

USMERNENIE

# Usmernenie k identifikácii a pomenovaniu látok podľa nariadení REACH a CLP

December 2023  
Verzia 3.0



## **PRÁVNE UPOZORNENIE**

Cieľom tohto dokumentu je pomôcť používateľom pri plnení ich povinností podľa nariadení REACH a CLP. Používateľom však pripomíname, že text nariadení REACH a CLP je jediným autentickým právnym materiálom a že informácie v tomto dokumente nepredstavujú právne poradenstvo. Za využívanie týchto informácií zodpovedá výhradne používateľ. Európska chemická agentúra nenesie žiadnu zodpovednosť za spôsob použitia informácií uvedených v tomto dokumente.

### ***Usmernenie k identifikácii a pomenovaniu látok podľa nariadení REACH a CLP***

**Referenčné číslo:** ECHA-23-H-07-SK  
**Kat. číslo:** ED-09-23-444-SK-N  
**ISBN:** 978-92-9468-319-9  
**DOI:** 10.2823/302309  
**Dátum vydania:** december 2023  
**Jazyk:** SK

© Európska chemická agentúra, 2023  
Obálka © Európska chemická agentúra

Ak máte otázky alebo poznámky týkajúce sa tohto dokumentu, pošlite ich prostredníctvom formulára žiadosti o informácie (s uvedením referenčného čísla a dátumu vydania). Formulár žiadosti o informácie sa nachádza na webovom sídle ECHA s kontaktmi:

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

**Európska chemická agentúra**

Poštová adresa: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Fínsko  
Kontaktná adresa: Telakkakatu 6, 00150, Helsinki, Fínsko

## **PREDHOVOR**

V tomto dokumente sa opisuje postup, ako identifikovať a pomenovať látku podľa nariadení REACH a CLP. Je súčasťou sérií usmerňovacích dokumentov, ktoré sú určené ako pomôcka pre všetky zúčastnené strany pri príprave na plnenie povinností vyplývajúcich z nariadení REACH a CLP. Tieto dokumenty obsahujú podrobné usmernenia pre množstvo základných postupov vyplývajúcich z nariadení REACH a CLP, ako aj pre určité osobitné vedecké a/alebo technické metódy, ktoré subjekty odvetvia alebo orgány musia použiť v rámci nariadení REACH a CLP.

Usmerňovacie dokumenty boli vypracované a prediskutované v rámci projektov na vykonávanie nariadenia REACH (RIP) pod vedením útvarov Európskej komisie za účasti všetkých zúčastnených strán: členských štátov, priemyslu a mimovládnych organizácií. Tieto usmerňovacie dokumenty sú dostupné na webovom sídle Európskej chemickej agentúry (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Ďalšie usmerňovacie dokumenty budú na tomto webovom sídle uverejnené po ich dokončení alebo aktualizácii.

## HISTÓRIA DOKUMENTU

Verzia	Poznámka	Dátum
Verzia 1	Prvé vydanie	jún 2007
Verzia 1.1	<p>Korigendum:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Do nadpisu a nadpisov jednotlivých kapitol sa pridal odkaz na nariadenie CLP (nariadenie (ES) č. 1272/2008 zo 16. decembra 2008).</li> <li>- Pridal sa dodatočný text na objasnenie rozsahu pôsobnosti usmerňovacieho dokumentu. V celom dokumente sa vypustil nadbytočný text.</li> <li>- Do textu sa podľa potreby vložili odkazy na nariadenie CLP.</li> <li>- Pojem „TGD“ sa v celom dokumente nahradil pojmom „usmerňovací dokument“.</li> <li>- Pojem „prípravok“ sa v celom dokumente nahradil pojmom „zmes“.</li> <li>- Pojem „bod“ sa v celom dokumente nahradil pojmom „časť“.</li> <li>- Pojem „predregistrácia“ sa v celom dokumente nahradil pojmom „(oneskorená) predregistrácia“.</li> <li>- Vložili sa skratky AAS a CLP a odstránili sa skratky RIP a TGD.</li> <li>- Upravil sa opis zliatiny, zoznamu EC a systému IUCLID. Vložilo sa vymedzenie pojmov EC číslo, číslo v zozname, zmes a oznámená látka. Vypustilo sa vymedzenie pojmu „prípravok“.</li> <li>- Časť 3.2 sa zrevidovala s cieľom objasniť obsah.</li> <li>- Časť 3.3 sa zrevidovala s cieľom objasniť obsah povinností podľa nariadenia CLP.</li> <li>- Spôsob prezentácie zložiek v časti 4.2.2.1 sa zmenil z koncentrácie vyjadrenej v percentách na abecedné poradie, aby sa z poradia v zozname nedalo odvodiť príbuzné zloženie.</li> <li>- V časti 4.2.3.1 sa pojem „kryštalická mriežka“ nahradil pojmom „kryštál“.</li> <li>- Časť 4.3.1.2.3 sa zrevidovala s cieľom objasniť obsah.</li> </ul>	november 2011 (len v angličtine)

	<ul style="list-style-type: none"><li>- V časti 5 sa vložil odkaz na Príručku na predkladanie údajov, časť 18: Ako uvádzať identifikáciu látky v aplikácii IUCLID 5 pri registrácii podľa nariadenia REACH.</li><li>- Časť 5 sa zrevidovala s cieľom objasniť obsah.</li><li>- V časti 6 sa zmenil opis predregistrácie na (oneskorenú) predregistráciu.</li><li>- V dodatku 1 sa aktualizovali nefunkčné hypertextové prepojenia.</li><li>- Odstránila sa časť 4.3 v dodatku 2, pretože jej obsah je dostupný na príslušnom webovom sídle.</li></ul>	
Verzia 1.2	Korigendum Vymedzenie pojmu „zavedená látka“ bolo zosúladené s vymedzením pojmu uvedeným v nariadení (ES) č. 1907/2006, ktorý bol zavedený nariadením Rady (ES) č. 1354/2007 a korigendom, Ú. v. EÚ L 36, 5. 2. 2009, s. 84 (1907/2006). Upozorňujeme, že zmeny vo verziách 1.1 a 1.2 sú spoločne zahrnuté do jednej preloženej verzie 1.2 pre všetky jazykové verzie okrem anglickej verzie.	marec 2012
Verzia 1.3	Korigendum Do kapitoly 7.6 boli vložené dva chýbajúce štruktúrne vzorce.	február 2014
Verzia 1.4	Korigendum: <ul style="list-style-type: none"><li>- Zmena formátu dokumentu, aby zodpovedal aktuálnej identite agentúry.</li><li>- Vypustenie kapitoly 8, ktorá obsahuje technické pokyny na základe zastaranej verzie aplikácie IUCLID.</li><li>- Oprava v časti 7.5 opisu kristobalitu a kremeňa a vypustenie odkazu na smernicu 2000/30/ES.</li><li>- Vypustenie odkazov na kapitolu 8 a na príručky na predkladanie údajov a pridanie odkazu na nové príručky agentúry ECHA.</li><li>- Vypustenie dodatku III a presunutie informácií do tabuľky histórie dokumentu.</li><li>- Boli opravené nefunkčné prepojenia na webové sídla a redakčné chyby.</li></ul>	jún 2016
Verzia 2.0	Čiastočná aktualizácia: <ul style="list-style-type: none"><li>- Doplnenie nového dodatku III s opisom pojmu profil identifikácie</li></ul>	december 2016

	<p>látky.</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Pridanie nového textu do kapitoly 1 na uvedenie nového dodatku III.</li><li>- Opravenie typografických a redakčných chýb.</li></ul>	
Verzia 2.1	Korigendum na opravu typografických chýb v texte a chýb v informáciách o zložení v príkladoch na obrázku 2 v dodatku III.	máj 2017
Verzia 3.0	<p>Aktualizácia:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Zosúladenie so zmenami zavedenými nariadením Komisie (EÚ) 2022/477 z 24. marca 2022.</li><li>- Odstránenie odkazov na (oneskorenú) predregistráciu.</li><li>- Opravenie typografických a redakčných chýb.</li><li>- Pridanie odkazov na stránky agentúry ECHA pre podporu a otázky a odpovede.</li><li>- Odstránenie ods. 5 v dodatku III o prechode z IUCLID 5 na IUCLID 6.</li></ul>	december 2023

## Obsah

<b>1. VŠEOBECNÉ INFORMÁCIE .....</b>	<b>9</b>
1.1. Ciele .....	9
1.2. Rozsah pôsobnosti .....	10
1.3. Štruktúrausmerňovacieho dokumentu .....	11
<b>2. DEFINÍCIE A SKRATKY.....</b>	<b>12</b>
2.1. Skratky .....	12
2.2. Vymedzenie pojmov.....	14
<b>3. RÁMEC PRE IDENTIFIKÁCIU LÁTKOK V NARIADENIACH REACH A CLP.....</b>	<b>18</b>
3.1. Vymedzenie pojmu „látka“ .....	18
3.2. Číselné identifikátory.....	18
3.2.1. Zoznam EC .....	18
3.2.2. Čísla v zozname.....	20
3.3. Požiadavky na identifikáciu látok v nariadeniach REACH a CLP.....	20
<b>4. USMERNENIE K IDENTIFIKÁCIU A POMENOVANIU LÁTKOK PODĽA NARIADENÍ REACH A CLP .....</b>	<b>24</b>
4.1. Úvod .....	24
4.2. Látky s presne definovaným zložením .....	30
4.2.1. Jednozložkové látky .....	31
4.2.2. Mnohozložkové látky .....	33
4.2.3. Látky definovaného chemického zloženia a iné hlavné identifikátory .....	36
4.3. Látky UVCB.....	37
4.3.1. Všeobecné usmernenie k látkam UVCB .....	38
4.3.2. Špecifické typy látok UVCB.....	46
<b>5. KRITÉRIÁ NA KONTROLU TOHO, ČI SÚ LÁTKY ROVNAKÉ .....</b>	<b>55</b>
<b>6. IDENTITA LÁTKY PRI ŽIADOSTI O INFORMÁCIE .....</b>	<b>61</b>
<b>7. PRÍKLADY.....</b>	<b>62</b>
7.1. Dietyl-peroxydikarbonát .....	62
7.2. ZOLIMIDÍN .....	62
7.3. Zmes izomérov.....	63
7.4. Vonná látka AH.....	67
7.5. Minerály .....	73
7.6. Esenciálny olej Lavandin grosso.....	76
7.7. Chryzantémový olej a z neho izolované izoméry .....	82
7.8. Fenol, izopropylovaný, fosfát.....	85

