

PORADNIK

# Poradnik dotyczący identyfikacji i nazywania substancji na podstawie rozporządzeń REACH i CLP

grudzień 2023  
Wersja 3.0



## **INFORMACJA PRAWNA**

Celem niniejszego dokumentu jest wsparcie użytkowników w wypełnianiu przez nich obowiązków wynikających z rozporządzeń REACH i CLP. Użytkownikom przypomina się jednak, że tekst rozporządzeń REACH i CLP stanowi jedyny autentyczny tekst prawny oraz że informacje zawarte w niniejszym dokumencie nie stanowią porady prawnej. Użytkownik ponosi wyłączną odpowiedzialność za wykorzystanie tych informacji. Europejska Agencja Chemikaliów nie ponosi żadnej odpowiedzialności w związku z ewentualnym wykorzystaniem informacji zawartych w niniejszym dokumencie.

### ***Poradnik dotyczący identyfikacji i nazywania substancji na podstawie rozporządzeń REACH i CLP***

**Nr referencyjny:** ECHA-23-H-07-PL  
**Numer katalogowy:** ED-09-23-444-PL-N  
**ISBN:** 978-92-9468-301-4  
**DOI:** 10.2823/944283  
**Data wydania:** grudzień 2023  
**Język:** PL

© Europejska Agencja Chemikaliów, 2023  
Strona tytułowa © Europejska Agencja Chemikaliów

Ewentualne pytania i uwagi dotyczące niniejszego dokumentu należy przysyłać za pomocą formularza wniosku o udzielenie informacji (należy podać powyższy numer referencyjny i datę wydania). Formularz wniosku o udzielenie informacji jest dostępny na stronie internetowej „Kontakt z ECHA” pod adresem:

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

**Europejska Agencja Chemikaliów**

Adres do korespondencji: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Finlandia  
Siedziba: Telakkakatu 6, 00150 Helsinki, Finlandia

## **WSTĘP**

Niniejszy dokument opisuje nazewnictwo i identyfikację substancji na podstawie rozporządzeń REACH i CLP. Należy do serii poradników mających służyć pomocą wszystkim zainteresowanym podmiotom w przygotowywaniu się do wypełniania obowiązków wynikających z rozporządzeń REACH i CLP. Poradniki te zawierają szczegółowe wytyczne na temat wielu istotnych procesów na podstawie REACH i CLP, jak również niektórych metod naukowych lub technicznych, które powinny być stosowane przez branżę lub władze w myśl rozporządzeń REACH i CLP.

Poradniki zostały opracowane i omówione w ramach projektów wdrożeniowych REACH (RIP) prowadzonych przez służby Komisji Europejskiej przy zaangażowaniu wszystkich zainteresowanych podmiotów: państw członkowskich, przedstawicieli branży oraz organizacji pozarządowych. Poradniki te są dostępne na stronie internetowej Europejskiej Agencji Chemikaliów (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Kolejne dokumenty zawierające wytyczne zostaną opublikowane na tej stronie po zakończeniu ich opracowania lub aktualizacji.

## HISTORIA DOKUMENTU

Wersja	Komentarz	Data
Wersja 1	Wydanie pierwsze	czerwiec 2007 r.
Wersja 1.1	<p>Sprostowanie:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Dodanie w tytule i tytułach rozdziałów odniesienia do rozporządzenia CLP (rozporządzenie (WE) nr 1272/2008 z dnia 16 grudnia 2008 r.).</li> <li>- Dodanie tekstu objaśniającego zakres poradnika. Usunięcie zbędnego tekstu w całym dokumencie.</li> <li>- W całym tekście wprowadzenie w stosownych przypadkach odniesienia do rozporządzenia CLP.</li> <li>- W całym dokumencie zmiana terminu „niniejszy dokument” na „poradnik”.</li> <li>- W całym dokumencie zmiana terminu „preparat” na „mieszaninę”.</li> <li>- W całym dokumencie zmiana terminu „punkt” na „część”.</li> <li>- W całym dokumencie zastąpienie terminu „rejestracja wstępna” terminem „(późniejsza) rejestracja wstępna”.</li> <li>- Zastosowanie skrótów AAS i CLP i usunięcie skrótów RIP i TGD.</li> <li>- Zmiana opisów dotyczących stopu, wykazu WE i IUCLID. Wprowadzenie definicji numeru WE, numeru porządkowego, mieszaniny i substancji zgłoszonej. Usunięcie definicji „preparatu”.</li> <li>- Poprawienie części 3.2 w celu wyjaśnienia treści.</li> <li>- Poprawienie części 3.3 w celu wyjaśnienia treści w odniesieniu do obowiązków na mocy CLP.</li> <li>- Zmiana w części 4.2.2.1 – sposób przedstawiania składników zmieniono ze stężeń procentowych na porządek alfabetyczny, tak że z kolejności nie można wywnioskować względnego składu.</li> <li>- Zmiana w części 4.2.3.1 – termin siatka zastąpiono terminem kryształ.</li> <li>- Poprawienie części 4.3.1.2.3 w celu wyjaśnienia treści.</li> </ul>	listopad 2011 r. (tylko w j. angielskim)

	<ul style="list-style-type: none"><li>- W części 5 zamieszczenie odniesienia do Podręcznika przedkładania danych – część 18 „Jak zgłaszać tożsamość substancji w IUCLID 5 w celu rejestracji w ramach REACH”.</li><li>- Poprawienie części 5 w celu wyjaśnienia treści.</li><li>- W części 6 zmiana opisu rejestracji wstępnej na (późniejszą) rejestrację wstępną.</li><li>- Poprawienie nie działających hiperłączy w załączniku 1.</li><li>- Usunięcie części 4.3 dodatku 2, ponieważ jej treść znajduje się na odpowiedniej stronie internetowej.</li></ul>	
Wersja 1.2	<p>Sprostowanie</p> <p>Dostosowanie definicji „substancji wprowadzonej” zgodnie z definicją w rozporządzeniu (WE) nr 1907/2006 wprowadzonym rozporządzeniem Rady (WE) nr 1354/2007 i sprostowaniem, Dz.U. L 36 z 5.2.2009, s. 84 (1907/2006).</p> <p>Zmiany w wersji 1.1 i 1.2 skonsolidowano w jednej wersji 1.2 w tłumaczeniu na języki inne niż angielski.</p>	marzec 2012 r.
Wersja 1.3	<p>Sprostowanie</p> <p>Zamieszczenie w rozdziale 7.6 dwóch brakujących wzorów strukturalnych.</p>	luty 2014 r.
Wersja 1.4	<p>Sprostowanie</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Zmiana formatu dokumentu zgodnie z obecną identyfikacją wizualną przedsiębiorstwa.</li><li>- Usunięcie rozdziału 8, który zawiera instrukcje techniczne oparte na nieaktualnej wersji IUCLID.</li><li>- Poprawienie w sekcji 7.5 opisu krystobalitu i kwarcu oraz usunięcie odniesienia do dyrektywy 2000/30/WE.</li><li>- Usunięcie odniesienia do rozdziału 8 i Podręczników przedkładania danych oraz dodanie odniesienia do nowych podręczników ECHA.</li><li>- Usunięcie załącznika III i przesunięcie informacji do tabeli z historią dokumentu.</li><li>- Naprawienie nie działających łączy do stron internetowych i poprawienie błędów redakcyjnych.</li></ul>	czerwiec 2016 r.

Wersja 2.0	Częściowa aktualizacja ograniczona do: <ul style="list-style-type: none"><li>- Dodania nowego załącznika III z opisem koncepcji profilu tożsamości substancji.</li><li>- Dodania nowego tekstu w rozdziale 1 w celu wprowadzenia nowego załącznika III.</li><li>- Poprawienia błędów typograficznych i redakcyjnych.</li></ul>	grudzień 2016
Wersja 2.1	Sprostowanie mające na celu usunięcie błędów typograficznych w tekście oraz błędów w informacji o składzie substancji w przykładach przedstawionych na rysunku 2 w załączniku III.	maj 2017 r.
Wersja 3.0	Aktualizacja <ul style="list-style-type: none"><li>- Dostosowanie do zmian wprowadzonych rozporządzeniem Komisji (UE) 2022/477 z dnia 24 marca 2022 r.</li><li>- Usunięcie odniesień do (późniejszej) rejestracji wstępnej.</li><li>- Poprawienie błędów typograficznych i redakcyjnych.</li><li>- Dodanie linków do stron wsparcia ECHA oraz pytań i odpowiedzi.</li><li>- W załączniku III usunięcie pkt 5 dotyczącego przejścia z IUCLID 5 na IUCLID 6.</li></ul>	grudzień 2023

## Spis treści

<b>1. INFORMACJE OGÓLNE.....</b>	<b>9</b>
1.1. Cele .....	9
1.2. Zakres.....	10
1.3. Struktura poradnika .....	11
<b>2. DEFINICJE I SKRÓTY .....</b>	<b>12</b>
2.1. Skróty .....	12
2.2. Definicje .....	14
<b>3. WYMAGANIA DOTYCZĄCE IDENTYFIKACJI SUBSTANCJI NA MOCY ROZPORZĄDZEŃ REACH I CLP .....</b>	<b>18</b>
3.1. DEFINICJA SUBSTANCJI .....	18
3.2. Identyfikatory numeryczne .....	18
3.2.1. Wykaz WE.....	18
3.2.2. Numery porządkowe.....	20
3.3. Wymagania dotyczące identyfikacji substancji na mocy rozporządzeń REACH i CLP .....	20
<b>4. WYTYCZNE DOTYCZĄCE IDENTYFIKACJI I NAZYWANIA SUBSTANCJI NA PODSTAWIE ROZPORZĄDZEŃ REACH I CLP .....</b>	<b>24</b>
4.1. Wprowadzenie.....	24
4.2. Substancje o dobrze określonym składzie .....	30
4.2.1. Substancje jednoskładnikowe .....	31
4.2.2. Substancje wieloskładnikowe.....	33
4.2.3. Substancje o określonym składzie chemicznym i innych identyfikatorach głównych .....	36
4.3. Substancje UVCB .....	37
4.3.1. Ogólne wytyczne dotyczące substancji UVCB .....	38
4.3.2. Substancje UVCB szczególnego typu .....	48
<b>5. KRYTERIA SPRAWDZANIA, CZY SUBSTANCJE SĄ TAKIE SAME.....</b>	<b>57</b>
<b>6. TOŻSAMOŚĆ SUBSTANCJI W RAMACH ZAPYTANIA .....</b>	<b>64</b>
<b>7. PRZYKŁADY .....</b>	<b>65</b>
7.1. Diethyl peroxydicarbonate (peroksydiwęglan dietylu) .....	65
7.2. ZOLIMIDINE (ZOLIMIDYNA) .....	66
7.3. Mieszanina izomerów .....	66
7.4. Aromat AH .....	70
7.5. Minerale .....	77
7.6. Olejek eteryczny z lawendy (Lavandin grosso).....	80
7.7. Olejek chryzantemowy i jego wyodrębnione izomery .....	86

7.8. Phenol, isopropylated, phosphate (fosforan izopropylowanego fenolu) .....	90
7.9. Czwartorzędowe związki amonowe .....	91
7.10. Substancje ropopochodne .....	95
7.10.1. Frakcja benzynowa (C4-C12) .....	95
7.10.2. Oleje gazowe (ropa naftowa) .....	97
7.11. Enzymy .....	98
7.11.1. Subtylizyna .....	98
7.11.2. $\alpha$ -amylaza .....	99
<b>ZAŁĄCZNIK I – MATERIAŁY POMOCNICZE .....</b>	<b>101</b>
<b>ZAŁĄCZNIK II – WYTYCZNE TECHNICZNE DOTYCZĄCE POSZCZEGÓLNYCH PARAMETRÓW IDENTYFIKACYJNYCH SUBSTANCJI .....</b>	<b>105</b>
<b>ZAŁĄCZNIK III – TOŻSAMOŚĆ SUBSTANCJI I WSPÓLNE PRZEDŁOŻENIE DANYCH .</b>	<b>122</b>

## Spis tabel

Tabela 1: Skróty .....	12
Tabela 2: Definicje.....	14
Tabela 3: Parametry identyfikacyjne substancji określone w sekcji 2 załącznika VI do rozporządzenia REACH.....	22
Tabela 4: Zestawienie głównych identyfikatorów dla przykładowych rodzajów podobnych substancji dobrze zdefiniowanych.....	25
Tabela 5: Zestawienie głównych identyfikatorów dla różnych przykładowych rodzajów substancji UVCB.....	26

## Spis rysunków

Rysunek 1: Klucz do rozdziałów i dodatków poradnika zawierających odpowiednie wytyczne dla różnych rodzajów substancji.....	29
Rysunek 2 (kolejna strona): Schematyczny obraz kroków podejmowanych przez potencjalnych rejestrujących: od określenia swoich obowiązków rejestracyjnych (1) po zdefiniowanie SIP dla danej tożsamości substancji (4) oraz, ostatecznie, dokonanie rejestracji i, tym samym, spełnienie formalnego obowiązku rejestracji substancji (8). .....	128
Rysunek 3: Proces definiowania SIP (krok 4 na rysunku 2) w przypadku substancji typu UVCB, której tożsamość określono na pod-stawie deskryptorów źródła i procesu pochodzących z opisów źródeł i procesów przedłożonych przez podmiot prawny.	131



## 1. Informacje ogólne

Rozporządzenie REACH (rozporządzenie (WE) nr 1907/2006) ustanawia system rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów i powołuje Europejską Agencję Chemikaliów (ECHA) do wdrażania rozporządzenia.<sup>1</sup>

Rozporządzenie CLP (rozporządzenie (WE) nr 1272/2008) to nowe europejskie rozporządzenie dotyczące klasyfikacji, oznakowania i pakowania substancji chemicznych i mieszanin.<sup>2</sup> Na mocy rozporządzenia w całej UE wprowadza się nowy system klasyfikacji i oznakowania chemikaliów, oparty na Globalnie Zharmonizowanym Systemie Organizacji Narodów Zjednoczonych.

Rozporządzenie REACH dotyczy przede wszystkim substancji. Aby zapewnić właściwe funkcjonowanie procesów REACH, konieczna jest prawidłowa i jednoznaczna identyfikacja substancji. Niniejszy poradnik dotyczący identyfikacji substancji i nazywania ma stanowić wsparcie dla przemysłu, państw członkowskich i Europejskiej Agencji Chemikaliów.

Niniejszy poradnik korzysta z doświadczeń dotyczących identyfikacji substancji na podstawie poprzednio obowiązujących przepisów (dyrektywa 67/548/EWG i dyrektywa 98/8/EWG). Jednakże podstawą uszczegółowienia niniejszego poradnika są aktualne praktyki dotyczące tożsamości substancji stosowane na podstawie rozporządzenia REACH oraz rozporządzenia CLP w sprawie klasyfikacji, oznakowania i pakowania substancji i mieszanin. Dodatkowo w stosownych przypadkach uwzględniono również podejścia stosowane w innych reżimach chemicznych spoza Unii Europejskiej.

Uwzględniono konkretne wytyczne dotyczące danych rodzajów substancji.

Niniejszy poradnik należy stosować do identyfikacji i nazywania substancji podlegających regulacji na podstawie rozporządzeń REACH i CLP.

### 1.1. Cele

Celem niniejszego poradnika jest określenie wytycznych dla producentów i importerów w zakresie odnotowywania i zgłaszania tożsamości substancji w kontekście rozporządzeń REACH i CLP. Niniejszy poradnik zawiera wytyczne dotyczące nazywania substancji, co stanowi istotny element identyfikacji substancji. Wyjaśnia również, kiedy substancje można uznać za takie same w kontekście rozporządzeń REACH i CLP oraz jak zasadę „jedna substancja, jedna rejestracja” (ang. *one substance, one registration*, OSOR) można wdrożyć poprzez zdefiniowanie profilu tożsamości substancji (ang. *Substance identity profile*, SIP). Identyfikacja takich samych substancji, które mogą być objęte tym samym SIP, jest istotna w przypadku zapytań, udostępniania danych, wspólnego przedkładania danych, zgłoszeń do wykazu klasyfikacji i oznakowania oraz harmonizacji klasyfikacji i oznakowania.

Identyfikacja substancji powinna być wykonywana przez ekspertów branżowych. Dodatkowe wytyczne dotyczące parametrów identyfikacyjnych dla podmiotów działających w branży

---

<sup>1</sup> Rozporządzenie (WE) nr 1907/2006 Parlamentu Europejskiego i Rady z dnia 18 grudnia 2006 r. w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH) i utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów, zmieniające dyrektywę 1999/45/WE oraz uchylające rozporządzenie Rady (EWG) nr 793/93 i rozporządzenie Komisji (WE) nr 1488/94, jak również dyrektywę Rady 76/769/EWG i dyrektywy Komisji 91/155/EWG, 93/67/EWG, 93/105/WE i 2000/21/WE („REACH”).

<sup>2</sup> Rozporządzenie Parlamentu Europejskiego i Rady (WE) nr 1272/2008 z dnia 16 grudnia 2008 r. w sprawie klasyfikacji, oznakowania i pakowania substancji i mieszanin, zmieniające i uchylające dyrektywy 67/548/EWG i 1999/45/WE oraz zmieniające rozporządzenie (WE) nr 1907/2006 (Tekst mający znaczenie dla EOG) („CLP”).

przemysłowej niedysponujących specjalistyczną wiedzą w tym zakresie znajdują się w załączniku do niniejszego poradnika.

Ponadto niniejszy poradnik zawiera odnośniki do odpowiednich narzędzi, które pomagają w określaniu i sprawdzaniu tożsamości chemicznej substancji.

Więcej szczegółowych instrukcji na temat wpisywania informacji o tożsamości substancji do IUCLID w kontekście różnych procesów na podstawie REACH i CLP znajduje się w podręcznikach ECHA dostępnych na stronie <http://echa.europa.eu/manuals>.

## 1.2. Zakres

Zgodnie z art. 1 rozporządzenia REACH dotyczy ono produkcji, importu, wprowadzania do obrotu i stosowania substancji w postaci własnej oraz w mieszaninach i wyrobach. Mieszaniny i wyroby jako takie nie są przedmiotem rozporządzenia REACH.

Zgodnie z art. 10 rozporządzenia REACH do rejestracji wymagane jest określenie tożsamości substancji z zastosowaniem parametrów określonych w sekcji 2 załącznika VI do rozporządzenia REACH (zob. Tabela 3). Podobne parametry (określone w sekcjach od 2.1 do 2.3.4 załącznika VI do rozporządzenia REACH) wymagane są do określenia tożsamości substancji do celów zgłoszenia zgodnie z art. 40 ust. 1 rozporządzenia CLP. Przedmiotem niniejszego poradnika jest odpowiednia identyfikacja substancji, które spełniają kryteria definicji prawnej substancji z rozporządzeń REACH i CLP, oraz wytyczne dotyczące parametrów służących do identyfikacji substancji wymienionych w sekcji 2 załącznika VI do rozporządzenia REACH. Przedłożone informacje na temat tożsamości substancji muszą umożliwiać identyfikację każdej substancji. Niektóre parametry identyfikacji substancji można pominąć, jeżeli podanie wymaganych informacji nie jest technicznie możliwe lub nie wydaje się konieczne z naukowego punktu widzenia. Należy wyraźnie określić powody takiego pominięcia, które muszą się opierać na naukowym uzasadnieniu.

Wybór metody identyfikacji substancji zależy od rodzaju substancji. Niniejszy poradnik odsyła użytkownika do stosownych rozdziałów dotyczących różnych rodzajów substancji.

Wykazy WE stosowane w ramach dyrektywy 67/548/EWG (EINECS, ELINCS i wykaz NLP) stanowią ważne narzędzie do identyfikacji substancji. Wytyczne dotyczące roli tych wykazów w procesach REACH znajdują się w rozdziale 3.2.

Substancje objęte zakresem rozporządzeń REACH i CLP (a tym samym niniejszego poradnika) powstają z reguły w wyniku reakcji chemicznych przy produkcji substancji i mogą zawierać wiele różnych składników. Definicja substancji z rozporządzeń REACH i CLP obejmuje również substancje otrzymywane w wyniku reakcji chemicznej lub wyodrębniane z surowców występujących w przyrodzie, stanowiące pojedynczy pierwiastek lub związek (np. metale czyste lub niektóre minerały) bądź składające się z kilku składników (np. olejki eteryczne, kamień hutniczy powstający przy przetapianiu rud siarczkowych metali). Jednakże substancje, które podlegają innym przepisom wspólnotowym, są w niektórych przypadkach zwolnione z rejestracji na podstawie rozporządzenia REACH (zob. art. 2 rozporządzenia REACH). Z obowiązku rejestracji zwolnione są również substancje wymienione w załączniku IV do rozporządzenia REACH oraz substancje spełniające niektóre kryteria określone w załączniku V do rozporządzenia REACH. Należy zauważyć, że chociaż substancja może być zwolniona z rejestracji, to nie musi to oznaczać, że nie podlega przepisom innych tytułów rozporządzenia REACH lub wymogów rozporządzenia CLP.

REACH wymaga od rejestrujących daną substancję, by uzgodnili metodę wspólnego

przedłożenia pewnych informacji na temat substancji (zasada OSOR)<sup>3</sup>. Aby tego dokonać, należy wyjaśnić, w jaki sposób rejestrujący zdefiniował zakres SIP.

### **1.3. Struktura poradnika**

Informacje ogólne, takie jak cele i zakres niniejszego poradnika, znajdują się w rozdziale 1, a stosowane skróty i definicje – w rozdziale 2. Odpowiednie informacje na temat ram prawnych dotyczących identyfikacji substancji na mocy rozporządzenia REACH, np. definicji substancji i wymagań w zakresie informacji w tekście prawnym, znajdują się w rozdziale 3.

Praktyczne wskazówki dotyczące identyfikacji i nazywania substancji znajdują się w rozdziale 4.

- W rozdziale 4.1 opisano różnicę pomiędzy substancjami „dobrze zdefiniowanymi” i „niezbyt dobrze zdefiniowanymi”; w obrębie tych dwóch głównych grup opisano poszczególne rodzaje substancji wraz z odpowiednimi wytycznymi do identyfikacji substancji. Zamieszczono kluczowy schemat, który odsyła użytkownika do odpowiednich rozdziałów zawierających wytyczne w zakresie identyfikacji danego rodzaju substancji.
- W kolejnych rozdziałach zamieszczono konkretne wytyczne dla poszczególnych rodzajów substancji w postaci katalogu zasad z objaśnieniami i przykładami.

Rozdział 5 zawiera wytyczne do sprawdzania, czy dane substancje można uznać za takie same. Wytyczne dotyczące identyfikacji substancji na etapie składania zapytań znajdują się w rozdziale 6.

Ponadto w rozdziale 7 przedstawiono kilka szczegółowych przykładów z zastosowaniem wytycznych praktycznych z rozdziału 4.

Załącznik I zawiera wykaz odnośników do przydatnych narzędzi ułatwiających charakteryzowanie i sprawdzanie tożsamości chemicznej substancji.

Załącznik II zawiera dodatkowe informacje na temat poszczególnych parametrów identyfikacji substancji wykorzystywanych w procesie identyfikacji substancji, takich jak zasady nazewnictwa, numeracja WE i CAS, zapis wzorów cząsteczkowych i strukturalnych oraz metody analityczne.

Załącznik III zawiera informacje na temat koncepcji SIP, jego znaczenia z punktu widzenia obowiązku wspólnego przedkładania danych oraz definiowania i raportowania

---

<sup>3</sup> Szczegółowe informacje na temat wspólnego przedkładania danych dotyczących takiej samej substancji opublikowano w *Poradniku dotyczącym udostępniania danych*.

## 2. Definicje i skróty

### 2.1. Skróty

Najważniejsze skróty stosowane w niniejszym poradniku oraz ich objaśnienia znajdują się w tabeli Tabela 1.

**Tabela 1: Skróty**

Skrót	Znaczenie
AAS	Absorpcyjna spektrometria atomowa
AISE	Międzynarodowe Stowarzyszenie Producentów Mydeł, Detergentów i Środków Czystości
CAS	Chemical Abstracts Service (Serwis skrótów chemicznych)
CLP	Rozporządzenie (WE) nr 1272/2008 w sprawie klasyfikacji, oznakowania i pakowania substancji i mieszanin
EINECS	Europejski Wykaz Istniejących Substancji o Znaczeniu Komercyjnym
ELINCS	Europejski Wykaz Notyfikowanych Substancji Chemicznych
ENCS	Spis Nowych i Istniejących Substancji Chemicznych (Japonia)
ESIS	Europejski System Informacji o Substancjach Chemicznych
GC	Chromatografia gazowa
GHS	Globalnie Zharmonizowany System
HPLC	Wysokosprawna chromatografia cieczowa
InChI	Międzynarodowy Identyfikator Chemiczny IUPAC
INCI	Międzynarodowe Nazewnictwo Składników Kosmetycznych
IR	Spektroskopia w podczerwieni
ISO	Międzynarodowa Organizacja Normalizacyjna
IUBMB	Międzynarodowa Unia Biochemii i Biologii Molekularnej
IUCLID	International Uniform Chemical Information Database (Międzynarodowa ujednolicono baza danych dotyczących chemikaliów)
IUPAC	Międzynarodowa Unia Chemii Czystej i Stosowanej
MS	Spektroskopia masowa
NLP	już nie polimer
NMR	Magnetyczny rezonans jądrowy
ppm	części na milion
REACH	Rejestracja, ocena, udzielanie zezwoleń i stosowane ograniczenia w

	zakresie chemikaliów
SIEF	forum wymiany informacji o substancjach
SIP	Profil tożsamości substancji
SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry Specification (Uproszczony zapis struktury cząsteczek w postaci liniowej informacji tekstowej)
TSCA	Ustawa o kontroli substancji toksycznych (USA)
UE	Unia Europejska
UV/VIS	Spektroskopia w nadfiolecie/zakresie widzialnym
UVCB	Substancje o nieznanym lub zmiennym składzie, złożone produkty reakcji lub materiały biologiczne
w/w	wagowo
WE	Komisja Europejska
XRD	Dyfraktometria rentgenowska
XRF	Analiza rentgenowska fluorescencyjna

## 2.2. Definicje

Podstawowe definicje stosowane w niniejszym poradniku zamieszczono w Tabeli 2.

Definicje te uwzględniają definicje stosowane w rozporządzeniach REACH i CLP. Z tego względu niektóre pojęcia zostały zdefiniowane inaczej niż w dyrektywie 67/548/EWG.

**Tabela 2: Definicje**

Definicja	Opis
Chromatografia typu fingerprint	Wyrażenie składu substancji za pomocą charakterystycznego rozłożenia składników w chromatogramie analitycznym.
Część składowa	Substancja dodana umyślnie w celu otrzymania danej mieszaniny.
Dodatek	Substancja, która została dodana celowo do substancji jako stabilizator <sup>4</sup> .
Główny składnik	Składnik, który nie jest dodatkiem ani zanieczyszczeniem, występujący w danej substancji i stanowiący znaczną jej część. W oparciu o główny składnik tworzona jest nazwa oraz powstaje szczegółowa identyfikacja substancji.
IUCLID	Międzynarodowa jednolita baza danych dotyczących substancji chemicznych. IUCLID to baza danych i system zarządzania do administrowania danymi dotyczącymi substancji chemicznych.
Mieszanina*	Mieszanina lub roztwór składające się z co najmniej dwóch substancji.
Monomer*	Substancja, która jest w stanie tworzyć wiązania kowalencyjne z serią innych podobnych lub niewykazujących podobieństwa cząsteczek w reakcji tworzenia polimerów, w odpowiednich warunkach stosowanych w danym procesie.
Numer porządkowy	Numer przydzielony przez Agencję. Automatyczny numer przypisywany przez system REACH-IT. Dotyczy wszystkich ważnych przedłożeń danych (np. PPORD, zapytań, rejestracji, zgłoszeń z zakresu klasyfikacji i oznakowania).
Numer WE	Numer WE to numeryczny identyfikator substancji w wykazie WE.

<sup>4</sup> Dodatek może pełnić również inne funkcje, np. regulatora pH lub środka barwiącego. W rozporządzeniu REACH oraz w niniejszym poradniku dodatek oznacza środek stabilizujący.

Polimer*	<p>Substancja składająca się z cząsteczek stanowiących sekwencję jednego lub kilku rodzajów jednostek monomeru. Cząsteczki te muszą być rozłożone w takim zakresie mas cząsteczkowych, w którym różnice w masie cząsteczkowej powinny wynikać głównie z różnic w liczbie jednostek monomerycznych. Polimer zawiera:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>(a) cząsteczki stanowiące prostą większość wagową, które zawierają co najmniej trzy jednostki monomeru związane kowalencyjnie z co najmniej jeszcze jedną jednostką monomeru lub z innym reagentem;</li><li>(b) cząsteczki niestanowiące prostej większości wagowej wśród cząsteczek o tej samej masie cząsteczkowej.</li></ul> <p>W kontekście tej definicji „jednostka monomeru” oznacza przereagowaną formę monomeru w polimerze.</p>
Półprodukt*	<p>Substancja, która jest produkowana, używana lub stosowana do przetwarzania chemicznego (określanego dalej <i>syntezą</i>) w celu przekształcenia w inną substancję:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>(a) <u>półprodukt niewyodrębniany</u> oznacza półprodukt, który podczas syntezy nie jest celowo usuwany (z wyjątkiem procesu pobierania próbek) ze sprzętu, w którym przeprowadzana jest synteza. Urządzenie takie oznacza pojemnik do przeprowadzania reakcji, wyposażenie pomocnicze i urządzenia, przez które przemieszczają się substancje podczas stałego procesu ciągłego lub okresowego, a także rurociągi do transportowania z jednego pojemnika do drugiego w celu przeprowadzenia następnego etapu reakcji; urządzenie takie nie oznacza zbiorników i innych pojemników, w których substancje są magazynowane po wyprodukowaniu;</li><li>(b) <u>półprodukt wyodrębniany w miejscu wytwarzania</u> oznacza półprodukt niespełniający kryteriów półproduktu niewyodrębnianego, w którego przypadku produkcja samego półproduktu i synteza innej (innych) substancji z tego półproduktu odbywa się w tym samym miejscu wytwarzania obsługiwany przez jedną lub więcej osób prawnych;</li><li>(c) <u>transportowany półprodukt wyodrębniany</u> oznacza półprodukt niespełniający kryteriów półproduktu niewyodrębnianego i transportowany pomiędzy innymi miejscami produkcji lub do nich dostarczany;</li></ul>
Produkcja*	<p>Wytwarzanie albo ekstrakcja substancji w stanie, w jakim występują w przyrodzie.</p>
Składnik	<p>Każde indywidualum obecne w danej substancji, które można opisać za pomocą jego niepowtarzalnej tożsamości chemicznej</p>
Stop*	<p>Jednolity w skali makroskopowej materiał metaliczny składający się z dwóch lub więcej pierwiastków połączonych w taki sposób, że nie można ich łatwo rozdzielić w sposób mechaniczny.</p> <p>Stopy uznaje się za mieszaniny szczególne.</p>

Substancja jednoskładnikowa	Jest to na ogół substancja definiowana na podstawie swojego składu, w której jeden główny składnik stanowi co najmniej 80% wagowych substancji.
Substancja niemodyfikowana chemicznie*	Substancja, której struktura chemiczna pozostaje niezmieniona, nawet jeżeli została ona poddana procesowi chemicznemu lub obróbce lub też fizycznej transformacji mineralogicznej, np. w celu usunięcia zanieczyszczeń.
Substancja wieloskładnikowa	Jest to na ogół substancja definiowana na podstawie swojego składu, w której kilka głównych składników jest obecnych w stężeniu $\geq 10\%$ wagowych i $< 80\%$ wagowych.
Substancja zgłoszona*	Substancja, wobec której złożono zgłoszenie i która może być wprowadzona do obrotu zgodnie z dyrektywą 67/548/EWG.
Substancja*	Pierwiastek chemiczny lub jego związki w stanie, w jakim występują w przyrodzie, lub uzyskane za pomocą procesu produkcyjnego, z wszelkimi dodatkami wymaganymi do zachowania ich trwałości oraz wszelkimi zanieczyszczeniami powstałymi w wyniku zastosowanego procesu, wyłączając rozpuszczalniki, które można oddzielić bez wpływu na stabilność i skład substancji.
Substancje występujące w przyrodzie *	Są to substancje w sposób naturalny występujące w ich postaci własnej, nieprzetworzone lub przetworzone jedynie ręcznie, mechanicznie lub z wykorzystaniem siły grawitacji; poprzez rozpuszczanie w wodzie, flotację, ekstrakcję z wody, destylację z parą wodną lub ogrzewanie jedynie w celu usunięcia wody, lub substancje, które w jakikolwiek sposób wydobywane są z powietrza.
Wykaz WE	Chociaż nie został prawnie zdefiniowany w rozporządzeniu REACH, wykaz WE stanowi połączenie trzech niezależnych i prawnie zatwierdzonych europejskich wykazów substancji stosowanych w ramach poprzednich przepisów unijnych dotyczących substancji chemicznych: EINECS, ELINCS oraz listy NLP (już nie polimerów). Wpisy w wykazie WE składają się z nazwy chemicznej i numeru (nazwy WE i numeru WE), numeru CAS, wzoru cząsteczkowego (jeżeli jest dostępny) oraz opisu (dla niektórych rodzajów substancji).
Wyrób*	Przedmiot, który podczas produkcji otrzymuje określony kształt, powierzchnię lub konstrukcję, co decyduje o jego funkcji w stopniu większym niż jego skład chemiczny.



Zanieczyszczenie

Składnik, który znalazł się w wytwarzanej substancji w sposób niezamierzony. Może on pochodzić z materiałów wyjściowych lub pochodzić z pobocznych lub niekompletnych reakcji zachodzących podczas procesu produkcji. Mimo iż występuje w substancji końcowej, nie został do niej dodany celowo.

\* Definicje zgodnie z art. 3 rozporządzenia REACH.

## 3. Wymagania dotyczące identyfikacji substancji na mocy rozporządzeń REACH i CLP

Rozporządzenia REACH i CLP zawierają definicję substancji, a rozporządzenie REACH zawiera listę parametrów identyfikujących substancję (załącznik VI, sekcja 2), które należy uwzględnić w celu identyfikacji substancji przy jej rejestracji.

Niniejszy rozdział zawiera definicję substancji stosowaną w rozporządzeniach REACH i CLP (rozdział 3.1), ogólne wytyczne dotyczące korzystania z wykazu WE utworzonego w ramach poprzednio obowiązujących przepisów w zakresie chemikaliów (rozdział 3.2) oraz dodatkowe informacje na temat wymogów w zakresie identyfikacji substancji określonych w rozporządzeniu REACH (rozdział 3.3).

### 3.1. DEFINICJA SUBSTANCJI

Substancja została zdefiniowana w rozporządzeniu REACH (art. 3 ust. 1) i w rozporządzeniu CLP (art. 2 ust. 7) w następujący sposób:

Substancja oznacza pierwiastek chemiczny i jego związki w stanie, w jakim występują w przyrodzie lub zostają uzyskane za pomocą procesu produkcyjnego, z wszelkimi dodatkami wymaganymi do zachowania ich trwałości oraz wszelkimi zanieczyszczeniami powstałymi w wyniku zastosowanego procesu, wyłączając rozpuszczalniki, które można oddzielić bez wpływu na stabilność i skład substancji.

Definicja substancji w rozporządzeniach REACH i CLP jest tożsama z definicją substancji stosowaną w poprawce 7 do dyrektywy w sprawie substancji niebezpiecznych (dyrektywa 92/32/EWG zmieniająca dyrektywę 67/548/EWG). W obu przypadkach definicja wykracza poza definicję substancji jako czystego związku chemicznego zdefiniowanego za pomocą pojedynczej cząsteczki. Definicja substancji obejmuje także inne składniki, takie jak zanieczyszczenia.

### 3.2. Identyfikatory numeryczne

#### 3.2.1. Wykaz WE

Istnieją trzy oddzielne wykazy stworzone na podstawie wcześniej obowiązujących przepisów dotyczących chemikaliów. Są to: Europejski Wykaz Istniejących Substancji o Znaczeniu Komercyjnym (EINECS), Europejski Wykaz Notyfikowanych Substancji Chemicznych (ELINCS) oraz lista NLP.

Substancje znajdujące się na rynku europejskim w okresie od dnia 1 stycznia 1971 r. do dnia 18 września 1981 r. są wymienione w Europejskim Wykazie Istniejących Substancji o

Znaczeniu Komercyjnym (EINECS)<sup>5, 6, 7</sup>.

Wykaz ten zawiera około 100 000 substancji zidentyfikowanych za pomocą nazwy chemicznej (oraz opisu dla niektórych rodzajów substancji), numeru CAS oraz siedmiocyfrowego numeru zwanego numerem EINECS. Numer EINECS rozpoczyna się zawsze cyfrą 2 lub 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Substancje zgłoszone do wykazu EINECS przeszły etap weryfikacji, na którym sprawdza się, czy substancja powinna znaleźć się w wykazie.

Substancje zgłoszone i wprowadzone do obrotu po dniu 18 września 1981 r. zostały umieszczone w Europejskim Wykazie Notyfikowanych Substancji Chemicznych (European List of Notified Chemical Substances – ELINCS)<sup>6</sup>. Wykaz ten zawiera wszystkie substancje zgłoszone do dnia 31 maja 2008 r. zgodnie z dyrektywą 67/548/EWG z późniejszymi zmianami. Substancje te są również nazywane „nowymi substancjami”, ponieważ nie zostały wprowadzone do obrotu na rynku wspólnotowym do dnia 18 września 1981 r. Numer ELINCS był przydzielany substancjom przez Komisję Europejską po weryfikacji przez właściwe organy państw członkowskich. W odróżnieniu od EINECS wpisy w wykazie ELINCS nie zawierają numeru CAS, tylko numer zgłoszenia przydzielany przez właściwe organy państw członkowskich, nazwę handlową (jeżeli występuje), klasyfikację oraz nazwę IUPAC dla sklasyfikowanych substancji. Numery ELINCS są również siedmiocyfrowe i rozpoczynają się zawsze cyfrą 4 (4xx-xxx-x).

Polimery nie były objęte obowiązkiem zgłaszania do wykazu EINECS, tylko podlegały szczególnym zasadom określonym w dyrektywie 67/548/EWG<sup>89</sup>. Definicja pojęcia „polimer” została doprecyzowana w 7. dyrektywie zmieniającej dyrektywę 67/548/EWG (dyrektywa 92/32/EWG). W wyniku zastosowania tej definicji niektóre substancje, które były uznawane za polimery zgodnie z zasadami sprawozdawczości do EINECS, *nie są już* uważane za polimery na mocy 7. dyrektywy zmieniającej. Ponieważ wszystkie substancje niewymienione w wykazie EINECS podlegały zgłoszeniu, teoretycznie wszystkie substancje typu „No Longer Polymer” (już nie polimer) (NLP) powinny być zostać zgłoszone. Rada Ministrów stwierdziła jednakże, iż substancje typu NLP nie powinny podlegać obowiązkowi zgłoszenia działającemu wstecz. Komisji powierzono zadanie sporządzenia listy NLP. Miały się na niej znaleźć substancje, które znajdowały się w obrocie na rynku UE pomiędzy dniem 18 września 1981 r. (data wejścia w życie dyrektywy 79/831/EWG, poprawka 6 do dyrektywy 67/548/EWG) a dniem 31 października 1993 r. (data wejścia w życie dyrektywy 92/32/EWG, poprawka 7 do dyrektywy 67/548/EWG) i spełniają wymóg uznania za polimery zgodnie z zasadami zgłaszania substancji do wykazu EINECS, ale jednocześnie nie są polimerami zgodnie z poprawką 7. Lista NLP nie jest wykazem zamkniętym. Substancje na liście NLP są opisane za pomocą nazwy chemicznej, numeru CAS i siedmiocyfrowego numeru NLP. NLP rozpoczyna się zawsze cyfrą

<sup>5</sup> EINECS powstał w oparciu o Europejski spis podstawowy (European **CO**re **IN**ventory– ECOIN). Substancje w EICON mogła również rejestrować branża przemysłowa (zgodnie z kryteriami obowiązującymi w przypadku EINECS). EICON został utworzony na podstawie różnych wykazów chemikaliów, które miały być w obrocie na rynku europejskim (np. TSCA). Wykaz EINECS został opublikowany dnia 15 czerwca 1990 r. i zawiera wykaz ponad 100 000 substancji. W trakcie użytkowania tego wykazu stwierdzono wiele błędów (drukarskich, np. niewłaściwa nazwa chemiczna, wzór, numer referencyjny CAS). W związku z tym 1 marca 2002 r. opublikowano sprostowanie.

<sup>6</sup> Europejskie Biuro Chemiczne ECB (2005) Manual of Decisions for implementation of the sixth and seventh amendments to Directive 67/548/EEC (Directives 79/831/EEC and 92/32/EEC) Non-confidential version. EUR 20519 EN. Uaktualniona wersja z czerwca 2005 r.

<sup>7</sup> Geiss F, Del Bino G, Blech G, i in. (1992) The EINECS Inventory of existing chemical substances on the EC market. Tox Env Chem Vol. 37, s. 21-33.

<sup>8</sup> ECB (2003) Notification of new chemical substances in accordance with Directive 67/548/EEC on the classification, packaging and labelling of dangerous substances. No Longer Polymer List. EUR 20853 EN.

<sup>9</sup> 8 Rasmussen K, Christ G and Davis JB (1998) Registration of polymers in accordance with Directive 67/548/EEC. Tox Env Chem tom 67, s. 251-261.

5 (5xx-xxx-x).

Wyżej wymienione trzy wykazy substancji, tj. EINECS, ELINCS i lista NLP, nazywane są łącznie wykazem WE. Każda substancja znajdująca się w tym wykazie posiada numer WE nadany przez Komisję Europejską (szczegółowe informacje dotyczące numeru WE znajdują się w załączniku II).

Informacje na temat tych substancji można uzyskać na stronie internetowej Europejskiej Agencji Chemikaliów (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>), która prowadzi również i publikuje wykaz substancji zarejestrowanych (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

Wykaz WE może być wykorzystywany przez producentów i importerów jako narzędzie do wyszukiwania numeru WE ich substancji.

### **3.2.2. Numery porządkowe**

Przy tworzeniu systemu REACH-IT ECHA uznała za stosowne, aby automatycznie przydzielać numer substancjom pojawiającym się we wszystkich przychodzących do Agencji i kompletnych pod względem technicznym zgłoszeniach (rejestracjach wstępnych, PPOD, zapytaniach, rejestracjach, zgłoszeniach w zakresie klasyfikacji i oznakowania itp.), jeżeli dla takich substancji nie określono numeru WE (zob. kryteria przydzielania numerów porządkowych poniżej). Ułatwiło to pod względem technicznym zarządzanie takimi substancjami, ich dalsze przetwarzanie oraz identyfikację substancji w takich zgłoszeniach. Te tzw. „numery porządkowe” mają ten sam format numeryczny, co numery EINECS, ELINCS i NLP, ale zaczynają się od innych cyfr.

Numery porządkowe mają format liczbowy wspólny z wpisami EINECS, ELINCS i NLP. Co najważniejsze, zdecydowana większość numerów porządkowych oraz związanych z nimi identyfikacji substancji nie została nigdy sprawdzona pod względem prawidłowości, ważności ani zgodności z konwencjami opisanymi w niniejszym poradniku.

Należy podkreślić, że tej samej substancji mogą zostać przypisane różne numery porządkowe, jeżeli dla tej substancji zastosowano różne identyfikatory (np. nazwę). Dlatego jest też możliwe, że numer porządkowy zostanie przypisany substancji uwzględnionej w wykazie EINECS, ELINCS lub NLP. Może się to zdarzyć, jeżeli w danych przedłożonych do ECHA poprzez REACH-IT zostanie użyta nazwa substancji, która różni się od tej z wykazu WE.

Numery porządkowe mogą zaczynać się na przykład od 6, 7, 8 lub 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 8xx-xxx-x, 9xx-xxx-x).

Należy zauważyć, że dla niektórych wpisów EINECS opis substancji jest dość obszerny i można uznać, że obejmuje więcej niż jedną tożsamość substancji zgodnie z art. 3 ust. 1 rozporządzenia REACH. W takich przypadkach potencjalnego rejestrującego zachęca się do dokładniejszego opisanie danej substancji (np. za pomocą nazwy IUPAC lub innych identyfikatorów). Rejestrujący powinien jednak wskazać, do którego wpisu w EINECS należy dana substancja. W takich przypadkach Europejska Agencja Chemikaliów podejmuje decyzję, czy należy przypisać numer porządkowy danej substancji.

## **3.3. Wymagania dotyczące identyfikacji substancji na mocy rozporządzeń REACH i CLP**

Na mocy rozporządzenia REACH, jeżeli wymagana jest rejestracja substancji, to należy w niej przedłożyć informacje dotyczące identyfikacji danej substancji zgodnie z sekcją 2 załącznika VI. W przypadku każdej substancji informacja taka musi być na tyle adekwatna i wystarczająca, aby umożliwić całkowitą identyfikację substancji. Jeśli podanie informacji dotyczących niektórych parametrów identyfikacyjnych substancji nie jest technicznie możliwe bądź nie wydaje się konieczne z naukowego punktu widzenia, należy przedłożyć stosowne

uzasadnienie, jak określono w uwadze 1 w załączniku VI.

Podobnie na mocy rozporządzenia CLP, jeżeli konieczne jest zgłoszenie (art. 40 CLP), to musi uwzględniać informacje o identyfikacji substancji określone w sekcjach 2.1–2.3.4 załącznika VI do rozporządzenia REACH. Informacje te muszą wystarczać do identyfikacji każdej substancji. Jeśli podanie informacji dotyczących niektórych parametrów identyfikacyjnych substancji nie jest technicznie możliwe bądź nie wydaje się konieczne z naukowego punktu widzenia, należy przedłożyć stosowne uzasadnienie, jak określono w uwadze 1 w załączniku VI.

Przegląd parametrów identyfikacyjnych substancji określonych w załączniku VI rozporządzenia REACH przedstawiono w Tabeli 3.

**Tabela 3: Parametry identyfikacyjne substancji określone w sekcji 2 załącznika VI do rozporządzenia REACH**

<b>Parametry identyfikacyjne substancji określone w sekcji 2 załącznika VI do rozporządzenia REACH</b>	
2.	<p><b>IDENTYFIKACJA SUBSTANCJI</b></p> <p><i>Podane informacje dotyczące każdej substancji muszą być wystarczające do jej identyfikacji. Jeśli przedstawienie informacji dotyczących niektórych pozycji nie jest technicznie możliwe lub nie wydaje się konieczne z naukowego punktu widzenia, należy przedstawić odpowiednie uzasadnienie.</i></p>
2.1	<b>Nazwa i dowolny inny identyfikator każdej substancji</b>
2.1.1	<i>Nazwa lub nazwy według nomenklatury IUPAC. Jeżeli nie są dostępne – inne międzynarodowe nazwy chemiczne</i>
2.1.2	<i>Inne nazwy (zwyczajowa, handlowa, skrót)</i>
2.1.3	<i>Numer WE, tj. numer Einecs, Elincs lub NLP, lub numer nadany przez Agencję (jeżeli są dostępne i odpowiednie)</i>
2.1.4	<i>Nazwa wg CAS i numer CAS (jeśli są dostępne)</i>
2.1.5	<i>Inne kody identyfikujące, np. numer celny (jeżeli są dostępne)</i>
2.2	<b>Informacje dotyczące wzoru cząsteczkowego i strukturalnego lub struktury krystalicznej każdej substancji</b>
2.2.1	<i>Wzór cząsteczkowy i wzór strukturalny (w tym zapis SMILES i inny sposób zapisu, jeżeli są dostępne) oraz opis struktury krystalicznej</i>
2.2.2	<i>Informacja o czynności optycznej substancji oraz typowych proporcjach izomerów (przestrzennych) (jeśli jest to możliwe i stosowne)</i>
2.2.3	<i>Masa cząsteczkowa lub zakres masy cząsteczkowej</i>
2.3.	<b>Skład każdej substancji</b>
2.3.1	<i>Stopień czystości (%), stosownie do przypadku</i>

2.3.2	<p><i>Nazwy składników i zanieczyszczeń</i></p> <p><i>W przypadku substancji o nieznanym lub zmiennym składzie, złożonych produktów reakcji lub materiałów biologicznych (UVCB):</i></p> <ul style="list-style-type: none"><li><i>– nazwy składników obecnych w stężeniu <math>\geq 10\%</math>,</i></li><li><i>– nazwy znanych składników obecnych w stężeniu <math>&lt; 10\%</math>,</i></li><li><i>– w przypadku składników, których nie można zidentyfikować pojedynczo</i></li><li><i>– opis grup składników na podstawie właściwości chemicznych,</i></li><li><i>– opis pochodzenia lub źródła i procesu produkcyjnego.</i></li></ul>
2.3.3	<p><i>Stężenie typowe i zakres stężeń (procentowo) składników, grup składników, których nie można zidentyfikować pojedynczo, oraz zanieczyszczeń określonych w pkt 2.3.2</i></p>
2.3.4	<p><i>Nazwy oraz stężenie typowe i zakres stężeń (procentowo) dodatków</i></p>
2.3.5	<p><i>Wszystkie niezbędne jakościowe dane analityczne specyficzne dla identyfikacji substancji, takie jak dane dotyczące ultrafioletu, podczerwieni, jądrowego rezonansu magnetycznego, widma masowego lub dyfrakcji</i></p>
2.3.6	<p><i>Wszystkie niezbędne ilościowe dane analityczne specyficzne dla identyfikacji substancji, takie jak dane dotyczące chromatografii, miareczkowania, analizy pierwiastkowej lub dyfrakcji</i></p>
2.3.7	<p><i>Opis metod analitycznych lub odpowiednie odniesienia bibliograficzne, które są niezbędne do identyfikacji substancji (łącznie z identyfikacją i kwantyfikacją jej składników oraz, w stosownych przypadkach, jej zanieczyszczeń i dodatków). Opis obejmuje zastosowane protokoły doświadczalne i odpowiednią interpretację wyników przedstawionych w pkt 2.3.1–2.3.6. Informacje te powinny być wystarczające do odtworzenia tych metod.</i></p>
2.5	<p><b>Wszelkie inne dostępne informacje istotne dla identyfikacji substancji</b></p>



## 4. Wytyczne dotyczące identyfikacji i nazywania substancji na podstawie rozporządzeń REACH i CLP

### 4.1. Wprowadzenie

Zasady identyfikacji i nazewnictwa są różne dla różnych rodzajów substancji. Ze względów praktycznych struktura niniejszego poradnika odsyła użytkownika bezpośrednio do tego rozdziału, w którym znajdują się stosowne wytyczne dotyczące danej substancji. W tym celu poniżej przedstawiono objaśnienia dotyczące różnych rodzajów substancji i wreszcie wskazówki, jak odnaleźć dotyczące ich rozdział.

Identyfikację substancji należy prowadzić w oparciu o przynajmniej te parametry identyfikacji substancji, które zostały wymienione w sekcji 2 załącznika VI do rozporządzenia REACH (zob. tabela Tabela 3). Każda substancja musi być zidentyfikowana za pomocą kombinacji stosownych parametrów identyfikacyjnych:

- nazwy IUPAC lub innej nazwy i identyfikatorów, np. numeru CAS, numeru WE (sekcja 2.1 załącznika VI);
- informacji o budowie cząsteczkowej i strukturalnej (sekcja 2.2 załącznika VI);
- składu chemicznego (sekcja 2.3 załącznika VI).

Substancja jest w pełni zidentyfikowana poprzez swój skład chemiczny, tj. tożsamość chemiczną i zawartość każdego jej składnika. Pomimo iż taka jednoznaczna identyfikacja jest możliwa dla większości substancji, w przypadku niektórych bywa niewykonalna lub niewłaściwa w kontekście rozporządzeń REACH i CLP. W takich przypadkach wymagane są inne lub dodatkowe informacje identyfikujące daną substancję.

Substancje można zatem podzielić na dwie podstawowe grupy:

1. „Substancje dobrze zdefiniowane”: substancje o określonym składzie jakościowym i ilościowym, które można wystarczająco zidentyfikować na podstawie parametrów identyfikacyjnych wymienionych w sekcji 2 załącznika VI do rozporządzenia REACH.
2. „Substancje UVCB”: substancje o nieznanym lub zmiennym składzie, złożone produkty reakcji lub materiały biologiczne. Substancji tych nie można wystarczająco zidentyfikować na podstawie wyżej wymienionych parametrów.

Dozwolona zmienność składu dla substancji dobrze zdefiniowanych jest ograniczona górną i dolną granicą zakresu stężenia głównego(-ych) składnika(-ów). W przypadku substancji UVCB zmienność ta jest względnie duża lub słabo przewidywalna.

Uznaje się, że występują również przypadki graniczne pomiędzy substancjami dobrze zdefiniowanymi (produktami reakcji o wielu składnikach, każdy o szerokim zakresie stężenia) i substancjami UVCB (produktami reakcji o zmiennym i słabo przewidywalnym składzie). Zidentyfikowanie danej substancji w najbardziej odpowiedni sposób leży po stronie rejestrującego.

Zasady identyfikacji i nazywania są różne dla „substancji dobrze zdefiniowanych” z jednym głównym składnikiem i dla „substancji dobrze zdefiniowanych” posiadających więcej niż jeden główny składnik. Opisano również odmienne zasady identyfikacji i nazywania dla różnych rodzajów substancji określanymi zbiorczo jako „UVCB”.

W tabelach

Tabela 4 i Tabela 5 wymieniono podstawowe identyfikatory dla przykładowych substancji różnego rodzaju. Przykłady te pogrupowano w taki sposób, aby ułatwić rozpoznanie podobieństw i różnic w procesie identyfikacji substancji.



Tabela 4 i Tabela 5 nie zawierają pełnego wykazu wszystkich możliwych rodzajów substancji. Nie należy traktować takiego zestawienia substancji i zasad identyfikacji i nazywania jako oficjalnego systemu klasyfikacji substancji, ale jako praktyczną wskazówkę, jak odpowiednio stosować określone zasady oraz wyszukiwać wytyczne w niniejszym poradniku.

**Tabela 4: Zestawienie głównych identyfikatorów dla przykładowych rodzajów podobnych substancji dobrze zdefiniowanych**

Cechy wspólne	Przykłady lub substancje reprezentatywne	Główne identyfikatory
Substancje dobrze zdefiniowane na podstawie składu chemicznego [rozdział 4.2.]	Substancje jednoskładnikowe, np. - benzen (95%) - nikiel (99%) [rozdział 4.2.1]	Skład chemiczny: jeden główny składnik ≥ 80%: - Tożsamość chemiczna głównego składnika (nazwa chemiczna, numer CAS, numer WE itd.) - Typowe stężenie oraz jego górna i dolna wartość
	Substancje wieloskładnikowe np. określone produkty reakcji, takie jak Masa reakcji 2-, 3- i 4-chlorotoluenu (po 30%) [rozdział 4.2.2]	Skład chemiczny: mieszanina (masa reakcji) głównych składników; stężenie każdego głównego składnika w przedziale ≥ 10 – < 80%: - Tożsamość chemiczna każdego głównego składnika - Typowe stężenie oraz górna i dolna jego wartość dla każdego składnika oraz samej masy reakcji
	Substancje definiowane na podstawie innych parametrów niż sam skład chemiczny, np. Grafit i diament [rozdział 4.2.3]	Skład chemiczny jak w przypadku substancji jedno- i wieloskładnikowych ORAZ Inne parametry fizyczne i parametry służące do scharakteryzowania substancji, takie jak np. krystalomorfologia, skład mineralogiczny, itd.

**Tabela 5: Zestawienie głównych identyfikatorów dla różnych przykładowych rodzajów substancji UVCB**

Cechy wspólne		Przykłady lub substancje reprezentatywne	Główne identyfikatory		
			Źródło	Proces	Inne identyfikatory
Substancje UVCB (substancje o nieznanym lub zmiennym składzie, złożone produkty reakcji lub materiały biologiczne) [rozdział 4.3]	Materiały biologiczne (B)	Ekstrakty z materiałów biologicznych, np. naturalne aromaty, naturalne olejki, barwniki i pigmenty	- Gatunek lub rodzina roślin lub zwierząt - Część rośliny/zwierzęcia	- Ekstrakcja - Frakcjonowanie, koncentracja, wyodrębnianie, oczyszczenie itd. - <u>Otrzymywanie pochodnych</u> **	- Skład znany lub rodzajowy - Chromatogramy typu „fingerprint” oraz inne „odciski palca” - Wzorzec referencyjny - Colour index (Indeks Barw)
		Złożone makrocząsteczki biologiczne, np. enzymy, białka, fragmenty DNA lub RNA, hormony, antybiotyki			- Standardowy wskaźnik enzymatyczny - Kod genetyczny - Konfiguracja przestrzenna - Właściwości fizyczne - Funkcja/ aktywność - Struktura - Sekwencja aminokwasów
	Produkty fermentacji antybiotyki, biopolimery, enzymy, wywary melasowe (produkty fermentacji cukru), soforolipidy itp.	- Pożywka hodowlana - Zastosowane mikroorganizmy	- Fermentacja - Wyodrębnienie produktów - Etapy rafinacji	- Rodzaj produktów: np. antybiotyki, biopolimery, białka itp. - Znany skład	
	Substancje chemiczne i mineralne o słabo zdefiniowanym,	Mieszanki reakcyjne o słabo przewidywalnym lub zmiennym składzie	Materiały wyjściowe	<u>Rodzaj reakcji chemicznej</u> , np. estryfikacja, alkilowanie, uwodornienie	- Znany skład - Chromatogramy typu „fingerprint” oraz inne „odciski palca” - Wzorzec referencyjny

	złożonym lub zmiennym składzie (UVC)	- Frakcje lub destylaty np. substancje ropopochodne - Gлина, np. bentonit - Smoły	- Ropa naftowa - Węgiel/ torf - Gazy mineralne - Minerale	- Frakcjonowanie, destylacja - <u>Przemiana frakcji</u> - Obróbka fizyczna - Pozostałości	- Wartości graniczne - Zakres długości łańcucha - Stosunek ilości związków aromatycznych do alifatycznych - Znany skład Standardowy wskaźnik
		Koncentraty lub wytopy, np. minerały metaliczne lub pozostałości po wytopie lub procesach metalurgicznych, np. żużel	Rudy	- Wytop - Obróbka cieplna - Różne procesy metalurgiczne	- Skład znany lub rodzajowy - Stężenie metali

\* Procesy podkreślone oznaczają syntezę nowej cząsteczki

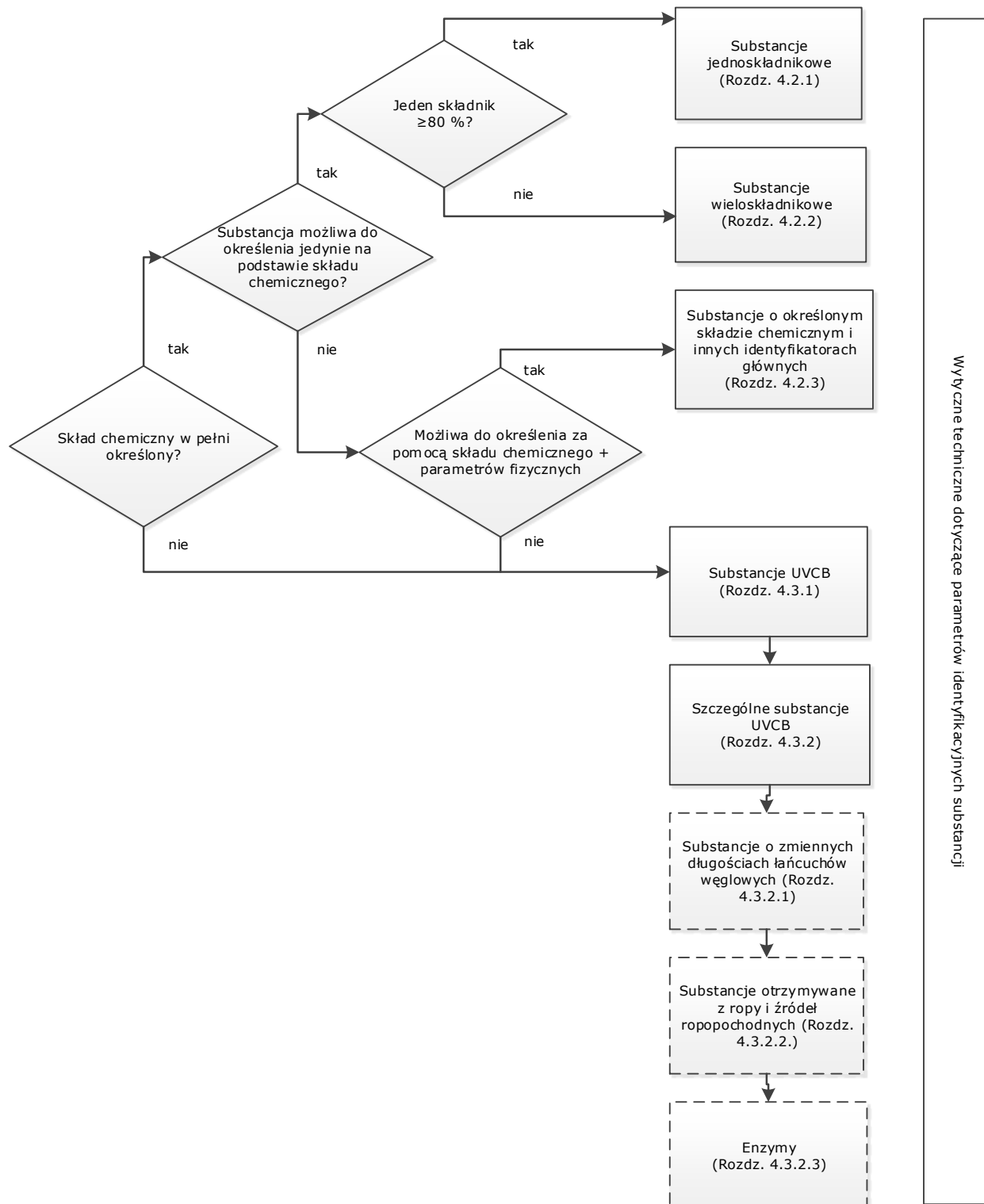
Niniejszy rozdział został podzielony na podrozdziały, które zawierają konkretne wytyczne dotyczące identyfikacji substancji różnego typu. Klucz do odpowiednich rozdziałów znajduje się na Rysunek 1.

Klucz na Rysunek 1 opiera się na przesłankach praktycznych. Rejestrujący substancję jest zobowiązany do wybrania najbardziej stosownego rozdziału i określenia tożsamości substancji zgodnie z zasadami i kryteriami dla tego typu substancji.

Podstawowa zasada brzmi, że substancje należy definiować przede wszystkim na podstawie ich składu chemicznego oraz identyfikacji składników. Tylko w przypadku gdy taka identyfikacja nie jest technicznie możliwa, należy wykorzystać inne identyfikatory określone dla różnych rodzajów substancji UVCB.

**Jeśli rejestrujący nie stosuje się do zasad identyfikacji substancji oraz kryteriów określonych w niniejszym poradniku, to musi dostarczyć odpowiednie uzasadnienie. Identyfikacja substancji powinna być przejrzysta, wytłumaczalna oraz spójna.**

Rysunek 1: Klucz do rozdziałów i dodatków poradnika zawierających odpowiednie wytyczne dla różnych rodzajów substancji



Należy przedłożyć opis metod analitycznych lub wykaz literatury wykorzystanej w celu identyfikacji substancji, a także, w stosownych przypadkach, identyfikacji zanieczyszczeń i dodatków (sekcje 2.3.5, 2.3.6 i 2.3.7 załącznika VI do rozporządzenia REACH). Informacje te powinny być wystarczające do odtworzenia zastosowanych metod. Należy również podać typowe wyniki przy zastosowaniu technik analitycznych.

## 4.2. Substancje o dobrze określonym składzie

Nazwę substancji o dobrze określonym składzie chemicznym tworzy się na podstawie głównego składnika (lub składników). Pewnych rodzajów substancji nie można scharakteryzować tylko za pomocą składu chemicznego. W takich przypadkach do identyfikacji substancji należy dodać dodatkowe parametry fizyczne dotyczące struktur chemicznych.

Zasadniczo skład chemiczny substancji należy określić w 100% oraz w pełni scharakteryzować każdy jej składnik pod względem chemicznym, z podaniem informacji o budowie. Dla substancji określanych na podstawie składu chemicznego wyróżnia się:

- Główny składnik: składnik, który nie jest dodatkiem ani zanieczyszczeniem, występujący w danej substancji i stanowiący znaczną jej część. W oparciu o główny składnik tworzona jest nazwa oraz powstaje szczegółowa identyfikacja substancji.
- Zanieczyszczenie: niezamierzony składnik występujący w wyprodukowanej substancji. Może pochodzić z materiałów wyjściowych lub powstawać w wyniku ubocznych bądź niepełnych reakcji zachodzących w czasie procesu produkcyjnego. Mimo iż zanieczyszczenia są obecne w substancji końcowej, nie zostały do niej dodane celowo.
- Dodatek: substancja, która została dodana celowo do substancji jako stabilizator.

Wszystkie składniki (z wyjątkiem dodatków), które nie są głównymi składnikami substancji jednoskładnikowej- lub wieloskładnikowej, uznaje się za zanieczyszczenia. Mimo iż w niektórych sektorach stosuje się często pojęcie „ilości śladowe”, w niniejszym poradniku stosuje się jedynie termin „zanieczyszczenia”.

Dla różnych składników obowiązują różne wymagania w zakresie identyfikacji:

- Na podstawie nazw głównych składników tworzona jest nazwa substancji i każdy główny składnik musi być dokładnie zidentyfikowany;
- Zanieczyszczenia nie są uwzględniane w nazwie substancji ale każde zanieczyszczenie musi być dokładnie zidentyfikowane;
- Dodatki wchodzi w skład substancji (ale nie są uwzględniane przy tworzeniu nazwy) i wymagają zawsze dokładnej identyfikacji.
- Dokładna identyfikacja głównych składników, zanieczyszczeń i dodatków musi składać się z nazwy IUPAC, nazwy chemicznej, wzoru strukturalnego, numeru WE, numeru CAS, jeśli jest dostępny.

Substancje jednoskładnikowe od wieloskładnikowych odróżnia się zgodnie z następującymi zasadami:

- Substancja jednoskładnikowa to substancja, w której jeden składnik jest obecny w stężeniu co najmniej 80% wagowych i która zawiera do 20% wagowych zanieczyszczeń.

Nazwę substancji jednoskładnikowej tworzy się na podstawie jednego głównego składnika.

- Substancja wieloskładnikowa to substancja składająca się z kilku głównych składników, z których każdy jest obecny w stężeniu wynoszącym z reguły  $\geq 10\%$  i  $< 80\%$  wagowych.

Substancja wieloskładnikowa jest nazywana jako masa reakcyjna dwóch lub więcej głównych składników.

Powyższe zasady mają stanowić wytyczne. Odstępstwo od nich jest możliwe pod warunkiem wiarygodnego uzasadnienia.

Z reguły należy określać te zanieczyszczenia, które są obecne w stężeniu  $\geq 1\%$ . Jednakże w każdym przypadku należy określić te zanieczyszczenia, które są istotne dla klasyfikacji lub oceny PBT<sup>10</sup>, niezależnie od ich stężenia. Zasadniczo informacje o składzie substancji powinny obejmować 100% składu.

W rozumieniu rozporządzeń REACH i CLP oraz niniejszego poradnika dodatki oznaczają środki niezbędne do zachowania stabilności substancji. Dodatki są więc niezbędnym składnikiem danej substancji, który uwzględnia się przy tworzeniu bilansu masowego. Jednakże poza definicją stosowaną w rozporządzeniu REACH oraz w niniejszym dokumencie pojęcie „dodatek” stosuje się również w odniesieniu do celowo dodanych substancji o innych funkcjach, np. regulatorów pH lub barwników. Takie celowo dodane substancje nie stanowią części substancji jako takiej i dlatego nie są uwzględniane w bilansie masowym.

Zgodnie z definicją z rozporządzeń REACH i CLP mieszaniny to celowe mieszaniny substancji, a więc nie można ich uznawać za substancje wieloskładnikowe.

Szczegółowe wytyczne dla substancji jednoskładnikowych znajdują się w rozdziale 4.2.1, a dla substancji wieloskładnikowych w rozdziale 4.2.2. Wytyczne dla substancji, które wymagają dodatkowych informacji (np. niektóre minerały) znajdują się w rozdziale 4.2.3.

#### 4.2.1. Substancje jednoskładnikowe

Substancja jednoskładnikowa to substancja określana na podstawie swojego składu ilościowego, gdzie jeden główny składnik osiąga stężenie co najmniej 80% wagowych.

##### Konwencja nazywania

Nazwę substancji jednoskładnikowej tworzy się na podstawie nazwy jej głównego składnika. Nazwę zasadniczo podaje się w języku angielskim zgodnie z zasadami nazewnictwa IUPAC (zob. załącznik I). Dodatkowo można podać inne uznawane oznaczenia międzynarodowe.

##### Identyfikatory

Substancja jednostkowa jest identyfikowana na podstawie nazwy chemicznej i wszystkich innych dostępnych identyfikatorów (w tym wzoru cząsteczkowego i strukturalnego lub struktury krystalicznej) głównego składnika. Należy zidentyfikować wszelkie zanieczyszczenia lub dodatki do substancji jednoskładnikowej. Należy podać typowe stężenia i zakresy stężeń głównego składnika, zanieczyszczeń lub dodatków. Wszystkie te informacje muszą być potwierdzone za pomocą danych analitycznych.

Przykład				
Główny składnik	Zawartość (%)	Zanieczyszczenie	Zawartość (%)	Tożsamość substancji
m-ksylen	91	o-ksylen	5	m-ksylen
o-ksylen	87	m-ksylen	10	o-ksylen

Zwykle główny składnik występuje w stężeniu  $> 80\%$  i musi być w pełni określony za pomocą wszystkich ww. parametrów. Suma typowych stężeń dla głównego składnika i zanieczyszczeń powinna wynosić 100%. Zanieczyszczenia obecne w stężeniu  $> 1\%$  należy określić za pomocą nazwy i identyfikatorów. W każdym przypadku należy określić zanieczyszczenia istotne dla

<sup>10</sup> Więcej informacji na temat oceny PBT i stosownych kryteriów znajduje się w Poradniku dotyczącym wymagań w zakresie informacji i oceny bezpieczeństwa chemicznego, rozdział R11: ocena PBT.

klasyfikacji substancji lub oceny PBT<sup>11</sup>, niezależnie od ich stężenia.

W celu właściwego stosowania reguły 80% w bilansie masowym nie należy uwzględniać substancji dodanych celowo, np. regulatorów pH lub barwników.

„Regułę 80%” stosuje się do zgłaszania nowych substancji (dyrektywa 67/548/EWG) i ma zastosowanie w REACH. Odstępstwo od reguły 80% należy uzasadnić. Do możliwych przykładów uzasadnionego odstępstwa zalicza się następujące sytuacje:

- Stężenie głównego składnika wynosi < 80%, ale można wykazać, że substancja posiada podobne właściwości fizykochemiczne oraz taki sam profil zagrożenia jak inne substancje jednoskładnikowe o tej samej tożsamości, które spełniają regułę 80%.
- Zakres stężeń dla głównego składnika i zanieczyszczeń są zbieżne z kryterium 80%, a stężenie głównego składnika wynosi jedynie sporadycznie ≤ 80%.

Przykłady									
Subst.	Główny składnik	Górna granica (%)	Typowa zawartość (%)	Dolna granica (%)	Zanieczyszczenie	Górna granica (%)	Typowa zawartość (%)	Dolna granica (%)	Tożsamość subst.
1	o-ksylen	90	85	65	m-ksylen	35	15	10	o-ksylen
2	o-ksylen m-ksylen	90 35	85 15	65 10	p-ksylen	5	4	1	o-ksylen

Ze względu na zakresy stężenia głównego składnika i zanieczyszczenia substancje nr 1 i 2 można uznać za substancje wieloskładnikowe z dwoma głównymi składnikami – o-ksylenem i m-ksylenem – lub jako substancje jednoskładnikowe. W tym przypadku obie substancje należy uznać za substancje jednoskładnikowe, ponieważ stężenie o-ksylenu wynosi typowo > 80%.

### Dane analityczne

Należy podać wystarczające dane jakościowe w celu potwierdzenia tożsamości składników i zanieczyszczeń substancji jednoskładnikowej. Istnieje kilka odpowiednich metod spektroskopowych odpowiednich do potwierdzenia tożsamości substancji, takich jak spektroskopia absorpcyjna w ultrafiolecie i zakresie widzialnym (UV/VIS), spektroskopia w podczerwieni (IR), magnetyczny rezonans jądrowy (NMR) i spektroskopia masowa (MS). W przypadku substancji nieorganicznych albo substancji organicznych lub metaloorganicznych wykrywalnych/mierzonych za pomocą struktury krystalicznej w większości przypadków preferowane jest stosowanie dyfrakcji rentgenowskiej (XRD).

Do potwierdzenia składu substancji należy stosować metody ilościowe, takie jak metody chromatograficzne, np. chromatografia gazowa (GC) lub wysokosprawna chromatografia cieczowa (HPLC) w połączeniu z techniką detekcji. W przypadku substancji nieorganicznych bardziej odpowiednia może być dyfrakcja rentgenowska (XRD), dyfrakcja rentgenowska fluorescencyjna (XRF), spektroskopia absorpcji atomowej (AAS), spektroskopia emisyjna ze wzbudzeniem w plazmie indukcyjnie sprzężonej (ICP-OES) lub spektrometria masowa ze wzbudzeniem w plazmie indukcyjnie sprzężonej (ICP-MS). W odpowiednich przypadkach należy również stosować inne właściwe techniki wyodrębnienia składników.

Opis metod analitycznych musi obejmować stosowane protokoły eksperymentalne i interpretację przedstawionych wyników.

Metody analityczne podlegają ciągłym postępom i udoskonaleniom. Dlatego, obowiązkiem rejestrującego jest przedłożenie stosownych danych analitycznych.

<sup>11</sup> Więcej informacji na temat oceny PBT i stosownych kryteriów znajduje się w Poradniku dotyczącym wymagań w zakresie informacji i oceny bezpieczeństwa chemicznego, rozdział R11: ocena PBT.



## 4.2.2. Substancje wieloskładnikowe

Substancja wieloskładnikowa to substancja określana na podstawie swojego składu ilościowego, w którym więcej niż jeden główny składnik występuje w stężeniu  $\geq 10\%$  wagowych i  $< 80\%$  wagowych. Substancja wieloskładnikowa jest wynikiem procesu produkcyjnego<sup>12</sup>.

Na mocy rozporządzenia REACH wymagana jest rejestracja substancji w takiej formie, jaką uzyskuje się w produkcji. Jeśli produkowana jest substancja wieloskładnikowa, to rejestrować należy substancję wieloskładnikową<sup>13 14</sup>. Decyzja, w jakim stopniu poszczególne etapy produkcji substancji są objęte definicją „produkcji”, zależy od konkretnego przypadku. Nie trzeba badać substancji, jeśli jej profil zagrożenia można zadowalająco opisać za pomocą informacji o poszczególnych składnikach.

### Konwencja nazywania

Substancja wieloskładnikowa jest nazywana jako masa reakcyjna głównych składników substancji jako takiej, a nie materiałów wyjściowych potrzebnych do wyprodukowania tej substancji. Nazwa tworzona jest według następującego wzoru: „Reaction mass of [nazwy głównych składników]”. Nazwy składników najlepiej wymieniać w kolejności alfabetycznej, oddzielone spójnikiem „i”. Nazwa jest tworzona jedynie na podstawie nazw głównych składników występujących w stężeniu  $\geq 10\%$ . Nazwę zasadniczo podaje się w języku angielskim zgodnie z zasadami nazewnictwa IUPAC. Dodatkowo można podać inne uznawane oznaczenia międzynarodowe.

### Identyfikatory

Substancja wieloskładnikowa jest identyfikowana za pomocą nazwy chemicznej i wszystkich innych dostępnych identyfikatorów substancji jako takiej oraz za pomocą tożsamości chemicznej składników (w tym wzoru cząsteczkowego i strukturalnego lub struktury krystalicznej). Należy zidentyfikować wszelkie zanieczyszczenia lub dodatki do substancji jednoskładnikowej. Należy podać typowe stężenia i zakresy stężeń składników, zanieczyszczeń lub dodatków. Wszystkie te informacje muszą być potwierdzone za pomocą danych analitycznych.

Przykład				
Główne składniki	Zawartość (%)	Zanieczyszczenie	Zawartość (%)	Tożsamość substancji
m-ksylen o-ksylen	50 45	p-ksylen	5	Masa reakcyjna m-ksylenu i o-ksylenu

Substancje wieloskładnikowe posiadają znany skład chemiczny, a ich identyfikacja odbywa się na podstawie więcej niż jednego głównego składnika. Ponadto skład chemiczny substancji jest przewidywalny, także pod względem typowych wielkości i zakresów. Główne składniki należy w pełni opisać za pomocą wszystkich stosownych parametrów. Suma typowych stężeń głównych składników ( $\geq 10\%$ ) i zanieczyszczeń ( $< 10\%$ ) musi wynosić 100%.