7.9. Kvartérne amóniové zlúčeniny .....	87
7.10. Ropné látky .....	91
7.10.1. Benzínová zmesná frakcia (C4-C12) .....	91
7.10.2. Plynové oleje (ropa) .....	92
7.11. Enzýmy .....	93
7.11.1. Subtilizín .....	93
7.11.2. $\alpha$ -amyláza .....	95
<b>DODATOK I - PODPORNÉ MATERIÁLY .....</b>	<b>97</b>
<b>DODATOK II – TECHNICKÉ USMERNENIE PRE IDENTIFIKAČNÝ PARAMETER LÁTKY 101</b>	
<b>DODATOK III – IDENTIFIKÁCIA LÁTKY A SPOLOČNÉ PREDKLADANIE ÚDAJOV .....</b>	<b>117</b>

## Zoznam tabuliek

Tabuľka 1: Skratky .....	12
Tabuľka 2: Vymedzenie pojmov .....	14
Tabuľka 3: Parametre identifikácie látok v časti 2 prílohy VI k nariadeniu REACH.....	22
Tabuľka 4: Zoskupenie hlavných identifikátorov pre príklady predstavujúce rôzne typy presne definovaných podobných látok .....	25
Tabuľka 5: Zoskupenie hlavných identifikátorov pre príklady predstavujúce rôzne typy látok UVCB.....	26

## Zoznam obrázkov

Obrázok 1: Návod na orientáciu v kapitolách a dodatkoch usmerňovacieho dokumentu pri hľadaní vhodného usmernenia pre rôzne typy látok .....	29
Obrázok 2 (nasledujúca strana): Schematický prehľad krokov potenciálnych registrujúcich vychádza z určenia ich registračných povinností (1) na vymedzenie ich profilu SIP pre ich jednu identitu látky (4) a nakoniec predloženie ich registrácií v rámci formálneho plnenia povinností registrovať ich látky (8).....	123
Obrázok3: Názorná schéma definovania SIP (krok 4 v obrázku 2) pre látku typu UVCB identifikovanú na základe deskriptorov zdroja a postupov z deskriptorov zdroja a postupu právneho subjektu. ....	126



## **1. Všeobecné informácie**

V nariadení REACH (nariadenie (ES) č. 1907/2006) sa stanovuje systém registrácie, hodnotenia, autorizácie a obmedzovania chemických látok a zriaďuje sa Európska chemická agentúra (ECHA) na implementáciu tohto nariadenia<sup>1</sup>.

Nariadenie CLP (nariadenie (ES) č. 1272/2008) je nové európske nariadenie o klasifikácii, označovaní a balení chemických látok a zmesí<sup>2</sup>. Týmto právnym predpisom sa v celej EÚ zavádza nový systém klasifikácie a označovania chemických látok na základe globálne harmonizovaného systému Organizácie Spojených národov (GHS OSN).

Nariadenie REACH je zamerané na látky. Na zabezpečenie riadneho fungovania procesov podľa nariadenia REACH je najdôležitejšie zaviesť správnu a jednoznačnú identifikáciu látok. Tento usmerňovací dokument o identifikácii a pomenovaní látok je pomôckou pre subjekty odvetvia, členské štáty a Európsku chemickú agentúru.

Tento usmerňovací dokument vychádza zo skúseností s identifikáciou látok na základe prechádzajúceho právneho predpisu o chemických látkach (smernica 67/548/EHS a smernica 98/8/EHS). Toto usmernenie sa však zlepšuje o súčasné postupy v oblasti identifikácie látok podľa nariadenia REACH a klasifikáciu, označovanie a balenie látok a zmesí podľa nariadenia CLP. V prípade potreby sa zohľadnili aj prístupy iných chemických systémov mimo Európskej únie.

Začlenili sa doň aj usmernenia prispôbené rôznym typom látok.

Tento usmerňovací dokument je určený na použitie pri identifikácii a pomenovaní látok regulovaných na základe nariadení REACH a CLP.

### **1.1. Ciele**

Cieľom tohto usmerňovacieho dokumentu je poskytnúť výrobcovi a dovozcom usmernenie o tom, ako zaznamenávať a oznamovať identitu látky v kontexte nariadení REACH a CLP. Ako dôležitý kľúčový prvok identifikácie látky obsahuje usmerňovací dokument usmernenia na pomenovanie látky. Poskytuje tiež usmernenie k tomu, či možno látky v kontexte nariadení REACH a CLP považovať za rovnaké, a ako možno uplatniť princíp „jednej registrácie jednej látky“ (OSOR) stanovením „profilu identifikácie látky“ (SIP). Identifikácia rovnakých látok, ktoré možno zahrnúť pod rovnaký SIP je dôležitá pri žiadostiach o informácie, spoločnom využívaní údajov, spoločnom predkladaní údajov, oznamovaní zaradenia do zoznamu

klasifikácie a označovania a pri harmonizácii klasifikácie a označovania.

Je žiaduce, aby identifikáciu látok vykonávali odborníci v rámci odvetvia. Pre subjekty odvetvia s malými skúsenosťami v oblasti identifikácie látok sa v dodatku k tomuto usmerňovaciemu dokumentu poskytujú dodatočné usmernenia k parametrom identifikácie.

Tento usmerňovací dokument okrem toho obsahuje niekoľko prepojení na významné nástroje podpory charakterizácie látky a kontroly chemickej identity látky.

---

<sup>1</sup> Nariadenie Európskeho parlamentu a Rady (ES) č. 1907/2006 z 18. decembra 2006 o registrácii, hodnotení, autorizácii a obmedzovaní chemických látok (REACH) a o zriadení Európskej chemickej agentúry, o zmene a doplnení smernice 1999/45/ES a o zrušení nariadenia Rady (EHS) č. 793/93 a nariadenia Komisie (ES) č. 1488/94, smernice Rady 76/769/EHS a smerníc Komisie 91/155/EHS, 93/67/EHS, 93/105/ES a 2000/21/ES (ďalej len „REACH“).

<sup>2</sup> Nariadenie Európskeho parlamentu a Rady (ES) č. 1272/2008 zo 16. decembra 2008 o klasifikácii, označovaní a balení látok a zmesí, o zmene, doplnení a zrušení smerníc 67/548/EHS a 1999/45/ES a o zmene a doplnení nariadenia (ES) č. 1907/2006 (Text s významom pre EHP) (ďalej len „CLP“).

Podrobnejšie pokyny, ako v aplikácii IUCLID vyplniť informácie o identite látky v kontexte rôznych procesov podľa nariadení REACH a CLP, sú k dispozícii v príručkách agentúry ECHA dostupných na adrese: <http://echa.europa.eu/manuals>.

## 1.2. Rozsah pôsobnosti

V článku 1 nariadenia REACH sa stanovuje, že nariadenie sa vzťahuje na výrobu, dovoz, uvádzanie na trh a používanie látok ako takých, v zmesiach alebo vo výrobkoch. Zmesi a výrobky sa ako také v nariadení REACH neupravujú.

V súlade s článkom 10 nariadenia REACH sa vyžaduje, aby sa identita látky pri registrácii zaznamenávala pomocou parametrov uvedených v časti 2 prílohy VI k nariadeniu REACH (pozri Tabuľka 3). Podobné parametre (ako sú uvedené v častiach 2.1 až 2.3.4 prílohy VI k nariadeniu REACH) sa vyžadujú aj pri zaznamenávaní identity látky na účely oznamovania v súlade s článkom 40 ods. 1 nariadenia CLP. Tento usmerňovací dokument je zameraný na riadnu identifikáciu látok, na ktoré sa vzťahuje právna definícia látky podľa nariadení REACH a CLP, a v časti 2 prílohy VI k nariadeniu REACH poskytuje usmernenie k parametrom identifikácie látok. Poskytnuté informácie o identite látky postačujú na dostatočnú identifikáciu každej látky. Ak nie je technicky možné poskytnúť požadované informácie, alebo sa poskytnutie týchto informácií javí ako vedecky neopodstatnené, jeden alebo viac parametrov identifikácie látok možno vynechať. Dôvody vynechania týchto informácií sa majú jasne podložiť vedeckým odôvodnením.

Prístup k identifikácii látky závisí od typu látky. Preto sa pri rôznych druhoch látok používateľ tohto usmerňovacieho dokumentu odkazuje na konkrétne kapitoly, ktoré sa ich týkajú.

Dôležitými nástrojmi sú pri identifikácii látok zoznamy EC používané v rámci smernice 67/548/EHS (zoznamy EINECS, ELINCS a NLP). Usmernenie k úlohám týchto zoznamov podľa nariadenia REACH sa nachádza v kapitole 3.2.