<sup>12</sup> Różnica między mieszaniną a substancją wieloskładnikową polega na tym, że mieszanina powstaje poprzez zmieszanie dwóch lub więcej substancji, przy czym nie zachodzi reakcja chemiczna. Substancja wieloskładnikowa powstaje w wyniku reakcji chemicznej.

<sup>13</sup> Wiele substancji nie podlega rejestracji na mocy rozporządzenia REACH (np. substancje wymienione w załączniku IV).

<sup>14</sup> Takie postępowanie nie dotyczy wielu określonych substancji, takich jak minerały (więcej szczegółów – zob. rozdział 7.5).

W celu poprawnej identyfikacji substancji wieloskładnikowej w bilansie masowym nie należy uwzględniać substancji dodawanych celowo (np. regulatorów pH lub barwników).

Zanieczyszczenia obecne w stężeniu  $\geq 1\%$  określa się za pomocą nazwy i wszystkich dostępnych identyfikatorów. W każdym przypadku należy określić zanieczyszczenia istotne dla klasyfikacji substancji lub oceny PBT, niezależnie od ich stężenia.

Przykład								
Główny składnik	Górna granica (%)	Typowa zawartość (%)	Dolna granica (%)	Zanieczyszczenie	Górna granica (%)	Typowa zawartość (%)	Dolna granica (%)	Tożsamość substancji
anilina	90	75	65	fenantren	5	4	1	Masa reakcyjna aniliny i naftalenu
naftalen	35	20	10					

Zgodnie z zasadami określonymi w niniejszym poradniku substancja ta jest substancją wieloskładnikową. Mimo iż zawartość jednego składnika wynosi  $> 80\%$ , taka sytuacja występuje rzadko, przy typowym składzie zawartość wynosi  $< 80\%$ .

W każdym przypadku, gdy główny składnik substancji wieloskładnikowej wynosi  $\geq 80\%$  lub  $< 10\%$  (w/w), należy podać uzasadnienie tego odstępstwa. Możliwym przykładem uzasadnionego odstępstwa jest:

- Składnik występuje jedynie sporadycznie w stężeniu  $\geq 80\%$  lub  $< 10\%$ .

Przykładowo, dana substancja zawiera dwa składniki – jeden w stężeniu 85% i drugi w stężeniu 10%, przy czym reszta to zanieczyszczenia. Oba składniki decydują o pożądanym skutku technicznym tej substancji i mają na niego wpływ. Dlatego też substancję tę można określić jako dwuskładnikową, pomimo iż zawartość jednego składnika wynosi  $> 80\%$ .

### Dane analityczne

Należy podać wystarczające dane jakościowe w celu potwierdzenia tożsamości składników i zanieczyszczeń substancji wieloskładnikowej. Istnieje kilka odpowiednich metod spektroskopowych odpowiednich do potwierdzenia tożsamości substancji, takich jak spektroskopia absorpcyjna w ultrafiolecie i zakresie widzialnym (UV/VIS), spektroskopia w podczerwieni (IR), magnetyczny rezonans jądrowy (NMR) i spektroskopia masowa (MS). W przypadku substancji nieorganicznych albo substancji organicznych lub metaloorganicznych wykrywalnych/mierzonych za pomocą struktury krystalicznej w większości przypadków preferowane jest stosowanie dyfrakcji rentgenowskiej (XRD).

Do potwierdzenia składu substancji należy stosować metody ilościowe, takie jak metody chromatograficzne, np. chromatografia gazowa (GC) lub wysokosprawna chromatografia cieczowa (HPLC) w połączeniu z techniką detekcji. W przypadku substancji nieorganicznych bardziej odpowiednia może być dyfrakcja rentgenowska (XRD), dyfrakcja rentgenowska fluorescencyjna (XRF), spektroskopia absorpcji atomowej (AAS), spektroskopia emisyjna ze wzbudzeniem w plazmie indukcyjnie sprzężonej (ICP-OES) lub spektrometria masowa ze wzbudzeniem w plazmie indukcyjnie sprzężonej (ICP-MS). W odpowiednich przypadkach należy również stosować inne właściwe techniki wyodrębnienia składników.

Opis metod analitycznych musi obejmować stosowane protokoły eksperymentalne i interpretację przedstawionych wyników.

Metody analityczne podlegają ciągłym postępom i udoskonaleniom. Dlatego, przedłożenie stosownych danych spektralnych jest obowiązkiem rejestrującego.

## Rejestracja poszczególnych składników substancji wieloskładnikowej

Zasadniczo zapis tożsamości substancji do celów rejestracji powinien być zgodny ze schematem dla substancji wieloskładnikowych (tj. dla rejestracji substancji wieloskładnikowej). Odstępstwem od tego postępowania może być, w uzasadnionych przypadkach, rejestracja poszczególnych składników. Odstępstwo od procedury standardowej w celu identyfikacji (i ewentualnie rejestracji) substancji na podstawie jej poszczególnych składników jest możliwe, gdy:

- nie stosuje się zmniejszenia wymagań w zakresie informacji;
- istnieją dostateczne dane uzasadniające procedurę rejestracji poszczególnych składników, tj. że procedura ta nie powinna zwykle powodować konieczności przeprowadzenia dodatkowych badań (na kręgowcach) w porównaniu z procedurą standardową;
- rejestracja poszczególnych składników zwiększa efektywność (tzn. unika się wielu rejestracji substancji złożonych z tych samych składników);
- podaje się informacje o składzie poszczególnych mas reakcyjnych.

Elastyczności tej nie należy nadużywać w celu uniknięcia wymagań w zakresie danych. W przypadku np. substancji wieloskładnikowej „(C + D)” o składzie 50% C i 50% D w ilości 1200 ton na rok procedura taka prowadziłyby do dwóch rejestracji z następującymi informacjami:

### Substancja C

- Tonaż (wielkość obrotu) 600
- wymagania w zakresie danych muszą być spełnione dla > 1000 ton (załącznik X)

### Substancja D

- Tonaż (wielkość obrotu) 600
- wymagania w zakresie danych muszą być spełnione dla > 1000 ton (załącznik X)

Procedurę tę należy połączyć ze spełnieniem wymogu REACH dotyczącym sumowania ilości tej samej substancji dla jednego podmiotu. Proponuje się ustalić wymagania w zakresie danych w sposób następujący:

- dodać ilości wszystkich indywidualnych składników (zgodnie z zawartością w substancji)
- odnieść się do największej ilości substancji zawierającej dany składnik

Wymagania w zakresie informacji należy ustalić na podstawie najwyższego wyniku. Jako tonaż należy podawać wynik sumowania tonażu każdego oddzielnego składnika. Poniżej przedstawiono uproszczone przykłady ilustrujące praktyczną realizację tego podejścia:

### Przykład 1

Substancja wieloskładnikowa „C+D+E” powstaje w wyniku procesu prowadzonego w ramach jednego podmiotu prawnego, z którego to procesu powstają różne substancje:

- Substancja 1: 50% C, 25% D i 25% E, 1100 t/rok
- Substancja 2: 50% C i 50% D, 500 t/rok

Również w tym przypadku produkt reakcji stanowi punkt wyjścia: obie substancje należy zarejestrować jako substancje wieloskładnikowe. Jeśli wybierze się procedurę rejestracji indywidualnych składników<sup>15</sup>, to sytuacja będzie następująca:

Zgłaszanie substancji D w tym przypadku oznacza:

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

<sup>15</sup> Przykład ten ma tylko zilustrować ustalenie wymagań w zakresie informacji i raportowania ilości. Nie przesądza on o zasadności tego podejścia w tym przypadku.

Podstawą do określenia wymagań odnośnie informacji jest najdalej idące wymaganie. W tym przypadku: > 1000 t/rok, jako że łączny tonaż substancji wieloskładnikowej „C+D+E” wynosi powyżej 1000 t/rok.

Uwaga: w tym przykładzie należy odpowiednio zarejestrować substancje C i E.

#### Przykład 2

Substancja wieloskładnikowa „G+H+I” powstaje w wyniku procesu prowadzonego w ramach jednego podmiotu prawnego, z którego to procesu powstają różne substancje:

- Substancja 3: 65% G, 15% H i 20% I, 90 t/rok
- Substancja 4: 60% G i 40% H, 90 t/rok

Raportowanie substancji G:

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

Podstawą do określenia wymagań odnośnie informacji jest najdalej idące wymaganie. W tym przypadku: > 100 t/rok, jako że łączny tonaż składnika G wynosi powyżej 100 t/rok.

Uwaga: w tym przykładzie należy odpowiednio zarejestrować substancje H i I.

Oprócz ustalenia ww. wymagań w zakresie informacji, kolejnym zagadnieniem jest liczba nowych badań (na kręgowcach), które trzeba wykonać. Przed podjęciem decyzji co do strategii postępowania potencjalni rejestrujący muszą rozważyć, czy istnieją już wystarczające badania (na kręgowcach) i czy proponowane rozwiązanie „elastyczne” oznaczać będzie mniejszą czy większą liczbę badań (na kręgowcach). Wybrać należy tę strategię, w której nie prowadzi się nowych badań (na kręgowcach).

W przypadku wątpliwości standardowym sposobem zapisywania tożsamości substancji do celów rejestracji powinna zawsze być identyfikacja substancji w tej postaci, w jakiej jest produkowana.

### 4.2.3. Substancje o określonym składzie chemicznym i innych identyfikatorach głównych

Niektóre substancje (np. minerały nieorganiczne), które mogą być zidentyfikowane za pomocą składu chemicznego, wymagają dalszego określenia za pomocą dodatkowych identyfikatorów, aby uzyskać własną identyfikację substancji. Substancje te mogą być substancjami jednoskładnikowymi bądź wieloskładnikowymi, ale do jednoznacznego ustalenia ich tożsamości konieczne są nie tylko ww. parametry identyfikacyjne, ale również dodatkowe identyfikatory główne.

#### Przykłady

W celu jednoznacznej identyfikacji niektórych minerałów niemetalicznych (występujących w przyrodzie lub sztucznych) o unikalnych strukturach konieczne jest określenie ich morfologii oraz składu chemicznego. Przykładem takiego minerału jest kaolin (CAS 1332-58-7) składający się z kaolinu, krzemianu potasowo-glinowego, skalenia oraz kwarcu.

Wytyczne dotyczące wypełniania szczególnych obowiązków wynikających z REACH w odniesieniu do substancji w „nanopostaciach” znajdują się w *Załączniku dotyczącym nanopostaci, mającym zastosowanie do Poradnika na temat rejestracji i identyfikacji*

*substancji*<sup>16</sup>. Przedstawione porady obejmują specyficzne dla nanomateriałów kwestie związane z rejestracją i charakterystyką nanopostaci.

### **Konwencja nazywania**

Zasadniczo stosuje się tę samą konwencję nazywania, jak dla substancji jednoskładnikowych (rozdział 4.2.1) i wieloskładnikowych (rozdział 4.2.2).

W przypadku minerałów nieorganicznych za nazwy składników substancji mogą posłużyć nazwy mineralogiczne. Na przykład, apatyt to substancja wieloskładnikowa składająca się z grupy minerałów fosforanowych, określanych zwykle jako hydroksyapatyt, fluoroapatyt, chloroapatyt, których nazwy pochodzą od wysokich stężeń odpowiednio jonów OH<sup>-</sup>, F<sup>-</sup>, lub Cl<sup>-</sup> w sieci krystalicznej. Wzór mieszaniny tych trzech najbardziej rozpowszechnionych składników jest następujący: Ca<sub>5</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>(OH, F, Cl). Kolejnym przykładem jest aragonit, jedna ze szczególnych struktur krystalicznych węgla wapnia.

### **Identyfikatory**

Substancje te są identyfikowane i nazywane zgodnie z zasadami dla substancji jednoskładnikowych (rozdział 4.2.1) lub wieloskładnikowych (rozdział 4.2.2). Inne szczególne identyfikatory główne, które trzeba dodać, zależą od rodzaju substancji. Przykładem takich dodatkowych identyfikatorów głównych mogą być: skład pierwiastkowy oraz dane spektralne, struktura krystaliczna określona za pomocą dyfrakcji rentgenowskiej (XRD), maksima absorpcji w paśmie podczerwieni, wskaźnik pęcznienia, zdolność wymiany kationowej lub inne właściwości fizykochemiczne.

W przypadku minerałów należy zestawić wyniki analizy składu pierwiastkowego z danymi spektralnymi, aby zidentyfikować skład mineralogiczny oraz strukturę krystaliczną minerału. Jest to następnie potwierdzane za pomocą jego charakterystycznych właściwości fizykochemicznych, takich jak struktura krystaliczna (określona za pomocą dyfrakcji rentgenowskiej XRD), kształt, twardość, pęcznienie, pojemność lub powierzchnia właściwa.

Ponieważ minerały mają charakterystyczne właściwości fizykochemiczne, które uzupełniają ich identyfikację, dla niektórych minerałów można podać przykłady odpowiednich, dodatkowych identyfikatorów głównych: np. bardzo niską twardość dla talku, zdolność pęcznienia dla bentonitu, kształty diatomitu, wysoką gęstość barytu lub powierzchnię właściwą (oznaczoną za pomocą adsorpcji azotu).

### **Dane analityczne**

Głównym kryterium jest to, że należy przedstawić wszystkie informacje niezbędne do potwierdzenia struktury substancji. Należy przedstawić takie same dane analityczne, jak dla substancji jednoskładnikowych (rozdział 4.2.1) lub wieloskładnikowych (rozdział 4.2.2).

## **4.3. Substancje UVCB**

Pełna identyfikacja substancji o słabo określonym lub zmiennym składzie, złożonych

---

<sup>16</sup> Załącznik dotyczący nanopostaci mający zastosowanie do Poradnika na temat rejestracji i identyfikacji substancji, dostępny pod adresem <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>

produktów reakcji i materiałów biologicznych<sup>171819</sup> (zwanymi również substancjami UVCB) na podstawie ich składu chemicznego nie jest możliwa z następujących przyczyn:

- liczba składników jest relatywnie duża lub
- skład jest w znacznej części nieznanymi lub
- zmienność składu jest relatywnie duża lub słabo przewidywalna.

Z tego względu oprócz informacji na temat składu chemicznego substancje UVCB wymagają innych dodatkowych informacji do ich identyfikacji.

W Tabeli 5 pokazano, że identyfikatory główne dla różnego rodzaju substancji UVCB dotyczą źródła pochodzenia danej substancji i zastosowanego procesu, bądź też należą do grupy „innych identyfikatorów głównych” (np. „chromatogramy typu fingerprint oraz inne „odciski palca” substancji”). Liczba i rodzaj identyfikatorów podanych w Tabeli 5 wskazują na ich różnorodność i nie należy ich uznawać za wyczerpujące. W przypadku gdy skład chemiczny, np. złożonego produktu reakcji lub substancji pochodzenia biologicznego, jest znany, substancję taką należy zidentyfikować jako, odpowiednio, substancję jednoskładnikową lub wieloskładnikową. Jeśli substancja została określona jako „substancja UVCB”, to oznacza to, iż każda istotna zmiana źródła pochodzenia lub zastosowanego procesu może przyczynić się do powstania innej substancji, która wymaga ponownej rejestracji. Jeżeli mieszanina reakcyjna została zidentyfikowana jako „substancja wieloskładnikowa”, to substancję taką można pozyskiwać z innego źródła lub z innych procesów pod warunkiem, że skład substancji końcowej jest zgodny z określonym dla niej zakresem stężeń. W takim przypadku nowa rejestracja nie jest konieczna.

Ogólne wytyczne dotyczące substancji UVCB zostały przedstawione w rozdziale 4.3.1, a szczegółowe wytyczne dotyczące substancji o zróżnicowanych długościach łańcuchów węglowych, substancji pozyskiwanych z ropy naftowej i źródeł ropopodobnych oraz enzymów jako substancji UVCB szczególnego rodzaju – w rozdziale 4.3.2.

### 4.3.1. Ogólne wytyczne dotyczące substancji UVCB

Niniejszy rozdział poradnika zawiera ogólne wytyczne dotyczące stosowania niektórych identyfikatorów głównych, poza parametrami identyfikacji substancji określonymi w sekcji 2 załącznika VI do rozporządzenia REACH, na potrzeby identyfikacji substancji UVCB.

#### Informacje dotyczące składu chemicznego

Substancje UVCB albo nie można jednoznacznie określić za pomocą nazwy IUPAC składników, ponieważ identyfikacja wszystkich składników nie jest możliwa, albo też substancje te mogą być określone w sposób ogólny, ale niedokładny z powodu zmienności faktycznego składu. Z powodu braku rozróżnienia pomiędzy składnikami a zanieczyszczeniami w odniesieniu do substancji UVCB nie należy stosować pojęć „składniki główne” oraz „zanieczyszczenia”.

Niemniej jednak należy określić skład chemiczny oraz nazwy składników, jeżeli są znane. Opis składu chemicznego można przedstawić w sposób bardziej ogólny, np. „liniowe kwasy tłuszczowe C8-C16” lub „etoksylany alkoholi C10-14 z 4-10 jednostkami oksyetylenowymi”. Ponadto dane dotyczące składu chemicznego można podać w oparciu o znane próbki

<sup>17</sup> Rasmussen K, Pettau D, Vollmer G i in. (1999) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for UVCB substances. Tox Env Chem tom 69, pp. 403-416.

<sup>18</sup> 17 US EPA (2005-B) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Combinations of two or more substances: complex reaction products.

<sup>19</sup> 18 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.



odniesienia lub wzorce. W wielu przypadkach można też wykorzystać indeksy oraz istniejące kody. Pozostałe informacje ogólne dotyczące składu mogą obejmować tzw. chromatogramy typu fingerprint – obrazy chromatograficzne lub spektralne ukazujące charakterystyczny wzorec rozmieszczenia pików.

Dla substancji UVCB wszystkie składniki obecne w stężeniu  $\geq 10\%$  i wszystkie inne znane składniki obecne w stężeniach  $< 10\%$  muszą być określone za pomocą angielskiej nazwy IUPAC, typowych stężeń i zakresów stężeń.

Ponadto, jeśli jest dostępny, należy podać dla każdego składnika identyfikator numeryczny (numer CAS lub numer WE lub numer w wykazie).

Składniki, których nie można zidentyfikować indywidualnie, należy opisać w grupach na podstawie właściwości chemicznych. W takim przypadku dla każdej grupy należy określić co najmniej nazwę substancji chemicznej, typowe stężenie i zakres stężeń. Ponadto należy podać informacje dotyczące budowy cząsteczkowej i strukturalnej, jeżeli są one dostępne.

W każdym przypadku za pomocą takich samych identyfikatorów należy zawsze zidentyfikować składniki mające wpływ na klasyfikację lub ocenę PBT<sup>20</sup> danej substancji, niezależnie od ich stężenia.

Jeśli to możliwe, nieznanne składniki, które nie przyczyniają się do klasyfikacji, należy zidentyfikować za pomocą ogólnego opisu ich charakteru chemicznego. Dodatki muszą być w pełni określone w sposób podobny do opisanego dla substancji dobrze zdefiniowanych.

### Główne parametry identyfikacyjne – nazwa, źródło i proces

Ponieważ sam skład chemiczny nie jest wystarczający do identyfikacji substancji, należy ją zidentyfikować, podając jej nazwę, pochodzenie lub źródło oraz opis procesu wytwarzania. Istotnymi identyfikatorami, czy to ogólnymi (np. temperatura wrzenia) czy kluczowymi dla określonych grup substancji (np. aktywność katalityczna enzymów), mogą być również inne właściwości substancji.

#### 1. Konwencja nazywania

Nazwa substancji UVCB to na ogół kombinacja źródła i procesu zapisywana w sposób następujący: najpierw źródło, potem procesy.

- Substancje pochodzące ze źródeł biologicznych identyfikuje się na podstawie nazwy gatunkowej.
- Substancje pochodzące ze źródeł niebiologicznych identyfikuje się na podstawie materiałów wyjściowych.
- Procesy identyfikuje się na podstawie rodzaju reakcji chemicznej w przypadku syntezy nowych cząsteczek lub jako rodzaj rafinacji, np. ekstrakcja, frakcjonowanie, zatężanie, lub jako pozostałość.

#### Przykłady

Numer WE	Nazwa WE
296-358-2	Lavender, Lavandula hybrida, ext., acetylated (Lavender, Lavandula hybrida, ext., acetylowany)
307-507-9	Lavender, Lavandula latifolia, ext., sulfurized, palladium salt

<sup>20</sup> Więcej informacji na temat oceny PBT i stosownych kryteriów znajduje się w Poradniku dotyczącym wymagań w zakresie informacji i oceny bezpieczeństwa chemicznego, rozdział R11: ocena PBT.

	(Lavender, <i>Lavandula latifolia</i> , ext., siarkowany, sól palladowa)
--	--

W przypadku produktów reakcji w wykazie WE stosowane są różne formaty, np.:

- EINECS: główny materiał wyjściowy, produkt(-y) reakcji pozostałego materiału wyjściowego (lub materiałów wyjściowych)
- ELINCS produkt(-y) reakcji materiału wyjściowego (lub materiałów wyjściowych)

### Przykłady

Numer WE	Nazwa WE
232-341-8	Nitrous acid, reaction products with 4-methyl-1,3-benzenediamine hydrochloride (Kwas azotawy, produkty reakcji z chlorowodorkiem 4-metylo-1,3-benzenodiaminy)
263-151-3	Fatty acids, coco, reaction products with diethylenetriamine (Kwasy tłuszczowe, kokos, produkty reakcji z dietylenotriaminą)
400-160-5	Reaction products of tall-oil fatty acids, diethanolamine and boric acid (Produkty reakcji kwasów tłuszczowych oleju talowego, dietanoloaminy i kwasu borowego)
428-190-4	Reaction product of: 2,4-diamino-6-[2-(2-methyl-1H-imidazol-1-yl)ethyl]-1,3,5-triazine and cyanuric acid (Produkt reakcji 2,4-diamino-6-[2-(2-metylo-1H-imidazolo-1-ilo)etylo]-1,3,5-triazyny i kwasu cyjanurowego)

W niniejszym poradniku ogólny schemat zapisu nazw produktu/produktów reakcji jest następujący: „Reaction product(s) of [Produkt(y) reakcji] [nazwy materiałów wyjściowych]”. Nazwę zasadniczo podaje się w języku angielskim zgodnie z zasadami nazewnictwa IUPAC. Dodatkowo można podać inne uznawane oznaczenia międzynarodowe. Zaleca się zastąpienie w nazwie słowa „reaction” (reakcja) stosownym rodzajem reakcji np. „esterification” (estryfikacja) lub „salt formation” (tworzenie soli) itd. (zob. poniżej: wytyczne dla czterech podklas substancji UVCB).

## 2. Źródło

Źródło można podzielić na dwie grupy:

### 2.1. Źródła o charakterze biologicznym

Substancje pochodzenia biologicznego należy definiować na podstawie rodzaju, gatunku oraz rodziny, np. *Pinus cembra*, *Pinaceae* to *Pinus* (rodzaj), *cembra* (gatunek) *Pinaceae* (rodzina), a w stosownych przypadkach odmiany lub typu genetycznego. W niektórych sytuacjach należy również podać tkankę lub część organizmu wykorzystane do ekstrakcji substancji, np. szpik kostny, trzustka, ewentualnie łodyga, nasiona lub korzenie.



Przykłady	
Numer WE	Nazwa WE
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae, ext. <b>Opis WE</b> Ekstrakty oraz ich fizycznie zmodyfikowane pochodne, takie jak tynktury, konkrety, absoluty, olejki eteryczne, oleożywice, terpeny, frakcje bezterpenowe, destylaty, pozostałości otrzymane z Saccharomyces cerevisiae, Saccharomycelaceae.
296-350-9	Arnica mexicana, ext. <b>Opis WE</b> Ekstrakty oraz ich fizycznie zmodyfikowane pochodne, takie jak tynktury, konkrety, absoluty, olejki eteryczne, oleożywice, terpeny, frakcje bezterpenowe, destylaty, pozostałości otrzymane z Arnica mexicana, Compositae.

## 2.2. Źródła chemiczne lub mineralne

W przypadku produktów reakcji otrzymanych w procesie reakcji chemicznej materiały wyjściowe należy opisać za pomocą nazwy IUPAC podanej w języku angielskim. Źródła mineralne opisuje się w sposób ogólny, np. rudy fosforytowe, boksyt, glinika biała, gaz mineralny, węgiel, torf.

## 3. Proces

Procesy identyfikowane są na podstawie typu reakcji chemicznej, jeśli zachodzi synteza nowych cząsteczek, lub jako rodzaj etapów rafinacji, np. ekstrakcja, frakcjonowanie, zatężanie, bądź jako pozostałość rafinacji.

W przypadku niektórych substancji, np. pochodnych chemicznych, proces opisuje się jako kombinację rafinacji i syntezy.

### 3.1 Synteza

Typ reakcji chemicznej lub biochemicznej zachodzącej pomiędzy materiałami wyjściowymi, w wyniku której otrzymywana jest dana substancja. Przykładami syntezy są: reakcja Grignarda, sulfonowanie, rozszczepienie enzymatyczne w wyniku działania proteazy lub lipazy itd. Do tej grupy należy także wiele reakcji otrzymywania pochodnych

W przypadku nowo syntezowanych substancji, dla których nie można podać składu chemicznego, głównymi identyfikatorami są materiały wyjściowe oraz specyfikacja reakcji, tzn. podanie typu reakcji chemicznej. Typ reakcji chemicznej wskazuje, jakie cząsteczki mogą być obecne w substancji. Istnieje kilka rodzajów końcowej reakcji chemicznej, m.in.: hydroliza, estryfikacja, alkirowanie, chlorowanie, itp. Ponieważ parametry te dostarczają jedynie ogólnych informacji o potencjalnie wyprodukowanych substancjach, w wielu przypadkach w celu pełnego scharakteryzowania i identyfikacji substancji należy również przedłożyć chromatogram typu fingerprint.

<b>Przykłady</b>	
<b>Numery WE</b>	<b>Nazwa WE</b>
294-801-4	Linseed oil, epoxidised, reaction products with tetraethylenepentamine (Olej lniany, epoksydowany, produkty reakcji z tetraetylenopentaminą)
401-530-9	Reaction product of (2-hydroxy-4-(3-propenoxy)benzophenone and triethoxysilane) with (hydrolysis product of silica and methyltrimethoxysilane) (Produkt reakcji (2-hydroksy-4-(3-propenoksy)benzofenonu i trietoksylanu) z (produktem hydrolizy krzemionki i metylotrimetoksylanu))

### 3.2 Rafinacja

Substancje występujące w przyrodzie oraz substancje pochodzenia mineralnego można poddawać rafinacji na wiele sposobów. Proces ten nie wpływa na zmianę tożsamości chemicznej składników, ale powoduje zmianę ich stężenia. Przykładem rafinacji jest obróbka na zimno tkanki roślinnej, a następnie ekstrakcja za pomocą alkoholu.

Rafinację można dokładniej zdefiniować za pomocą takich procesów, jak ekstrakcja. Identyfikacja substancji zależy od rodzaju procesu:

- Dla substancji otrzymywanych metodami fizycznymi, np. za pomocą rafinacji lub frakcjonowania, należy określić wartość graniczną i parametr frakcji (np. wielkość cząsteczki, długość łańcucha, temperaturę wrzenia, przedział lotności itd.);
- W przypadku substancji otrzymywanych w wyniku koncentracji, np. produktów pozyskiwanych w procesach metalurgicznych, odwirowanych osadów, placków filtracyjnych itd., należy określić etap zatężania oraz skład rodzajowy uzyskanej substancji w odniesieniu do materiału wyjściowego;

<b>Przykłady</b>	
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa WE</b>
408-250-6	Organotungsten compound concentrate (reaction products of tungsten hexachloride with 2-methylpropan-2-ol, nonylphenol and pentane-2,4-dione) (Koncentrat związku wolframoorganicznego (produkty reakcji heksachlorku wolframu z 2-metylopropan-2-olem, nonylfenolem i pentano-2,4-dionem))

- W przypadku pozostałości po niektórych reakcjach, np. żużli, smoły i frakcji ciężkich, należy opisać odpowiedni proces i podać skład rodzajowy substancji powstałej w wyniku reakcji;

<b>Przykłady</b>	
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa WE</b>
283-659-9	<p>Tin, melting residues (Cyna, pozostałości z topnienia)</p> <p><b>Opis WE</b></p> <p>Substancja powstała w wyniku stosowania i produkcji cyny oraz jej stopów pozyskiwanych ze źródeł pierwotnych i wtórnych łącznie z recykulowanymi półproduktami zakładowymi. Substancja ta składa się głównie ze związków cyny i może zawierać pozostałości innych metali</p>

	nieżelaznych i ich związki.
293-693-6	Soybean meal, protein extn. Residue (Mączka sojowa, bez białek. Pozostałość) <b>Opis WE</b> Produkt uboczny zawierający głównie węglowodany, otrzymywany w wyniku ekstrakcji etanolem odtłuszczonej soi.

- o W przypadku ekstraktów należy podać metodę ekstrakcji, rozpuszczalnik ekstrakcyjny oraz inne odpowiednie czynniki, np. temperaturę/przedział temperatur.
- o W przypadku obróbki metodą łączoną, poza informacją o źródle pochodzenia substancji, należy określić każdy etap danego procesu (w sposób ogólny). Przetwarzanie łączone ma szczególne znaczenie w przypadku otrzymywania pochodnych chemicznych.

Przykłady:

- o Roślinę najpierw poddaje się ekstrakcji. Otrzymany ekstrakt jest następnie destylowany, a destylowana frakcja ekstraktu roślinnego jest wykorzystywana w celu chemicznego otrzymania substancji pochodnej. Pozyskiwana w ten sposób substancja może być poddawana dalszemu oczyszczaniu. Zdarza się, iż scharakteryzowanie takiego rafinowanego produktu na podstawie składu chemicznego staje się ostatecznie możliwe i w takiej sytuacji nie ma potrzeby identyfikować danej substancji jako UVCB. Jeżeli jednak produkt ten uznaje się za substancję UVCB, to obróbkę metodą łączoną można opisać następująco: „rafinowana pochodna chemiczna destylowanej frakcji ekstraktu roślinnego”.
- o Jeśli dalsza obróbka ekstraktu polega tylko na pozyskiwaniu pochodnej metodami fizycznymi, to zmieni się skład, ale bez zamierzonej syntezy nowych cząsteczek. Tym niemniej zmiana składu daje w efekcie inną substancję, np. destylat lub osad ekstraktu roślinnego.
- o W procesie wytwarzania produktów ropopochodnych często stosowana jest kombinacja chemicznego procesu otrzymywania pochodnych oraz frakcjonowania. Na przykład, w wyniku destylacji ropy naftowej, po której stosuje się kraking, powstaje frakcja materiału wyjściowego oraz nowe cząsteczki. W takiej sytuacji należy zidentyfikować oba rodzaje procesów bądź scharakteryzować destylat jako materiał wyjściowy krakingu. Dotyczy to w szczególności pochodnych ropy naftowej, które otrzymywane są często w wyniku kombinacji procesów. W celu określenia tożsamości substancji ropopochodnych można też zastosować osobny system identyfikacji (zob. rozdział 4.3.2.2).

Ponieważ pochodna chemiczna ekstraktu zawiera inne składniki niż ekstrakt wyjściowy, należy ją uznać za substancję odmienną. W konsekwencji zastosowania tej zasady nazwa i opis utworzone w procesie identyfikacji mogą odbiegać od nazwy i opisu z wykazu EINECS. W chwili tworzenia wykazu EINECS jeden wpis obejmował często ekstrakty otrzymywane w wyniku różnych procesów i zastosowania różnych rozpuszczalników, a nawet ich pochodne fizyczne i chemiczne. Na mocy rozporządzenia REACH substancje te powinno się jednak rejestrować jako oddzielne substancje.

#### **4. Pozostałe parametry identyfikacyjne substancji**

Zgodnie z sekcją 2 załącznika VI do rozporządzenia REACH substancję UVCB należy identyfikować za pomocą nazwy chemicznej, źródła i specyfikacji procesu, a także wszelkich innych stosownych danych.

Pozostałe parametry identyfikacyjne mogą być szczególnie istotne w przypadku niektórych rodzajów substancji UCVB. Do dodatkowych identyfikatorów zaliczyć można:

- o ogólny opis składu chemicznego;
- o chromatogram typu fingerprint oraz inne „odciski palca” substancji;
- o dokument referencyjny (np. ISO);
- o parametry fizykochemiczne (np. temperatura wrzenia);
- o numer w Colour Index (Indeksie Barw);
- o numer wg AISE.

Szczegółowe wytyczne dotyczące zasad i kryteriów, stosowania nazwy, danych o źródle i procesie do celów identyfikacji substancji UVCB pozyskiwanych z różnych źródeł i w wyniku różnych procesów znajdują się poniżej. Przedstawiono cztery podtypy substancji UVCB opisane za pomocą kombinacji biologicznego lub chemicznego/mineralnego źródła pochodzenia oraz zastosowanych procesów (synteza lub rafinacja).

### **Substancje UVCB podtypu 1 – substancje pochodzenia biologicznego pozyskiwane w procesie syntezy**

Substancje pochodzenia biologicznego można modyfikować w procesie obróbki (bio)chemicznej w celu wytworzenia składników, które nie występują w materiale wyjściowym, np. chemiczne pochodne ekstraktów roślinnych lub produkty obróbki enzymatycznej ekstraktów. Na przykład białka można hydrolizować za pomocą proteazy, aby uzyskać oligopeptydy, a celulozę otrzymywaną z drewna można poddawać karboksylacji w celu wytworzenia karboksymetylocelulozy (CMC).

Do tego podtypu substancji UVCB można również zaliczyć produkty fermentacji. Przykładowo, wywar melasowy jest produktem fermentacji cukru zawierającym wiele składników innych niż cukier. Jeżeli w wyniku dalszego oczyszczania produktów fermentacji uzyskuje się możliwość całkowitej identyfikacji substancji na podstawie składu chemicznego, to takich substancji nie należy identyfikować jako substancji UVCB.

Enzymy stanowią szczególną grupę substancji, które mogą być otrzymywane ze źródeł biologicznych za pomocą ekstrakcji i dalszej rafinacji. Mimo iż dla enzymów możliwe jest szczegółowe określenie źródła pochodzenia i zastosowanego procesu, dane te nie dostarczają konkretnych informacji o enzymie. Dla substancji tych stosuje się odrębny system klasyfikacji, nazywania oraz identyfikacji (zob. rozdział 4.3.2.3).

Aby zidentyfikować substancję, należy podać końcowy etap procesu i wszelkie inne etapy procesu mające wpływ na tożsamość chemiczną substancji.

Opis procesu chemicznego powinien obejmować rodzaj procesu (estryfikacja, hydroliza alkaliczna, alkilowanie, chlorowanie, reakcja substytucji itd.) oraz odpowiednie warunki przebiegu danego procesu.

Opis procesu biochemicznego można przedłożyć w formie opisu rodzajowego reakcji katalizowanej, z podaniem nazwy enzymu katalizującego daną reakcję.

W przypadku substancji otrzymywanych w wyniku fermentacji lub hodowli (tkankowych) należy określić drobnoustroje fermentacyjne, rodzaj oraz ogólne warunki fermentacji (okresowa lub ciągła, tlenowa, beztlenowa, anoksyczna, temperatura, pH itp.) oraz dalsze etapy procesu zastosowane w celu wyodrębnienia produktów fermentacji, np. wirowanie, wytrącanie, ekstrakcja itd. Jeśli substancje poddawane są dalszej rafinacji, to wynikiem takiego procesu mogą być frakcja, koncentrat lub pozostałość. Tak przetworzone substancje identyfikuje się na podstawie dodatkowego opisu dalszych etapów procesu.

## Substancje UVCB podtypu 2 – substancje pochodzenia chemicznego lub mineralnego otrzymywane w procesie syntezy

Substancje UVCB pochodzenia chemicznego lub mineralnego, które otrzymuje się w procesie, w którym powstają nowe cząsteczki, stanowią „produkty reakcji”. Przykładami produktów reakcji chemicznej są produkty estryfikacji, alkilowania lub chlorowania. Reakcje biochemiczne z udziałem izolowanych enzymów należą do reakcji chemicznych szczególnego rodzaju. Jednakże w przypadku złożonych biochemicznych procesów syntezy z wykorzystaniem całych mikroorganizmów wskazane jest rozpatrywanie otrzymanej substancji jako produktu fermentacji i zidentyfikowanie jej na podstawie procesu fermentacji i gatunku drobnoustrojów fermentacyjnych, a nie na podstawie materiałów wyjściowych (zob. substancje UVCB podtypu 4).

Nie każdy produkt reakcji powinien zostać automatycznie określony jako substancja UVCB. Jeśli dany produkt reakcji można zdefiniować w sposób wystarczający na podstawie składu chemicznego (przy uwzględnieniu pewnej zmienności), to zaleca się identyfikację produktu jako substancji wieloskładnikowej (zob. rozdział 4.2.2). Tylko wówczas gdy skład produktu reakcji nie jest wystarczająco znany lub słabo przewidywalny, substancję należy zidentyfikować jako substancję UVCB („produkt reakcji”). Produkt reakcji identyfikuje się w oparciu o materiały wyjściowe do reakcji i proces reakcji (bio)chemicznej, w wyniku którego powstaje dana substancja.

### Przykłady

Numer WE	Nazwa EINECS	Numer CAS
294-006-2	Nonanedioic acid, reaction products with 2-amino-2-methyl-1-propanol (Kwas nonanodiowy, produkty reakcji z 2-amino-2-metylo-1-propanolem)	91672-02-5
294-148-5	Formaldehyde, reaction products with diethylene glycol and phenol (Formaldehyd, produkty reakcji z glikolem dietylenowym i fenolem)	91673-32-4

Głównym identyfikatorem dla produktów reakcji jest opis procesu produkcyjnego. W celu identyfikacji substancji należy podać końcowy lub najbardziej istotny etap procesu. Opis procesu chemicznego powinien stanowić ogólny opis rodzaju procesu (np. estryfikacja, hydroliza alkaliczna, alkilowanie, chlorowanie, reakcja substytucji itd.) wraz z warunkami przebiegu tego procesu. Proces biochemiczny opisuje się za pomocą typu reakcji oraz nazwy enzymu katalizującego reakcję.

## Substancje UVCB podtypu 3 – substancje pochodzenia biologicznego otrzymywane w procesie rafinacji

Substancje UVCB pochodzenia biologicznego otrzymywane w procesie rafinacji, w którym nie są celowo wytwarzane nowe cząsteczki, to np. ekstrakty, frakcje ekstraktu, koncentraty ekstraktu, oczyszczony ekstrakt lub pozostałości obróbki substancji pochodzenia biologicznego.

Jeżeli ekstrakt poddawany jest dalszemu przetwarzaniu, to otrzymywana substancja nie jest już identyczna z ekstraktem i stanowi inną substancję należącą do innego podtypu substancji UVCB (np. frakcja lub pozostałość ekstraktu). Takie substancje opisuje się za pomocą dodatkowych parametrów związanych z (dalszą) obróbką. Jeśli ekstrakt ulega modyfikacji w reakcjach chemicznych lub biochemicznych generujących nowe cząsteczki (pochodne), substancję identyfikuje się zgodnie z wytycznymi opisanymi dla substancji UVCB podtypu 2

lub substancji dobrze zdefiniowanych w rozdziale 4.2.

Ze względu na takie rozróżnienie ekstraktów poddawanych dalszej obróbce nowa nazwa i opis substancji mogą się różnić od nazwy i opisu stosowanych w wykazie EINECS. W chwili tworzenia wykazu EINECS nie uwzględniono takiego rozróżnienia, dlatego jeden wpis mógł obejmować wszystkie rodzaje ekstraktów pozyskiwanych za pomocą różnych rozpuszczalników oraz na dalszych etapach procesu.

Pierwszym podstawowym identyfikatorem tego podtypu substancji UVCB jest rodzina, rodzaj oraz gatunek organizmu, z którego otrzymywana jest substancja. W stosownych przypadkach należy również podać tkankę lub części organizmu wykorzystywane do ekstrakcji substancji (np. szpik kostny, trzustka; łydoga, nasiona lub korzenie). Przy identyfikacji substancji pochodzenia mikrobiologicznego należy określić odmianę lub typ genetyczny danego gatunku.

Jeśli substancję UVCB otrzymuje się z organizmu innego gatunku, to uznaje się ją za substancję odmienną, nawet jeśli jej skład chemiczny jest podobny.

<b>Przykłady</b>	
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa EINECS</b>
290-977-1	Oxidised logwood (Haematoxylon campechianum) extract (Utlenione drewno kampekowe (Haematoxylon campechianum) ekstrakt)  <b>Opis WE</b> Substancja ta jest identyfikowana w Colour Index (Indeksie Barw) pod numerem struktury C.I. 75290 jako utleniona.
282-014-9	Pancreatic extracts, deproteinated (Wyciągi trzustkowe, deproteinowane)

Kolejnym głównym identyfikatorem jest zastosowana obróbka substancji, np. proces ekstrakcji, frakcjonowanie, oczyszczanie, proces zateżania lub proces wpływający na skład pozostałości. Tym samym, w wyniku rafinacji ekstraktów przeprowadzonej za pomocą różnych procesów, np. przy wykorzystaniu różnych rozpuszczalników lub różnych etapów oczyszczania, uzyskuje się odmienne substancje.

Im więcej etapów rafinacji, tym większa możliwość zdefiniowania substancji na podstawie składu chemicznego. W takim przypadku różne gatunki źródłowe lub różne modyfikacje procesu nie muszą automatycznie prowadzić do powstania innej substancji.

Głównym parametrem identyfikacyjnym dla substancji pochodzenia biologicznego jest opis istotnych procesów. W przypadku ekstraktów opis procesu ekstrakcji powinien być na tyle szczegółowy, aby umożliwić określenie tożsamości substancji. Podać należy co najmniej rodzaj zastosowanego rozpuszczalnika.

Jeżeli do wyprodukowania substancji stosowane są dalsze etapy obróbki, takie jak frakcjonowanie lub zateżanie, należy opisać kombinację istotnych etapów procesu, np. kombinację ekstrakcji i frakcjonowania wraz z wartościami granicznymi.

#### **Substancje UVCB podtypu 4 – substancje pochodzenia chemicznego lub mineralnego otrzymywane w procesie rafinacji**

Substancje pochodzenia niebiologicznego, tj. minerały, rudy, węgiel, gaz ziemny, ropa naftowa i inne surowce dla przemysłu chemicznego oraz ich pochodne, będące wynikiem obróbki bez udziału celowych reakcji chemicznych, mogą mieć postać (oczyszczonych) frakcji,



koncentratów lub pozostałości procesów.

Węgiel i ropa naftowa poddawane są procesom destylacji i zgazowania w celu uzyskania różnych produktów, takich jak substancje ropopochodne oraz paliwa gazowe, a także pozostałości, np. smoła oraz żużle. Bardzo często destylowany lub frakcjonowany w inny sposób produkt jest natychmiast poddawany dalszej obróbce z udziałem reakcji chemicznych. W takich przypadkach substancję należy identyfikować zgodnie z wytycznymi określonymi dla substancji UVCB podtypu 2, ponieważ w tym przypadku proces jest bardziej istotny niż źródło.

Dla substancji ropopochodnych stosuje się specjalny system identyfikacji (zob. rozdział 4.3.2.2). Do substancji objętych tym systemem należą frakcje i produkty reakcji chemicznych.

Inne substancje UVCB podtypu 4 to rudy, koncentraty rud i żużle zawierające różne ilości metali, które można uzyskiwać w procesach metalurgicznych.

Minerały, takie jak bentonit lub węglan wapnia, można poddawać obróbce poprzez np. rozpuszczanie w kwasie lub strącanie chemiczne, bądź w kolumnach jonitowych. Jeżeli skład chemiczny jest w pełni określony, minerały należy identyfikować zgodnie z wytycznymi opisanymi w stosownej części rozdziału 4.2. Jeśli minerały poddawane są tylko obróbce mechanicznej, np. poprzez mielenie, przesiewanie, odwirowywanie, flotację itd., to nadal uważa się je za tożsame z minerałami w tej formie, w jakiej są pozyskiwane. Minerały uzyskiwane w procesie produkcyjnym mogą – do celów identyfikacji<sup>21</sup> – być uważane za takie same jak ich naturalnie występujące odpowiedniki, pod warunkiem że ich skład jest podobny, a profil toksyczności identyczny.

Jednym z głównych parametrów do identyfikacji substancji pochodzenia niebiologicznego jest opis stosownego etapu (lub etapów) procesu.

W przypadku frakcji należy opisać proces frakcjonowania i podać parametry oraz wartości graniczne dla frakcji wyodrębnionej, a w stosownych przypadkach opis wcześniejszych etapów procesu.

Opisując etap zatężania, poza informacjami dotyczącymi wcześniejszego(-ych) etapu(-ów) procesu, należy podać rodzaj procesu (np. odparowanie, wytrącanie itd.) oraz stosunek stężenia wyjściowego do stężenia końcowym głównych składników.

Jednym z głównych parametrów do identyfikacji pozostałości pochodzenia niebiologicznego jest opis procesu, w wyniku którego powstaje dana pozostałość. Procesem tym może być każdy proces fizyczny, w wyniku którego powstają pozostałości, np. oczyszczanie, frakcjonowanie, proces zatężania.

### **„Analytical information” (dane analityczne)**

Substancje UVCB obejmują bardzo zróżnicowane rodzaje substancji, różniące się takimi parametrami, jak źródło pochodzenia i proces wytwarzania. W związku z tym należy przedstawić odpowiednie metody analityczne w celu dostarczenia informacji na temat składu substancji UVCB, które zależą od przypadku. Ponadto spostrzeżenia na temat sposobu stosowania takich metod podlegają ciągłym zmianom i udoskonaleniom. W związku z tym obowiązkiem rejestrującego jest przedstawienie odpowiednich danych analitycznych w celu dostarczenia możliwie najlepszych informacji umożliwiających identyfikację substancji.

W celu scharakteryzowania substancji UVCB można zastosować kilka metod jakościowych; przykłady obejmują UV/Vis, spektroskopię w podczerwieni, spektroskopię masową, magnetyczny rezonans jądrowy, dyfrakcję rentgenowską.

---

<sup>21</sup> Takie samo podejście do identyfikacji minerałów występujących w przyrodzie i otrzymywanych w procesach chemicznych niekoniecznie oznacza, że takie same są dotyczące nich wymagania prawne (np. zwolnienie z obowiązku rejestracji).

W celu scharakteryzowania składu substancji należy podać dane ilościowe, takie jak dane z chromatografii lub dyfrakcji typu fingerprint.

Opis metod analitycznych musi obejmować stosowane protokoły eksperymentalne i interpretację przedstawionych wyników.

### 4.3.2. Substancje UVCB szczególnego typu

Niniejsza część poradnika zawiera wytyczne dotyczące szczególnych grup substancji UVCB: substancji o zróżnicowanych długościach łańcuchów węglowych (4.3.2.1), substancji otrzymywanych z ropy naftowej lub źródeł ropopodobnych (4.3.2.2) oraz enzymów (4.3.2.3).

#### 4.3.2.1 Substancje o zróżnicowanych długościach łańcuchów węglowych

Do tej grupy substancji UVCB należą długołańcuchowe substancje alkilowe o zróżnicowanych długościach łańcuchów węglowych, np. parafiny i olefiny. Substancje te uzyskuje się z naturalnych tłuszczów lub olejów bądź produkuje w sposób syntetyczny. Tłuszcze naturalne są otrzymywane z roślin lub zwierząt. Substancje o długich łańcuchach węglowych pochodzenia roślinnego mają na ogół tylko parzyste łańcuchy atomów węgla, podczas gdy substancje o długich łańcuchach węglowych pochodzenia zwierzęcego zawierają (pewną liczbę) nieparzystych łańcuchów atomów węgla. Produkowane w sposób syntetyczny substancje o długich łańcuchach węglowych mogą zawierać różne łańcuchy węglowe – o parzystych lub nieparzystych liczbach atomów węgla.

#### Identyfikatory oraz nazewnictwo

Grupa ta obejmuje substancje, których poszczególne składniki mają pewną wspólną cechę strukturalną: jedną długołańcuchową grupę alkilową lub więcej takich grup z przyłączoną grupą funkcyjną. Składniki te różnią się od siebie pod względem jednej lub kilku następujących właściwości grup łańcucha alkilowego:

- o długość łańcucha węglowego (liczba atomów węgla)
- o Nasycenie
- o struktura (liniowa lub rozgałęziona)
- o położenie grupy funkcyjnej

Tożsamość chemiczną składników można określić w wystarczający i systematyczny sposób za pomocą następujących trzech deskryptorów:

- o **Deskryptor alkilowy**, który opisuje liczbę atomów węgla w łańcuchu węglowym grupy alkilowej/łańcuchach węglowych grup alkilowych.
- o **Deskryptor funkcyjności**, który identyfikuje grupę funkcyjną substancji, np. amina, związek amoniowy, kwas karboksylowy.
- o **Deskryptor soli**, kation/anion dowolnej soli, np. sodowy ( $\text{Na}^+$ ), węglanowy ( $\text{CO}_3^{2-}$ ), chlorkowy ( $\text{Cl}^-$ ).

#### Deskryptor alkilowy

- o Zasadniczo, deskryptor alkilowy  $\text{C}_{x-y}$  dotyczy nasyconych, liniowych łańcuchów alkilowych o wszystkich długościach łańcuchów od x do y, np.  $\text{C}_{8-12}$  odpowiada  $\text{C}_8$ ,  $\text{C}_9$ ,  $\text{C}_{10}$ ,  $\text{C}_{11}$  i  $\text{C}_{12}$ .
- o Należy wskazać, czy deskryptor alkilowy odnosi się tylko do parzystych lub nieparzystych łańcuchów alkilowych, np.  $\text{C}_{8-12}$  (even numbered) – parzyste
- o Należy wskazać, czy deskryptor alkilowy odnosi się (także) do rozgałęzionych



- łańcuchów alkilowych, np. C<sub>8-12</sub> (branched) (rozgałęzione) lub C<sub>8-12</sub> (linear and branched) (liniowe i rozgałęzione)
- Należy wskazać, czy deskryptor alkilowy odnosi się (także) do nienasyconych łańcuchów alkilowych, np. C<sub>12-22</sub> (C<sub>18</sub> unsaturated) – nienasycone
- Wąski zakres długości łańcucha alkilowego nie obejmuje szerszego zakresu długości łańcucha alkilowego i odwrotnie, np. C<sub>10-14</sub> nie odpowiada C<sub>8-18</sub>
- Deskryptor alkilowy może się również odnosić do źródła łańcuchów alkilowych, np. „coco” (kokos) lub „tallow” (łój). Rozkład długości łańcuchów węglowych musi jednak odpowiadać rozkładowi długości łańcuchów źródła.

Powyższy system należy stosować do opisu substancji o zmiennych długościach łańcuchów węglowych. Nie ma on zastosowania w przypadku substancji dobrze zdefiniowanych, które można zidentyfikować na podstawie dokładnie znanej struktury chemicznej.

Informacje dotyczące deskryptora alkilowego, deskryptora funkcyjności i deskryptora soli stanowią podstawę do tworzenia nazwy substancji UVCB tego typu. W celu bardziej szczegółowej identyfikacji substancji posłużyć mogą również informacje o źródle i procesie.

Przykłady		
Deskryptory	Nazwa	
<b>Deskryptor alkilowy</b> <b>Deskryptor funkcyjności</b> <b>Deskryptor soli</b>	długości łańcucha alkilowego C <sub>10-18</sub> kwasy tłuszczowe (kwas karboksylowy) sole kadmu	fatty acids (C <sub>10-18</sub> ) cadmium salts (sole kadmowe kwasów tłuszczowych C <sub>10-18</sub> )
<b>Deskryptor alkilowy</b> <b>Deskryptor funkcyjności</b> <b>Deskryptor soli</b>	dialkilo(C <sub>10-18</sub> )-dimetyloamon chlorek	di-C <sub>10-18</sub> -alkyl-dimethylammonium chloride (chlorek di-C <sub>10-18</sub> -alkilodimetyloamonu)
<b>Deskryptor alkilowy</b> <b>Deskryptor funkcyjności</b> <b>Deskryptor soli</b>	trimetylo łój-alkiloamon chlorek	trimethyl-tallowalkyl-ammonium chloride (chlorek trimetylo łój-alkiloamonu)

#### 4.3.2.2 Substancje otrzymywane z ropy naftowej lub pozyskiwane ze źródeł ropopodobnych

Substancje pozyskiwane z ropy (substancje ropopochodne) lub ze źródeł ropopodobnych (np. węgiel kamienny) to substancje posiadające bardzo złożony, zróżnicowany lub częściowo nieokreślony skład. W niniejszym rozdziale wykorzystano substancje ropopochodne, aby pokazać sposób identyfikacji tego szczególnego rodzaju substancji UVCB. Taką samą metodą identyfikacji można też stosować dla substancji pozyskiwanych ze źródeł ropopodobnych, takich jak węgiel kamienny.

Materiałem wyjściowym używanym w przemyśle rafineryjnym może być ropa naftowa lub inny określony produkt rafineryjny otrzymywany w wyniku jednego lub kilku procesów. Skład produktów końcowych zależy od ropy naftowej wykorzystanej do produkcji (jej skład różni się w zależności od miejsca pochodzenia) oraz od kolejnych procesów rafinacji. Zróżnicowanie składu substancji ropopochodnych jest więc zjawiskiem naturalnym, niezależnym od zastosowanego procesu<sup>17</sup>.

## 1. Konwencja nazywania

W przypadku identyfikacji substancji ropopochodnych należy podać nazwę zgodną z ustalonym systemem nomenklatury<sup>22</sup>. Nazwa ta wskazuje zazwyczaj na proces rafineryjny, źródło produktu oraz ogólny skład lub właściwości substancji. Jeśli substancja zawiera > 5% wagowych węglowodorów aromatycznych o 4-6 skondensowanych pierścieniach, to informację taką należy uwzględnić w opisie. W przypadku substancji ropopochodnych posiadających numer EINECS, należy podać nazwę z wykazu WE.

## 2. Identyfikatory

Terminy oraz definicje służące do identyfikacji substancji ropopochodnych uwzględniają na ogół źródło produktu, proces rafineryjny, ogólny skład substancji, liczbę atomów węgla, zakres temperatury wrzenia i inne stosowne właściwości fizyczne oraz przeważający rodzaj węglowodorów<sup>21</sup>.

Należy podać parametry identyfikacyjne określone w sekcji 2 załącznika VI do rozporządzenia REACH. Uznaje się, że produkcja substancji ropopochodnych ma na celu wytworzenie substancji o określonych właściwościach, raczej niż składzie. Parametry takie jak nazwa, zakres długości łańcucha węglowego, temperatura wrzenia, lepkość, wartości graniczne oraz pozostałe właściwości fizyczne są więc bardziej użyteczne do pełnej identyfikacji substancji niż informacje dotyczące jej składu.

Chociaż skład chemiczny nie jest podstawowym identyfikatorem substancji UVCB, należy podać wszystkie składniki w stężeniu  $\geq 10\%$  i znane składniki w stężeniu  $< 10\%$ , a skład należy opisać w sposób ogólny, np. zakres masy cząsteczkowej, związki alifatyczne lub aromatyczne, stopień uwodornienia i inne istotne informacje. Grupy składników, których nie można zidentyfikować indywidualnie, również powinny być opisane tymi samymi parametrami. Ponadto należy podać nazwę i typowe stężenie każdego składnika o mniejszym stężeniu, który ma wpływ na klasyfikację zagrożeń.

### 4.3.2.3 Enzymy

Enzymy są z reguły wytwarzane poprzez fermentację wywołowaną przez mikroorganizmy, ale czasem uzyskuje się je z materiałów pochodzenia roślinnego lub zwierzęcego. Ciekły koncentrat enzymatyczny będący wynikiem fermentacji lub ekstrakcji i kolejnych etapów oczyszczania zawiera wodę oraz aktywne białko enzymatyczne i inne składniki będące pozostałościami po fermentacji, tj. białka, peptydy, aminokwasy, węglowodany, lipidy oraz sole nieorganiczne.

Do celów identyfikacji za substancję uznaje się białko enzymatyczne wraz z innymi składnikami pochodzącymi z procesu fermentacji lub ekstrakcji, ale z wyłączeniem wody, którą można oddzielić bez wpływu na trwałość białka enzymatycznego lub na jego skład.

Substancja enzymatyczna zawiera z reguły 10-80% wagowych białka enzymatycznego. Zawartość procentowa innych składników jest zróżnicowana i zależy od organizmu wykorzystanego w produkcji, pożywki fermentacyjnej i parametrów procesu fermentacyjnego, jak również dalszych operacji oczyszczania. Typowy skład mieści się jednak w granicach przedstawionych w tabeli poniżej.

---

<sup>22</sup> 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.

Aktywne białko enzymatyczne	10–80%
Inne białka + peptydy i aminokwasy	5–55%
Węglowodany	3–40%
Lipidy	0–5%
Sole nieorganiczne	1–45%
Razem	100%

Ze względu na ich zmienność i częściowo nieznaną skład substancje enzymatyczne zalicza się do „substancji UVCB”. Białko enzymatyczne należy traktować jak składnik substancji UVCB. Enzymy o wysokim stopniu czystości można uznać za substancje o dobrze zdefiniowanym składzie (jedno- i wieloskładnikowe) i stosownie je identyfikować.

W wykazie EINECS identyfikatorem głównym dla enzymów jest ich aktywność katalityczna. Enzymy są ujęte w postaci wpisów ogólnych bez dodatkowej specyfikacji lub z wpisami szczegółowymi określającymi organizm źródłowy lub substrat.

Przykłady		
Numer WE	Nazwa EINECS	Numer CAS
278-547-1	Proteinase, Bacillus neutral (Proteinaza, Bacillus obojętna)	76774-43-1
278-588-5	Proteinase, Aspergillus neutral (Proteinaza, Aspergillus obojętna)	77000-13-6
254-453-6	Elastase (pig pancreas) (Elastaza (trzustka świńska))	39445-21-1
262-402-4	Mannanase (Mannanaza)	60748-69-8

W badaniu na temat enzymów zleconym przez Komisję Europejską proponuje się identyfikację enzymów zgodnie z międzynarodowym systemem nomenklatury enzymów IUBMB (Międzynarodowej Unii Biochemii i Biologii Molekularnej).<sup>23</sup> Podejście to zastosowano w niniejszym poradniku. Umożliwia ono bardziej systematyczną, szczegółową i pełną identyfikację enzymów w porównaniu do EINECS.

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

## 1. Konwencja nazywania

Enzymy nazywa się zgodnie z zasadami nomenklatury IUBMB.

W systemie klasyfikacji IUBMB przewidziano niepowtarzalny czterocyfrowy numer dla każdego typu enzymu i funkcji katalitycznej (np. 3.2.1.1 dla  $\alpha$ -amylazy)<sup>24</sup>. Pod jednym numerem sklasyfikowane mogą być enzymy o różnej sekwencji aminokwasów i różnym pochodzeniu, ale o tej samej funkcjonalności. Do identyfikacji substancji należy stosować nazwę i numer z nomenklatury IUBMB. W nomenklaturze IUBMB enzymy dzieli się na sześć głównych grup:

- 1. Oksydoreduktazy
- 2. Transferazy
- 3. Hydrolases (hydrolazy)
- 4. Liazy
- 5. Izomerazy
- 6. Ligazy

Poniższy przykład ilustruje wpis zgodny z nomenklaturą IUBMB:

EC 3.4.22.33

**Przyjęta nazwa:** „fruit bromelain” (bromelaina owocowa)

**Reakcja:** Hydroliza białek o szerokiej selektywności w kierunku wiązań peptydowych. Dobrym substratem syntetycznym jest Bz-Phe-Val-Arg<sup>+</sup>NHMec, ale nie ma oddziaływania na Z-Arg-Arg-NHMec (*por.* „stem bromelain” (bromelaina łodygowa))

**Inne nazwy (ang.):** juice bromelain; ananase; bromelase; bromelin; extranase; juice bromelain; pinase; pineapple enzyme; traumanase; fruit bromelain FA2

**Uwagi:** Otrzymywana z ananasa, *Ananas comosus*. W niewielkim stopniu ulega inhibicji przez kurzą cystatynę. Inna endopeptydaza cysteinowa o podobnym działaniu na substraty małowcząsteczkowe, pinguinaina (dawniej EC 3.4.99.18), uzyskiwana jest z pokrewnej rośliny *Bromelia pinguin*, jednak różni się od bromelainy owocowej tym, że ulega inhibicji przez kurzą cystatynę [4].<sup>25</sup> Należy do rodziny peptydaz C1<sup>26</sup> (rodzina papainy). Poprzednio EC 3.4.22.5 i ujęta w EC 3.4.22.4, numer w rejestrze CAS: 9001-00-7

### Odnośniki do innych baz danych:

[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)

### Literatura:

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

<sup>24</sup> Terminy „numer EC” ( $\equiv$  Enzyme Commission number) oraz „numer IUBMB” są często używane synonimicznie. Aby uniknąć nieporozumień, zaleca się stosowanie terminu „numer IUBMB” dla czterocyfrowego kodu stosowanego przez IUBMB.

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

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

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

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

### Przykłady klasyfikacji enzymów wg systemu IUBMB

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

#### Proteazy są numerowane wg następujących kryteriów:

3.	<b>Hydrolases (hydrolazy)</b>
3.4	<b>Działające na wiązania peptydowe (peptydazy), z podklasami:</b>
3.4.1	$\alpha$ -Amino-Acyl-Peptide Hydrolases ( $\alpha$ -amino-acylo-peptydowe hydrolazy) (obecnie w EC 3.4.11)
3.4.2	Peptidyl-Amino-Acid Hydrolases (peptydyl-amino-kwasowe hydrolazy) (obecnie w EC 3.4.17)
3.4.3	Dipeptide Hydrolases (hydrolazy dipeptydowe) (obecnie w EC 3.4.13)
3.4.4	Peptidyl Peptide Hydrolases (hydrolazy peptydylowo-peptydowe) (obecnie sklasyfikowane ponownie w EC 3.4)
3.4.11	Aminopeptidases (aminopeptydazy)
3.4.12	Peptidylamino-Acid Hydrolases or Acylamino-Acid Hydrolases (peptydylamino-kwasowe hydrolazy lub acylamino-kwasowe hydrolazy) (obecnie sklasyfikowane ponownie w 3.4)
3.4.13	Dipeptidases (dipeptydazy)
3.4.14	Dipeptidyl-peptidases and tripeptidyl-peptidases (peptydazy dipeptydylowe i peptydazy tripeptydylowe)
3.4.15	Peptidyl-dipeptidases (dipeptydazy peptydylowe)
3.4.16	Serine-type carboxypeptidases (karboksypeptydazy typu serynowego)
3.4.17	Metallo-carboxypeptidases (metalokarboksypeptydazy)
3.4.18	Cysteine-type carboxypeptidases (karboksypeptydazy typu cysteinowego)
3.4.19	Omega peptidases (omegapeptydazy)
3.4.21	Serine endopeptidases (endopeptydazy serynowe)
	<b>I dalej identyfikuje się konkretne enzymy:</b>

3.4.21.1	chymotrypsin (chymotrypsyna)
3.4.21.2	chymotrypsin C (chymotrypsyna C)
3.4.21.3	metridin (metrydyna)
3.4.21.4	trypsin (trypsyna)
3.4.21.5	thrombin (trombina)
3.4.21.6	coagulation factor Xa (czynnik koagulacji Xa)
3.4.21.7	plasmin (plazmina)
3.4.21.8	obecnie objęte EC 3.4.21.34 i EC 3.4.21.35
3.4.21.9	enteropeptidase (enteropeptydaza)
3.4.21.10	acrosin (akrozyna)
3.4.21.11	obecnie objęte EC 3.4.21.36 i EC 3.4.21.37
3.4.21.12	12 a-Lytic endopeptidase (12 a-lityczna endopeptydaza)
...	
3.4.21.105	
3.4.99	Endopeptidases of unknown catalytic mechanism (endopeptydazy o nieznanym mechanizmie katalitycznym)

#### Przykłady z EINECS uzupełnione o numer IUBMB

Numer WE	Nazwa EINECS	Numer CAS	numeru IUBMB
278-547-1	Proteinase, Bacillus neutral (Proteinaza, Bacillus obojętna)	76774-43-01	3.4.24.28
232-752-2	Subtylizyna	9014-01-01	3.4.21.62
232-734-4	Cellulase (Cellulaza)	9012-54-8	3.2.1.4

## **2. Identyfikatory**

Substancje enzymatyczne identyfikuje się na podstawie białka enzymatycznego (nomenklatura IUBMB) i innych składników pochodzących z fermentacji. Oprócz białka

enzymatycznego stężenie każdego pozostałego składnika nie przekracza zwykle 1%. Jeżeli tożsamości tych składników nie są znane, to można je określić grupowo (tj. białka, peptydy, aminokwasy, węglowodany, lipidy i sole nieorganiczne). Poszczególne składniki należy jednak wskazać, jeśli ich tożsamości są znane, lub jeśli ich stężenie wynosi lub przekracza 10% albo jeśli mają istotne znaczenie dla klasyfikacji i oznakowania lub oceny PBT<sup>27</sup>.

### **Białka enzymatyczne**

Białka enzymatyczne zawarte w koncentracji powinny być identyfikowane za pomocą:

- numeru IUBMB
- nazw nadanych przez IUBMB (nazwa systematyczna, nazwy enzymów, synonimy)
- uwag podanych przez IUBMB
- reakcji i rodzaju reakcji
- numeru WE i nazwy WE – w stosownych przypadkach
- numeru i nazwy CAS, jeśli są dostępne.

Należy określić reakcję wywoływaną przez enzym. Reakcję taką definiuje się za pomocą IUBMB.

#### **Przykład**

.alpha.-amylase: Polysaccharide containing .alpha.-(1-4)-linked glucose units + H<sub>2</sub>O = maltooligosaccharides; endohydrolysis of 1,4-.alpha.-d-glucosidic linkages in polysaccharides containing three or more 1,4-.alpha.-linked d-glucose units. (.alfa.-amylaza: wielocukier zawierający .alfa.-(1-4)-powiązane jednostki glukozy + H<sub>2</sub>O = maltooligosacharydy; endohydroliza 1,4-.alfa.-d-glukozydowych połączeń w wielocukrach zawierających co najmniej trzy 1,4-.alfa.-powiązane jednostki d-glukozy.)

Rodzaj reakcji należy przypisywać według klasy enzymu. Może to być utlenianie, redukcja, eliminacja, addycja lub nazwa reakcji.

#### **Przykład**

.alpha.-amylase: O-glycosyl bond hydrolysis (endohydrolysis). (.alfa.-amylaza: hydroliza wiązania O-glikozydowego (endohydroliza))

### **Składniki inne niż białka enzymatyczne**

Należy zidentyfikować wszystkie składniki obecne w ilości  $\geq 10\%$  wagowych oraz składniki istotne dla klasyfikacji i oznakowania lub oceny PBT<sup>28</sup>. Tożsamość składników obecnych w ilości poniżej 10% można wskazać jako grupę chemiczną. Należy podać typowe stężenia lub zakres stężeń:

- (gliko)proteiny
- peptydy i aminokwasy
- Węglowodany
- Lipidy

<sup>27</sup> Więcej informacji na temat oceny PBT i stosownych kryteriów znajduje się w Poradniku dotyczącym wymagań w zakresie informacji i oceny bezpieczeństwa chemicznego, rozdział R11: ocena PBT.

<sup>28</sup> Więcej informacji na temat oceny PBT i odpowiednich stężeń granicznych znajduje się w 3.2 Poradnik dotyczący wymagań w zakresie informacji i oceny bezpieczeństwa chemicznego, sekcja dot. oceny PBT

- materiał nieorganiczny (np. chlorek sodu lub inne sole nieorganiczne).

Jeśli dostateczna identyfikacja innych składników koncentratu enzymu nie jest możliwa, to należy podać nazwę organizmu wytwarzającego (rodzaj i odmiana lub typ genetyczny, w stosownych przypadkach), tak jak w przypadku innych substancji UVCB pochodzenia biologicznego.

Można też podać dodatkowe parametry, o ile są dostępne, np. parametry funkcjonalne (tj. pH lub temperatury optymalne i zakresy temperatur), parametry kinetyczne (tj. aktywność właściwa lub molekularna), ligandy, substraty i produkty oraz kofaktory.



## 5. Kryteria sprawdzania, czy substancje są takie same

Przy sprawdzaniu, czy substancje pochodzące od różnych producentów/importerów można uznać za takie same, należy przestrzegać określonych zasad. Zasady te, zastosowane w trakcie tworzenia EINECS, powinny się uznawać za podstawę identyfikacji i nazywania substancji, umożliwiającą odnalezienie potencjalnego współrejestrującego daną substancję<sup>5, 6, 16, 29, 30</sup>. Substancje uznawane za odmienne mogą jednak zostać uznane za strukturalnie pokrewne poprzez zastosowanie osądu eksperckiego. W przypadku takich substancji możliwe jest udostępnianie danych, jeśli jest to naukowo uzasadnione. Nie jest to jednak przedmiotem niniejszego poradnika, lecz zostało omówione w *Poradniku na temat udostępniania danych*.

- Należy zastosować zasadę „≥ 80%” dla substancji jednoskładnikowych, a także definicję substancji wieloskładnikowych.

W tym przypadku nie stosuje się rozróżnienia pomiędzy gatunkami technicznymi, czystymi i analitycznymi substancjami. „Taka sama” substancja może więc mieć różny profil czystości/zanieczyszczeń w zależności od stopnia czystości. Jednakże substancje dobrze zdefiniowane powinny zawierać ten sam główny składnik/główne składniki, a jedynymi dozwolonymi zanieczyszczeniami są zanieczyszczenia pochodzące z procesu produkcji (szczegóły – zob. rozdział 4.2) oraz dodatki stabilizujące substancję.

- Na potrzeby rejestracji wodziany oraz bezwodne formy związków chemicznych są uznawane za takie same substancje.

Przykłady			
Nazwa i wzór	Numer CAS	Numer WE	Zasada
Copper sulphate (Cu · H <sub>2</sub> O <sub>4</sub> S) (siarczan miedzi)	7758-98-7	231-847-6	
Sulphuric acid copper(2+) salt (1:1), pentahydrate (Sól miedziowa(2+) kwasu siarkowego (1:1), pentahydrat) (Cu.H <sub>2</sub> O <sub>4</sub> S · 5 H <sub>2</sub> O)	7758-99-8		Substancja ta jest objęta wpisem dla swojej formy bezwodnej (numer WE: 231-847-6)

Formy uwodnione i bezwodne mają różne nazwy chemiczne i różne numery CAS.

- Kwasy lub zasady oraz ich sole należy uznawać za substancje odmienne.

<sup>29</sup> Vollmer i in. (1998) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. Tox Env Chem Vol. 65, p. 113-122.

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

<b>Przykłady</b>		
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa</b>	<b>Zasada</b>
201-186-8	Peracetic acid (kwas nadoctowy) C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	Substancji tej nie należy uznawać za tożsamą z np. jej solą sodową (EINECS 220-624-9)
220-624-9	Sodium glycollate (glikolan sodu) C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub> . Na	Substancji tej nie należy uznać za tożsamą z np. odpowiadającym jej kwasem (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-Chloroaniline (2-chloroanilina) C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> ClN	Substancji tej nie należy uznawać za jednakową z np. bromowodorkiem benzenoaminy, 2-chloro-(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> ClN . HBr)

- Pojedyncze sole (np. sodu lub potasu) należy uznawać za substancje odmienne.

<b>Przykłady</b>		
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa</b>	<b>Zasada</b>
208-534-8	Sodium benzoate (benzoesan sodu) C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> . Na	Substancji tej nie należy uznawać za tożsamą z np. solą potasową (EINECS 209-481-3)
209-481-3	Potassium benzoate (benzoesan potasu) C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> . K	Substancji tej nie należy uznawać za tożsamą z np. solą sodową (EINECS 208-534-8)

- Rozgałęzione lub liniowe łańcuchy alkilowe należy uznać za substancje odmienne.

<b>Przykłady</b>		
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa</b>	<b>Zasada</b>
295-083-5	Phosphoric acid, dipentyl ester, branched and linear (Kwas fosforowy, ester dipentylowy, rozgałęziony i liniowy)	Substancji tej nie należy uznawać za tożsamą z poszczególnymi substancjami, tj. liniowym estrem dipentylowym kwasu fosforowego i rozgałęzionym estrem dipentylowym kwasu fosforowego

- Grupy rozgałęzione należy wymieniać jako takie w nazwie. Substancje zawierające grupy alkilowe bez dalszej specyfikacji obejmują jedynie grupy o łańcuchach nierozgałęzionych, chyba że określono inaczej.

Przykłady		
Numer WE	Nazwa	Zasada
306-791-1	Fatty acids (kwasy tłuszczowe), C12-16	Za substancje tożsame uznawane są jedynie substancje z liniowymi oraz nierozgałęzionymi grupami alkilowymi
279-420-3	Alcohols (alkohole), C12-14	
288-454-8	Amines, C12-18-alkylmethyl (aminy, C12-18-alkilometylowe)	

- Substancji z grupami alkilowymi o nazwach zawierających dodatkowe określenia, takie jak „izo”, „neo”, „rozgałęzione” itd. nie należy uznawać za tożsame z substancjami bez takiej specyfikacji.

Przykłady		
Numer WE	Nazwa	Zasada
266-944-2	Glycerides (glicerydy), C <sub>12-18</sub> Substancja ta jest identyfikowana za pomocą nazwy przypisanej jej w katalogu nazw substancji SDA: C12-C18 trialkyl glyceride, oraz numeru sprawozdawczego SDA: 16-001-00	Niniejszej substancji nie można uznać za tożsamą z substancją C <sub>12-18-iso</sub> o nasyconych łańcuchach alkilowych rozgałęzioną w dowolnym miejscu.

- W przypadku braku wyraźnej specyfikacji łańcuchy alkilowe w kwasach lub alkoholach itd. uznaje się tylko za łańcuchy nasycone. Łańcuchy nienasycone określa się jako takie i uznaje za substancje odmienne.

Przykłady		
Numer WE	Nazwa	Zasada
200-313-4	Stearic acid, pure (czysty kwas stearynowy) C18H36O2	Niniejszej substancji nie należy uznawać za tożsamą z kwasem oleinowym, czystym C18H34O2 (EINECS 204-007-1)

- Substancje z centrami chiralności

Substancja z jednym centrum stereogenicznym może istnieć w formach lewo- i prawoskrętnych (enancjomery). Jeśli nic nie wskazuje inaczej, zakłada się, że substancja jest mieszaniną równomolową obu form (racemiczną).

<b>Przykłady</b>		
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa</b>	<b>Zasada</b>
201-154-3	2-chloropropan-1-ol	Poszczególnych enancjomerów, (R)-2-chloropropan-1-olu oraz (S)-2-chloropropan-1-olu, nie uważa się za tożsame z tym wpisem

Racematy uznaje się za substancje wieloskładnikowe. Jeżeli substancja została wzbogacona jedną formą enancjomeru, stosuje się zasady dla substancji jedno- lub wieloskładnikowych, tj. w zależności od zakresów stężeń izomerów, substancja jest substancją jedno- lub wieloskładnikową.

Substancje o kilku centrach stereogenicznych mogą istnieć w formach  $2^n$  (gdzie „n” to liczba centrów stereogenicznych). Te odmienne formy mogą mieć różne właściwości fizykochemiczne, toksykologiczne lub ekotoksykologiczne. Należy je traktować jako odrębne substancje.

- Katalizatory nieorganiczne

Katalizatory nieorganiczne uważa się za mieszaniny. Do celów identyfikacji składniki metaliczne lub związki metali należy uznawać za indywidualne substancje (bez określenia zastosowania).

<b>Przykłady</b>		
	<b>Nazwa</b>	<b>Zasada</b>
	Cobalt oxide-aluminium oxide catalyst (Katalizator tlenek kobaltu-tlenek glinu)	Należy identyfikować oddzielnie jako: - Cobalt II oxide (tlenek kobaltu (II)) - Cobalt III oxide (tlenek kobaltu (III)) - Aluminium oxide (tlenek glinu) - Aluminium cobalt oxide (tlenek glinowo-kobaltowy)

- Koncentraty enzymatyczne o tym samym numerze IUBMB można uważać za tę samą substancję pomimo zastosowania różnych organizmów wytwarzających, o ile właściwości niebezpieczne nie różnią się znacząco i zapewniają taką samą klasyfikację.

### Substancje wieloskładnikowe

W dyrektywie 67/548/EWG określono zasady dotyczące wprowadzania substancji do obrotu. W świetle tych zasad sposób produkcji substancji był nieistotny. Dlatego, wykaz EINECS obejmował określoną substancję wieloskładnikową wprowadzaną do obrotu, jeśli *wszystkie* jej poszczególne składniki figurowały w EINECS, np. izomeryczna mieszanina difluorobenzenów objęta została w wykazie wpisami 1,2-Difluorobenzene (206-680-7), 1,3-Difluorobenzene (206-746-5) oraz 1,4-Difluorobenzene (208-742-9), pomimo iż sama mieszanina izomeryczna nie została wymieniona w EINECS.