Látky patriace do rozsahu pôsobnosti nariadení REACH a CLP (a následne aj tohto usmerňovacieho dokumentu) sú zvyčajne výsledkom chemických reakcií v rámci postupu výroby látky a môžu obsahovať viaceré rôzne zložky. K látkam vymedzeným v nariadeniach REACH a CLP patria aj látky, ktoré sú chemicky odvodené alebo izolované z prirodzene sa vyskytujúcich materiálov a zložené z jedného prvku alebo molekuly (napr. čisté kovy alebo určité minerály) alebo niekoľkých zložiek (napr. esenciálne oleje, kovové hmoty vznikajúce pri tavení sulfidových kovových rúd). V mnohých prípadoch sa však na látky upravené inými právnymi predpismi Spoločenstva vzťahujú výnimky z registračnej povinnosti podľa nariadenia REACH (pozri článok 2 nariadenia REACH). Z registračnej povinnosti sú vyňaté aj látky uvedené v prílohe IV k nariadeniu REACH a látky spĺňajúce určité kritériá, ktoré sú uvedené v prílohe V k nariadeniu REACH. Je potrebné poznamenať, že ak sa na látku vzťahuje výnimka z registračnej povinnosti, nemusí to ešte znamenať, že sa na ňu vzťahujú aj výnimky z ustanovení iných hláv nariadenia REACH alebo z požiadaviek nariadenia CLP.

Nariadenie REACH vyžaduje, aby sa registrujúci tej istej látky stretli a dohodli na spoločnom predkladaní určitých informácií o látke (princíp OSOR)<sup>3</sup>. Zavedenie takéhoto princípu si vyžaduje jasné vysvetlenie spôsobu, ako registrujúci definujú rozsah ich SIP (profilu identifikácie látky).

---

<sup>3</sup> Podrobné informácie o spoločnom využívaní údajov pri spoločnom predkladaní pre tú istú látku sú uvedené v *Usmernení k spoločnému využívaniu údajov*.

### **1.3. Štruktúra usmerňovacieho dokumentu**

Základné informácie, ako napríklad ciele a rozsah pôsobnosti tohto usmerňovacieho dokumentu, sa nachádzajú v kapitole 1, použité skratky a definície v kapitole 2. Dôležité informácie týkajúce sa rámca identifikácie látok podľa nariadenia REACH, napr. vymedzenie látky a požiadavky na informácie v právnom texte, sú uvedené v kapitole 3.

Praktické usmernenia k identifikácii a pomenovaniu látok sa nachádzajú v kapitole 4.

- V kapitole 4.1 sa opisuje rozdiel medzi „presne definovanými“ a „nepresne definovanými“ látkami. V týchto dvoch hlavných skupinách sa rozoznávajú rôzne typy látok, pre ktoré platia osobitné usmernenia k identifikácii látok. K dispozícii tu je kľúčový diagram, ktorý má používateľovi pomôcť nájsť príslušnú kapitolu s požadovaným usmernením k identifikácii konkrétneho typu látky.
- Nasledujúce kapitoly poskytujú konkrétne usmernenie pre každý typ látok, napr. súbor pravidiel s vysvetleniami a príkladmi.

Kapitola 5 obsahuje usmernenie ku kontrole toho, či sa môžu látky považovať za rovnaké. Usmernenie k identifikácii látok pri procesoch zisťovania informácií sa nachádza v kapitole 6.

V kapitole 7 sú okrem toho uvedené podrobné príklady vytvorené s využitím praktického usmernenia z kapitoly 4.

V dodatku I sa uvádza niekoľko prepojení na významné nástroje podpory charakterizácie látky a kontroly chemickej identity látky.

V dodatku II sú uvedené ďalšie základné informácie o jednotlivých parametroch identifikácie látok používaných pri procese identifikácie látok, napríklad o pravidlách názvoslovia, EC číslach, číslach CAS, zápisoch molekulárnych a štruktúrnych vzorcov a analytických metódach.

V dodatku III sú uvedené informácie o koncepcii profilu identifikácie látky, dôležitosti povinností pri spoločnom predkladaní a o tom, ako sa má definovať a oznámiť.

## 2. Definície a skratky

### 2.1. Skratky

Kľúčové skratky použité v tomto usmerňovacom dokumente sa uvádzajú a vysvetľujú v Tabuľka 1.

**Tabuľka 1: Skratky**

Skratka	Význam
AAS	Atómová absorpčná spektroskopia
AISE	Medzinárodné združenie pre mydlá, detergenty a prostriedky na údržbu
CAS	Služba pre chemické abstrakty
CLP	Nariadenie (ES) č. 1272/2008 o klasifikácii, označovaní a balení látok a zmesí
EC	Európska komisia
EINECS	Európsky zoznam existujúcich komerčných chemických látok
ELINCS	Európsky zoznam nových chemických látok
ENCS	Existujúce a nové chemické látky (Japonsko)
ESIS	Európsky informačný systém o chemických látkach
EÚ	Európska únia
GC	Plynová chromatografia
GHS	Globálny harmonizovaný systém
HPLC	Vysokoúčinná kvapalinová chromatografia
INCI	Medzinárodné názvoslovie kozmetických zložiek
InChI	Medzinárodný chemický identifikátor IUPAC
IR	Infračervené
ISO	Medzinárodná organizácia pre normalizáciu
IUBMB	Medzinárodná únia biochémie a molekulárnej biológie
IUCLID	Medzinárodná databáza jednotných chemických informácií
IUPAC	Medzinárodná únia pre čistú a aplikovanú chémiu
MS	Hmotnostná spektrometria
NLP	Látka, ktorá sa už nepovažuje za polymér
NMR	Nukleárna magnetická rezonancia
ppm	Počet častíc na milión, milióntina

REACH	Registrácia, hodnotenie, autorizácia a obmedzovanie chemických látok
SIEF	Fórum na výmenu informácií o látkach
SIP	Profil identifikácie látky
SMILES	Zjednodušený systém zadávania molekulárnych štruktúr
TSCA	Zákon o kontrole toxických látok (USA)
UV/VIS	Ultrafialové/viditeľné
UVCB	Látky neznámeho alebo variabilného zloženia, produkty komplexných reakcií alebo biologické materiály
w/w	Hmotnostné percento
XRD	Disfrakcia röntgenových lúčov
XRF	Röntgenová fluorescenčná analýza

## 2.2. Vymedzenie pojmov

Kľúčové vymedzenie pojmov použité v tomto usmerňovacom dokumente je uvedené a opísané v Tabuľka 2.

Pri týchto vymedzeniach pojmov sa zohľadňujú vymedzenia pojmov použité v nariadeniach REACH a CLP. Z tohto dôvodu sú niektoré pojmy vymedzené inak, než sa používajú v smernici 67/548/EHS.

**Tabuľka 2: Vymedzenie pojmov**

Vymedzenie pojmu	Opis
Číslo v zozname	Číslo pridelené agentúrou ECHA. Číslo, ktoré automaticky priraduje systém REACH-IT. Používa sa pri všetkých prichádzajúcich platných predloženiach (napr. pri technologicky orientovanom výskume a vývoji, žiadostiach o informácie, registráciách, oznamovaní klasifikácie a označovania).
EC číslo	EC číslo je číselný identifikátor látok v zozname EC.
Hlavná zložka	Zložka látky, ktorá nie je prísada ani nečistota a tvorí podstatnú časť látky, preto sa používa pri pomenovaní látok a podrobnej identifikácii látok.
Chemicky nemodifikovaná látka*	Látka, ktorej chemické zloženie ostáva nezmenené, aj keď prešla chemickým procesom alebo úpravou, alebo fyzikálnou mineralogickou transformáciou, napríklad na odstránenie nečistôt.
Chromatografický záznam	Vyjadrenie zloženia látky charakteristickou distribúciou zložiek v analytickom chromatograme.
IUCLID	Medzinárodná databáza jednotných chemických informácií. IUCLID je databáza a riadiaci systém na správu údajov o chemických látkach.
Jednozložková látka	Spravidla látka definovaná svojím zložením, v ktorom je jedna hlavná zložka prítomná aspoň v 80 % hmotnostných (w/w).
Látka prírodného pôvodu*	Prírodne sa vyskytujúca látka ako taká, nespracovaná alebo spracovaná iba manuálnym, mechanickým gravitačným spôsobom, rozpustením vo vode, flotáciou, extrakciou vodou, destiláciou s vodnou parou alebo zahrievaním výlučne na účely odstránenia vody; alebo ktorá je extrahovaná zo vzduchu akýmkoľvek spôsobom.