Rozporządzenie REACH wymaga natomiast rejestracji substancji wyprodukowanej. Decyzja, do jakiego stopnia różne etapy wytwarzania substancji są zgodne z definicją „produkcji” (np. różne etapy oczyszczania lub destylacji), jest podejmowana indywidualnie w każdym przypadku. Jeśli w wyniku procesu produkcji wytwarzana jest substancja wieloskładnikowa, to substancja ta podlega rejestracji (chyba że jest objęta rejestracją poszczególnych składników – zob. rozdział 4.2.2.4). I tak, na przykład, w przypadku wyprodukowanej izomerycznej mieszaniny difluorobenzenu rejestracji podlega „difluorobenzen” jako mieszanina izomeryczna. Dla substancji wieloskładnikowych badanie samej substancji nie jest jednak konieczne, jeśli profil zagrożenia substancji można w pełni określić na podstawie danych o poszczególnych składnikach. Natomiast jeśli izomery 1,2-difluorobenzenu, 1,3-difluorobenzenu oraz 1,4-difluorobenzenu produkowane są oddzielnie, a następnie mieszane, należy zarejestrować poszczególne izomery, a mieszaninę izomeryczną uznać się wówczas za mieszaninę.

Substancji wieloskładnikowej zawierającej główne składniki A, B i C nie uznaje się za tożsamą z substancją wieloskładnikową zawierającą główne składniki A i B, ani z masą reakcyjną A, B, C i D.

- Substancja wieloskładnikowa nie jest uznawana za tożsamą z substancją zawierającą jedynie podzbiór pojedynczych składników.

Przykłady		
Numer WE	Nazwa	Zasada
207-205-6	2,5-Difluorotoluene (2,5-difluorotoluen)	Te dwie substancje nie są uznawane za tożsame z izomerycznymi mieszaninami difluorotoluenów, ponieważ stanowią one jedynie podzbiór wszystkich możliwych izomerów.
207-211-9	2,4-Difluorotoluene (2,4-difluorotoluen)	

- Rejestracja substancji wieloskładnikowej nie obejmuje poszczególnych składników.

<b>Przykłady</b>		
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa</b>	<b>Zasada</b>
208-747-6	1,2-Dibromoethylene (1,2-dibromoetylen)	Substancja ta opisuje mieszaninę izomerów cis i trans. Odrębne substancje – (1Z)-1,2-dibromoethene oraz (1E)-1,2-Dibrimoethene – nie są objęte rejestracją mieszaniny izomerycznej.

### Substancje UVCB

- Substancja UVCB o małej liczbie składników nie jest uznawana za tożsamą z substancją wieloskładnikową o szerszym składzie i odwrotnie.

<b>Przykłady</b>		
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa</b>	<b>Zasada</b>
288-450-6	Amines, C12-18-alkyl, acetates (aminy, C12-18-alkilo, octany)	Substancje „amines, C12-14-alkyl, acetates” lub „amines, C12-20-alkyl, acetates”, bądź „amines, dodecyl (C12-alkyl), acetates”, jak również substancje posiadające jedynie łańcuchy alkilowe o parzystej liczbie atomów węgla nie są uznawane za tożsame z tą substancją

- Substancja charakteryzowana na podstawie danego gatunku/rodzaju nie jest uznawana za tożsamą z substancją izolowaną z innego gatunku/rodzaju.

<b>Przykłady</b>		
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa</b>	<b>Zasada</b>
296-286-1	Glycerides, sunflower-oil di- (Glicerydy, olej słonecznikowy di-)	Substancja ta nie jest uznawana za tożsamą z substancjami „Glycerides, soya di-” (EINECS: 271-386-8) lub „Glycerides, tallow di-” (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	Linseed oil, epoxidized (Olej lniany, epoksydowany)	Substancja ta nie jest uznawana za tożsamą z substancją „linseed oil, oxidized” (EINECS: 272-038-8) lub z substancją „linseed oil, maleated”

	(EINECS: 268-897-3) ani substancją „castor oil, epoxidized” (nie zamieszczony w EINECS).
--	--

- Oczyszczony ekstrakt lub koncentrat jest uznawany za substancję inną niż ekstrakt.

Przykłady		
Numer WE	Nazwa	Zasada
232-299-0	Rape oil (Olej rzepakowy) Ekstrakty i ich fizycznie modyfikowane pochodne. Składa się głównie z glicerydów kwasów tłuszczowych: erukowego, linolowego i oleinowego. (Brassica napus, Cruciferae)	Substancja „(Z)-Docos-13-enoic acid (erucic acid)” (kwas erukowy) jest składnikiem substancji „rape oil” (olej rzepakowy). Kwas erukowy nie jest uznawany za tożsamy z olejem rzepakowym, ponieważ jest wyodrębniany jako substancja czysta z oleju rzepakowego; kwas erukowy ma własny wpis w wykazie EINECS (204-011-3). Wyodrębniona mieszanina kwasu palmitynowego, kwasu oleinowego, kwasu linolowego, kwasu linolenowego, kwasu erukowego oraz eikozenowego nie jest uznawana za substancję tożsamą z olejem rzepakowym, ponieważ składniki te nie reprezentują oleju jako całości.

## 6. Tożsamość substancji w ramach zapytania

Wytyczne dotyczące identyfikacji i nazywania substancji znajdują się w rozdziale 4 niniejszego poradnika. Wytycznymi tymi należy się kierować w celu określenia, czy dane substancje można uznać za takie same na potrzeby rozporządzeń REACH i CLP. Poniżej znajdują się dalsze objaśnienia dotyczące zapytania w sprawie substancji.

Zgodnie z art. 4 każdy producent lub importer może, zachowując pełną odpowiedzialność za wypełnianie swoich zobowiązań przewidzianych rozporządzeniem REACH, wyznaczyć osobę trzecią do reprezentowania go w postępowaniu na podstawie tytułu III rozporządzenia w zakresie rozmów z innymi producentami lub importerami.

W przypadku wszystkich substancji potencjalny rejestrujący ma obowiązek zapytać Agencję przed rejestracją, czy nie złożono już wniosku rejestracyjnego dla tej samej substancji (art. 26 rozporządzenia REACH). Takie zapytanie musi zawierać następujące dane:

- tożsamość potencjalnego rejestrującego zgodnie z sekcją 1 załącznika VI do rozporządzenia REACH, z wyłączeniem miejsc wykorzystania;
- tożsamość substancji, jak określono w sekcji 2 załącznika VI do rozporządzenia REACH;
- wskazanie, dla których wymagań w zakresie informacji konieczne będzie przeprowadzenie przez potencjalnego rejestrującego nowych badań na kręgowcach;
- wskazanie, dla których wymagań w zakresie informacji konieczne będzie przeprowadzenie przez potencjalnego rejestrującego innych, nowych badań.

Potencjalny rejestrujący powinien przedłożyć tożsamość oraz nazwę substancji zgodnie z zasadami określonymi w rozdziale 4 niniejszego poradnika.

Agencja ustala, czy taka sama substancja została już wcześniej zarejestrowana. Odbywa się to również zgodnie z zasadami opisanymi w rozdziale 4 niniejszego poradnika. O wyniku ustaleń powiadamiany jest potencjalny rejestrujący oraz wszelcy poprzedni lub inni potencjalni rejestrujący.

Więcej informacji na temat procesu zapytania znajduje się w *Poradniku na temat udostępniania danych* i na poświęconej temu tematowi stronie ECHA:

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



## 7. Przykłady

Poniższe przykłady mają jedynie zilustrować, w jaki sposób użytkownik może wykorzystać wytyczne zawarte w niniejszym poradniku. Nie stwarzają żadnego precedensu w zakresie obowiązków wynikających z rozporządzenia REACH.

Uwzględniono następujące przykłady:

- „Diethyl peroxydicarbonate” (peroksydiwęglan dietylu) stanowi przykład substancji jednoskładnikowej zawierającej rozpuszczalnik działający również jako środek stabilizujący (zob. rozdział 7.1);
- „Zolimidine” (zolimidyna) stanowi przykład substancji, którą można zidentyfikować jako substancję jednoskładnikową lub jako wieloskładnikową (zob. rozdział 7.2);
- „Mieszanina izomerów” utworzona podczas reakcji produkcji jest przykładem substancji wieloskładnikowej (zob. rozdział 7.3). Substancja ta była wcześniej ujęta w wykazie EINECS za pomocą wpisów dla poszczególnych izomerów;
- „Aromat AH” stanowi przykład substancji produkowanej w różnych postaciach, którą można opisać jako masę reakcyjną składającą się z pięciu składników o określonych zakresach stężeń (rozdział 7.4). Stanowi również przykład uzasadnionego odstępstwa od progów 80% i 10%;
- Nietaliczne „minerały”, w tym montmorylonit, jako przykład substancji dobrze zdefiniowanej, która wymaga dodatkowej charakterystyki właściwości fizycznych, zamieszczono w rozdziale 7.5;
- „Olejek eteryczny z lawendy” stanowi przykład substancji UVCB uzyskiwanej z roślin (rozdział 7.6);
- „Olejek chryzantemowy i jego wyodrębnione izomery” stanowi przykład substancji UVCB pochodzenia biologicznego, która poddawana jest dalszej obróbce (rozdział 7.7);
- „Phenol, isopropylated, phosphate” (fosforan izopropylowanego fenolu) stanowi przykład zmiennej substancji UVCB, której pełna identyfikacja jest niemożliwa (rozdział 7.8);
- „Czwartorzędowe związki amoniowe” stanowią przykład substancji o zróżnicowanych długościach łańcuchów węglowych (rozdział 7.9);
- Dwa przykłady „substancji ropopochodnych” – frakcji benzynowej oraz olejów gazowych – znajdują się w rozdziale 7.10;
- Dwa przykłady identyfikacji enzymów, lakazy oraz amylazy, znajdują się w rozdziale 7.11.

### 7.1. Diethyl peroxydicarbonate (peroksydiwęglan dietylu)

Substancja „diethyl peroxydicarbonate” (peroksydiwęglan dietylu) (WE 238-707-3, CAS 14666-78-5,  $C_6H_{10}O_6$ ) jest produkowana jako 18% roztwór w izododekanie (WE 250-816-8, CAS 31807-55-3). Izododekan działa również jako środek stabilizujący właściwości wybuchowe. Najwyższym możliwym stężeniem gwarantującym bezpieczne stosowanie substancji jest roztwór 27%.

W jaki sposób ww. substancję należy zidentyfikować i nazwać na potrzeby rejestracji?

Zgodnie z definicją substancji z rozporządzenia REACH należy pominąć rozpuszczalniki, które mogą być wyodrębnione bez wpływu na stabilność substancji i bez zmiany jej składu. Ponieważ w powyższym przypadku izododekan działa również jako środek stabilizujący i nie może być całkowicie wyodrębniony ze względu na właściwości wybuchowe substancji, musi on zostać uznany za dodatek, a nie jedynie rozpuszczalnik. Substancję taką należy wciąż uznać za substancję jednoskładnikową. Powinna ona zostać zatem zarejestrowana jako roztwór o najniższym możliwym stężeniu izododekanu, który gwarantuje bezpieczne użytkowanie:

Peroksydiwęglan dietylu (górne stężenie graniczne: 27%). Izododekan należy podać w rubryce „Dodatki” i określić jego funkcję stabilizującą.

## 7.2. ZOLIMIDINE (ZOLIMIDYNA)

Wyprodukowany roztwór metanolowy zawiera „zolimidynę” (WE 214-947-4; CAS 1222-57-7, C<sub>14</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>S) oraz „imidazol” (WE 206-019-2; CAS 288-32-4, C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>N<sub>2</sub>). Po usunięciu rozpuszczalnika „metanolu” oraz optymalizacji procesu produkcyjnego substancja posiada zakres czystości wynoszący: 74-86 % zolimidyny oraz 4-12% imidazolu.

W jaki sposób ww. substancję należy zidentyfikować i nazwać na potrzeby rejestracji?

Zgodnie z definicją substancji z rozporządzenia REACH należy pominąć rozpuszczalniki, które mogą być wyodrębnione bez wpływu na stabilność substancji i bez zmiany jej składu. Jak w powyższym przypadku metanol może być oddzielony bez żadnych trudności; należy zarejestrować substancję bez rozpuszczalnika.

Zasadniczo substancję uznaje się za jednoskładnikową, jeśli jeden główny składnik tej substancji jest obecny w stężeniu  $\geq 80\%$ . Substancję uznaje się za substancję wieloskładnikową, jeśli kilka głównych składników występuje w stężeniu  $\geq 10\%$  oraz  $< 80\%$ . Powyższy przykład jest przypadkiem granicznym, ponieważ wartości progowe zostały przekroczone. Substancja tę można więc uznać za substancję jednoskładnikową „zolimidynę” lub za substancję wieloskładnikową - masę reakcyjną „zolimidyny” i „imidazolu”.

W takim przypadku granicznym do podjęcia decyzji o tym, jak najlepiej opisać substancję, można wykorzystać typowego stężenia głównych składników substancji, np.:

- (1) (1) Jeśli typowe stężenie zolimidyny wynosi 77%, a imidazolu 11%, zaleca się uznanie substancji za masę reakcyjną zolimidyny i imidazolu;
- (2) (2) Jeśli typowe stężenie zolimidyny wynosi 85%, a imidazolu 5%, zaleca się uznanie substancji za substancję jednoskładnikową o nazwie „zolimidyna”.

## 7.3. Mieszanina izomerów

Dana substancja jest mieszaniną (masą reakcyjną) dwóch izomerów powstałą w wyniku reakcji produkcji. Poszczególne izomery zostały zgłoszone do wykazu EINECS. W dyrektywie 67/548/EWG określono zasady dotyczące wprowadzania substancji do obrotu. Ponieważ sposób produkcji substancji był nieistotny, wykaz EINECS objął daną mieszaninę wpisami dla dwóch poszczególnych izomerów. Rozporządzenie REACH wymaga jednak rejestracji substancji wyprodukowanych. Decyzja, do jakiego stopnia różne etapy wytwarzania substancji objęte są definicją „produkcji”, jest podejmowana na podstawie indywidualnego przypadku. Jeżeli mieszanina izomerów jest zarejestrowana jako substancja wieloskładnikowa (zgodnie z wytycznymi z rozdziału 4.2.2), to badanie danej substancji nie jest konieczne, jeśli profil zagrożenia substancji można w pełni określić na podstawie danych o poszczególnych składnikach.

## 1. Nazwa i inne identyfikatory

Przykłady	
<b>Nazwa IUPAC lub inna międzynarodowa nazwa chemiczna (substancji)</b>	Reaction mass of 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol and 2,2'-[[[5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol (Masa reakcji 2,2'-[[[4-metylo-1H-benzotriazolo-1-ilo)metylo]imino]bisetanolu i 2,2'-[[[5-metylo-1H-benzotriazolo-1-ilo)metylo]imino]bisetanolu)
<b>Inne nazwy (substancji)</b>	2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol (2,2'-[[[(metylo-1H-benzotriazolo-1-ilo)metylo]imino]bisetanol) Reaction mass of Ethanol, 2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- and water (Masa reakcji (2,2'-[[[(metylo-1H-benzotriazolo-1-ilo)metylo]imino]bis- i wody) Ethanol, 2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- (9CI) isomeric compound (etanol, 2,2'-[[[(metylo-1H-benzotriazolo-1-ilo)metylo]imino]bis- (9CI) związek izomeryczny)
<b>Numer WE (substancji)</b> <b>Nazwa WE</b> <b>Opis WE</b>	Dla tej substancji nie istnieje numer WE, ponieważ mieszanina izomerów nie została zgłoszona do wykazu EINECS. Została jednak objęta w wykazie EINECS wpisami swoich składników (279-502-9, 279-501-3).
<b>Numer CAS (substancji)</b> <b>Nazwa CAS</b>	niedostępna niedostępna
<b>Numer WE (składnik A)</b> <b>Nazwa WE</b> <b>Opis WE</b>	279-502-9 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
<b>Numer WE (składnik B)</b> <b>Nazwa WE</b> <b>Opis WE</b>	279-501-3 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
<b>Numer CAS (składnik A)</b> <b>Nazwa CAS</b>	80584-89-0 Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
<b>Numer CAS (składnik B)</b> <b>Nazwa CAS</b>	80584-88-9 Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
<b>Inne kody identyfikacyjne</b> <b>Odniesienie</b>	Numer ENCS 5-5917

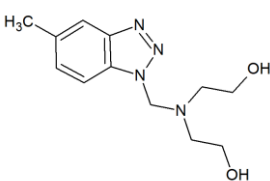
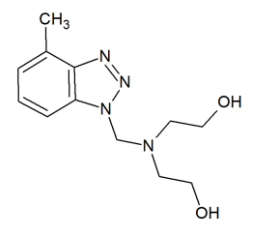
## 2. Informacje dotyczące składu – główne składniki

<b>Główne składniki</b>						
	<b>Nazwa IUPAC</b>	<b>Numer CAS</b>	<b>Numer WE</b>	<b>Wzór cząst. Metoda Hilla</b>	<b>Typowe stęż. (% wag.)</b>	<b>Zakres stężeń (% wag.)</b>
<b>A</b>	Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C12H18N4O2	60	50-70
<b>B</b>	Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C12H18N4O2	40	30-50

<b>Główne składniki</b>	
<b>Inne nazwy</b>	
<b>A</b>	2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol
<b>B</b>	2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol

<b>Główne składniki</b>		
	<b>Nazwa WE</b>	<b>Opis WE</b>
<b>A</b>	2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/
<b>B</b>	2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/

<b>Główne składniki</b>		
	<b>Nazwa CAS</b>	<b>Numer CAS</b>
<b>A</b>	Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0
<b>B</b>	Ethanol, 2,2'-[[[4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9

Główne składniki			
	Wzór cząsteczkowy Metoda CAS	Wzór strukturalny	Kod SMILES
<b>A</b>	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
<b>B</b>	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Główne składniki		
	Masa cząsteczkowa [g mol <sup>-1</sup> ]	Zakres masy cząsteczkowej
<b>A</b>	250	/
<b>B</b>	250	/

## 7.4. Aromat AH

Aromat AH składa się z gamma (izo-alfa) metylojononu oraz jego izomerów. Produkowany jest w trzech różnych gatunkach (A, B, C), które różnią się od siebie stosunkiem izomerów.

W tabeli poniżej znajduje się zestawienie składu różnych gatunków aromatu.

<b>Skład różnych gatunków aromatu AH Zakres stężeń [%]</b>				
Zakres stężenia [%]	Gatunek A	Gatunek B	Gatunek C	Ogólny zakres stężenia
gamma (iso-alfa) methyl ionone (gamma (izo-alfa) metylojonon)	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta (iso-beta) methyl ionone (delta (izo-beta) metylojonon)	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
alpha n-methyl ionone (alfa n-metylojonon)	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gamma n-methyl ionone (gamma n-metylojonon)	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4	0,5 - 4
beta n-methyl ionone (beta n-metylojonon)	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15	0,5 - 15
pseudo methyl ionones (pseudometylojonony)	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3	0,5 - 3

Istnieje kilka możliwości identyfikacji substancji:

- Gatunek A zawiera co najmniej 80% izomeru gamma (izo-alfa) metylojononu, a zatem substancję taką można uznać za substancję jednoskładnikową zawierającą izomer gamma (izo-alfa) metylojononu oraz inne izomery jako zanieczyszczenia.
- Gatunki B i C zawierają mniej niż 80% izomeru gamma (izo-alfa) metylojononu oraz  $\geq 10\%$  innych izomerów. Można je zatem uznać za substancje wieloskładnikowe:
  - Gatunek B: jako masa reakcyjna gamma(izo-alfa) metylojononu (65–75%) i alfa-n metylojononu (10–20%) plus inne izomery w postaci zanieczyszczeń.
  - Gatunek C: jako masa reakcyjna gamma(izo-alfa) metylojononu (50–60%) i alfa-n metylojononu (20–30%) plus inne izomery w postaci zanieczyszczeń.

Skład jest zmienny i czasami izomer występuje w ilości  $\geq 10\%$  (w związku z czym nazywany jest zwykle głównym składnikiem), a czasami w ilości  $< 10\%$  (w związku z czym nazywany jest zwykle zanieczyszczeniem).

Istnieje możliwość zarejestrowania poszczególnych gatunków osobno. Oznaczałoby to trzy rejestracje. Uzasadnione może być jednak podejście przekrojowe do danych.

Można też rozważyć następujące możliwości:

- Jedna rejestracja jako substancji jednoskładnikowej z dwoma podgatunkami. W tym przypadku podgatunki nie spełniają zasady 80% (zob. rozdział 4.2.1);
- Jedna rejestracja jako zdefiniowanej masy reakcyjnej 5 izomerów (substancja wieloskładnikowa). W tym przypadku niektóre izomery (główne składniki) nie spełniają zasady 10%, która odróżnia składniki główne od zanieczyszczeń (zob. rozdział 4.2.2).
- Jedna rejestracja jako zdefiniowanej masy reakcyjnej, przy czym zmienność składu jest objęta przez pełny zakres dla każdego izomeru.

Warto też rozważyć następujące kwestie:

- Wszystkie trzy gatunki substancji mają takie same lub bardzo zbliżone właściwości fizykochemiczne.
- Wszystkie trzy gatunki substancji mają podobne zastosowanie i scenariusze narażenia.
- Wszystkie gatunki mają taką samą klasyfikację zagrożenia i oznakowanie, a ich karty charakterystyki oraz raporty bezpieczeństwa są identyczne.
- Dostępne dane badawcze (oraz przyszłe badania) uwzględniają zróżnicowanie tych trzech gatunków.

W tym przykładzie opisano identyfikację substancji jako zdefiniowanej masy reakcyjnej zawierającej 5 izomerów (substancja wieloskładnikowa). W takim przypadku konieczne jest stosowne uzasadnienie odstępstwa od reguły 80% (zob. rozdział 4.2.1) oraz progu 10% (definicja substancji wieloskładnikowej, zob. rozdział 4.2.2). Ponieważ każdy gatunek substancji jest produkowany jako taki, skład każdego z nich należy określić w dokumentacji rejestracyjnej. Ze względów formalnych mogą jednak być konieczne co najmniej dwie rejestracje: (1) gamma (izo-alfa) metylojononu oraz (2) masy reakcyjnej gamma (izo-alfa) metylojononu i alfa-n metylojononu.

### **Identyfikacja substancji**

Aromat AH jest produkowany w trzech różnych gatunkach (A, B i C) o tym samym składzie jakościowym, lecz różnym składzie ilościowym. Wszystkie trzy gatunki są opisane w jednej dokumentacji rejestracyjnej dla substancji wieloskładnikowej. Chociaż oznacza to pewne odstępstwo od definicji, rejestracja substancji jako substancji wieloskładnikowej jest uzasadniona, ponieważ: (1) dostępne dane badawcze uwzględniają odmienną trzech gatunków substancji, (2) wszystkie trzy gatunki substancji mają podobne właściwości fizykochemiczne, (3) wszystkie gatunki substancji mają taką samą klasyfikację zagrożenia i oznakowanie (a tym samym identyczne karty charakterystyki) oraz (4) wszystkie trzy rodzaje substancji mają podobne zastosowanie i scenariusze narażenia (a tym samym podobne raporty bezpieczeństwa chemicznego).

#### **1. Nazwa i inne identyfikatory**

Nazwa IUPAC lub inna międzynarodowa nazwa chemiczna	Reaction mass (masa reakcyjna) 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one; 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one (3- metylo-4-(2,6,6-trimetylo-1-cyclohekseno-1-ilo)but-3-en-2-on)
---	---

	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one; 1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one; 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one (Masa reakcji 3-metylo-4-(2,6,6-trimetylo-2-cyclohekseno-1-ilo)but-3-en-2-onu; 3- metylo-4-(2,6,6- trimetylo-1- cyclohekseno-1-ilo)but-3-en-2-onu; [R-(E)]-1-(2,6,6- trimetylo-2- cyclohekseno-1-ilo)pent-1-en-3-onu; 1-(6,6- metylo-2- metylenocycloheks-1-ilo)pent-1-en-3-onu; 1-(2,6,6- trimetylo-1- cyclohekseno-1-ilo)pent-1-en-3-onu)
Inne nazwy	Methyl Ionone Gamma Quality A Methyl Ionone Gamma Quality B Methyl Ionone Gamma Quality C
Numer WE	niedostępna
Nazwa WE	/
Opis WE	/
Numer CAS	niedostępna
Nazwa CAS	/

## 2. Informacje dotyczące składu – główne składniki

Teoretycznie mogą występować dodatkowe enancjomery. Zbadano jednak następujące:

<b>Główne składniki</b>						
	Nazwa IUPAC	Numer CAS	Numer WE	Wzór cząst. Metoda Hilla	Min. stęż. (% wag.)	Maks. stęż. (% wag.)
<b>A</b>	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one (3-metylo-4-(2,6,6- trimetylo-2- cyclohekseno-1-ilo)but-3-en-2-on)	127-51-5	204-846-3	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	50	85



<b>B</b>	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one (3- metylo-4-(2,6,6-trimetylo-1-cyclohekseno-1-ilo)but-3-en-2-on)	79-89-0	201-231-1	C14H22O	3	10
<b>C</b>	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one ([R-(E)]-1-(2,6,6-trimetylo-2-cyclohekseno-1-ilo)pent-1-en-3-on)	127-42-4	204-842-1	C14H22O	3	30
<b>D</b>	1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one (1-(6,6-metylo-2-metylenocycloheks-1-ylo)pent-1-en-3-on)	niedostępna	niedostępna	C14H22O	0,5	4
<b>E</b>	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one (1-(2,6,6-trimetylo-1-cyclohekseno-1-ilo)pent-1-en-3-on)	127-43-5	204-843-7	C14H22O	0,5	15

### Główne składniki

#### Inne nazwy

<b>A</b>	alpha-iso-methyl ionone; gamma methyl ionone
<b>B</b>	beta-iso-methyl ionone; delta methyl ionone
<b>C</b>	alpha-n-methyl ionone
<b>D</b>	gamma-n-methyl ionone

<b>E</b>	beta-n-methyl ionone
----------	----------------------

### Główne składniki

	Nazwa WE	Opis WE
<b>A</b>	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	/
<b>B</b>	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	/
<b>C</b>	[ <i>R-(E)</i> ]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
<b>D</b>	1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
<b>E</b>	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one (1-(2,6,6-trimetylo-1-cyclohekseno-1-ilo)pent-1-ten-3-on)	/

### Główne składniki

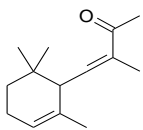
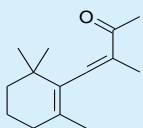
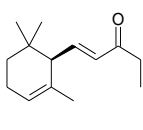
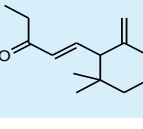
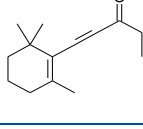
	Nazwa CAS	Numer CAS
<b>A</b>	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-	127-51-5
<b>B</b>	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-	79-89-0
<b>C</b>	1-Penten-3-one, 1-[(1 <i>R</i> )-2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl]-, (1 <i>E</i> )-	127-42-4
<b>D</b>	niedostępna	niedostępna
<b>E</b>	1-Penten-3-one, 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	127-43-5

### Główne składniki

	Inne kody identyfikacyjne	Odniesienie
<b>A</b>	2714 07.036	FEMA EU Flavour Register

<b>B</b>	07.041	EU Flavour Register
<b>C</b>	2711 07.009	FEMA EU Flavour Register
<b>D</b>	niedostępna	niedostępna
<b>E</b>	2712 07.010	FEMA EU Flavour Register

### Główne składniki

	Wzór cząsteczkowy Metoda CAS	Wzór strukturalny	Kod SMILES
<b>A</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
<b>B</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
<b>C</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>
<b>D</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC</chem>
<b>E</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>

<b>Główne składniki</b>		
	Masa cząsteczkowa [g mol <sup>-1</sup> ]	Zakres masy cząsteczkowej
<b>A</b>	206,33	/
<b>B</b>	206,33	/
<b>C</b>	206,33	/
<b>D</b>	206,33	/
<b>E</b>	206,33	/

### 3. Informacje dotyczące składu – zanieczyszczenia i dodatki

<b>Zanieczyszczenia</b>						
	Nazwa IUPAC	Numer CAS	Numer WE	Wzór cząst.	Typowe stęż. (% wag.)	Zakres stężeń (% wag.)
<b>F</b>						
Liczba nieokreślonych zanieczyszczeń:				11 (pseudometylojonony)		
Łączne stężenie nieokreślonych zanieczyszczeń:				0,5–3% wagowych		
<b>„Additives” – dodatki</b>						
	Nazwa IUPAC	Numer CAS	Numer WE	Wzór cząst.	Typowe stęż. (% wag.)	Zakres stężeń (% wag.)
<b>G</b>	Butylated Hydroxytoluene (BHT) (butylowany hydroksytoluen)	128-37-0	204-881-4	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O	0,1	0,05 – 0,15

### 4. Informacje dotyczące różnych gatunków substancji

Poniżej podano zakresy stężeń pięciu głównych składników występujących w trzech różnych

gatunkach substancji:

Zakres stężenia [%]	Gatunek A	Gatunek B	Gatunek C
gamma (iso-alpha) methyl ionone (gamma (izo-alfa) metylojonon)	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (iso-beta) methyl ionone (delta (izo-beta) metylojonon)	6 - 10	3 - 7	3 - 7
alpha n-methyl ionone (alfa n-metylojonon)	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gamma n-methyl ionone (gamma n-metylojonon)	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4
beta n-methyl ionone (beta n-metylojonon)	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15
pseudo methyl ionones (pseudometylojonony)	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3

## 7.5. Minerale

Minerał definiuje się jako kombinację składników nieorganicznych występującą w skorupie ziemskiej i posiadającą charakterystyczny skład chemiczny, postać krystaliczną (od wysokokrystalicznej do amorficznej) oraz właściwości fizykochemiczne.

Minerały nie podlegają rejestracji, o ile spełniają kryteria definicji substancji występującej w przyrodzie (*art. 3 pkt 39* rozporządzenia REACH) i nie są chemicznie modyfikowane (*art. 3 pkt 40* rozporządzenia REACH). Dotyczy to minerałów, których struktura chemiczna pozostaje niezmienną, nawet jeśli są poddawane procesowi chemicznemu lub obróbce chemicznej albo transformacji mineralogicznej, przeprowadzonej na przykład w celu usunięcia zanieczyszczeń.

Niektóre minerały można opisać jednoznacznie za pomocą składu chemicznego (zob. rozdziały 4.2.1 i 4.2.2 dotyczące substancji jednoskładnikowych i wieloskładnikowych), ale w przypadku innych sam skład chemiczny nie wystarcza do jednoznacznej identyfikacji (zob. rozdział 4.2.3).

W przeciwieństwie do innych substancji jedno- i wieloskładnikowych wiele minerałów należy identyfikować zarówno na podstawie składu chemicznego, *jak i* struktury wewnętrznej (np. określonej za pomocą dyfrakcji promieni rentgenowskich), ponieważ dopiero obie te cechy naraz stanowią istotę minerału i decydują o jego właściwościach fizykochemicznych.

Tak jak w przypadku innych substancji wieloskładnikowych do identyfikacji substancji (jako kombinacji składników nieorganicznych) wykorzystuje się m.in. numer CAS minerału. Numery CAS składników nieorganicznych (określonych przez mineralogię systematyczną) wykorzystuje się do opisu poszczególnych składników. W przypadku wyprodukowania odrębnego składnika nieorganicznego (substancji jednoskładnikowej) do identyfikacji substancji należy stosować numer CAS. Na przykład:

- Kaolin (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) jest minerałem składającym się głównie

z kaolinitów pierwotnych i wtórnych (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7), tj. uwodnionego glinokrzemianu.

Jeśli kaolin poddany zostanie procesowi rafinacji w celu wyprodukowania pojedynczego składnika, np. kaolinitów, to numery CAS/EINECS substancji będą następujące: EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Minerale bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9), opisany w EINECS jako „Gлина koloidalna. Składa się głównie z montmorylonitu”, zawiera dużą ilość składnika nieorganicznego montmorylonitu (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), ale nie tylko.

W przypadku wyprodukowania czystego montmorylonitu (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) substancję identyfikuje się za pomocą numeru CAS montmorylonitu.

Należy podkreślić, że bentonitu (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) oraz montmorylonitu (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) nie uznaje się za substancje tożsame.

Podsumowując, nazwę minerału tworzy się na ogół na podstawie kombinacji jej nieorganicznego składnika lub składników. Minerale można uznać za substancje jednoskładnikowe lub wieloskładnikowe (zob. rozdział 4.2.1 i 4.2.2). Niektórych minerałów nie można opisać jednoznacznie za pomocą ich składu chemicznego; do dostatecznej identyfikacji wymagają one dodatkowego opisu fizycznego lub parametrów obróbki (zob. rozdział 4.2.3). Kilka przykładów podano w tabeli poniżej.

**Przykłady minerałów**

Nazwa	CAS	EINECS	Dodatkowy opis
Cristobalite (krystobalit)	14464-46-1	238-455-4	O <sub>2</sub> Si (struktura krystaliczna: symetria sześcienna)
Quartz (kwarc)	14808-60-7	238-878-4	O <sub>2</sub> Si (struktura krystaliczna: symetria romboedryczna)
Kieselguhr	61790-53-2	-	Substancja znana również jako: Diatomite, Kieselgur i Celite Opis: Miękka krzemionkowa kopalina składająca się ze szczątków niewielkich prehistorycznych roślin wodnych. Zawiera głównie krzemionkę.
Dolomite (dolomit)	16389-88-1	240-440-2	CH <sub>2</sub> O <sub>3</sub> .1/2Ca.1/2Mg
Feldspar- group minerals (minerały grupy Feldspar)	68476-25-5	270-666-7	Substancja nieorganiczna stanowiąca produkt reakcji wysokotemperaturowej kalcynacji, podczas której zachodzi homogeniczna, jonowa dyfuzja wzajemna pomiędzy różnymi ilościami tlenku glinu, tlenku baru, tlenku wapnia, tlenku magnezu, tlenku krzemu oraz tlenku strontu, prowadząc do utworzenia struktury krystalicznej.
Talc (talk)	14807-96-6	238-877-9	Mg <sub>3</sub> H <sub>2</sub> (SiO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>
Vermiculite (wermikulit)	1318-00-9	-	(Mg <sub>0.33</sub> [Mg <sub>2-3</sub> (Al <sub>0-1</sub> Fe <sub>0-1</sub> ) <sub>0-1</sub> ])(Si <sub>2.33-3.33</sub> Al <sub>0.67-1.67</sub> )(OH) <sub>2</sub> O <sub>10</sub> .4H <sub>2</sub> O)

### **Dane analityczne wymagane dla minerałów**

<b>Skład pierwiastkowy</b>	Skład chemiczny ukazuje całościowy skład danego minerału bez względu na liczbę składników i ich zawartość w minerale. Zgodnie z obowiązującą konwencją skład chemiczny jest wyrażany w formie tlenkowej.
<b>Dane spektralne (XRD lub równoważne)</b>	XRD albo inne techniki mogą służyć do identyfikacji minerałów na podstawie ich struktury krystalograficznej. Charakterystyczne piki XRD lub odpowiednie alternatywne dane identyfikujące minerał należy przedłożyć wraz z krótkim opisem metody analitycznej lub odnośnikami do literatury.
<b>Typowe właściwości fizykochemiczne</b>	Minerały mają charakterystyczne właściwości fizykochemiczne umożliwiające uzupełnienie ich identyfikacji, np. <ul style="list-style-type: none"> <li>- - bardzo niska twardość</li> <li>- - zdolność pęcznienia</li> <li>- - kształty diatomitu (mikroskop optyczny)</li> <li>- - bardzo wysoka gęstość</li> <li>- - powierzchnia właściwa (adsorpcja azotu)</li> </ul>

## **7.6. Olejek eteryczny z lawendy (Lavandin grosso)**

Olejki eteryczne to substancje pozyskiwane z roślin. Można je więc scharakteryzować jako substancje o pochodzeniu roślinnym.

Substancje pochodzenia roślinnego to zasadniczo złożone substancje naturalne otrzymywane w wyniku przetwarzania roślin lub ich części poprzez obróbkę, taką jak ekstrakcja, destylacja, tłoczenie, frakcjonowanie, oczyszczanie, zateżanie lub fermentacja. Skład takich substancji jest różny w zależności od rodzaju, gatunku, warunków wzrostu oraz okresu zbioru roślin źródłowych, a także zastosowanych metod obróbki.

Olejki eteryczne można określać na podstawie głównych składników, tak jak w przypadku substancji wieloskładnikowych. Jednakże w skład olejków eterycznych może wchodzić do kilkuset składników, które mogą znacząco się różnić w zależności od wielu czynników (np. rodzaju, gatunku, warunków wzrostu, okresu zbioru, zastosowanych procesów). Dlatego opis głównych składników jest często niewystarczający do identyfikacji takich substancji UVCB. Olejki eteryczne opisuje się za pomocą rośliny źródłowej oraz procesu obróbki zgodnie z opisem w rozdziale 4.3.1 (substancje UVCB podtypu 3).

Dla wielu olejków eterycznych istnieją odpowiednie normy przemysłowe (dla wielu olejków eterycznych również normy ISO-). Informacje o normach można podać dodatkowo. Daną substancję należy jednak zidentyfikować na podstawie substancji wyprodukowanej.

Poniższy przykład dotyczy „olejku eterycznego z Lavandin grosso”, dla którego istnieje norma ISO (ISO 8902-1999).



## 1. Nazwy i inne identyfikatory

### Źródło

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

### Proces

#### Opis procesów reakcji (bio)chemicznej zastosowanych do produkcji substancji:

Destylacja z parą wodną kwitnących czubków rośliny *Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae), a następnie oddzielenie wody od olejku eterycznego;  
Zachodzący następnie proces oddzielenia jest samorzutnym procesem fizycznym, który zwykle zachodzi w separatorze (kolbie płaskodennej) umożliwiając łatwe wyodrębnienie odseparowanego olejku. Temperatura na tym etapie procesu destylacji wynosi około 40°C.

### Nazwa

Nazwa IUPAC lub inna międzynarodowa nazwa chemiczna	Essential oil of <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) (Olejek eteryczny z <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae))
Numer WE Nazwa WE Opis WE	297-385-2 Lavender, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ext. Ekstrakty i ich fizycznie modyfikowane związki pochodne, takie jak tynktury, konkrety, absoluty, olejki eteryczne, oleożywice, terpeny, frakcje bezterpenowe, destylaty, pozostałości itd. otrzymywane z <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae 31.
Numer CAS Nazwa CAS	93455-97-1 Lavender, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ext.

<sup>31</sup> „Labiatae” i „Lamiaceae” to synonimy.

## 2. Informacje dotyczące składu – składniki znane

Znane składniki					
	Nazwa chemiczna WE CAS IUPAC inne	Numer WE CAS	Wzór cząst. metoda Hilla	Typowe stęż. (% wag.)	Zakres stężenia (% wag.)
<b>A</b>	<b>WE</b> linalyl acetate (octan linalilu) <b>CAS</b> 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-, acetate <b>IUPAC</b> 3,7-Dimethyl octa-1,6-dien-3-yl acetate	<b>WE</b> 204-116-4 <b>CAS</b> 115-95-7	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	33	28 – 38
<b>B</b>	<b>WE</b> linalool <b>CAS</b> 1,6-octadien-3-ol, 3,7-dimethyl- <b>IUPAC</b> 3,7-Dimethyl octa-1,6-diene-3-ol	<b>WE</b> 201-134-4 <b>CAS</b> 78-70-6	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	29,5	24 – 35
<b>C</b>	<b>WE</b> Bornan-2-one (bornan-2-on) <b>CAS</b> Bicyclo[2.2.1] heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl- <b>IUPAC</b> 1,7,7-Trimethylbicyclo[2.2.1]-2-heptanone <b>Inne</b> camphor (kamfora)	<b>WE</b> 200-945-0 <b>CAS</b> 76-22-2	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O	7	6 – 8
<b>D</b>	<b>EC</b> Cineole (cyneol) <b>CAS</b> 2-oxabicyclo [2.2.2]octane, 1,3,3-trimethyl- <b>IUPAC</b> 1,3,3-Trimethyl-2-oxabicyclo[2.2.2]octane <b>Inne</b> 1,8-cineole	<b>WE</b> 207-431-5 <b>CAS</b> 470-82-6	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	5,5	4 – 7

<b>E</b>	<p><b>WE</b> P-menth-1-en-4-ol</p> <p><b>CAS</b> 3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-</p> <p><b>IUPAC</b> 1-(1-Methylethyl)-4-methyl-3-cyclohexen-1-ol</p> <p><b>Inne</b> terpinene-4-ol</p>	<p><b>WE</b> 209-235-5</p> <p><b>CAS</b> 562-74-3</p>	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	3,25	1,5 – 5
<b>F</b>	<p><b>WE</b> 2-Isopropenyl-5-methylhex-4-enyl acetate (octan 2-izopropenylo-5-metyloheks-4-enylu)</p> <p><b>CAS</b> 4-Hexen-1-ol, 5-methyl-2-(1-methylethenyl)-, acetate</p> <p><b>IUPAC</b> 2-(1-Methylethenyl)-5-methylhex-4-en-1-ol</p> <p><b>Inne</b> (±)-Lavandulol acetate</p>	<p><b>WE</b> 247-327-7</p> <p><b>CAS</b> 25905-14-0</p>	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	2,25	1,5 – 3
<b>G</b>	<p><b>WE</b> DL-borneol</p> <p><b>CAS</b> Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p><b>IUPAC</b> (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimethyl bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol</p> <p><b>Inne</b> borneol</p>	<p><b>WE</b> 208-080-0</p> <p><b>CAS</b> 507-70-0</p>	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	2,25	1,5 – 3
<b>H</b>	<p><b>WE</b> Caryophyllene (kariofilen)</p> <p><b>CAS</b> Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, (1R,4E,9S)-</p> <p><b>IUPAC</b> (1R,4E,9S)-4,11,11-trimethyl-8-methylene bicyclo[7.2.0]undec-4-ene</p> <p><b>Inne</b> trans-beta-caryophyllene</p>	<p><b>WE</b> 201-746-1</p> <p><b>CAS</b> 87-44-5</p>	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	1,75	1 – 2,5

<b>I</b>	<p><b>WE</b> (E)-7,11-dimethyl-3-methylenedodeca-1,6,10-triene ((E)-7,11-dimetylo-3-metylenododeka-1,6,10-trien)</p> <p><b>CAS</b> 1,6,10-Dodecatriene, 7,11-dimethyl-3-methylene-, (6E)-</p> <p><b>IUPAC</b> (E)-7,11-Dimethyl-3-methylene-1,6,10-dodecatriene</p> <p><b>Inne</b> trans-beta-farnesene</p>	<p><b>WE</b> 242-582-0</p> <p><b>CAS</b> 18794-84-8</p>	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	1,1	0,2 – 2
<b>J</b>	<p><b>WE</b> (R)-p-mentha-1,8-diene</p> <p><b>CAS</b> cyclohexen, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, (4R)-</p> <p><b>IUPAC</b> (4R)-1-Methyl-4-(1-methylethenyl)cyclohexene</p> <p><b>Inne</b> limonene (limonen)</p>	<p><b>WE</b> 227-813-5</p> <p><b>CAS</b> 5989-27-5</p>	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1	0,5 – 1,5
<b>K</b>	<p><b>WE</b> 3,7-dimethylocta-1,3,6-triene</p> <p><b>CAS</b> 1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-</p> <p><b>IUPAC</b> 3,7-Dimethylocta-1,3,6-triene</p> <p><b>Inne</b> cis-beta-ocimene</p>	<p><b>WE</b> 237-641-2</p> <p><b>CAS</b> 13877-91-3</p>	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1	0,5 – 1,5

#### Znane składniki ≥ 10%

Znane składniki		
	Nazwa WE	Opis WE
<b>A</b>	linalyl acetate C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	
<b>B</b>	linalool C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	

Znane składniki		
	Nazwa CAS	Powiązane numery CAS
<b>A</b>	linalyl acetate C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	115-95-7
<b>B</b>	linalool C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	78-70-6

Znane składniki			
	Wzór cząsteczkowy Metoda CAS	Wzór strukturalny	Kod SMILES
<b>A</b>	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>		
<b>B</b>	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O		

Znane składniki		
	Masa cząsteczkowa	Zakres masy cząsteczkowej
A	196,2888	/
B	154,2516	/

## 7.7. Olejek chryzantemowy i jego wyodrębnione izomery

Pewna firma produkuje olejek chryzantemowy uzyskiwany w procesie ekstrakcji ze zmiażdżonych kwiatów i liści *Chrysanthemum cinerariaefolium* (Compositae) za pomocą rozpuszczalnika stanowiącego mieszaninę wody i etanolu (1:10). Po procesie ekstrakcji rozpuszczalnik jest usuwany, a „czysty” ekstrakt poddawany jest dalszej rafinacji, której wynikiem jest końcowy olejek chryzantemowy.

Ponadto z ekstraktu wyodrębniane są dwa izomery jako masa reakcyjna następujących substancji:

### Jasmolina I

(Cyclopropanecarboxylic acid, 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)-, (1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-yl ester, (1R,3R)-; numer CAS 4466-14-2), oraz

### Jasmolina II

(Cyclopropanecarboxylic acid, 3-[(1E)-3-methoxy-2-methyl-3-oxo-1-propenyl]-2,2-dimethyl-, (1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-ylester, (1R,3R)-; numer CAS 1172-63-0

Dodatkowo firma chce również syntetyzować mieszaninę izomeryczną jasmoliny I oraz II.

Firma ta stawia następujące pytania:

1. Jak zidentyfikować olejek chryzantemowy na potrzeby rejestracji?
2. Czy rejestracja olejku obejmuje masę reakcyjną wyodrębnionych izomerów jasmoliny I i jasmoliny II?
3. Czy syntetyzowana mieszanina dwóch izomerów może być uznana za tożsamą z mieszaniną izomerów wyodrębnionych z olejku chryzantemowego?

### 1. Jak zidentyfikować olejek chryzantemowy na potrzeby rejestracji?

Olejek chryzantemowy uznaje się za substancję UVCB, której nie można w pełni zidentyfikować na podstawie składu chemicznego (szczegółowe wytyczne w rozdziale 4.3). Konieczne są inne parametry identyfikujące, takie jak źródło pochodzenia lub zastosowany proces. Olejek chryzantemowy to substancja pochodzenia biologicznego, a więc należy go identyfikować na podstawie gatunku oraz części organizmu, z którego jest otrzymywany, a także zastosowanego procesu rafinacji (ekstrakcja za pomocą rozpuszczalnika). Niemniej jednak należy określić skład chemiczny oraz nazwy składników, jeżeli są znane.

Informacje niezbędne do wystarczającej identyfikacji substancji są następujące:

<b>Nazwa substancji</b>	<b><i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i>, Compositae; olejek otrzymywany ze zmiażdżonych kwiatów i liści poprzez ekstrakcję wodą/etanołem (w proporcji 1:10)</b>
<b>Źródło</b>	
Rodzaj, gatunek, podgatunek	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae

Część rośliny wykorzystana przy wytworzeniu olejku	Kwiaty i liście			
<b>Proces</b>				
Metoda produkcji	Miażdżenie, a następnie ekstrakcja			
Rozpuszczalnik stosowany do ekstrakcji	Woda:etanol (1:10)			
<b>Informacja o składzie – składniki znane w % wagowych</b>				
Nazwa składnika	Numer WE	Numer CAS	Min. %	Maks. %
<b>Pyrethrin I (pyretryna I):</b> 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-chrysanthemate	204-455-8	121-21-1	30	38
<b>Pyrethrin II (pyretryna II):</b> 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate	204-462-6	121-29-9	27	35
<b>Cinerin I (cyneryna I):</b> 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	246-948-0	25402-06-6	5	10
<b>Cinerin II (cyneryna II):</b> 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropane carboxylate	204-454-2	121-20-0	8	15
<b>Jasmolina I:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	brak	4466-14-2	4	10

<b>Jasmolina II:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	brak	1172-63-0	4	10
Ponadto substancja ta zawiera do 40 składników w stężeniu poniżej 1%.				

Można też rozważyć identyfikację substancji jako dobrze zdefiniowanej substancji wieloskładnikowej zawierającej sześć głównych składników (masę reakcyjną pyretryny I, pyretryny II, cyneryny I, cyneryny II, jasmoliny I oraz jasmoliny II).

Taka substancja zostałaby uznana za „substancję występującą w przyrodzie”, jeśli proces jej produkcji polegałby jedynie na „miażdżeniu”. Byłaby również zwolniona z rejestracji, chyba że spełnia kryteria klasyfikacji jako substancja niebezpieczna zgodnie z dyrektywą 67/548/EWG.

## 2. Czy rejestracja olejku obejmuje masę reakcyjną wyodrębnionych izomerów jasmoliny I i jasmoliny II?

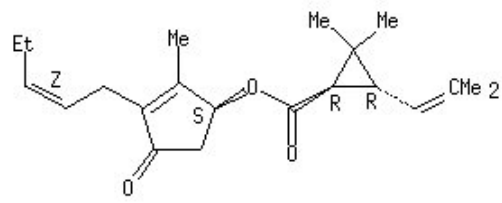
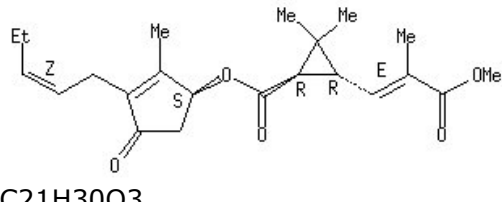
Masa reakcyjna wyodrębnionych izomerów jasmoliny I i jasmoliny II nie jest objęta rejestracją olejku z *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae, ponieważ rejestracja substancji UVCB nie obejmuje poszczególnych składników i odwrotnie. Masę reakcyjną jasmoliny I oraz II uznaje się za odmienną substancję.

Masę reakcyjną jasmoliny I oraz jasmoliny II można rozpatrywać jako substancję wieloskładnikową (szczegółowe wytyczne w rozdziale 4.2.3) zawierającą dwa główne składniki.

Informacje niezbędne do wystarczającej identyfikacji substancji są następujące:

Nazwa IUPAC substancji	Reaction mass (masa reakcyjna) (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate) oraz (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate)			
Inna nazwa	Masa reakcyjna jasmoliny I i jasmoliny II			
Czystość substancji	95–98% wag.			
Informacja dotycząca składu – główne składniki w % wagowych				
<b>Nazwa składnika</b>	<b>Numer WE</b>	<b>Numer CAS</b>	<b>Min. %</b>	<b>Maks. %</b>



Jasmolina I: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	brak	4466-14-2	40	60
Wzór cząsteczkowy				
Wzór strukturalny Masa cząsteczkowa		C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> O <sub>5</sub> M = 374 g/mol		
Jasmolina II: 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	brak	1172-63-0	35	65
Wzór cząsteczkowy				
Wzór strukturalny Masa cząsteczkowa		C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>3</sub> M = 330 g/mol		

### 3. Czy syntetyzowaną mieszaninę (masę reakcyjną) dwóch izomerów można uznać za tożsamą z mieszaniną izomerów wyodrębnionych z olejku chryzantemowego?

W przypadku substancji dobrze zdefiniowanych, które można wystarczająco opisać na podstawie składników, nie ma znaczenia, czy substancja została wyodrębniona z ekstraktu czy syntetyzowana za pomocą procesu chemicznego. Dlatego syntetyzowaną masę reakcyjną jasmoliny I oraz jasmoliny II można uznać za taką samą mieszaninę, jak mieszaninę izomerów wyodrębnioną z chryzantemy, nawet jeśli otrzymywana jest w wyniku innego procesu produkcyjnego, pod warunkiem że czystość mieszaniny oraz zakres stężenia głównych składników są jednakowe.

### 4. Wniosek

Zidentyfikowano dwie substancje:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae; olejek otrzymywany ze zmiażdżonych

- kwiatów i liści poprzez ekstrakcję wodą/etanołem (w proporcji 1:10)
- Masa reakcyjna izomerów jasmoliny I oraz jasmoliny II, bez względu na proces jej wytworzenia.

Jeżeli powyższe substancje są stosowane *wyłącznie* w produktach ochrony roślin oraz biobójczych, to uznaje się je za zarejestrowane zgodnie z REACH (*art. 15*).

## 7.8. Phenol, isopropylated, phosphate (fosforan izopropylowanego fenolu)

Fosforan izopropylowanego fenolu (3:1) to substancja UVCB, dla której nie można w pełni określić zmienności grupy izopropylowej.

### 1. Nazwa i inne identyfikatory

<b>Nazwa IUPAC lub inna międzynarodowa nazwa chemiczna</b>	Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (fenol, izopropylowany, fosforan (3:1))
<b>Inne nazwy</b>	Phenol, isopropylated, phosphate (fosforan izopropylowanego fenolu) Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (based on a 1:1 mol ratio propylene to phenol)
<b>Numer WE</b> <b>Nazwa WE</b> <b>Opis WE</b>	273-066-3 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (fenol, izopropylowany, fosforan (3:1)) /
<b>Numer CAS</b> <b>Nazwa CAS</b>	68937-41-7 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (fenol, izopropylowany, fosforan (3:1))

### 2. Informacje dotyczące składu – główne składniki

<b>Główne składniki</b>					
Nazwa IUPAC	Numer CAS	Numer WE	Wzór cząst. Metoda Hilla	Typowe stęż. (% wag.)	Zakres stężeń (% wag.)

Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (fenol, izopropyłowany, fosforan (3:1))	68937-41-7	273-066-3	nieokreślony		
--	------------	-----------	--------------	--	--

### Główne składniki

Nazwa WE	Opis WE
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (fenol, izopropyłowany, fosforan (3:1))	/
Nazwa CAS	Numer CAS
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (fenol, izopropyłowany, fosforan (3:1))	68937-41-7

## 7.9. Czwartorzędowe związki amonowe

Pewna firma syntetyzuje następujące substancje:

### Substancja A

„Quaternary ammonium compounds, di-C<sub>10-18</sub>-alkyldimethyl, chlorides” (czwartorzędowe związki amonowe, di-C<sub>10-18</sub>-alkilodimetylowe, chlorki)

Numer WE 294-392-2

Numer CAS 91721-91-4

Rozkład długości łańcuchów węglowych:

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

**Substancja B**

„Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides” (czwartorzędowe związki amonowe, dicocoalkilodimetylowe, chlorki)

EC number 263-087-6

CAS number 61789-77-3

Firma nie zna dokładnego składu tej substancji.

**Substancja C**

„Didodecyldimethylammonium bromide” (bromek didodecyldimetyloamoniowy)

**Substancja D**

„Didodecyldimethylammonium chloride” (chlorek didodecyldimetyloamoniowy)

**Substancja E**

Substancja E jest wytwarzana jako masa reakcyjna bromku didodecyldimetyloamoniowego oraz chlorku didodecyldimetyloamoniowego (masa reakcyjna substancji C i D)

**Substancja F**

„Quaternary ammonium compounds, di-C<sub>14-18</sub>-alkyldimethylammonium, chlorides” (czwartorzędowe związki amonowe, di-C<sub>14-18</sub>-alkilodimetylowe amonowe, chlorki)

EC number 268-072-8

CAS number 68002-59-5

Rozkład długości łańcuchów węglowych:

C <sub>14</sub>	20%
C <sub>15</sub>	10%
C <sub>16</sub>	40%
C <sub>17</sub>	10%
C <sub>18</sub>	20%

**Substancja G**

„Quaternary ammonium compounds, di-C<sub>4-22</sub>-alkyldimethyl, chlorides” (czwartorzędowe związki amonowe, di-C<sub>4-22</sub>-alkilodimetylowe, chlorki)

Rozkład długości łańcuchów węglowych (pojedynczy znak prim oznacza jedno wiązanie podwójne, podwójny znak prim oznacza jedno wiązanie potrójne):

C <sub>4</sub>	0,5%
C <sub>6</sub>	3,0%
C <sub>8</sub>	6,0%
C <sub>10</sub>	10,0%
C <sub>12</sub>	12,0%

C14	24,0%
C16	20,0%
C18	16,0%
C18'	2,0%
C18''	0,5%
C20	4,0%
C22	2,0%

Do tej pory na potrzeby nazewnictwa firma stosowała jedynie nazwę substancji B („Quaternary ammonium compounds, dicocoalkyldimethyl chlorides”, numer WE 263-087-6, numer CAS 61789-77-3), gdyż pasuje ona najbardziej do wszystkich substancji (substancje od A do G). Firma chciałaby wiedzieć, czy możliwe jest objęcie wszystkich substancji (od A do G) jedną rejestracją substancji B.

### 1. Uwagi ogólne

Węglowodory (parafiny, olefiny) otrzymywane z tłuszczów i olejów lub ich syntetyczne substytuty identyfikuje się na podstawie rozkładu łańcuchów węglowych lub źródła pochodzenia (deskryptor alkilowy), za pomocą grupy funkcyjnej (deskryptor funkcyjności), np. amonowej, oraz anionu/kationu (deskryptor soli) np. chlorkowego. Rozkład długości łańcucha węglowego, np. C<sub>8-18</sub>, dotyczy łańcuchów:

nasyconych

liniowych (nierozgałęzionych)

o wszystkich liczbach atomów węgla (C<sub>8</sub>, C<sub>9</sub>, C<sub>10</sub>, C<sub>11</sub>,..., C<sub>18</sub>), przy czym wąski przedział długości łańcucha węglowego nie obejmuje szerszego i odwrotnie

W przeciwnym razie należy użyć następujących określeń:

nienasycony (C<sub>16</sub> unsaturated)

rozgałęziony (C<sub>10</sub> branched)

parzysty (C<sub>12-18</sub> even-numbered)

Łańcuchy węglowe opisywane na podstawie źródła pochodzenia muszą posiadać taki rozkład łańcuchów węglowych, jaki występuje w źródle pochodzenia, np. w przypadku alkiloamin łojowych (ang.: „tallow alkyl amines”):

Alkiloaminy łojowe w 99% składają się z pierwszorzędowych liniowych amin alkilowych o następującym rozkładzie długości łańcuchów węglowych (Ullman, 1985) [pojedynczy znak prim (') oznacza jedno wiązanie podwójne, podwójny znak prim (") – jedno wiązanie potrójne]:

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

C18	23%
C18'	37%
C18''	1,5%

## 2. Jak zidentyfikować substancje na potrzeby rejestracji?

Każdą substancję porównuje się z substancją B (na podstawie której tworzono dotychczas nazwę substancji) w celu stwierdzenia, czy dwie substancje można uznać za takie same.

Porównanie substancji A i B

Dla grup typu „coco” w substancji B znaleźć można następujący rozkład długości łańcuchów węglowych (Ullmann, 1985) [pojedynczy znak prim (') oznacza jedno wiązanie podwójne, podwójny znak prim (") – jedno wiązanie potrójne]:

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

Widać, że rozkład długości łańcuchów węglowych substancji A różni się od rozkładu długości łańcuchów węglowych „coco” substancji B. Ponieważ składy ilościowy i jakościowy obu substancji znacząco się różnią, nie można ich uznać za takie same.

### Porównanie substancji B i C

Substancja B „Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides” to mieszanina składników o różnych długościach łańcuchów węglowych (od C<sub>6</sub> to C<sub>18</sub> parzyste, liniowe, nasycone i nienasycone), a substancja C zawiera tylko jeden składnik o jednej określonej długości łańcucha nasyconego (C<sub>12</sub>) i o innym anionie (bromek). Substancji C nie można więc uznać za tożsamą z substancją B.

### Porównanie substancji B i D

Substancja B „Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides” to mieszanina składników o różnych długościach łańcuchów węglowych (od C<sub>6</sub> do C<sub>18</sub> parzyste, liniowe, nasycone i nienasycone), a substancja D zawiera jeden składnik o jednej określonej długości łańcucha nasyconego (C<sub>12</sub>) i o takim samym anionie (chlorek). Substancje B i D mają różne nazwy i nie można ich uznać za takie same, ponieważ pojedynczy składnik nie jest objęty rejestracją mieszaniny zawierającej dany składnik i odwrotnie.

### Porównanie substancji B i E

Substancja E jest mieszaniną substancji C i D. Obie posiadają nasycony łańcuch C<sub>12</sub>, lecz odmienne aniony (bromek i chlorek). Substancja B „Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides” opisuje mieszaninę składników o różnych długościach łańcuchów węglowych (od C<sub>6</sub> do C<sub>18</sub> parzyste, liniowe, nasycone i nienasycone) zawierającej anion chlorkowy. Substancja E jest opisywana tylko za pomocą łańcucha węglowego C<sub>12</sub> oraz bromku jako dodatkowego anionu. Substancji B i E nie można zatem uznać za takie same. Konieczna jest oddzielna rejestracja substancji E.

### Porównanie substancji B i F

Substancja F „Quaternary ammonium compounds, di- C<sub>14-18</sub> alkyldimethylammonium, chlorides” jest mieszaniną składników o różnych długościach łańcuchów węglowych (od C<sub>14</sub> do C<sub>18</sub> parzyste i nieparzyste, liniowe i nasycone). Substancja F różni się od substancji B pod względem składu i zakresu rozkładu łańcuchów węglowych. Substancja F ma wąski rozkład długości łańcuchów węglowych i dodatkowo zawiera łańcuchy węglowe C<sub>15</sub> i C<sub>17</sub>. Substancje B i F nie mogą być więc uznane za takie same.

### Porównanie substancji B i G

Substancje B i G wydają się bardzo podobne, ponieważ zakres rozkładu łańcuchów węglowych w obu przypadkach jest prawie jednakowy. Jednak substancja G zawiera dodatkowo łańcuchy węglowe C<sub>4</sub>, C<sub>20</sub> i C<sub>22</sub>. Rozkład długości łańcuchów węglowych substancji G jest szerszy niż dla substancji B. Substancji B i G nie można zatem uznać za takie same.

## 3. Wniosek

Węglowodory (parafiny, olefiny) można uznać za substancje tożsame tylko wtedy, gdy jednakowe są wszystkie trzy deskryptory (alkilowy, funkcyjności i soli).

W podanym przykładzie deskryptory są zawsze różne. Substancje te nie mogą być więc objęte jedną rejestracją substancji B.

## 7.10. Substancje ropopochodne

Przystawiono dwa przykłady wykorzystania wytycznych dla szczególnych substancji UVCB z rozdziału 4.3.2.2.

### 7.10.1. Frakcja benzynowa (C4-C12)

#### 1. Nazwa i inne identyfikatory

Nazwa

<b>Nazwa IUPAC lub inna międzynarodowa nazwa chemiczna</b>	Naphtha (petroleum), catalytic reformed (Benzyna ciężka (ropa naftowa), reforming katalityczny)
--	---

## Źródło

<b>Identyfikacja lub opis pochodzenia produktu</b>	Ropa naftowa
--	--------------

## Proces

<b>Opis procesu rafineryjnego</b>	<b>Reforming katalityczny</b>
<b>Liczba atomów węgla</b>	C4-C12
<b>Temperatura wrzenia lub wartości graniczne</b>	od 30°C do 220°C
<b>Inne właściwości fizyczne, np. lepkość</b>	poniżej 7 mm <sup>2</sup> /s w 40°C (lepkość)
<b>Numer WE</b> <b>Numer CAS</b> <b>Nazwa WE/nazwa CAS</b> <b>Opis WE/opis CAS</b>	273-271-8 68955-35-1 Naphtha (petroleum), catalytic reformed (Bezyna ciężka (ropa naftowa), reforming katalityczny) Złożona mieszanina węglowodorów, produkt destylacji produktów reformingu katalitycznego. Składa się z węglowodorów o liczbie atomów węgla przeważnie od C4 do C12 i wrzących w zakresie temperatur od ok. 30°C do 220°C (90°F do 430°F). Zawiera względnie wysoką ilość węglowodorów aromatycznych i węglowodorów o łańcuchach rozgałęzionych. Produkt może zawierać 10% lub więcej benzenu.

**2. Informacja dotycząca składu**

<b>Znane składniki</b>			
<b>Nazwa IUPAC</b>	<b>Numer CAS</b>	<b>Numer WE</b>	<b>Zakres stężeń (% wag.)</b>
Benzene (benzen)	71-43-2	200-753-7	1-10
Toluene (toluen)	108-88-3	203-625-9	20-25



Xylene (ksylen)	1330-20-7	215-535-7	15-20
-----------------	-----------	-----------	-------

## 7.10.2. Oleje gazowe (ropa naftowa)

### 1. Nazwa i inne identyfikatory

<b>Nazwa IUPAC lub inna międzynarodowa nazwa chemiczna</b>	Gas oils (petroleum), heavy atmospheric
--	---

Źródło

<b>Identyfikacja lub opis pochodzenia produktu</b>	Ropa naftowa
--	--------------

Proces

<b>Opis procesu rafineryjnego</b>	<b>Destylacja atmosferyczna</b>
<b>Liczba atomów węgla</b>	C7–C35
<b>Temperatura wrzenia lub wartości graniczne</b>	121 °C do 510 °C
<b>Inne właściwości fizyczne, np. lepkość</b>	20 mm <sup>2</sup> /s w 40 °C (lepkość)
<b>Numer WE</b> <b>Numer CAS</b> <b>Nazwa WE/nazwa CAS</b> <b>Opis WE/opis CAS</b>	272-184-2 68783-08-4 Gas oils (petroleum), heavy atmospheric Złożona mieszanina węglowodorów otrzymywana w wyniku destylacji ropy naftowej. Składa się z węglowodorów o liczbie atomów węgla głównie od C7 do C35. Jej temperatura wrzenia wynosi od ok. 121°C do 510°C (250°F do 950°F).

### 2. Skład chemiczny

Brak informacji.

## 7.11. Enzymy

Przestawiono dwa przykłady wykorzystania wytycznych dla szczególnych substancji UVCB z rozdziału 4.3.2.3 dla koncentratów enzymatycznych: subtylizyny (identyfikowanej przy użyciu nomenklatury IUBMB + innych składników) oraz  $\alpha$ -amylazy (identyfikowanej przy użyciu nomenklatury IUBMB + organizmu wytwarzającego).

### 7.11.1. Subtylizyna

Białko enzymatyczne	Subtylizyna
<b>numeru IUBMB</b>	3.4.21.62
<b>Nazwa nadana przez IUBMB</b> (nazwa systematyczna, nazwa enzymu, synonimy)	Subtilisin; alcalase; alcalase 0.6L; alcalase 2.5L; ALK- enzyme; bacillopeptidase A; bacillopeptidase B; Bacillus subtilis alkaline proteinase biopraxe; biopraxe AL 15; biopraxe APL 30; colistinase; (zob. również uwagi); subtilisin J; subtilisin S41; subtilisin Sendai; subtilisin GX; subtilisin E; itd.
<b>Uwagi podane przez IUBMB</b>	Subtylizyna jest endopeptydazą serynową, przykładem typowym <a href="#">rodziny S8 peptydaz</a> . Nie zawiera reszt cysteinowych (choć takie występują w enzymach homologicznych). Warianty obejmują subtylizynę BPN' (także subtylizynę B, subtylopeptydazę B, subtylopeptydazę C, Nagarse, proteinazę Nagarse, subtylizynę Novo, proteinazę bakteryjną Novo) oraz subtylizynę Carlsberg (subtylizynę A, subtylopeptydazę A, alkalazę Novo). Poprzednio oznaczona jako EC 3.4.4.16 i ujęta w EC 3.4.21.14. Podobne enzymy wytwarzane są przez różne szczepy <i>Bacillus subtilis</i> i inne gatunki <i>Bacillus</i> [1,3].
<b>Reakcja</b>	Hydroliza białek o szerokiej selektywności w kierunku wiązań peptydowych i z preferencją do dużych reszt bez ładunku w P1. Hydrolizuje amidy peptydowe
<b>Typ reakcji</b>	Hydrolazy; Działa na wiązania peptydowe (peptydazy); Serine endopeptidases (endopeptydazy serynowe)

<b>Numer WE</b>	232-752-2
<b>Nazwa WE</b>	Subtylizyna
<b>Numer CAS</b>	9014-01-1
<b>Nazwa CAS</b>	Subtylizyna
<b>Stężenie białka enzymatycznego</b>	26%
<b>Inne składniki</b>	
Inne białka, peptydy i aminokwasy	39%
Węglowodany	11%
Lipidy	1%
Sole nieorganiczne	23%
<b>Dodatkowe parametry</b>	
<b>Substraty i produkty</b>	białka lub oligopeptydy, woda peptydy

### 7.11.2. $\alpha$ -amylaza

<b>Białko enzymatyczne</b>	<b><math>\alpha</math>-amylaza</b>
<b>numeru IUBMB</b>	3.2.1.1
<b>Nazwa nadana przez IUBMB</b> (nazwa systematyczna, nazwa enzymu, synonimy)	1,4- $\alpha$ -D-glucan glucanohydrolase; glycogenase; $\alpha$ -amylase; alpha-amylase; endoamylase; Taka-amylase A

<b>uwag podanych przez IUBMB</b>	Działa na skrobię, glikogen i pokrewne polisacharydy i oligosacharydy w sposób losowy; grupy redukujące są uwalniane w konfiguracji $\alpha$ . Termin „ $\alpha$ ” odnosi się do początkowej konfiguracji uwalnianej wolnej grupy cukrowej, a nie do konfiguracji hydrolizowanego wiązania.
<b>Reakcja</b>	Endohydroliza wiązań 1,4- $\alpha$ -D-glukozydowych w polisacharydach zawierających co najmniej trzy 1,4- $\alpha$ -powiązane jednostki D-glukozy
<b>Typ reakcji</b>	hydrolazy; glikozydazy; glikozydazy, tj. enzymy hydrolizujące związki O- i S-glikozydowe
<b>Numer WE</b>	232-565-6
<b>Nazwa WE</b>	Amylase, $\alpha$ -
<b>Numer CAS</b>	9000-90-2
<b>Powiązane numery CAS</b>	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (wszystkie anulowane)
<b>Nazwa CAS</b>	Amylase, $\alpha$ -
<b>Stężenie białka enzymatycznego</b>	37%
<b>Inne składniki</b>	
Inne białka, peptydy i aminokwasy	30%
Węglowodany	19%
Sole nieorganiczne	14%
<b>Dodatkowe parametry</b>	
<b>Substraty i produkty</b>	skrobia; glikogen; woda; polisacharyd; oligosacharyd;

## Załącznik I – Materiały pomocnicze

Niniejszy załącznik zawiera wykaz stron internetowych, baz danych oraz podręczników, które można wykorzystać do wyszukiwania stosownych nazw IUPAC, CAS oraz WE, numerów CAS i WE, wzorów cząsteczkowych oraz strukturalnych, w tym zapisu SMILES, oraz innych parametrów wymaganych do identyfikacji substancji. Nie uwzględnia on komercyjnych baz danych i materiałów.

Informacje ogólne		
Parametr identyfikacyjny substancji	Źródło	Opis źródła
U.S. Department of Health and Human Services	<a href="https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/">https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/</a>	Zbiór baz danych oraz narzędzi ułatwiających użytkownikom wyszukiwanie informacji chemicznych
Perkin Elmer Informatics	<a href="https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice">https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice</a>	Nieodpłatna baza danych zawierająca struktury chemiczne, właściwości fizyczne oraz hiperłącza do stosownych informacji
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	<a href="https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/">https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/</a>	Oprogramowanie chemiczne; Accord Alphabetical Product Listing

<b>Nazwa i inne identyfikatory</b>		
<b>Parametr identyfikacyjny substancji</b>	<b>Źródło</b>	<b>Opis źródła</b>
Nazwa IUPAC	<a href="https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/">https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/</a>	Oficjalna strona internetowa IUPAC
	<a href="https://iupac.qmul.ac.uk/">https://iupac.qmul.ac.uk/</a>	Nazewnictwo chemiczne oraz zalecenia IUPAC (pod patronatem IUPAC)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Najważniejsze publikacje IUPAC poświęcone nazewnictwu, aktualizacja spodziewana w 2006 r.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Najważniejsze publikacje IUPAC poświęcone nazewnictwu, aktualizacja spodziewana w 2006 r.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Najważniejsze publikacje IUPAC poświęcone nazewnictwu, aktualizacja spodziewana w lipcu 2005 r.
Nazwa IUPAC	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Najważniejsze publikacje IUPAC poświęcone nazewnictwu
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Tom wprowadzający poświęcony wszystkim rodzajom związków

Nazwa IUPAC	<a href="http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/">http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/</a>	Komercyjny program komputerowy służący do nazywania substancji, który może być bardzo pomocny w nazywaniu umiarkowanie złożonych struktur. Dostępny bezpłatny program dla małych cząsteczek (rekomendowany przez IUPAC).
	<a href="http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature">http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature</a>	Nomenklatura IUPAC chemii organicznej (rekomendowane przez IUPAC)
	<a href="http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm">http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm</a>	Kompletny wykaz akceptowanych zwyczajowych i półsystematycznych nazw źródłowych związków organicznych
	<a href="http://www.chemexper.com/">http://www.chemexper.com/</a>	Celem ChemExper Chemical Directory jest stworzenie wspólnej i dostępnej przez Internet nieodpłatnej bazy substancji chemicznych. W bazie tej mieści się wykaz substancji chemicznych wraz z właściwościami fizycznymi. Informacje o substancji chemicznej można przedkładać oraz wyszukać za pomocą przeglądarki internetowej
Nazewnictwo IUBMB	<a href="https://iubmb.qmul.ac.uk/">https://iubmb.qmul.ac.uk/</a>	Baza nomenklatury biochemicznej IUBMB (pod patronatem IUBMB)
Inne nazwy	<a href="http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name">http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name</a>	Nazwy ogólne w Colour Index (Indeksie Barw), Colour Index International, czwarte wydanie internetowe
	<a href="https://incipedia.personalcarecouncil.org/">https://incipedia.personalcarecouncil.org/</a>	INCI (Międzynarodowe Nazewnictwo Składników Kosmetycznych), oficjalna strona internetowa Rady ds. produktów higieny osobistej
	<a href="https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges">https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges</a>	US EPA Substancje zawierające łańcuchy węglowe o zróżnicowanej długości (zakresy alkilowe z wykorzystaniem zapisu CX-Y)

Inne identyfikatory	<a href="https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en">https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en</a>	Normy CE, oficjalna strona Europejskiego Komitetu Normalizacyjnego
Numer WE	<a href="https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory">https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory</a>	Wykaz WE: wyszukiwanie w ramach EINECS, ELINCS, NLP i załącznika I do 67/548/EWG
Numer CAS	<a href="http://www.cas.org">http://www.cas.org</a>	Oficjalna strona internetowa serwisu rejestracyjnego CAS
	<a href="http://www.chemistry.org">http://www.chemistry.org</a>	Oficjalna strona internetowa Amerykańskiego Towarzystwa Chemicznego

### Wzór cząsteczkowy i strukturalny

Parametr identyfikacyjny substancji	Źródło	Opis źródła
SMILES	<a href="http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html">http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html</a>	Bezpłatny generator SMILES
Masa cząsteczkowa i SMILES	<a href="http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html">http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html</a>	Nieodpłatny program ACD/Chemsketch (dostępny również w wersji komercyjnej)
Niektóre parametry fizykochemiczne	<a href="https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface">https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface</a>	Pakiet EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ jest pakietem działającym w środowisku Windows®, który zawiera modele oceny właściwości fizycznych/chemicznych oraz losu środowiskowego opracowane przez EPA Office of Pollution Prevention and Toxics oraz Syracuse Research Corporation (SRC).
Dodatkowe wsparcie dotyczące określonych substancji	<a href="#">Pytania i odpowiedzi - ECHA</a> <a href="#">Wsparcie dla konkretnej branży przy identyfikacji substancji - ECHA</a>	Wsparcie w zakresie nazewnictwa i charakterystyki określonych substancji jest dostępne na stronie internetowej ECHA oraz w pytaniach i odpowiedziach.



## Załącznik II – Wytyczne techniczne dotyczące poszczególnych parametrów identyfikacyjnych substancji

Informacje w niniejszym załączniku są przeznaczone dla tych użytkowników poradnika, którzy nie znają zasad technicznych nomenklatury, stosowania różnych numerów rejestracyjnych, zapisu informacji molekularnej i strukturalnej, danych spektralnych itd.

Dodatek zawiera wprowadzenie ogólne i streszczenie podstawowych zasad oraz odsyła użytkownika tekstu do źródeł oryginalnych w celu uzyskania pełnej informacji.

Niniejszy przegląd to wersja uproszczona, niepełna i niewyczerpująca, która nie jest wystarczająco szczegółowa dla profesjonalistów. W żadnym przypadku nie należy uznawać niniejszego dodatku za równoważny oficjalnemu tekstowi źródłowemu.

### 1 Nazwa/nazwy według terminologii IUPAC lub innej nomenklatury międzynarodowej

Rejestracja substancji wymaga podania nazwy IUPAC w języku angielskim lub innej dobrze zdefiniowanej, uznawanej międzynarodowo nazwy substancji.

Nazwę IUPAC tworzy się w oparciu o międzynarodową standardową nomenklaturę chemiczną ustaloną przez międzynarodową organizację IUPAC – Międzynarodową Unię Chemii Czystej i Stosowanej (International Union of Pure and Applied Chemistry) (odpowiednie odnośniki znajdują się w Załączniku 1). Nomenklatura IUPAC to usystematyzowany system nazywania substancji chemicznych, zarówno organicznych, jak i nieorganicznych. W terminologii stosowanej przez IUPAC do opisywania rodzaju i pozycji grup funkcyjnych w substancji służą przedrostki, przyrostki oraz wrostki.