Látka*	Chemický prvok a jeho zlúčeniny v prírodnom stave alebo získané akýmkoľvek výrobným postupom vrátane všetkých prísad potrebných na udržanie ich stability a všetkých nečistôt pochádzajúcich z použitého postupu, ktorá však nezahŕňa žiadne rozpúšťadlá, ktoré možno oddeliť bez ovplyvnenia stability látky alebo zmeny jej zloženia.
Medziprodukt*	Látka, ktorá sa vyrába pre chemické spracovanie alebo sa pri ňom spotrebúva či používa, aby sa transformovala na inú látku (ďalej len <i>syntéza</i> ):  (a) <u>neizolovaný medziprodukt</u> je medziprodukt, ktorý sa pri syntéze zámerne neodoberá (s výnimkou odobratia vzorky) zo zariadenia, v ktorom syntéza prebieha. Medzi takéto zariadenie patrí reakčná nádoba, jej prídavné zariadenia a akékoľvek vybavenie, cez ktoré látky prechádzajú pri kontinuálnom alebo šaržovom procese, ako aj systém potrubí na presun z jednej nádoby do druhej na účely prevedenia ďalšieho kroku reakcie; nezahŕňa však nádrže alebo iné nádoby, v ktorých sa látky po výrobe skladujú;  (b) <u>medziprodukt izolovaný na mieste</u> je medziprodukt, ktorý nespĺňa kritériá neizolovaného medziproduktu a pri ktorom prebieha výroba medziproduktu a syntéza ďalších látok z tohto medziproduktu na tom istom mieste a vykonáva ju jedna alebo viac právnických osôb;  (c) <u>prepravovaný izolovaný medziprodukt</u> je medziprodukt, ktorý nespĺňa kritériá neizolovaného medziproduktu a prepravuje sa alebo sa dodáva na iné miesta;
Mnohozložková látka	Spravidla látka definovaná svojím zložením, v ktorej je viac ako jedna hlavná zložka prítomná v koncentrácii $\geq 10\%$ hmotnostných (w/w) a $< 80\%$ hmotnostných (w/w).
Monomér*	Látka, ktorá je schopná vytvárať kovalentné väzby so sekvenciou ďalších rovnakých alebo rozdielnych molekúl za podmienok príslušnej polymerizačnej reakcie používanej na konkrétny proces.
Nečistota	Zložka neúmyselne prítomná v látke vznikajúca počas výroby. Môže pochádzať z východiskových materiálov alebo môže byť výsledkom druhotných alebo neúplných reakcií v priebehu výrobného procesu. Hoci je prítomná v konečnej látke, nebola do nej pridaná zámerne.
Oznámená látka*	Látka, pre ktorú bolo predložené oznámenie a ktorú by bolo možné uviesť na trh v súlade so smernicou 67/548/EHS.

Polymér*	<p>Látka, ktorá sa skladá z molekúl charakterizovaných sekvenciou jedného alebo viacerých druhov monomérnych jednotiek. Takéto molekuly musia byť distribuované v určitom rozsahu molekulových hmotností, pričom rozdiely v molekulových hmotnostiach sú spôsobené najmä rozdielnym počtom monomérnych jednotiek. Polymér tvorí:</p> <p>(a) jednoduchá hmotnostná väčšina molekúl obsahujúca najmenej tri monomérene jednotky, ktoré sú viazané kovalentnými väzbami aspoň na jednu inú monoméernu jednotku alebo inú reagujúcu zložku;</p> <p>(b) menej ako jednoduchá hmotnostná väčšina molekúl s rovnakou molekulovou hmotnosťou.</p> <p>„Monoméerna jednotka“ je v zmysle tohto vymedzenia pojmu zreagovaná forma monoméernej látky v polyméri.</p>
Prísada	Látka zámerne pridaná s cieľom stabilizovať látku <sup>4</sup> .
Výroba*	Vyrobenie alebo extrakcia látok v prírodnom stave.
Výrobok*	Predmet, ktorý počas výroby dostáva konkrétny tvar, povrch alebo stvárnenie, ktoré určuje jeho funkciu vo väčšej miere ako jeho chemické zloženie.
Zliatina*	<p>Kovový materiál homogénny na makroskopickej úrovni, ktorý pozostáva z dvoch alebo viacerých prvkov spojených tak, že sa mechanickými prostriedkami nedajú ľahko oddeliť.</p> <p>Zliatiny sa považujú za špeciálne zmesi.</p>
Zložka	Látka zámerne pridaná s cieľom vytvoriť zmes.
Zložka	Každý druh prítomný v látke, ktorý sa dá charakterizovať jedinečnou chemickou identitou.
Zmes*	Zmes alebo roztok zložený z dvoch alebo viacerých látok.

<sup>4</sup> V iných oblastiach môže mať príroda aj iné funkcie, napr. látky na úpravu pH alebo farbiva. V nariadení REACH a v tomto usmerňovacom dokumente je však príroda stabilizátorom.



Zoznam EC	Zoznam EC nie je v nariadení REACH právne vymedzený, ide však o kombináciu troch nezávislých a právne schválených európskych zoznamov látok z predchádzajúcich regulačných rámcov EÚ pre chemické látky: zoznamov EINECS, ELINCS a NLP (látky, ktoré sa už nepovažujú za polyméry). Záznamy v zozname EC pozostávajú z chemického názvu a čísla (názvu EC a EC čísla), čísla CAS, molekulárneho vzorca (ak je k dispozícii) a opisu (v prípade určitých typov látok).
-----------	---

\* Vymedzenia pojmov podľa článku 3 nariadenia REACH.

## 3. Rámec pre identifikáciu látok v nariadeniach REACH a CLP

Nariadenia REACH a CLP obsahujú vymedzenie pojmu „látka“ a v nariadení REACH sa uvádza zoznam parametrov identifikácie látok (príloha VI, časť 2), ktoré sa majú používať pri identifikácii látok na účely registrácie.

Táto kapitola sa zaoberá vymedzením pojmu „látka“ v nariadeniach REACH a CLP (kapitola 3.1), poskytuje všeobecné usmernenie k používaniu zoznamu EC z predchádzajúceho regulačného rámca pre chemické látky (kapitola 3.2) a ďalšie základné informácie o požiadavkách v rámci identifikácie látok, ktoré sú uvedené v nariadení REACH (kapitola 3.3).

### 3.1. Vymedzenie pojmu „látka“

Pojem „látka“ je vymedzený v nariadení REACH (článok 3 ods. 1) a v nariadení CLP (článok 2 ods. 7) takto:

Látkou je chemický prvok a jeho zlúčeniny v prírodnom stave alebo získané akýmkoľvek výrobným postupom vrátane všetkých prísad potrebných na udržanie ich stability a všetkých nečistôt pochádzajúcich z použitého postupu, ktorá však nezahŕňa žiadne rozpúšťadlá, ktoré možno oddeliť bez ovplyvnenia stability látky alebo zmeny jej zloženia.

Vymedzenie pojmu „látka“ v nariadeniach REACH a CLP je rovnaké ako vymedzenie pojmu „látka“ použité v rámci siedmej zmeny smernice o nebezpečných látkach (smernica 92/32/EHS, ktorou sa mení a dopĺňa smernica 67/548/EHS). V oboch prípadoch toto vymedzenie pojmu presahuje čisté chemické zloženie vymedzené štruktúrou jednej molekuly. Toto vymedzenie pojmu „látka“ obsahuje rôzne zložky, napríklad nečistoty.

### 3.2. Číselné identifikátory

#### 3.2.1. Zoznam EC

Na základe predchádzajúceho regulačného rámca chemických látok existujú tri samostatné zoznamy. Sú to Európsky zoznam existujúcich komerčných chemických látok (EINECS), Európsky zoznam oznámených chemických látok (ELINCS) a Zoznam látok, ktoré sa už nepovažujú za polyméry (NLP).

Látky, ktoré boli uvedené na európsky trh od 1. januára 1971 do 18. septembra 1981, sa

uvádzajú v Európskom zozname existujúcich komerčných chemických látok (EINECS)<sup>5, 6, 7</sup>.

Tento zoznam obsahuje približne 100 000 látok identifikovaných podľa chemického názvu (a opis určitých typov látok), čísla CAS a sedemmiestneho čísla nazývaného číslo EINECS. Čísla EINECS sa vždy začínajú číslicou 2 alebo 3 (2xx-xxx-x, 3xx-xxx-xx). Látky oznámené v zozname EINECS prešli fázou overenia, ktorou sa opodstatňuje ich začlenenie do zoznamu.

Látky oznámené a umiestnené na trh po 18. septembri 1981 sú uvedené v Európskom zozname nových chemických látok (ELINCS)<sup>6</sup>. Tento zoznam obsahuje všetky látky oznámené do 31. mája 2008 v súlade so smernicou 67/548/EHS a jej zmenami. Tieto látky sa nazývajú tzv. nové látky, keďže neboli uvedené na trh Spoločenstva do 18. septembra 1981. Číslo ELINCS látke prideliť Európska komisia po jej preskúmaní príslušnými orgánmi členských štátov (MSCA). Zoznam ELINCS na rozdiel od zoznamu EINECS neobsahuje vo svojich záznamoch číslo CAS, ale číslo oznámenia pridelené príslušnými orgánmi členských štátov, obchodný názov (ak je k dispozícii), klasifikáciu a názov IUPAC v prípade klasifikovaných látok. Čísla ELINCS sú tiež sedemmiestne a vždy sa začínajú číslicou 4 (4xx-xxx-x).

Polyméry boli vylúčené z oznamovania do EINECS a vzťahovali sa na ne osobitné pravidlá v rámci smernice 67/548/EHS<sup>8, 9</sup>. Pojem „polymér“ bol ďalej vymedzený v siedmej zmene smernice 67/548/EHS (smernica 92/32/EHS). V dôsledku vykonávania tohto vymedzenia sa niektoré látky, ktoré boli považované za polyméry na základe pravidiel o oznamovaní do zoznamu EINECS, už nepovažujú za polyméry na základe 7. zmeny smernice. Keďže je potrebné oznamovať všetky látky, ktoré nie sú uvedené v zozname EINECS, teoreticky je potrebné oznamovať aj všetky látky, ktoré sa už nepovažujú za polyméry (NLP). Rada ministrov však objasnila, že na tieto látky, ktoré sa už nepovažujú za polyméry, sa nemá vzťahovať povinnosť spätného oznamovania. Komisia musela vypracovať zoznam látok, ktoré sa už nepovažujú za polyméry (zoznam NLP). Do tohto zoznamu sa mali začleniť látky, ktoré boli uvedené na trh EÚ od 18. septembra 1981 (dátum nadobudnutia účinnosti smernice 79/831/EHS, 6. zmeny smernice 67/548/EHS) do 31. októbra 1993 (dátum nadobudnutia účinnosti smernice 92/32/EHS, 7. zmeny smernice 67/548/EHS) a ktoré spĺňali požiadavky, na základe ktorých sa podľa pravidiel oznamovania do zoznamu EINECS považovali za polyméry, ale na základe 7. zmeny smernice už nie. Zoznam NLP nie je úplný. Látky v zozname NLP sa identifikujú na základe chemického názvu, čísla CAS a sedemmiestneho čísla nazývaného číslo NLP. Číslo NLP sa vždy začína číslicou 5 (5xx-xxx-x).