**penta-1,3-dien-1-ol**, w tym przykładzie:

przedrostkiem jest **penta-1,3-**

wrostkiem jest **-di**

a przyrostkiem **-ol**

**en-** to rdzeń nazwy, nazwa podstawowa.

Opracowanie zasad trwało kilka lat i ulegają one ciągłej zmianie ze względu na nowe elementy molekularnej różnorodności i ewentualne wykryte sprzeczności i niejasności. Zasady opracowane przez IUPAC można stosować tylko do substancji dobrze zdefiniowanych.

Poniżej znajdują się pewne ogólne wytyczne dotyczące struktury nazwy IUPAC. Szczegółowe wskazówki znajdują się w rozdziale 4 niniejszego poradnika.

#### 1.1 Substancja organiczna

Krok 1 Ustalić liczbę atomów węgla w najdłuższym ciągłym łańcuchu węglowym. Liczba ta określa przedrostek, pierwszą część rdzenia:

Liczba atomów węgla	Rdzeń
1	meth-
2	eth-
3	prop-
4	but-
5	pent-
6	hex-
7	hept-
8	oct-
N	....

Krok 2 Określić nasycenie łańcucha; nasycenie łańcucha decyduje o przyrostku, czyli drugim elemencie rdzenia:

Nasycenie	Wiązania	Przyrostek
Nienasycone	Podwójne Potrójne	-ene -yn
Nasycone	-	-ane

W przypadku wielu wiązań podwójnych lub potrójnych liczbę wiązań określa cząstka „mono”, „di”, „tri” itd. stawiana przed przyrostkiem:

Penten z 2 podwójnymi wiązaniami ma angielską nazwę: pentadiene

Krok 3 Do rdzenia dołączyć przedrostek, przyrostek oraz inne dodatkowe elementy

Uwaga: W rdzeniu można również stosować uznawane przez IUPAC nazwy zwyczajowe i półsystematyczne:

Benzene, toluene, itp.

Krok 4 Posłużyć się następującą tabelą:

- Zidentyfikować podstawniki lub grupy funkcyjne: grupy węglowe lub niewęglowe przyłączone do łańcucha atomów węgla zidentyfikowanego w punkcie 1;
- Określić kolejność ważności podstawników lub grup funkcyjnych;
- Dodać przyrostek dla pierwszego podstawnika/grupy funkcyjnej oraz kolejnych zgodnie z kolejnością ważności;
- Dodać przedrostek dla innych podstawników i grup funkcyjnych w kolejności

alfabetycznej.

Ważność	Grupa	Wzór	Przyrostek	Przedrostek
1	Kwas karboksylowy	R-COOH	-oic acid	Carboxy
2	Ester	R-CO-O-R	-oate	-
3	Amid	R-CONH <sub>2</sub>	-amide	Carbamoyl
4	Cyjanek	R-CN	-nitrile	Cyano
5	Aldehyd	R-CHO	-al	Oxo
6	Keton	R-CO-R	-one	Oxo
7	Alkohol	R-OH	-ol	Hydroxyl
8	Tiol	R-SH	-thiol	Sulfanyl
9	Amina	R-NH <sub>2</sub>	-amine	Amino

## 1.2 Substancja nieorganiczna

### 1.2.1 Nazywanie prostych substancji nieorganicznych

Nazywanie substancji nieorganicznych opiera się na katalogu zasad (IUPAC Red Book, zob. odnośnik w pkt 7.1), z których najważniejsze zasady dla języka angielskiego przedstawiono poniżej:

- Nazwę anionów jednoatomowych tworzy się za pomocą przyrostka „-ide”:

**O<sup>2-</sup> to „oxide”**

- Nazwę prostych związków jonowych tworzy się przez podanie kationu, a następnie anionu. Dla kationów o ładunku > 1 wartość ładunku zapisuje się za pomocą cyfr rzymskich w nawiasach zaraz po nazwie pierwiastka:

**Cu<sup>2+</sup> to „copper(II)”**

- Nazwę wodnianów tworzy się tak jak nazwę związku jonowego, po czym dodaje się przedrostek numeryczny i cząstkę „-hydrate”. Przedrostki numeryczne to: mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, octa-, nona-, deca-:

**CuSO<sub>4</sub> · 5H<sub>2</sub>O to „copper(II) sulphate pentahydrate”**

Uwaga: na potrzeby rejestracji wodziany oraz, w stosownych przypadkach, forma bezwodna danej soli metalu uznawane są za „substancje takie same”.

- Nazwę nieorganicznych związków cząsteczkowych tworzy się poprzez umieszczenie przedrostka (zob. wodziany) przed każdym pierwiastkiem. Pierwiastek bardziej elektroujemny umieszcza się na końcu, z przyrostkiem „-ide”:

**CO<sub>2</sub> to „carbon dioxide”, a CCl<sub>4</sub> to „carbon tetrachloride”.**

- Nazwę kwasu tworzy się od nazwy anionu powstającego podczas rozpuszczania kwasu w wodzie. Istnieje kilka możliwości:

Jeśli po rozpuszczeniu w wodzie kwas dysocjuje na anion o nazwie „x-ide”, to nazwa kwasu to „hydro-„x”-ic acid”:

**„hydrochloric acid” tworzy anion chlorkowy – „chloride anion”.**

Jeśli po rozpuszczeniu w wodzie kwas dysocjuje na anion o nazwie „x-ate”, to nazwa kwasu to „x-ic acid”:

**„chloric acid” dysocjuje w wodzie na aniony „chlorate” (chlorany).**

Jeśli po rozpuszczeniu w wodzie kwas dysocjuje na anion o nazwie „x-ite”, to nazwa kwasu to „x-ous acid”:

**„chlorous acid” dysocjuje na aniony „chlorite” (chloryny).**

### 1.2.2 Nadawanie nazw fazom mineralnym

Złożone fazy mineralne zawierają na ogół połączenie trzech lub więcej pierwiastków. Większość pierwiastków obecnych w substancji jest połączona z tlenem. Aby uprościć identyfikację, mineralodzy z reguły uznają związki złożone za zbudowane z tlenków zasadowych lub kwasowych. Na przykład, krzemiany zwyczajowo przedstawia się albo jako sumę szeregu tlenków albo jako sole kwasu krzemowego lub jako kwasy glinokrzemowe. I tak, ortokrzemian wapnia można przedstawić jako  $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ , mieszaninę odrębnych tlenków, albo jako  $\text{Ca}_2\text{SiO}_4$ , sól wapniową kwasu ortokrzemowego  $\text{H}_4\text{SiO}_4$ . To samo dotyczy innych złożonych tlenków mineralnych – w ich nazwie przed każdym tlenkiem stawiany jest przedrostek (np.  $\text{Ca}_3\text{SiO}_5$  = Tricalcium silicate =  $3\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ ). W niektórych sektorach przemysłu w celu skrócenia wzoru związku chemicznego wprowadzono dalsze uproszczenia. Na przykład, wzór portlandzkiego klinkieru cementowego,  $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$  (ortokrzemian wapnia lub krzemian diwapnia) został skrócony do  $\text{C}_2\text{S}$ , gdzie C = CaO, a S =  $\text{SiO}_2$ . W przypadku nazywania lub identyfikacji złożonych faz mineralnych zaleca się lekturę standardowych mineralogicznych lub przemysłowych tekstów branżowych.

### 1.3 Produkty naturalne oraz składniki pokrewne

Dla produktów naturalnych IUPAC opracowała szereg zasad nadawania nazw systematycznych. Oznacza to, iż nazwy substancji pozyskiwanych ze źródeł naturalnych tworzone są w miarę możliwości na podstawie nazwy rodziny, rodzaju lub gatunku organizmu, z którego pozyskano te substancje:

**Dla hipotetycznego białka *Hypothecalia Exemplare* nazwy tworzy się w oparciu o „hypothecalia” lub „exemplare”, na przykład „Horse Exemplare”**

Jeśli to możliwe, nazwa powinna odzwierciedlać znaną lub prawdopodobną budowę produktu pochodzenia naturalnego. W stosownych przypadkach za podstawę nazwy substancji, która występuje w szeregu rodzin pokrewnych, może posłużyć klasa lub rząd. Nazwy produktów pochodzenia naturalnego o nieznannej strukturze nie powinny zawierać przedrostków, przyrostków lub wrostków stosowanych w nomenklaturze organicznej:

**„Condensation product of Horse expemplare, Valarine added to the N-terminus” (produkt kondensacji Horse expemplare, walaryna dodana do końca N)**

Wiele substancji występujących w przyrodzie to substancje należące do dobrze zdefiniowanych klas strukturalnych, które można opisać za pomocą zbioru ściśle powiązanych ze sobą struktur macierzystych, tzn. każdą z nich można wyprowadzić ze struktury podstawowej. Nazwę systematyczną dla tych substancji występujących w

przyrodzie oraz ich pochodnych można tworzyć na podstawie stosownej nazwy podstawowej struktury macierzystej:

**Do znanych struktur macierzystych należą: alkaloidy, sterydy, terpenoidy oraz witaminy**

Podstawowa struktura macierzysta powinna odzwierciedlać podstawowy szkielet, który jest wspólny dla większości substancji w danej klasie. Substancje występujące w przyrodzie lub pochodne są nazywane w oparciu o strukturę macierzystą poprzez dodanie przedrostków, przyrostków oraz wrostków wskazujących na:

- modyfikacje struktury szkieletowej
- zmianę atomu struktury szkieletowej
- zmiany w stanie uwodornienia, na które wskazuje nazwa struktury macierzystej
- atomy lub grupy zastępujące atomy wodoru struktury macierzystej
- konfiguracje, na które nie wskazuje nazwa struktury macierzystej, lub zmienione w stosunku do tych, na które wskazuje nazwa

**Substancja „Thiamin chloride” (chlorek tiaminy) jest znana również pod nazwą „vitamin B<sub>1</sub>” (witamina B<sub>1</sub>)**

W celu uzyskania bardziej szczegółowych informacji dotyczących systematycznego nazewnictwa produktów występujących w przyrodzie oraz substancji pokrewnych należy skontaktować się z IUPAC (zob. załącznik 1).

#### 1.4 Brak możliwości utworzenia nazwy IUPAC

Jeśli utworzenie nazwy pewnych substancji w oparciu o zasady IUPAC nie jest możliwe, to można zastosować inną uznaną międzynarodową nomenklaturę właściwą dla tych substancji, taką jak:

- nazwy mineralogiczne minerałów i rud;
- Substancje ropopochodne
- nazwy rodzajowe wg Colour Index (Indeksu Barw)<sup>3</sup>;
- nazwy dodatków do olejów;
- nazwy wg INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients)<sup>4</sup>;
- nazwy substancji powierzchniowo czynnych wg SDA (Soap and Detergent Association)<sup>5</sup>;
- itp.

## 2 Inne nazwy

W ramach rejestracji na podstawie rozporządzenia REACH warto przedłożyć, we wszystkich językach, wszystkie stosowne nazwy lub publiczne identyfikatory, pod którymi dana substancja jest lub będzie wprowadzana na rynek UE (np. nazwy handlowe). Dotyczy to nazw handlowych, synonimów, skrótów, itd.

- <http://www.colour-index.com>, Colour Index International, wydanie czwarte online
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, oficjalna strona internetowa Personal Care Products Council
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, oficjalna strona internetowa American Cleaning Institute (ACI).

### 3 Numer WE z wykazów EINECS, ELINCS lub NLP (wykaz WE)

Numer WE, tj. numer EINECS, ELINCS lub NLP, jest oficjalnym numerem substancji obowiązującym w Unii Europejskiej. Numer WE można uzyskać za pośrednictwem oficjalnych publikacji EINECS, ELINCS, NLP oraz Europejskiej Agencji Chemikaliów.

Numer WE składa się z 7 cyfr w układzie  $x_1x_2x_3-x_4x_5x_6-x_7$ . Pierwsza cyfra określa wykaz, w którym ujęta jest dana substancja:

Wykaz	Pierwsza cyfra w numerze WE
EINECS	2 lub 3
ELINCS	4
NLP	5

### 4 Nazwa CAS i numer CAS

Chemical Abstracts Service (CAS), oddział Amerykańskiego Towarzystwa Chemicznego (ACS), przypisuje nazwę i numer CAS każdej substancji chemicznej wprowadzanej do bazy rejestru CAS. Nazwy i numery są nadawane kolejno poszczególnym substancjom identyfikowanym przez naukowców CAS. Każda substancja zarejestrowana w Chemical Abstracts Service ma nazwę zgodną z nomenklaturą CAS. Nazwa ta jest zatwierdzana przez ACS po rekomendacji komitetu ACS ds. nomenklatury (zob. odnośniki w załączniku 1).

#### 4.1 Nazwa CAS

Nazwa CAS to nazwa nadana przez Chemical Abstract Service, która nie jest tożsama z nazwą IUPAC. Nomenklatura CAS jest tworzona w oparciu o ograniczony zbiór kryteriów, które nie zawsze są wystarczające do utworzenia nazwy substancji. W celu uzyskania właściwej nazwy CAS zaleca się zatem skontaktowanie z Chemical Abstract Service.

Podstawowe zasady nomenklatury są następujące:

- „Główna” część substancji pełni rolę nagłówka lub rdzenia.
- Podstawniki wymieniane są po nagłówku/rdzeniu, co określane jest jako kolejność odwrócona.
- W przypadku większej liczby podstawników wymieniane są one w kolejności alfabetycznej (łącznie z przedrostkami):

**„o-Xylen-3-ol to Benzene, 1,2-dimethyl, 3-hydroxy,”**

#### 4.2 Numer CAS

Numery CAS można uzyskać od Chemical Abstract Service.

Numer CAS składa się z co najmniej 5 cyfr występujących w trzech grupach oddzielonych myślnikami. Druga grupa zawsze składa się z 2 cyfr, trzecia z 1 cyfry:

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

Numer CAS można sprawdzić na podstawie następującej „sumy kontrolnej”:

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

Numer CAS musi być prawidłowy zgodnie z sumą kontrolną.

## 5 Inne kody identyfikacyjne

Można również podać inne uznawane kody identyfikacji, takie jak:

- numer celny;
- numer ONZ;
- numer wg Colour Index (Indeksu Barw);
- numer barwnika;

## 6 Wzór cząsteczkowy, wzór strukturalny oraz SMILES

### 6.1 Wzór cząsteczkowy

We wzorze cząsteczkowym identyfikuje się każdy rodzaj pierwiastka za pomocą jego symbolu chemicznego oraz liczbę atomów każdego takiego pierwiastka w pojedynczej cząsteczce substancji.

Wzory cząsteczkowe należy podawać zgodnie z (tradycyjnym) systemem Hilla oraz, dodatkowo, zgodnie z systemem CAS, jeżeli te dwa wzory się różnią.

Wzór Hilla można utworzyć w sposób następujący:

1. Zidentyfikować pierwiastki i spisać ich symbole chemiczne;
2. Ustawić pierwiastki we właściwej kolejności:

- a. Substancje zawierające węgiel:

Każdy pierwiastek zaznaczany jest za pomocą symbolu chemicznego w następującej kolejności:

- (1) węgiel;
- (2) wodór;
- (3) symbole pozostałych pierwiastków w kolejności alfabetycznej:

**Pentan: C5H12**

**Penten: C5H10**

**Pentanol: C5H12O**

- b. Substancje niezawierające węgla:

Pierwiastki podawane są w kolejności alfabetycznej:

**Kwas chlorowodorowy: ClH**

3. Dla każdego pierwiastka, którego liczba atomów wynosi > 1, podać liczbę atomów w indeksie dolnym przy symbolu chemicznym;

4. Informacje, które nie dotyczą głównej struktury, należy podać na końcu wzoru cząsteczkowego po kropce lub przecinku:

**Benzoesan sodu to „C7H6O2, sodium salt”**

### Dwuwodzian siarczynu miedzi to $\text{CuO}_4\text{S}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Jeśli dla danej substancji nie można zastosować metody Hilla, to wzór cząsteczkowy substancji należy podać w inny sposób, na przykład w postaci wzoru empirycznego, uproszczonego opisu atomów i ich proporcji lub wzoru podanego przez Chemical Abstract Service (zob. rozdział 4 niniejszego poradnika).

## 6.2 Wzór strukturalny i opis struktury krystalicznej

Wzór strukturalny jest potrzebny, aby pokazać rozmieszczenie cząsteczek w substancji i związków pomiędzy nimi. Wzór strukturalny powinien pokazywać umiejscowienie atomów, jonów lub grup oraz rodzaj łączących je wiązań. Obejmuje to również izomerię, tj. cis/trans, chiralność, enancjomery itd.

Wzór strukturalny można podać w różnych formatach: w postaci wzoru cząsteczkowego lub w formie schematu strukturalnego.

- *Wzór strukturalny w postaci wzoru cząsteczkowego*

1. Zapisać wszystkie pierwiastki według grup i w kolejności występowania:

**n-pentan:  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$**

2. Podstawniki zapisuje się w nawiasach, bezpośrednio po atomie, z którym są połączone:

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

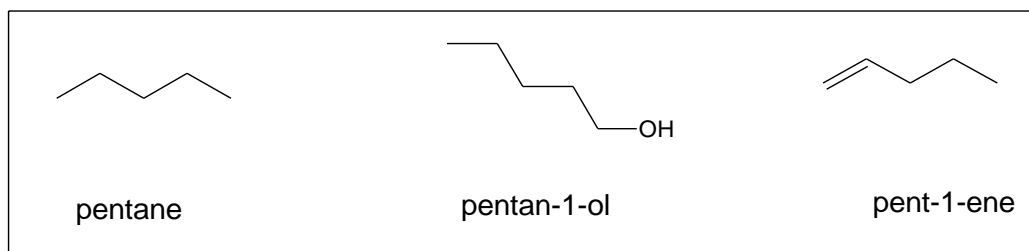
3. W przypadku wiązań podwójnych lub potrójnych wskazać ich umiejscowienie pomiędzy powiązаныmi grupami pierwiastków:

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

*Wzór strukturalny w postaci schematu strukturalnego*

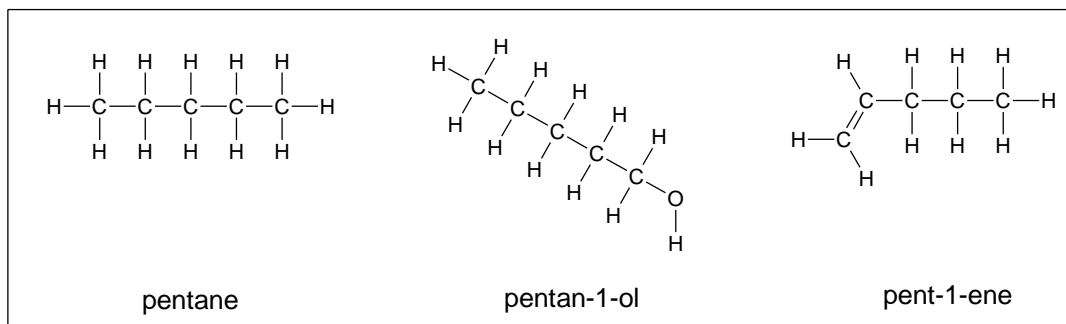
Schemat strukturalny pokazuje pierwiastki oraz wiązania między nimi w postaci dwu- lub trójwymiarowego rysunku. Istnieje kilka metod:

1. Przedstawienie wszystkich atomów innych niż węgiel oraz wodoru przyłączonego do atomów innych niż węgiel.

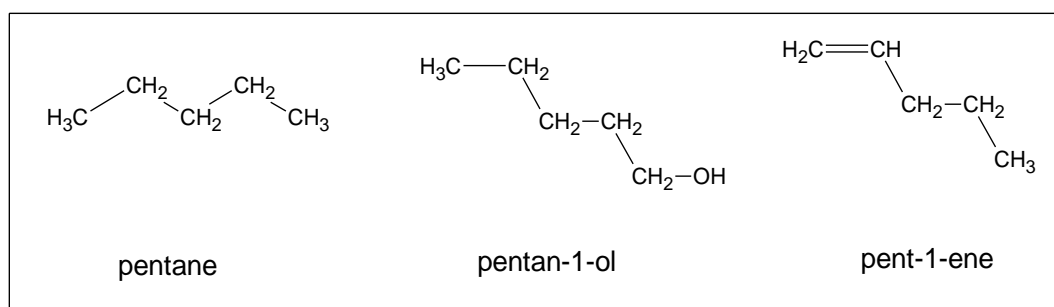


2. Przedstawienie wszystkich pierwiastków za pomocą ich symboli





3. Przedstawienie węgla i wodoru w postaci grup (np. CH<sub>3</sub>), wszystkich pierwiastków innych niż węgiel oraz wszystkich wodorów nieprzyłączonych do węgla.

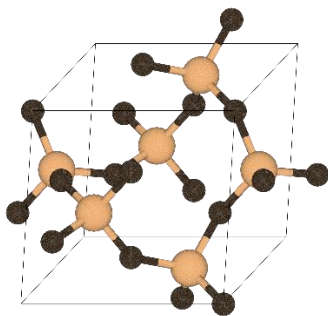


- Wzór strukturalny w postaci wzoru cząsteczkowego

1. Należy podać wzór cząsteczkowy:

**SiO<sub>2</sub>**

2. Należy podać strukturę krystaliczną dla substancji



3. Należy podać nazwę mineralogiczną i/lub krystalograficzną na podstawie systemu krystalicznego<sup>32</sup> i klasy krystalicznej:

*α*-kwarc [*β*-kwarc] / **system krystaliczny:** trygonalny - heksagonalny, **klasa krystaliczna:** trygonalno-trapezoidalny 3 2

<sup>32</sup> sześcienny/tetragonalny/ortomorficzny/romboedryczny (lub trygonalny)/sześciokątny/monokliniczny/trójkątny

### 6.3 Zapis SMILES

SMILES to akronim od „Simplified Molecular Input Line Entry Specification” (uproszczony zapis struktury cząsteczek w postaci liniowej informacji tekstowej).<sup>33</sup> Jest to system zapisu chemicznego stosowany do przedstawiania struktury cząsteczkowej za pomocą liniowego ciągu symboli. W przypadku standardowego systemu SMILES nazwa cząsteczki jest synonimiczna z jej strukturą: pokazuje w sposób pośredni dwuwymiarowy rysunek struktury cząsteczkowej. Ponieważ dwuwymiarową strukturę chemiczną można narysować na wiele sposobów, dla jednej cząsteczki istnieje kilka poprawnych zapisów SMILES. Podstawą SMILES jest przedstawienie modelu wartościowości cząsteczki, przez co system ten nie jest odpowiedni do opisu cząsteczek, których nie można wyrazić za pomocą modelu wartościowości.

Zapisy SMILES składają się z atomów wyrażonych za pomocą symboli pierwiastkowych, wiązań, nawiasów służących do wskazania rozgałęzienia oraz cyfr ukazujących strukturę cykliczną. Zapis SMILES przedstawia strukturę cząsteczkową w formie graficznej z opcjonalnym wskazaniem chiralności. Zapis SMILES opisujący strukturę jedynie za pomocą wiązań i atomów to SMILES kanoniczny, a zapis SMILES uwzględniający izotopowość i chiralność to SMILES izomeryczny.

Zapis SMILES tworzy się w oparciu o kilka podstawowych zasad:

1. Atomy wyrażane są za pomocą ich symboli;
2. Każdy atom, poza wodorem, jest określany osobno;
  - a. Pierwiastki z „podzbioru organicznego” – B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br oraz I – zapisuje się bez nawiasów i bez przyłączonych atomów H, o ile ich liczba odpowiada najniższej wartościowości głównej (lub wartościowościom) spójnej z liczbą wiązań:

Pierwiastek w „podzbiorze organicznym”	„Najniższa wartościowość główna”
B	3
C	4
N	3 i 5
O	2
P	3 i 5
S	2, 4 i 6
F	1
Cl	1
Br	1

<sup>33</sup> 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.

I	1
---	---

- b. Pierwiastki w „podzbiorze organicznym” zapisuje się z nawiasami, jeśli liczba atomów H nie odpowiada najniższej wartościowości głównej:

**kation amonowy to NH4+**

- c. Pierwiastki spoza „podzbioru organicznego” zapisuje się w nawiasach wraz ze wszystkimi przyłączonymi wodorami.

3. Atomy alifatyczne zapisuje się wielkimi literami; atomy aromatyczne małymi literami:

**benzen to c1ccccc1, a cykloheksan to C1CCCCC1**

4. Wodór zapisuje się tylko w następujących przypadkach:

- a. atom wodoru z ładunkiem, tj. proton, [H+];
- b. atomy wodoru połączone z innymi wodorami, tj. wodór cząsteczkowy, [H][H];
- c. atomy wodoru połączone z więcej niż jednym, innym atomem, np. atomy wodoru tworzące mostek wodorowy;
- d. izotopowe odmiany wodoru, np. deuter ([2H]);
- e. jeśli wodór jest połączony z atomem chiralnym.

5. Cztery podstawowe wiązania przedstawia się w sposób następujący:

Rodzaj wiązania	Zapis SMILES
Pojedyncze	- (nie musi być pokazane)
Podwójne	=
Potrójne	#
Aromatyczne	małe litery

6. Podstawniki przedstawia się poprzez umieszczenie ich w nawiasach zaraz za atomami, do których są przyłączone:

**2-metylobutan to CC(C)CC**

- a. Podstawniki umieszcza się zawsze bezpośrednio po odpowiednich atomach; nie można ich umieszczać zaraz za symbolem podwójnego lub potrójnego wiązania:

**kwasy pentanowe to CCCCC(=O)O**

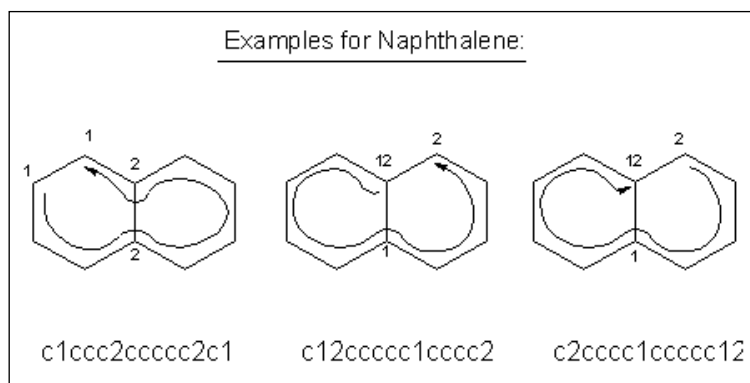
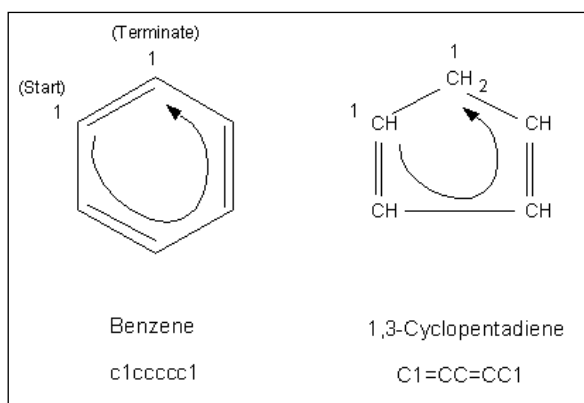
- b. Dozwolone jest umieszczanie podstawników w obrębie podstawników:

**2-(1-metyloetylo)butan to CC(C(C)C)CC**

7. Dla struktur pierścieniowych stosuje się cyfry od 1 do 9 w celu wskazania początkowego oraz końcowego atomu pierścienia.

- a. Ta sama cyfra służy do wskazania początkowego i końcowego atomu dla każdego pierścienia. Atom początkowy i końcowy muszą być ze

- sobą połączone.
- Cyfry zapisuje się zaraz za atomami wskazującymi pozycje początkowe i końcowe.
  - Atomowi początkowemu lub końcowemu mogą być przypisane dwie kolejne cyfry.



- Związki niepowiązane kowalencyjnie oznacza się jako odrębne struktury lub jony oddzielone kropką („.”). Sąsiadujące atomy oddzielone kropką nie są ze sobą połączone bezpośrednim wiązaniem (np. występuje tu wiązanie Van der Waalsa):

**Chlorowodorek aminopropenu to C=CC(N).HCl**

- Konfigurację izomeryczną wyraża się za pomocą ukośników „\” oraz „/”. Symbole te oznaczają względną kierunkowość pomiędzy dwoma wiązaniami izomerycznymi. (cis = „/ \”, trans = „/ /”). SMILES stosuje chiralność miejscową, co oznacza, że musi być w pełni określona:

**cis-1,2-dibromoeten to Br/C=C\Br**

**trans-1,2-dibromoeten to Br/C=C/Br**

- Enancjomery lub chiralność oznacza się za pomocą symbolu „@”. Symbol ten oznacza, że atomy sąsiadujące z atomem chiralnym wymienione są przeciwnie do ruchu wskazówek zegara. Symbol „@@” oznacza, że atomy wymieniono zgodnie z ruchem wskazówek zegara. Atom chiralny oraz „@” umieszcza się w nawiasach:

**Kwas 2-chloro-2-hydroksypropanowy**

**z określoną chiralnością to C[C@](Cl)(O)C(=O)O**

- Dane izotopowe określa się za pomocą liczby poprzedzającej symbol atomu, która równa jest całkowitej masie atomowej. Masę atomową zapisuje się wyłącznie w nawiasach:

### Węgiel-13 to [13C], a tlen-18 to [18O]

Zapis SMILES można ustalić za pomocą narzędzi – generatorów SMILES (zob. Załącznik 1).

## 7 Informacje dotyczące aktywności optycznej

Aktywność optyczna to właściwość substancji asymetrycznych polegająca na zdolności skręcania płaszczyzny światła spolaryzowanego. Substancje takie oraz ich lustrzane odbicia są znane jako enancjomery i posiadają jedno lub więcej centrów chiralności. Enancjomery różnią się od siebie układem geometrycznym, ale posiadają identyczne właściwości fizykochemiczne. Ponieważ każdy typ enancjomeru inaczej wpływa na światło spolaryzowane, aktywność optyczną można wykorzystać do zidentyfikowania, który enancjomer występuje w próbce, a tym samym do określenia czystości substancji. Wielkość skręcenia jest swoistą właściwością cząsteczki.

Skręcalność enancjomerów ma zawsze charakter przeciwny: cząsteczki polaryzują światło w takim samym stopniu, ale w przeciwnych kierunkach. Aktywność optyczna mieszaniny enancjomerów stanowi wskaźnik proporcji między dwoma enancjomerami. Mieszanina enancjomerów w proporcji 50:50 ma aktywność optyczną równą 0.

Zaobserwowana skręcalność zależy od stężenia, długości drogi optycznej, temperatury oraz długości fali źródła światła.

Aktywność optyczna stanowi więc parametr definiujący, który służy do identyfikacji substancji asymetrycznej. Jest to również jedyny parametr umożliwiający odróżnienie substancji od jej lustrzanego odbicia. W stosownych przypadkach należy zatem określić aktywność optyczną danej substancji.

Miernikiem aktywności optycznej jest skręcalność właściwa. Definiuje się ją jako obserwowaną skręcalność światła o długości fali 5896 angstromów przy długości drogi optycznej 1 dm i stężeniu próbki 1 g/ml. Skręcalność właściwa to zaobserwowana skręcalność podzielona przez długość drogi optycznej (dm) i pomnożona przez stężenie (g/ml).

Aktywność optyczną mierzy się za pomocą kilku różnych metod. Do najczęściej stosowanych należą:

- Skręcalność optyczna, gdzie mierzone jest skręcenie płaszczyzny polaryzacji wiązki światła przechodzącego przez próbkę
- Dichroizm kołowy, gdzie mierzona jest absorpcja w próbce światła spolaryzowanego kołowo w lewo i prawo.

Substancja skręcająca światło w prawo (zgodnie z ruchem wskazówek zegara) to substancja prawoskrętna, oznaczona znakiem „+”. Substancja skręcająca światło w lewo (przeciwnie do ruchu wskazówek zegara) to substancja lewoskrętna oznaczana znakiem „-”.

## 8 Masa cząsteczkowa lub zakres masy cząsteczkowej

Masa cząsteczkowa to masa cząsteczki substancji wyrażona w jednostkach masy atomowej (amu) lub jako masa molowa (g/mol). Masę cząsteczkową można obliczyć na podstawie wzoru cząsteczkowego substancji: jest to suma mas atomowych atomów tworzących cząsteczkę. W przypadku niektórych cząsteczek, takich jak niektóre białka lub nieokreślone mieszaniny reakcyjne, ustalenie pojedynczej masy cząsteczkowej jest niemożliwe. Można wtedy podać zakres masy cząsteczkowej.

Masę cząsteczkową substancji można określić za pomocą następujących metod:

- Do określenia mas cząsteczkowych substancji gazowych można zastosować prawo Avogadra, które mówi, że jednakowe objętości gazów zawierają w tej samej temperaturze i pod tym samym ciśnieniem jednakową liczbę cząsteczek.

$$PV = nRT = NkT$$

n = liczba moli

R = uniwersalna stała gazowa = 8,3145 J/mol K

N = liczba cząsteczek

k = stała Boltzmanna = 1,38066 x 10<sup>-23</sup> J/K = 8,617385 x 10<sup>-5</sup> eV/K

k = R/NA

NA = liczba Avogadra = 6,0221 x 10<sup>23</sup> /mol

- Masę cząsteczkową cieczy i ciał stałych można określić poprzez ustalenie ich wpływu na temperaturę topnienia, temperaturę wrzenia, prężność par lub ciśnienie osmotyczne niektórych rozpuszczalników;
- Spektrometria masowa, bardzo dokładna metoda pomiaru;
- Masy cząsteczkowe cząsteczek substancji złożonych o dużych masach cząsteczkowych, takich jak białka lub wirusy, można określić za pomocą pomiaru np. szybkości sedymentacji w ultrawirówce lub fotometrycznie przez pomiar intensywności światła rozproszonego;
- Dostępne są również narzędzia, za pomocą których można obliczyć masę cząsteczkową na podstawie schematu strukturalnego lub wzoru cząsteczkowego substancji (zob. Załącznik 1).

## 9 Skład substancji

Dla każdej substancji należy podać skład substancji jako kombinacji głównych składników, dodatków i zanieczyszczeń, zgodnie z zasadami i kryteriami opisanymi w rozdziale 4 niniejszego poradnika.

Każdy składnik, dodatek lub zanieczyszczenie należy odpowiednio zidentyfikować za pomocą:

- nazwy (IUPAC lub, jeśli nie jest dostępna, innej międzynarodowo uznawanej nazwy);
- numeru CAS (jeśli jest dostępny);
- numeru WE (jeśli jest dostępny).
- Wszystkie inne dostępne identyfikatory

Dla każdego składnika, grupy składników, dodatku lub zanieczyszczenia należy podać typowe stężenie procentowe w partiach handlowych (najlepiej wagowo lub objętościowo), jeśli to możliwe. Podane wartości powinny się sumować do 100%. Należy zawsze podać górne i dolne granice stężeń, takie jak zakres stężenia w substancji handlowej.

## 10 Dane spektralne

Dane spektralne służą do potwierdzenia struktury danej substancji jednoskładnikowej lub potwierdzenia, że dana mieszanina reakcyjna nie jest preparatem. Istnieje kilka metod spektralnych (UV, IR, NMR lub spektrometria masowa). Nie wszystkie nadają się do każdego rodzaju substancji. Niniejszy poradnik zawiera wskazówki dotyczące wykorzystywania odpowiednich danych spektralnych dla różnych typów substancji (ECB, 2004; ECB, 2005).

W przypadku niektórych dobrze znanych metod na samym widmie lub w załącznikach należy umieścić następujące informacje:

#### *Widmo UV-VIS*

- tożsamość substancji;
- rozpuszczalnik i stężenie;
- zakres;
- położenie (oraz wartości epsilon) głównych pików;
- działanie kwasu;
- działanie zasady.

#### *Widmo w podczerwieni (IR)*

- tożsamość substancji;
- medium;
- zakres;
- wyniki (wskazać główne maksima istotne dla identyfikacji substancji, np. interpretacja obszaru daktyloskopowego – „fingerprint”).

#### *Widmo NMR*

- tożsamość substancji;
- jądro i częstotliwość;
- rozpuszczalnik;
- w stosownych przypadkach wzorec wewnętrzny lub zewnętrzny;
- wyniki (wskazać sygnały istotne dla identyfikacji substancji oraz sygnały odpowiadające rozpuszczalnikowi oraz zanieczyszczeniom);
- dla widma  $^1\text{H}$  NMR należy podać krzywą całkowania;
- zwiększyć natężenie słabych pików NMR pionowo oraz rozciągnąć złożone układy pików.

#### *Widmo spektroskopii masowej (MS)*

- tożsamość substancji;
- napięcie przyspieszające;
- sposób wprowadzania (wprowadzenie bezpośrednio, przez GC itd.);
- sposób jonizacji (jonizacja elektronami, jonizacja chemiczna, desorpcja polem itd.);
- jon cząsteczkowy (M);
- fragmenty istotne dla identyfikacji substancji;
- wartości m/z lub przypisanie pików istotnych dla zidentyfikowania struktury;
- złożone układy pików należy rozszerzyć.

#### *Spektroskopia masowa dyfrakcji rentgenowskiej (XRD)*

- tożsamość substancji;
- napięcie;

- prąd;
- źródło promieniowania rentgenowskiego i wszelkie źródła bibliograficzne umożliwiające identyfikację faz krystalicznych obecnych w substancji;

W przypadku, gdy metoda XRD jest stosowana do identyfikacji i ilościowego oznaczania faz krystalicznych lub amorficznych obecnych w substancji, konieczne jest spełnienie co najmniej następujących wymagań:

- opis metod udoskonalania i zastosowanych wzorców wewnętrznych;
- wartość współczynnika odzwierciedlająca dopasowanie między modelowanym/referencyjnym wzorem dyfrakcyjnym;
- wzorzec pomiarowy oraz skala wartości współczynnika (np. 0-1 lub 0-100).

Można również wykorzystać inne międzynarodowo uznane metody, jeśli dane spektralne potwierdzają identyfikację substancji, np. jej strukturę wewnętrzną.

W celu zrozumienia lub interpretacji widma należy przestrzegać następujących zasad ogólnych:

- opisać przygotowanie próbki;
- odnotować istotne długości fal lub inne dane;
- przedstawić dodatkowe informacje, np. widma materiałów wyjściowych;
- podać zastosowany rozpuszczalnik lub inne istotne szczegóły jak określono powyżej dla niektórych metod;
- przedłożyć czytelne kopie widma (zamiast oryginałów) z zaznaczoną poprawnie skalą;
- podać informacje dotyczące zastosowanego stężenia substancji;
- zapewnić, by najwyższe piki odpowiadające substancjom osiągały poziom zbliżony do pełnego zakresu.