Tieto tri zoznamy látok (EINECS, ELINCS a NLP) sa súhrnne nazývajú zoznam EC. Každý

<sup>5</sup> EINECS je založený na zozname **E**uropean **C**ORE **I**NVENTORY (ECOIN), do ktorého mohli subjekty odvetvia pridať doplňujúce informácie o látkach (podľa kritérií pre oznamovanie látok pre zoznam EINECS). Zoznam ECOIN bol zostavený zlúčením jednotlivých zoznamov chemikálií, o ktorých sa predpokladalo, že boli uvedené na európsky trh (napr. zoznamu TSCA). Zoznam EINECS bol uverejnený 15. júna 1990 a obsahuje viac než 100 000 látok. Počas používania tohto zoznamu sa našlo množstvo chýb (tlačové chyby, napr. nesprávny chemický názov, vzorec alebo číslo CAS). Preto bolo 1. marca 2002 uverejnené jeho korigendum.

<sup>6</sup> 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) [Príručka rozhodnutí na vykonávanie šiesteho a siedmeho pozmeňujúceho návrhu k smernici 67/548/EHS (smernice 79/831/EHS a 92/32/EHS)]. Nemá dôverný charakter. EUR 20519 EN. Aktualizovaná verzia z júna 2005.

<sup>7</sup> Geiss F, Del Bino G, Blech G, et al kol. (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 (Oznámenie nových chemických látok podľa smernice 67/548/EHS o klasifikácii, balení a označovaní nebezpečných látok). Zoznam látok, ktoré sa už nepovažujú za polyméry. EUR 20853 EN.

<sup>9</sup> Rasmussen K, Christ G and Davis JB (1998), Registration of polymers in accordance with Directive 67/548/EEC. Tox Env Chem Vol. 67 (Registrácia polymérov v súlade so smernicou 67/548/EHS). Tox Env Chem Vol. 67, s. 251– 261.

látke z tohto zoznamu prideliť Európska komisia EC číslo (pozri podrobné informácie o EC čísle v dodatku II).

Informácie o týchto látkach je možné získať prostredníctvom webového sídla Európskej chemickej agentúry (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>) which also maintains and publishes an inventory of registered substances (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

Zoznam EC sa môže použiť ako nástroj pre výrobcov a dovozcov pri hľadaní EC čísla svojej látky.

### 3.2.2. Čísla v zozname

Agentúra ECHA považovala pri nastavovaní systému REACH-IT za užitočné automaticky pridelať čísla látkam zo všetkých technicky úplných predložení (predregistrácií, technologicky orientovaného výskumu a vývoja, žiadostí o informácie, registrácií, oznámení klasifikácie a označovania atď.), ktorým ešte nebolo pridelené EC číslo (pozri ďalej kritériá pridelenia čísel v zozname). Tým sa technicky uľahčilo riadenie, ďalšie spracovanie a identifikácia látok z týchto predložení. Tieto tzv. čísla v zozname majú rovnaký číselný formát ako čísla zo zoznamov EINECS, ELINCS a NLP, začínajú sa však inými číslicami.

Tieto čísla v zozname majú rovnaký číselný formát ako čísla zo zoznamov EINECS, ELINCS a NLP. V prípade veľkej väčšiny čísel v zozname a identifikácií látok, ktoré sú k nim priradené, sa nikdy nevykonala kontrola správnosti, platnosti a dodržania postupov uvedených v tomto usmerňovacom dokumente.

Treba zdôrazniť, že sa môže stať, že ak sa v prípade tej istej látky používajú rôzne identifikátory (napr. názov), tej istej látke sú pridelené rôzne čísla v zozname. V dôsledku toho je tiež možné, že číslo v zozname sa prideliť látke uvedenej v zozname EINECS, ELINCS alebo NLP. Môže sa to stať vtedy, ak sa pri predkladaní agentúre ECHA prostredníctvom systému REACH-IT použije názov látky, ktorý sa líši od názvu uvedeného v zozname EC.

Čísla v zozname môžu začínať napríklad číslicou 6, 7, 8 alebo 9 (6xx-xxx-x, 7xx-xxx-x, 8xx-xxx-x, 9xx-xxx-x).

Je dôležité poznamenať, že v prípade niektorých záznamov v zozname EINECS je opis látky relatívne široký a môže sa považovať za opis viac než jednej identity látky podľa článku 3 ods. 1 nariadenia REACH. V týchto prípadoch sa potenciálny registrujúci vyzýva na presnejšie opísanie danej látky (napr. prostredníctvom názvu IUPAC alebo iných dostupných identifikátorov). Registrujúci by však mali uviesť, ku ktorému záznamu zoznamu EINECS látka patrí. V takých prípadoch Európska chemická agentúra zvažuje, či je vhodné príslušnej látke prideliť číslo v zozname.

## 3.3. Požiadavky na identifikáciu látok v nariadeniach REACH a CLP

Ak sa vyžaduje registrácia podľa nariadenia REACH, musí obsahovať informácie o identifikácii látky podľa časti 2 prílohy VI. Tieto informácie musia byť primerané a dostatočné na identifikáciu látky. Ak nie je technicky možné poskytnúť informácie o jednom alebo viacerých parametroch identifikácie látky, alebo ak sa z vedeckého hľadiska zdá, že ich poskytnutie je zbytočné, musia sa jasne uviesť dôvody, ako sa uvádza v poznámke 1 prílohy VI.

Podobne, ak sa vyžaduje oznámenie podľa nariadenia CLP (článok 40 nariadenia CLP), toto oznámenie musí obsahovať informácie o identifikácii látky uvedené v častiach 2.1 až 2.3.4 prílohy VI k nariadeniu REACH. Tieto informácie musia byť primerané na identifikáciu látky. Ak nie je technicky možné poskytnúť informácie o jednom alebo viacerých parametroch identifikácie látky, alebo ak sa z vedeckého hľadiska zdá, že ich poskytnutie je zbytočné, musia sa jasne uviesť dôvody, ako sa uvádza v poznámke 1 prílohy VI.

Prehľad parametrov identifikácie látok podľa prílohy VI k nariadeniu REACH sa nachádza v Tabuľka 3.

**Tabuľka 3: Parametre identifikácie látok v časti 2 prílohy VI k nariadeniu REACH**

<b>Parametre identifikácie látok v časti 2 prílohy VI k nariadeniu REACH</b>	
2.	<p><b>IDENTIFIKÁCIA LÁTKY</b></p> <p><i>Informácie o každej látke musia byť postačujúce na jej identifikáciu. Ak nie je technicky možné poskytnúť informácie o jednej alebo viacerých ďalej uvedených položkách alebo ak sa z vedeckého hľadiska zdá, že ich poskytnutie je zbytočné, musia sa jasne uviesť dôvody.</i></p>
2.1	<b>Názov a akýkoľvek iný identifikátor každej látky</b>
2.1.1	<i>Názov (názvy) látky podľa názvoslovia IUPAC. Ak nie je dostupný, iný medzinárodný systematický názov (názvy).</i>
2.1.2	<i>Iné názvy (bežný názov, obchodný názov, skratka)</i>
2.1.3	<i>EC číslo, t. j. číslo EINECS, ELINCS alebo NLP alebo číslo pridelené agentúrou (ak je dostupné a potrebné)</i>
2.1.4	<i>Názov a číslo CAS (ak sú dostupné)</i>
2.1.5	<i>Iný identifikačný kód, ako napríklad colné číslo (ak je dostupné)</i>
2.2	<b>Informácie o molekulových a štruktúrnych vzorcoch alebo kryštálovej štruktúre každej látky</b>
2.2.1	<i>Molekulový vzorec a štruktúrny vzorec (vrátane zápisu SMILES a iného vyjadrenia, ak je dostupné) a opis kryštálovej štruktúry (štruktúr)</i>
2.2.2	<i>Informácie o optickej aktivite a typickom pomere (stereo)izomérov (ak je takáto informácia uplatniteľná a primeraná)</i>
2.2.3	<i>Molekulová hmotnosť alebo rozpätie molekulovej hmotnosti</i>
2.3.	<b>Zloženie každej látky</b>
2.3.1	<i>Stupeň čistoty (%), ak sa uplatňuje</i>

2.3.2	<p>Názvy zložiek a nečistôt</p> <p>V prípade látky neznámeho alebo variabilného zloženia, produktov komplexných reakcií alebo biologických materiálov (UVCB):</p> <ul style="list-style-type: none"><li>– názvy zložiek prítomných v koncentrácii <math>\geq 10\%</math>,</li><li>– názvy známych zložiek prítomných v koncentrácii <math>&lt; 10\%</math>,</li><li>– v prípade zložiek, ktoré nemožno identifikovať jednotlivo, opis skupín zložiek na základe chemickej povahy,</li><li>– opis pôvodu alebo zdroja a výrobný proces</li></ul>
2.3.3	<p>Typická koncentrácia a rozsah koncentrácie (v percentách) zložiek, skupín zložiek, ktoré nemožno identifikovať jednotlivo, a nečistôt, ako sa uvádza v bode 2.3.2.</p>
2.3.4	<p>Názvy a typická koncentrácia a rozsah koncentrácie (v percentách) prísad.</p>
2.3.5	<p>Všetky potrebné kvalitatívne analytické údaje špecifické pre identifikáciu látky, ako sú údaje o ultrafialovom žiarení, infračervenom žiarení, jadrovej magnetickej rezonancii, hmotnostnom spektre alebo difrakcii</p>
2.3.6	<p>Všetky potrebné kvantitatívne analytické údaje špecifické pre identifikáciu látky, ako sú údaje o chromatografii, titracii, elementárnej analýze alebo difrakcii</p>
2.3.7	<p>Opis analytických metód alebo príslušných bibliografických odkazov, ktoré sú potrebné na identifikáciu látky (vrátane identifikácie a kvantifikácie jej zložiek a prípadne jej nečistôt a prísad). Opis musí pozostávať z použitých experimentálnych protokolov a príslušnej interpretácie výsledkov uvedených v bodoch 2.3.1 až 2.3.6. Informácia má byť postačujúca na to, aby bolo možné metódy reprodukovat.</p>
2.5	<p><b>Akékoľvek iné dostupné informácie relevantné pre identifikáciu látky</b></p>

## 4. Usmernenie k identifikácii a pomenovaniu látok podľa nariadení REACH a CLP

### 4.1. Úvod

Pravidlá identifikácie a pomenovania sa líšia v závislosti od rôznych typov látok. Z praktických dôvodov má tento usmerňovací dokument takú štruktúru, aby mohol používateľ v prípade akéhokoľvek typu látky priamo prejsť na príslušnú kapitolu s požadovaným usmernením. Na tento účel sú ďalej uvedené vysvetlenia rôznych typov látok a nakoniec sa uvádza kľúč na vyhľadanie príslušnej kapitoly.

Identifikácia látok by mala byť založená aspoň na parametroch identifikácie látok uvedených v časti 2 prílohy VI k nariadeniu REACH (pozri Tabuľka 3). Každú látku je preto potrebné identifikovať pomocou kombinácie príslušných parametrov identifikácie:

- názvu IUPAC a/alebo iného názvu a ďalších identifikátorov, napr. čísla CAS, EC čísla (príloha VI, časť 2.1),
- molekulárnych a štruktúrnych informácií (príloha VI, časť 2.2),
- chemického zloženia (príloha VI, časť 2.3).

Látka je úplne identifikovaná svojím chemickým zložením, t. j. chemickou identitou a obsahom každej zložky v látke. Hoci je takáto priama identifikácia pri väčšine látok možná, v prípade určitých látok nie je uskutočniteľná alebo nie je podľa nariadení REACH a CLP dostatočná. V týchto prípadoch sa vyžadujú ďalšie alebo dodatočné informácie na identifikáciu látok.

Látky možno teda rozdeliť na dve hlavné skupiny:

1. „Presne definované látky“: Látky s definovaným kvalitatívnym a kvantitatívnym zložením, ktoré môžu byť dostatočne identifikované na základe identifikačných parametrov vyžadovaných v časti 2 prílohy VI k nariadeniu REACH.
2. „Látky UVCB“: Látky neznámeho alebo variabilného zloženia, produkty komplexných reakcií alebo biologické materiály. Tieto látky nemožno dostatočne identifikovať len na základe uvedených parametrov.

Variabilita zloženia sa v prípade presne definovaných látok určuje na základe horného a dolného limitu rozsahu koncentrácií hlavných zložiek. Variabilita látok UVCB je pomerne veľká a/alebo sa dá len ťažko predvídať.

Uznáva sa, že medzi presne definovanými látkami (produktmi reakcie s množstvom zložiek, pričom každá má široký rozsah) a látkami UVCB (produktmi reakcie s variabilným a ťažko predvídateľným zložením) budú existovať hraničné prípady. Registrujúci je povinný identifikovať látku tým najprimeranejším spôsobom.

Pravidlá identifikácie a pomenovania sa líšia podľa toho, či ide o „presne definované látky“ s jednou hlavnou zložkou alebo o „presne definované látky“ s viac ako jednou hlavnou zložkou. V rámci „UVCB“ sú opísané rôzne typy látok a rôzne pravidlá identifikácie a pomenovania.

V Tabuľka 4 a Tabuľka 5, sa uvádzajú hlavné identifikátory pre niekoľko príkladov rôznych typov látok. Tieto príklady sú zoskupené tak, aby boli podobnosti a rozdiely v rámci identifikácie látok jednoducho rozpoznatelne.

Tabuľka 4 a Tabuľka 5 nepredstavujú úplný zoznam všetkých možných typov látok. Toto zoskupenie látok s pravidlami identifikácie a pomenovania sa nemá považovať za oficiálny systém kategorizácie látok, ale za praktickú pomôcku na vhodné uplatňovanie konkrétnych pravidiel a vyhľadanie príslušného usmernenia v tomto usmerňovacom dokumente.



**Tabuľka 4: Zoskupenie hlavných identifikátorov pre príklady predstavujúce rôzne typy presne definovaných podobných látok**

Bežné vlastnosti	Príklady	Hlavné identifikátory
<p>Presne definované látky podľa chemického zloženia [Kapitola 4.2.]</p>	<p>Jednozložkové látky, napr. - benzén (95 %), - nikel (99 %). [Kapitola 4.2.1]</p>	<p>Chemické zloženie: jedna hlavná zložka ≥ 80 %: - chemická identita hlavnej zložky (chemický názov, číslo CAS, EC číslo atď.) - typická koncentrácia a horný a dolný limit</p>
	<p>Mnohozložkové látky, napr. definované produkty reakcie, ako napríklad reakčná zmes 2, 3 a 4-chlórtoluénu (každý 30 %) [Kapitola 4.2.2]</p>	<p>Chemické zloženie: zmes (reakčná zmes) hlavných zložiek, pričom každá je v rozpätí ≥ 10 – &lt; 80 %: - chemická identita každej hlavnej zložky - typické koncentrácie a horný a dolný limit každej zložky a reakčnej zmesi</p>
	<p>Látky definované viac než len chemickým zložením, napr. grafit a diamant [Kapitola 4.2.3]</p>	<p>Chemické zloženie jednozložkovej alebo mnohozložkovej látky A ďalšie fyzikálne alebo charakterizačné parametre: napr. kryštalomorfológia, (geologické) minerálne zloženie atď.</p>

Tabuľka 5: Zoskupenie hlavných identifikátorov pre príklady predstavujúce rôzne typy látok UVCB

Bežné vlastnosti		Príklady	Hlavné identifikátory		
			Zdroj	Proces	Ďalšie identifikátory
Látky UVCB (látky neznámeho alebo variabilného zloženia, produkty komplexných reakcií alebo biologické materiály) [Kapitola 4.3]	Biologické materiály (B)	Výťažky z biologických materiálov, napr. prírodné vône, prírodné oleje, prírodné farbivá a pigmenty	- Rastliny alebo zvieratá rôznych druhov a čeladií - Súčasť rastlín alebo zvierat	- Extrakcia - Frakcionovanie, koncentrovanie, izolácia, čistenie atď. - <u>Odvodenie</u> *	- Známe alebo všeobecné zloženie - Chromatografické a iné záznamy - Odkaz na normy - Index farieb
		Zložené biologické makromolekuly, napr. enzýmy, proteíny, fragmenty DNA alebo RNA, hormóny, antibiotiká			- Štandardný enzýmový index - Genetický kód - Stereokonfigurácia - Fyzikálne vlastnosti - Funkcia/činnosť - Štruktúra - Sekvencia aminokyselín
	Výrobky fermentácie antibiotiká, biopolyméry, enzýmy, vinázy (produkty fermentácie cukru), soforolipy atď.	- Živná pôda - Použité mikroorganizmy	- Fermentácia - Izolácia výrobkov - Kroky na odstránenie nečistôt	- Typ výrobkov: napr. antibiotiká, biopolyméry, proteíny atď. - Známe zloženie	
Chemické a minerálne látky s nedostatkom	Reakčné zmesi s ťažko predvídateľným a/alebo variabilným zložením	Východiskové materiály	<u>Typ chemickej reakcie</u> , napr. esterifikácia, alkylácia, hydrogenácia	- Známe zloženie - Chromatografické a iné záznamy - Odkaz na normy	

	očne definovaný, zložitým alebo variabilným zložením (UVC)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Frakcie alebo destiláty, napr. ropné látky</li> <li>- Hlinka, napr. bentonit</li> <li>- Dechty</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Ropné oleje</li> <li>- Uhlie/rašelina</li> <li>- Minerálne plyny</li> <li>- Minerály</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Frakcionovanie, destilácia</li> <li>- <u>Konverzia frakcií</u></li> <li>- Fyzické spracovanie</li> <li>- Rezíduá</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Hraničné pásma</li> <li>- Rozsah dĺžky reťazca</li> <li>- Aromatický/alifatický pomer</li> <li>- Známe zloženie</li> <li>- Štandardný index</li> </ul>
		Koncentráty alebo taveniny, napr. kovové minerály alebo rezíduá rôznych taviacich alebo metalurgických procesov, napr. kaly	Rudy	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Tavenie</li> <li>- Úprava za tepla</li> <li>- Rôzne metalurgické procesy</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Známe alebo všeobecné zloženie</li> <li>- Koncentrácia kovov</li> </ul>