## 11 Wysokosprawna chromatografia cieczowa, chromatografia gazowa

W przypadku niektórych rodzajów substancji trzeba przedłożyć chromatogram w celu potwierdzenia składu. Właściwy chromatogram potwierdzi, na przykład, obecność zanieczyszczeń, dodatków oraz składników mieszaniny reakcyjnej. Dwie najlepiej znane metody separacji oraz identyfikacji mieszanin to chromatografia gazowa (GC) oraz wysokosprawna chromatografia cieczowa (HPLC). Te dwie metody oparte są na wzajemnym oddziaływaniu fazy ruchomej z fazą nieruchomą, co prowadzi do rozdzielania składników mieszaniny.

W przypadku chromatogramów GC/HPLC na samym chromatogramie lub w załącznikach należy umieścić następujące informacje (ECB, 2004; ECB, 2005):

### HPLC

- tożsamość substancji;
- parametry kolumny, takie jak średnica, wypełnienie, długość;
- temperatura, a także zakres temperatur, jeśli taki stosowano;
- skład fazy ruchomej i zakres, jeśli taki stosowano;
- zakres stężenia substancji;
- metoda wizualizacji, np. UV-VIS;
- wyniki (wskazać główne piki istotne dla identyfikacji substancji);

### GC

- tożsamość substancji;
- parametry kolumny, takie jak średnica, wypełnienie, długość;
- temperatura, a także zakres temperatur, jeśli taki stosowano;



- temperaturę wstrzyknięcia;
- gaz nośny oraz ciśnienie gazu nośnego;
- zakres stężenia substancji;
- metoda wizualizacji, np. MS;
- identyfikacja pików;
- wyniki (wskazać główne piki istotne dla identyfikacji substancji).

## **12 Opis metod analitycznych**

*Załącznik VI* do rozporządzenia REACH wymaga, aby rejestrujący przedkładali opis metod analitycznych lub odniesienia bibliograficzne do metod wykorzystywanych do identyfikacji substancji oraz, odpowiednio, identyfikacji zanieczyszczeń i dodatków. Informacje te powinny być wystarczające do odtworzenia zastosowanych metod.

## Załącznik III – Tożsamość substancji i wspólne przedłożenie danych

W części głównej niniejszego poradnika przedstawiono ogólne zasady obowiązujące potencjalnych rejestrujących podczas określania tożsamości substancji, która ma zostać zarejestrowana przez dany podmiot prawny. Niniejszy załącznik zawiera praktyczne wskazówki dla potencjalnych rejestrujących dotyczące stosowania zasad identyfikacji substancji w procesie wspólnego definiowania tożsamości i zakresu tożsamości substancji podlegającej wspólnej rejestracji zgodnie z przyjętą na mocy rozporządzenia REACH zasadą „jedna substancja - jedna rejestracja” (OSOR). Więcej informacji na temat obowiązków związanych ze wspólnym przedkładaniem danych oraz procesem udostępniania danych zamieszczono w Poradniku dotyczącym udostępniania danych opublikowanym na stronie <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

Przyjmuje się, że zasady określania tożsamości substancji przedstawione w części głównej poradnika obowiązują, w zależności od rodzaju substancji, także w odniesieniu do tożsamości substancji w procesie wspólnej rejestracji.

Zgodnie z treścią art. 11 ust. 1 i art. 19 ust. 1 rozporządzenie REACH nakłada wymóg „wspólnego przedkładania danych przez wielu rejestrujących”, co oznacza, że „jeżeli jeden lub więcej producentów albo jeden lub więcej importerów zamierza produkować lub importować daną substancję na terytorium Wspólnoty”, informacje dotyczące właściwości substancji i jej klasyfikacji „są przedkładane najpierw przez jednego rejestrującego, który działa w porozumieniu z pozostałymi zgadzającymi się na to rejestrującymi (dalej zwanego „wiodącym rejestrującym”)”.

Rozporządzenie wykonawcze Komisji (UE) 2016/9 w sprawie wspólnego przedkładania danych i udostępniania danych potwierdza obowiązek wspólnego przedłożenia pewnych informacji w przypadku, gdy daną substancję rejestruje kilka podmiotów. W praktyce, wspólne przedkładanie danych wymaga od zainteresowanych stron uzgodnienia granic i zakresu tożsamości substancji, które określa się mianem profilu tożsamości substancji, tj. SIP (ang. *substance identity profile*). SIP ma z założenia określać granice substancji, które rejestrujący obejmują zakresem wspólnie przedłożonych danych. Dotyczy to również rejestrujących, którzy skorzystali z opcji wyłączenia (opt out) i zrezygnowali z przedłożenia pewnych danych.

W związku z powyższym, porozumienie co do zakresu tożsamości substancji objętej rejestracją jest warunkiem wstępnym wspólnego przedłożenia danych. Kluczowe znaczenie ma tutaj przejrzystość co do zakresu danej tożsamości substancji oraz danych, do których się odnosi. A zatem zakres substancji lub SIP musi zostać opisany w jasny i jednoznaczny sposób w dokumentacji wiodącego rejestrującego w imieniu wszystkich pozostałych rejestrujących, przy czym wszyscy rejestrujący indywidualnie przedkładają informacje na temat składu.

### **Prosty przykład ilustrujący sposób opracowania profilu tożsamości substancji w przypadku chemikaliów produkowanych w UE/importowanych do UE przez poszczególnych rejestrujących przedstawiono schematycznie na rysunku**

Rysunek 2 poniżej. Przedstawia on określanie tożsamości substancji, która ma zostać zarejestrowana, gromadzenie informacji na temat poszczególnych składów, generowanie danych i ostateczne przedkładanie informacji w formacie IUCLID w ramach dokumentacji rejestracyjnej. Przykład dotyczy prostej, dobrze zdefiniowanej substancji jednoskładnikowej. W przypadku bardziej złożonych substancji, proces definiowania SIP może obejmować iteracje pomiędzy krokami 3 i 5 przedstawionymi na rysunku.

Na potrzeby dyskusji pomiędzy potencjalnymi rejestrującymi, dokumentację SIP można

sporządzić w postaci pliku tekstowego Word lub arkusza Excel, w których zapisuje się kolejne ustalenia, a następnie udostępnia wszystkim członkom i potencjalnym członkom. Niektóre stowarzyszenia branżowe udostępniły specjalne szablony na potrzeby dokumentacji SIP; skorzystało z nich wielu rejestrujących (np. Szablon Cefic<sup>34</sup>). Inną metodą jest zapisywanie informacji w pliku Word lub na stronie konsorcjum ustanowionego na potrzeby rejestracji danej substancji.

## **2. Definiowanie tożsamości i zakresu substancji odpowiadających danym przedłożonym do rejestracji**

Kroki, które mogą podjąć potencjalni rejestrujący określając tożsamość substancji odpowiadającą danym, które przedkładają wspólnie, przedstawiono schematycznie na przykładzie na rysunku

Rysunek 2 (kroki od 1 do 4) dotyczącym prostych i dobrze zdefiniowanych substancji.

Działając indywidualnie, potencjalny rejestrujący określa swoje obowiązki w zakresie substancji, które wytwarza/importuje na podstawie definicji substancji zawartej w art. 3 ust. 1 oraz przestrzegając zasad określania tożsamości substancji zawartych w części głównej niniejszego Poradnika (kroki 1 i 2 na rysunku

Rysunek 2).

Każdy potencjalny rejestrujący może następnie sprawdzić, czy inni potencjalni rejestrujący doszli do tej samej „nazwy i innych identyfikatorów” (krok 3). Od tego momentu potencjalni rejestrujący mogą wspólnie stosować zasady wskazane w części głównej niniejszego poradnika, aby określać granice tożsamości substancji odpowiadające danym, które przedkładają wspólnie; jest to profil tożsamości substancji (krok 4).

SIP opisuje w ogólny sposób zakres substancji w kategoriach informacji dotyczących składu (w tym wszelkich innych istotnych parametrów, takich jak morfologia, tj. po-stać fizyczna, kształt), nazwy i innych identyfikatorów, dla których istotne będą wspólnie przedłożone dane klasyfikacyjne i informacje dotyczące zagrożenia. Opracowując SIP, nie należy przyjmować nazbyt zachowawczego podejścia w celu uniknięcia wykluczenia konkurentów z procesu wspólnego przedkładania danych.

SIP łączy tożsamość substancji z danymi dotyczącymi zagrożenia, które mają być przedłożone wspólnie. Jeśli takie powiązania zostaną ustalone z odpowiednim wyprzedzeniem, mogą ułatwić proces generowania/gromadzenia informacji w ramach wypełniania obowiązków rejestracyjnych (opisanych w Poradniku dotyczącym wymogów informacyjnych oraz oceny bezpieczeństwa chemicznego; krok 5 na rysunku

Rysunek 2 poniżej) w celu zapewnienia, że wygenerowane lub zgromadzone dane obejmują pełen zakres tożsamości substancji.

Jak opisano w sekcjach 4.2.3 i 4.3 głównej części poradnika, w przypadku bardziej złożonych substancji, dodatkowe parametry i/lub informacje opisowe dotyczące składu (np. opis źródła/procesu) są zwykle wykorzystywane przez potencjalnych rejestrujących w krokach 1-3; te wspólnie ustalone mogą zostać uwzględnione w SIP (krok 4). W niektórych przypadkach, związek między granicą tożsamości substancji a wspólnie przedłożonymi danymi dotyczącymi zagrożenia może okazać się w pełni zrozumiałą

---

<sup>34</sup> SIP został po raz pierwszy opisany w „Guidance for Lead Registrants” Cefic dostępnym na stronie <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Przykłady SIP opracowanych przez rejestrujących przy użyciu tego szablonu można znaleźć m.in. na stronie internetowej Centrum REACH <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>

dopiero po zgromadzeniu części lub wszystkich dostępnych danych dotyczących zagrożenia. Mogą mieć miejsce iteracje między etapem 3 a 5, w zależności od złożoności tożsamości substancji i danych zgromadzonych na etapie 5, np. jeżeli niektóre ze składów obejmują elementy, z którymi wiąże się wymóg klasyfikacji i oznakowania i/lub oceny PBT. Aby prawidłowo określić granice tożsamości substancji, SIP może obejmować więcej niż jeden profil składu.

SIP musi zawierać ogólne informacje umożliwiające określenie granic tożsamości substancji zgodnie ze wspólnie przedłożonymi danymi:

- nazwę substancji
- inne identyfikatory (np. numer CAS, numer WE, wzór cząsteczkowy i strukturalny, opis), przedłożone przez wszystkich rejestrujących daną tożsamość substancji
- informacje na temat składu:
  - nazwy składników istotnych dla tożsamości substancji oraz odpowiednie zakresy stężeń,
  - ogólny wykaz tożsamości stabilizatorów istotnych dla tożsamości substancji (wraz z zakresami stężeń, jeżeli dotyczy),
  - ogólny wykaz dodatkowych parametrów, właściwych dla danego rodzaju substancji (np. deskryptory źródła/procesu w przypadku niektórych UVCB)

Istotne jest, by parametry określające granice tożsamości substancji, której dotyczy wspólne przedłożenie danych zostały uzgodnione przez wszystkich rejestrujących i jasno udokumentowane w SIP. W związku z tym, konieczna może okazać się modyfikacja lub rozszerzenie SIP na wniosek każdego nowego, potencjalnego rejestrującego, jeżeli pozostali rejestrujący uznają, że część lub wszystkie przedłożone wspólnie dane dotyczą również substancji produkowanej lub importowanej przez nowego rejestrującego.

Opracowywanie SIP nie może prowadzić do wymiany poufnych informacji biznesowych pomiędzy rejestrującymi, ani do ujawnienia takich informacji stronom trzecim. W przypadkach, w których sporządzenie SIP wymaga, by potencjalnie poufne informacje zostały ujawnione przez wspólnych rejestrujących, mogą oni rozważyć zaangażowane w proces powiernika, co opisano w Poradniku dotyczącym udostępniania danych.

### 3. Praktyczne wskazówki dotyczące dokumentacji profilu tożsamości substancji

Ogólne zasady określania tożsamości substancji w przypadku dobrze zdefiniowanych substancji oraz substancji UVCB zostały przedstawione w głównej części poradnika. Poniżej zaprezentowano kilka praktycznych wskazówek dotyczących wspólnego stosowania tych zasady. Poradnik przewiduje odstępstwa od zasad ogólnych. Takie odstępstwa wymagają od rejestrujących wykazania powiązań pomiędzy wspólnie przedłożonymi danymi dotyczącymi tożsamości substancji a danymi dotyczącymi zagrożenia.

#### 3.1 Dobrze zdefiniowane substancje

W przypadku dobrze zdefiniowanych substancji zasada  $\geq 80\%$  (w/w) dotycząca identyfikacji substancji jednoskładnikowej oraz zasada  $< 80\%$ ,  $\geq 10\%$  obowiązująca w odniesieniu przy określaniu tożsamości substancji wieloskładnikowej, muszą być przestrzegane w procesie definiowania głównego składnika lub składników oraz zakresów stężeń i zanieczyszczeń. Odnosi się to do każdego indywidualnego rejestrującego i wszystkich rejestrujących wspólnie w procesie opracowywania SIP. W szczególności należy zgłosić profile zanieczyszczeń przyjęte w SIP. Jeżeli SIP obejmuje specyficzne zanieczyszczenia, które mogłyby wpłynąć na klasyfikację i oznakowanie i/lub ocenę PBT, rejestrujący, których te zanieczyszczenia dotyczą, będą musieli uwzględnić je na etapie gromadzenia danych (krok 5). Istotne informacje wskazane w treści załączników VII-XI

mogą być przedłożone wspólnie lub oddzielnie, zgodnie z art. 11 ust. 3 rozporządzenia REACH (tzw. opcje wyłączenia). Zgłaszane wartości stężeń powinny uwzględniać pełen zakres stężeń podany przez wszystkich rejestrujących.

Jeżeli jednoznaczne określenie tożsamości danej substancji wymaga przyjęcia dodatkowych parametrów, każdy rejestrujący musi przestrzegać zasad opisanych w rozdziale 4.2.3 głównej części niniejszego poradnika. Należy rozważyć, czy zmiany tych parametrów spowodowałyby dostosowanie klasyfikacji lub wspólnie przedłożonych danych o zagrożeniach. Podobnie może być w przypadku ustalania SIP w odniesieniu do wspólnego przedłożenia danych. Na przykład, konieczne może okazać się włączenie do profilu tożsamości substancji tych parametrów (np. postaci fizycznej i/lub parametrów morfologicznych, takich jak porowatość, wielkość cząstek, kształt cząstek), które mogą mieć wpływ na właściwości istotne z punktu widzenia profilu zagrożenia (np. rozpuszczalność, reaktywność, toksyczność inhalacyjna itd.). Jeżeli tak jest, ogólne zakresy tych parametrów ujęte w SIP muszą być opisane w sposób przejrzysty (np. zakresy wielkości cząstek uwzględniające dane przekazane przez wszystkich rejestrujących, wykaz ich kształtów, chemizm powierzchni). W ten sposób zapewniona jest kompleksowość wspólnie przedłożonych danych dotyczących zagrożeń w odniesieniu do SIP.

Podobnie, z różnicami w fazie krystalicznej substancji nieorganicznych mogą wiązać się rozważania dotyczące profilu zagrożenia właściwe tym fazom (np. kwarc, krystobalit, amorficzna krzemionka). Biorąc pod uwagę ewentualne różnice we właściwościach poszczególnych faz, potencjalni rejestrujący te substancje powinni rozważyć, czy należy dokonać jednej, wspólnej rejestracji obejmującej wszystkie fazy, podając dane dotyczące zagrożenia charakterystycznego dla poszczególnych faz, czy dokonać wspólnych rejestracji poszczególnych faz (tj. różnych tożsamości substancji). W obu przypadkach fazy muszą być wymienione w SIP, a dane przekazane zgodnie z treścią załączników VII-XI muszą dotyczyć wszystkich etapów objętych rejestracją, a przez to obejmować pełen zakres SIP.

Należy zauważyć, że profile zanieczyszczeń i/lub zagrożeń poszczególnych składów mogą różnić się między sobą, chociaż nie musi to oznaczać, że różne składy nie mogą być przedmiotem tej samej rejestracji.

### 3.2 Substancje UVCB

W przypadku UVCB, określenie tożsamości może być trudniejsze, w związku z czym ważna jest przejrzysta dokumentacja, która ułatwia proces ustalania tożsamości substancji w ramach wspólnej rejestracji. Każdy potencjalny rejestrujący będzie musiał rozważyć wskazówki zawarte w części głównej niniejszego poradnika indywidualnie, a następnie zastosować te same zasady wspólnie. Należy zwrócić uwagę na to, że agregacja zakresów stężeń w SIP może prowadzić do opracowania profilu z zakresem stężeń tak szerokim, że trudno mówić w ich przypadku o jednej substancji.

Jak wskazano w głównej części poradnika, podstawą do określania tożsamości niektórych substancji UVCB jest źródło i procesy produkcji, a nie tożsamości i zakresy stężeń ich składników. W takich przypadkach to inne deskryptory zastępują tożsamości składników i ich zakresy stężeń. Potencjalni rejestrujący mogą opisywać proces produkcyjny w kategoriach źródła i procesu, w zakresie niezbędnym do określenia tożsamości substancji. Opis może zawierać wszelkie dodatkowe parametry/cechy charakterystyczne, które rejestrujący uznają za istotne dla tożsamości substancji (patrz na przykład Tabela 5 w części głównej poradnika). Na potrzeby wspólnej rejestracji, opisy udostępnia się wyłącznie w takim zakresie, w jakim jest to konieczne w celu uzgodnienia zakresu tożsamości substancji UVCB w procesie rejestracji. Potencjalni rejestrujący mogą

przestrzegać zasad opisanych w głównej części poradnika najpierw indywidualnie, a potem wspólnie. SIP umożliwia w ten sposób zgłoszenie ogólnych parametrów źródeł i procesów, by uwzględnić pełen zakres składów reprezentowanych przez poszczególnych rejestrujących. Zostało to zilustrowane schematycznie na Rysunek 3.

W odniesieniu do substancji zidentyfikowanych w oparciu o źródło i proces, jak wskazano w części głównej poradnika, każda istotna zmiana źródła lub procesu mogłaby prowadzić do ustalenia innej tożsamości substancji, która powinna zostać zarejestrowana oddzielnie. Odstępstwa od tej zasady oznaczałyby, że rejestrujący mogą wykazać, iż poszczególne kombinacje procesu i źródła prowadzą do powstania składów, które mogą być przedmiotem tej samej, wspólnej rejestracji. Niewielkie różnice w zakresie materiałów źródłowych i procesów i/lub warunków procesu mogą być uwzględnione w SIP. Rejestrujący powinni uzgodnić, że każda kombinacja procesu i źródła prowadzi do powstania składów, które są podobne do tego stopnia, że można im przypisać tę samą tożsamość oraz zagwarantować, że dane dotyczące zagrożenia mają zastosowanie do wszystkich wariantów objętych SIP. Oznacza to, że rejestrujący muszą być w stanie uzasadnić, iż wspólnie przedłożone dane dotyczące zagrożenia dotyczą wszystkich uwzględnionych składów lub są dostosowane, w stosownych przypadkach, na podstawie informacji przedstawionych osobno dla poszczególnych składów na mocy art. 11 ust. 3 rozporządzenia REACH (wyłączenie).

Aby udowodnić prawidłowość danych w odniesieniu do każdej kombinacji procesu i źródła, kombinacje te muszą być udokumentowane w sposób przejrzysty w SIP, aby udokumentować kryteria włączenia/wyłączenia stosowane wobec obecnych i przyszłych wspólnych rejestrujących.

W przypadku innych typów UVCB (patrz rozdział 4.3.2 głównej części poradnika), połączenie deskryptorów składu i deskryptorów dodatkowych może być wykorzystane przez potencjalnych rejestrujących i uznane za istotne. Na przykład, skład niektórych oleochemikaliów zmienia się w związku ze zmiennością długości łańcucha alkilowego składników, a rozkład długości łańcucha alkilowego może być wykorzystany jako dodatkowy deskryptor w procesie ustalania tożsamości substancji. Podejście przyjęte przez SIEF musi być udokumentowane w sposób przejrzysty w SIP.

### **3.3 Profil tożsamości substancji**

Obowiązkiem wszystkich rejestrujących wspólnie przedkładających dane jest uzgodnienie niezbędnych parametrów na potrzeby określenia tożsamości substancji i udokumentowanie ich w sposób przejrzysty w odpowiednim SIP. Odstępstwa od normalnie stosowanych zasad określania tożsamości substancji muszą być przejrzysto udokumentowane. W związku z tym, że SIP dokumentuje kryteria włączenia/wyłączenia, SIEF musiałoby zapewnić, że stosowane kryteria są przejrzyste, oraz że odpowiednie dane wygenerowane/zgromadzone zgodnie z treścią załączników VII-XI obejmują wszystkie ustalone profile składu.

Jeżeli potencjalni rejestrujący, działając indywidualnie, uwzględniają dodatkowe substancje stabilizujące w kontekście art. 3 ust. 1, ich tożsamości i zakresy stężeń muszą zostać uzgodnione i przedstawione w przejrzysty sposób w SIP.

Na etapie gromadzenia danych należy uwzględnić znaczenie materiału(-ów) użytych do badań w celu generowania/zebrania danych zgodnie z wymogami dotyczącymi informacji zawartymi w załącznikach VII-XI. Uzasadnienie wniosków dotyczących ich reprezentatywności dla składów objętych SIP musi zostać udokumentowane i włączone do dokumentacji technicznej. Jest to szczególnie istotne w przypadku złożonych tożsamości substancji i szerokich profili składu



Potencjalni rejestrujący mogą ustalić w procesie zbierania danych, że ich SIP jest zbyt szeroki i nie można go wykorzystać na potrzeby wspólnego przekazywania informacji na temat zagrożeń. W takim przypadku potencjalni rejestrujący mogą podjąć decyzję o podziale SIEF i potraktowaniu dwóch lub kilku substancji oddzielnie<sup>35</sup>. Każda substancja ma w takiej sytuacji własny SIP oraz dotyczące jej informacje o zagrożeniach, które są przedmiotem wspólnego przedłożenia. Powody, dla których pewne informacje o zagrożeniach nie były reprezentatywne dla niektórych parametrów tożsamości substancji muszą być przejrzysto udokumentowane w SIP w odniesieniu do każdej odrębnej rejestracji. Potencjalni rejestrujący mogą również ustalić na tym etapie, że profile składu należy doprecyzować w oparciu o składniki i/lub zanieczyszczenia wymagające klasyfikacji i oznakowania, oceny PBT itd.

Potencjalni rejestrujący, którzy zamierzają dołączyć do innych potencjalnych rejestrujących, w sytuacji, w której SIP został już przez tych ostatnich uzgodniony, a rejestracji jeszcze nie dokonano, muszą rozważyć, czy posiadane przez nich informacje o tożsamości substancji mieszczą się w granicach SIP. W przeciwnym razie muszą uzgodnić z potencjalnymi rejestrującymi, czy włączenie nowego członka wymaga rozszerzenia zakresu profilu, albo ustalić, że nie mieści się on w danym zakresie.

Adaptacja SIP byłaby konieczna, gdyby substancja, która ma zostać zarejestrowana przez potencjalnego rejestrującego reprezentowała takie parametry tożsamości substancji, które mogłyby zmienić reprezentatywność wspólnie przedłożonych informacji o zagrożeniach, a w związku z tym wymagała szczególnego uzasadnienia (np. określone zanieczyszczenie, inne proporcje składu, inna faza, inne wielkości cząstek itd.). Dla zachowania przejrzystości, parametr ten będzie musiał zostać określony w SIP.

W indywidualnych przypadkach potencjalni i istniejący rejestrujący mogą uzgodnić, że przedłożone wspólnie dane dotyczące zagrożenia nie są reprezentatywne dla substancji potencjalnego rejestrującego ze względu na różnice w parametrach tożsamości substancji, które nie mieszczą się w ustalonych granicach SIP. W takim przypadku potencjalny rejestrujący przedkłada odrębną rejestrację wspólnie z innymi rejestrującymi (jeśli ich substancja obejmuje ten parametr), albo indywidualnie, w przypadku braku innych rejestrujących tę samą tożsamość substancji.

#### **4. Zgłaszanie profilu tożsamości substancji w dokumentacji rejestracyjnej**

**Kiedy potencjalni rejestrujący zgromadzą/wygenerują wszystkie wymagane dane wymienione w załącznikach VII-XI dotyczące swojej substancji (tj. krok 5 na**

**Rysunek 2), pakiet danych jest gotowy do zgłoszenia w formacie IUCLID w dokumentacjach składanych w Agencji (tj. krok 6 na**

Rysunek 2). Aby zgłosić SIP w formacie IUCLID, nazwę i inne identyfikatory, informacje o składzie i inne istotne parametry podaje się w sekcjach 1.1 i 1.2 IUCLID.

<b>Profil tożsamości substancji</b>	<b>Zgłoszenie w IUCLID</b>
nazwa i inne identyfikatory	Sekcja 1.1 wszystkich dokumentacji

<sup>35</sup> Rozważania na temat roli EINECS w ustaleniu tożsamości substancji w ramach REACH przedstawiono w dokumencie CARACAL przyjętym na czwartym posiedzeniu właściwych organów ds. rozporządzeń REACH i CLP (CARACAL): CA/74/2009 rev.2 „Substance identity and SIEF formation (the role of EINECS)”.

informacje o składzie i inne parametry (jeśli są istotne)	Sekcja 1.2 dokumentacji wiodącego rejestrującego
---	--

Nazwę i inne identyfikatory SIP podaje się w punkcie 1.1 wszystkich dokumentacji. Wiodący rejestrujący zgłasza informacje o składzie podane w SIP i inne istotne parametry w punkcie 1.2 swojej dokumentacji w postaci „granicznego składu substancji”<sup>36</sup>. Wiodący rejestrujący musi również przedstawić wszystkie istotne dane zgodnie z wymogami zawartymi w załącznikach VII-XI w sekcjach 4-14 (w przypadku braku uzasadnionych wyłączeń w odniesieniu do jednego lub kilku wymogów informacyjnych) w imieniu wszystkich rejestrujących.

Każdy rejestrujący (w tym wiodący rejestrujący) zgłasza informacje o składzie substancji wytwarzanej lub importowanej przez swój podmiot prawny w sekcji 1.2 własnej dokumentacji. Oznacza to, że wiodący rejestrujący zgłasza zarówno informacje o składzie zawarte w SIP, jak i informacje o składzie substancji wytwarzanej/importowanej przez jego własny podmiot prawny w punkcie 1.2 swej dokumentacji, podczas gdy wszyscy inni rejestrujący zgłaszają własne informacje o składzie. Każda standardowa rejestracja musi również obejmować odpowiednie informacje analityczne w sekcji 1.4 IUCLID.

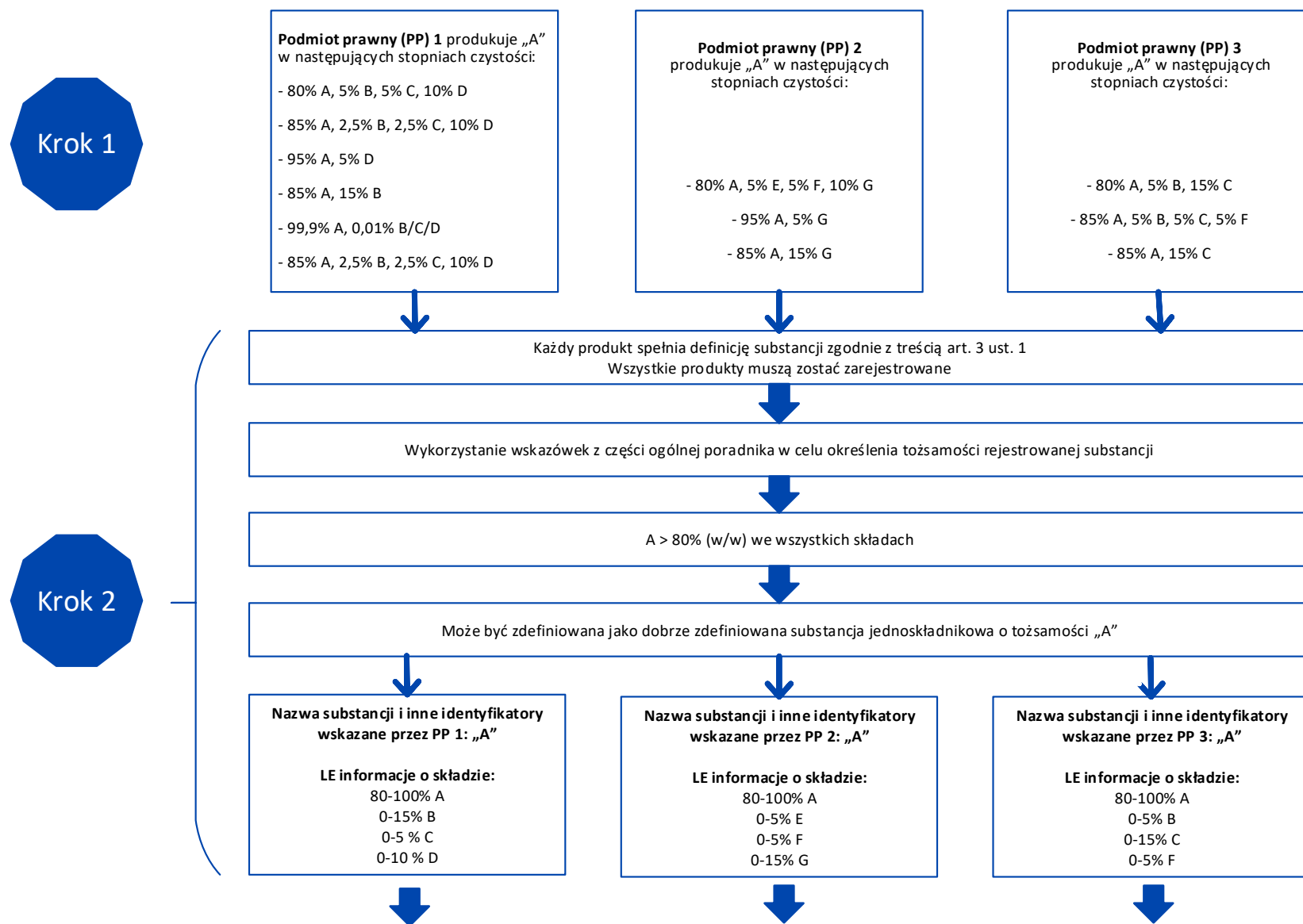
Każdy rejestrujący powinien wykazać, że informacje dotyczące składu substancji, które produkuje lub importuje, są uwzględnione w SIP, zgodnie z tym, co podano w „składzie granicznym”, co z kolei objęte jest treścią danych wskazanych w załącznikach VII-XI, przedłożonych w dokumentacji wiodącego rejestrującego (w przypadku braku uzasadnionych możliwości wyłączenia).

Instrukcje techniczne dotyczące sposobu zgłaszania informacji o składzie w formacie IUCLID przekazano w podręcznikach IUCLID (<http://echa.europa.eu/manuals>).

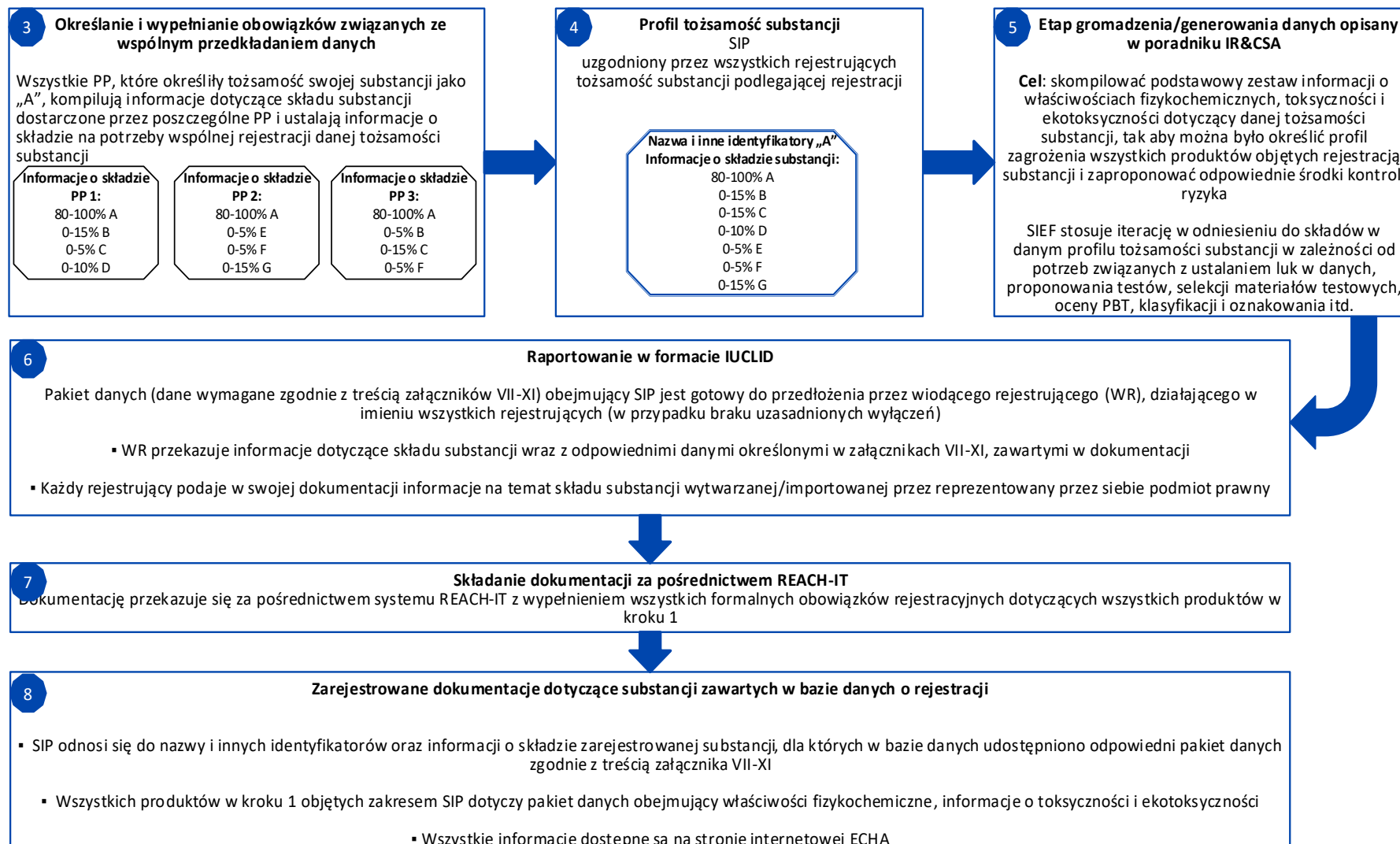
**Rysunek 2 (kolejna strona): Schematyczny obraz kroków podejmowanych przez potencjalnych rejestrujących: od określenia swoich obowiązków rejestracyjnych (1) po zdefiniowanie SIP dla danej tożsamości substancji (4) oraz, ostatecznie, dokonanie rejestracji i, tym samym, spełnienie formalnego obowiązku rejestracji substancji (8).**

<sup>36</sup> Instrukcję rejestracji „granicznego składu substancji” przedstawiono w podręczniku zatytułowanym „How to prepare registration and PPORD dossiers” („Jak przygotować rejestrację i dokumentację PPORD”), dostępnym na stronie <http://echa.europa.eu/manuals>.

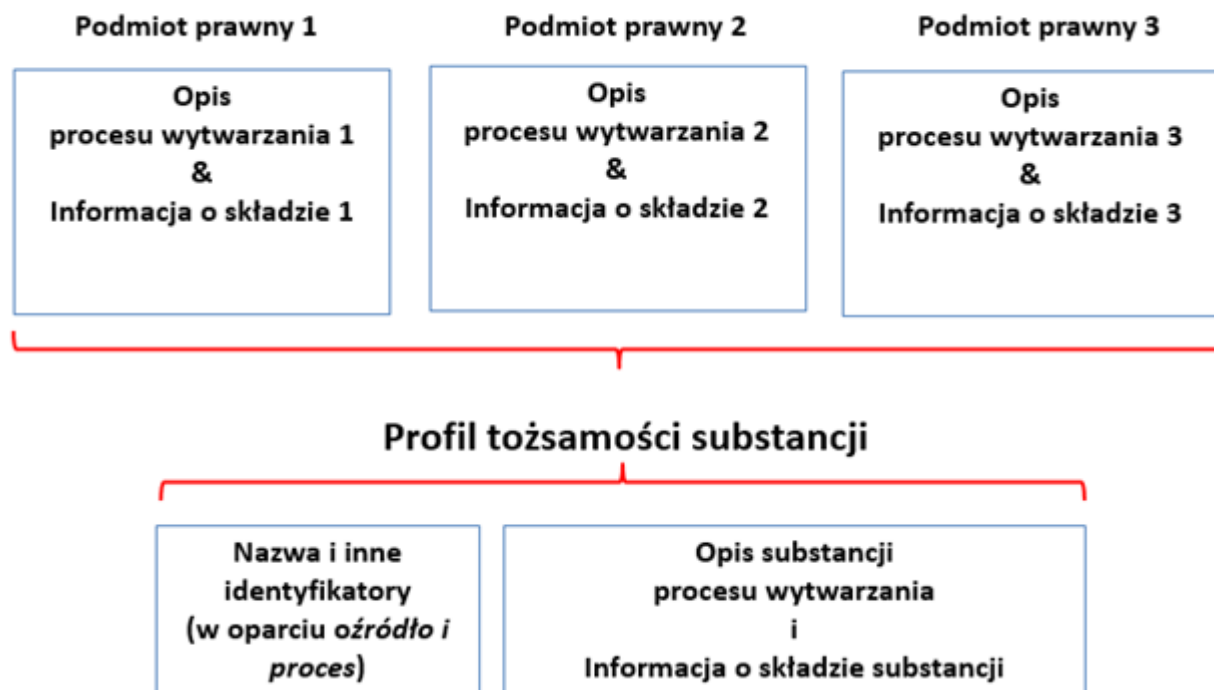




**Uwaga do rysunku:** Aby ułatwić wizualizację, posłużono się przykładem prostej, jednoskładnikowej substancji. W przypadku bardziej złożonych substancji, kolejne kroki są takie same, ale określenie tożsamości substancji może wymagać dodatkowych i/lub zastępczych dla danych dotyczących składu. Proces określania SJP może również obejmować iteracje po-niędzy krokami 3 i 4.



Rysunek 3: Proces definiowania SIP (krok 4 na rysunku 2) w przypadku substancji typu UVCB, której tożsamość określono na podstawie deskryptorów źródła i procesu pochodzących z opisów źródeł i procesów przedłożonych przez podmiot prawny.



**EUROPEJSKA AGENCJA CHEMIKALIÓW**  
**P.O. BOX 400, FI-00121 HELSINKI, FINLANDIA**  
**[HTTP://ECHA.EUROPA.EU](http://ECHA.EUROPA.EU)**