\* Podčiarknuté procesy znamenajú syntézu novej molekuly

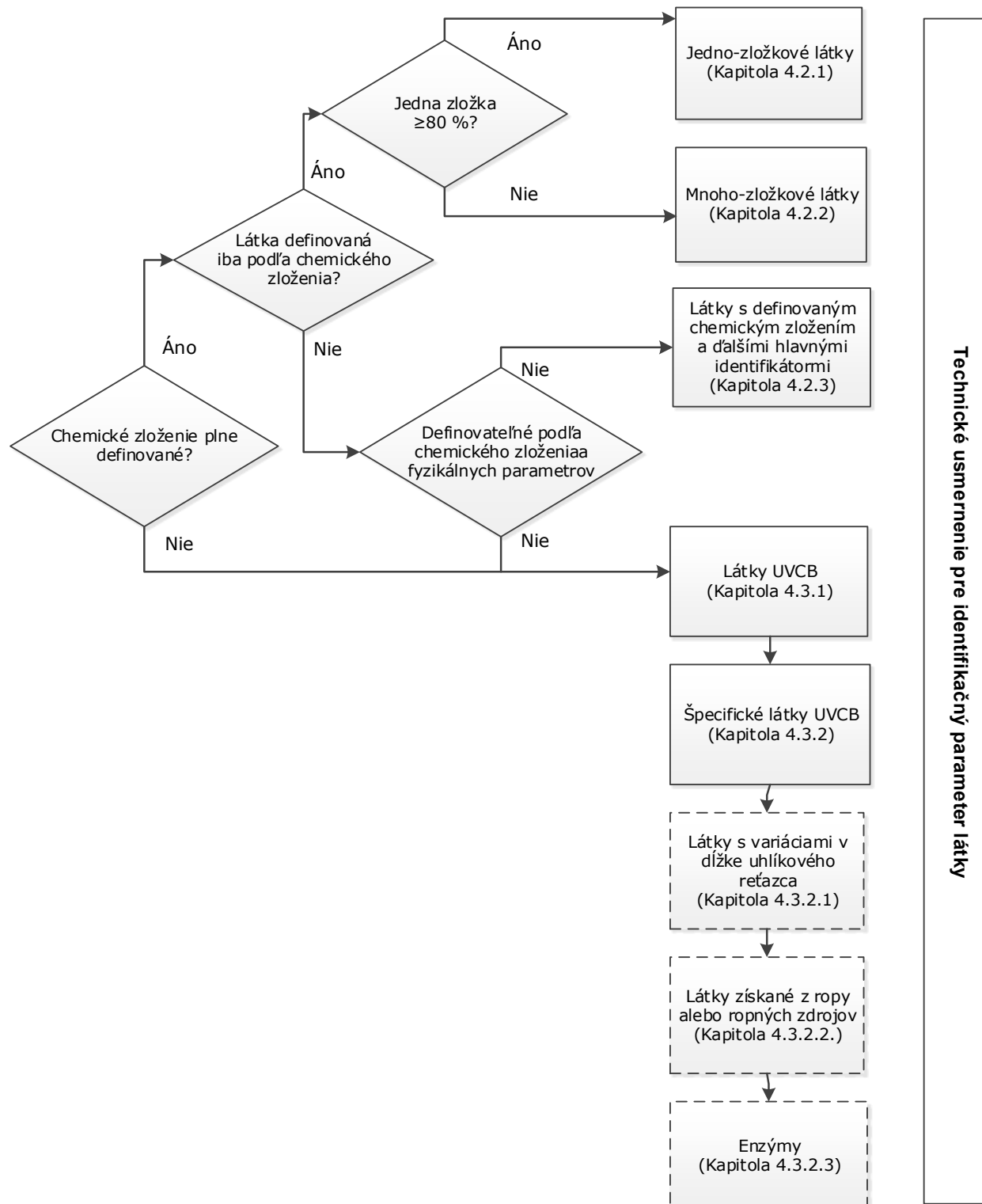
Táto kapitola sa delí na podkapitoly obsahujúce konkrétne usmernenia k identifikácii rôznych typov látok. Návod na orientáciu v príslušných kapitolách sa nachádza na Obrázok 1.

Návod na Obrázok 1 vychádza z kritérií empirického pravidla. Registrujúci zodpovedá za výber najvhodnejšej kapitoly a zaznamenanie identity látky v súlade s pravidlami a kritériami pre daný typ látky.

Základným pravidlom je, že látky sú v čo najväčšej možnej miere definujú podľa svojho chemického zloženia a identifikácie zložiek. Iné identifikátory sa použijú len vtedy, ak je to technicky neuskutočniteľné, ako sa uvádza pri rôznych typoch látok UVCB.

**Ak sa registrujúci odchýli od pravidiel na identifikáciu látky a kritérií tohto usmerňovacieho dokumentu, musí poskytnúť odôvodnenie. Identifikácia látky musí byť transparentná, zodpovedná a musí sa ňou zabezpečiť jednotnosť.**

Obrázok 1: Návod na orientáciu v kapitolách a dodatkoch usmerňovacieho dokumentu pri hľadaní vhodného usmernenia pre rôzne typy látok



Musí byť uvedený opis analytických metód a/alebo príslušné bibliografické odkazy na identifikáciu látky a prípadnú identifikáciu nečistôt a prísad (časti 2.3.5, 2.3.6 a 2.3.7 prílohy VI k nariadeniu REACH). Tieto informácie musia byť postačujúce na to, aby bolo možné metódy reprodukovať. Musia sa poskytnúť aj bežné výsledky, ku ktorým sa dospeje po použití analytických metód.

## 4.2. Látky s presne definovaným zložením

Látky s presne definovaným chemickým zložením sa pomenúvajú podľa hlavnej zložky (zložiek). V prípade niektorých typov látok chemické zloženie na charakterizáciu nepostačuje. Vtedy sa k identifikácii látky musia pridať niektoré dodatočné fyzikálne parametre súvisiace s jej chemickou štruktúrou.

Vo všeobecnosti platí, že by malo ísť o 100 % opis zloženia látky, pričom pri každej zložke sa vyžaduje úplná chemická špecifikácia vrátane štruktúrnych informácií. V prípade látok definovaných podľa chemického zloženia sa rozlišuje medzi:

- hlavnou zložkou: zložkou látky, ktorá nie je prísadou ani nečistotou a tvorí podstatnú časť látky, preto sa používa pri pomenovaní látok a podrobnej identifikácii látok,
- nečistotou: zložkou neúmyselne prítomnou v látke vznikajúcou počas výroby. Môže pochádzať z východiskových materiálov alebo môže byť výsledkom druhotných alebo neúplných reakcií v priebehu výrobného procesu. Hoci nečistoty môžu byť prítomné v konečnej látke, neboli pridané zámerné,
- prísadou: látkou zámerné pridanou s cieľom stabilizovať látku.

Všetky zložky (okrem prísad), ktoré v jednozložkovej alebo mnohozložkovej látke netvoria hlavnú zložku (zložky), sa považujú za nečistoty. Napriek tomu, že v určitých sektoroch sa zvykne používať pojem „stopové množstvo“, v tomto usmerňovacom dokumente sa používa iba pojem „nečistoty“.

Pri rôznych zložkách existujú rôzne požiadavky na identifikáciu:

- hlavné zložky slúžia na pomenovanie látky a každá hlavná zložka sa má presne identifikovať,
- nečistoty sa nepoužívajú na pomenovanie látky, ale každá nečistota sa má presne identifikovať,
- prísady sú súčasťou zloženia látky (nie sú však súčasťou názvu), preto je ich vždy potrebné presne identifikovať,
- Presná identifikácia hlavných zložiek, nečistôt a prísad spočíva v uvedení názvu IUPAC, chemického názvu, štruktúrneho vzorca, EC čísla a čísla CAS, ak je dostupné.

Na rozlišovanie medzi jednozložkovými a mnohozložkovými látkami sa používa niekoľko konvencií:

- Jednozložková látka je látka, v ktorej je jedna zložka prítomná v koncentrácii aspoň 80 % (w/w) a ktorá obsahuje maximálne 20 % (w/w) nečistôt.

Jednozložková látka je pomenovaná podľa jednej hlavnej zložky.

- Mnohozložková látka je látka pozostávajúca z niekoľkých hlavných zložiek prítomných zvyčajne v hmotnostných koncentráciách  $\geq 10\%$  a  $< 80\%$  (w/w).

Mnohozložková látka sa nazýva reakčná zmes dvoch alebo viacerých hlavných zložiek.

Tieto pravidlá sa považujú za usmernenie. Odchýlka je možná v prípade, ak sa poskytne dostatočné odôvodnenie.

Bežne je potrebné špecifikovať nečistoty prítomné v koncentrácii  $\geq 1\%$ . Vždy a bez ohľadu na koncentrácie sa však majú špecifikovať nečistoty, ktoré sú dôležité pri klasifikácii a/alebo

hodnotení látok PBT<sup>10</sup>. Vo všeobecnosti platí, že informácie o zložení je potrebné vyplniť na 100 %.

Prísadami v zmysle nariadení REACH a CLP a tohto usmerňovacieho dokumentu sú látky potrebné na zachovanie stability látky. Prísady preto predstavujú základnú zložku látky a zohľadňujú sa pri vytváraní hmotnostnej bilancie. Mimo vymedzenia nariadenia REACH a tohto usmerňovacieho dokumentu sa pojem „prísada“ používa aj na zámerne pridávané látky s inými funkciami, napr. látky na úpravu pH alebo farbivá. Tieto zámerne pridávané látky nie sú súčasťou látok ako takých, a preto sa pri vytváraní hmotnostnej bilancie nezohľadňujú.

Zmesi sú podľa vymedzenia v nariadeniach REACH a CLP zámerné zmesi látok, a preto sa nepovažujú za mnohozložkové látky.

Osobitné usmernenie k jednozložkovým látkam sa nachádza v kapitole 4.2.1 a osobitné usmernenie k mnohozložkovým látkam sa nachádza v kapitole 4.2.2. Usmernenia k látkam vyžadujúcim dodatočné informácie (napr. určité minerály) sa nachádzajú v kapitole 4.2.3.

#### **4.2.1. Jednozložkové látky**

Jednozložková látka je látka definovaná svojím kvantitatívnym zložením, v ktorom jedna hlavná zložka je prítomná aspoň v 80 % hmotnostných (w/w).

##### **Konvencia pomenovania**

Jednozložková látka je pomenovaná podľa hlavnej zložky. Názov by sa mal v zásade stanoviť v angličtine podľa pravidiel názvoslovia IUPAC (pozri dodatok I). Ďalšie medzinárodne uznané pomenovania sa uvádzajú dodatočne.

##### **Identifikátory**

Jednozložková látka sa identifikuje podľa chemického názvu a všetkých iných dostupných identifikátorov (vrátane molekulového a štruktúrneho vzorca alebo kryštálovej štruktúry) hlavnej zložky. Musí sa identifikovať každá nečistota a/alebo prísada jednozložkovej látky. Musia sa uviesť typické koncentrácie a rozsahy koncentrácií hlavnej zložky, nečistôt a/alebo prísad. Všetky tieto údaje musia byť podložené analytickými informáciami.

<b>Príklad</b>				
<b>Hlavná zložka</b>	<b>Obsah (%)</b>	<b>Nečistota</b>	<b>Obsah (%)</b>	<b>Identifikácia látky</b>
m-xylén	91	o-xylén	5	m-xylén
o-xylén	87	m-xylén	10	o-xylén

Bežne je hlavná zložka prítomná v > 80 % a musí sa úplne špecifikovať podľa všetkých uvedených parametrov. Súčet typických koncentrácií hlavnej zložky a nečistôt by mal byť 100 %. Nečistoty prítomné v koncentrácii > 1 % sa musia špecifikovať podľa názvu a

<sup>10</sup> Ďalšie informácie o hodnotení látok PBT a o príslušných kritériách sa nachádzajú v Usmernení k požiadavkám na informácie a k hodnoteniu chemickej bezpečnosti v kapitole R11: Hodnotenie látok PBT.

identifikátorov. Nečistoty, ktoré sú dôležité pri klasifikácii a/alebo hodnotení látok PBT<sup>11</sup>, sa majú vždy a bez ohľadu na koncentrácie špecifikovať podľa rovnakých identifikátorov.

Pravidlo 80 % sa uplatňuje správne, ak sa do hmotnostnej bilancie nezačleňujú zámerne pridávané látky, napríklad látky na úpravu pH alebo farbivá.

Pravidlo 80 % sa uplatňuje pri oznamovaní nových látok (smernica 67/548/EHS) a používa sa v nariadení REACH. Odchýlka od tohto pravidla 80 % sa však musí odôvodniť. K možným príkladom odôvodnenej odchýlky patria:

- Ak má hlavná zložka koncentráciu < 80 %, látka však vykazuje podobné fyzikálno-chemické vlastnosti a rovnaký profil nebezpečnosti ako iné jednozložkové látky s rovnakou identitou, ktoré spĺňajú pravidlo 80 %.
- Rozsah koncentrácií pre hlavnú zložku a nečistoty sa prekrýva s kritériom 80 % a hlavná zložka má len príležitostne koncentráciu ≤ 80 %.

Príklady									
Látka	Hlavná zložka	Horná hranica obsahu (%)	Typický obsah (%)	Dolná hranica obsahu (%)	Nečistota	Horná hranica obsahu (%)	Typický obsah (%)	Dolná hranica obsahu (%)	Identita látky
1	o-xylén	90	85	65	m-xylén	35	15	10	o-xylén
2	o-xylén m-xylén	90 35	85 15	65 10	p-xylén	5	4	1	o-xylén

Z dôvodu rozsahov koncentrácií hlavnej zložky a nečistoty sa môžu látky 1 a 2 považovať za mnohozložkové látky skladajúce sa z dvoch hlavných zložiek, o-xylénu a m-xylénu, alebo za jednozložkové látky. V takom prípade treba prijať rozhodnutie, že ide o jednozložkovú látku, a to preto, že o-xylén je bežne prítomný v koncentrácii > 80 %.

### Analytické informácie

Na potvrdenie identity zložiek a nečistôt jednozložkovej látky sa musí poskytnúť dostatok kvalitatívnych údajov. Na potvrdenie identity látky môže byť vhodných niekoľko spektroskopických metód, ako sú ultrafialová a viditeľná absorpčná spektroskopia (UV/Vis), infračervená spektroskopia (IR), spektroskopia nukleárnej magnetickej rezonancie (NMR) a hmotnostná spektroskopia (MS). Pri anorganických látkach alebo organických a/alebo kovovo-organických látkach, ktoré možno zistiť/merať podľa kryštálovej štruktúry, môže byť vo väčšine prípadov vhodnejšie použitie difrakcie röntgenových lúčov (XRD).

Na potvrdenie zloženia látky sa musia uviesť kvantitatívne metódy, akými sú chromatografické metódy, napr. plynová chromatografia (GC) alebo vysokoúčinná kvapalinová chromatografia (HPLC) spolu s metódou detekcie. Pri anorganických látkach môže byť vhodnejšie použitie difrakcie röntgenových lúčov (XRD), röntgenovej fluorescenčnej analýzy (XRF), atómovej absorpčnej spektroskopie (AAS), optickej emisnej spektrometrie s indukčne viazanou plazmou (ICP-OES) alebo hmotnostnej spektrometrie s indukčne viazanou plazmou (ICP-MS). V prípade potreby sa musia použiť aj iné platné metódy separácie zložiek.

Opis musí pozostávať z použitých experimentálnych protokolov a príslušnej interpretácie výsledkov.

<sup>11</sup> Ďalšie informácie o hodnotení látok PBT a o príslušných kritériách sa nachádzajú v Usmernení k požiadavkám na informácie a k hodnoteniu chemickej bezpečnosti v kapitole R11: Hodnotenie látok PBT.



Analytické metódy sa neustále vyvíjajú a zdokonaľujú. Regstrujúci je zodpovedný za predloženie primeraných analytických údajov.

#### 4.2.2. Mnohozložkové látky

Mnohozložková látka je látka definovaná svojím kvantitatívnym zložením, v ktorom je viac ako jedna hlavná zložka prítomná v koncentrácii  $\geq 10\%$  hmotnostných (w/w) a  $< 80\%$  hmotnostných (w/w). Mnohozložková látka je výsledkom výrobného procesu<sup>12</sup>.

Podľa nariadenia REACH sa vyžaduje registrácia látky vo forme, v akej sa vyrába. Ak sa mnohozložková látka vyrába, musí sa mnohozložková látka zaregistrovať<sup>13 14</sup>. Rozhodnutie o tom, do akej miery sa na jednotlivé kroky pri výrobe látky vzťahuje vymedzenie pojmu „výroba“, sa prijíma v každom prípade osobitne. Ak sa profil nebezpečnosti látky dostatočne opíše v informáciách o jednotlivých zložkách, látku ako takú nie je potrebné testovať.

#### Konvencia pomenovania

Mnohozložková látka sa pomenúva ako reakčná zmes hlavných zložiek látky ako takej, t. j. nie ako východiskové materiály potrebné na výrobu látky. Všeobecný formát je: „Reakčná zmes [názvy hlavných zložiek]“. Odporúča sa, aby sa názvy zložiek uvádzali v abecednom poradí a oddeľovali sa spojkou „a“. V názve sa používajú iba hlavné zložky v typickej koncentrácii  $\geq 10\%$ . Názvy by sa mali v zásade uvádzať v angličtine podľa pravidiel názvoslovia IUPAC. Ďalšie medzinárodne uznané pomenovania sa uvádzajú dodatočne.

#### Identifikátory

Mnohozložková látka sa identifikuje podľa chemického názvu a všetkých iných dostupných identifikátorov látky ako takej a podľa chemickej identity zložiek (vrátane molekulového a štruktúrneho vzorca alebo kryštálovej štruktúry). Musí sa identifikovať každá nečistota a/alebo prísada mnohozložkovej látky. Musia sa uviesť typické koncentrácie a rozsahy koncentrácií zložiek, nečistôt a/alebo prísad. Všetky tieto údaje musia byť podložené analytickými informáciami.

Príklad				
Hlavné zložky	Obsah (%)	Nečistota	Obsah (%)	Identifikácia látky
m-xylén	50	p-xylén	5	Reakčná zmes m-xylénu a o-xylénu
o-xylén	45			

V prípade mnohozložkových látok je chemické zloženie známe a pri identifikácii látky je dôležitá viac než jedna hlavná zložka. Chemické zloženie látky je okrem toho predvídateľné ako typické hodnoty alebo rozsahy. Hlavné zložky sa úplne špecifikujú podľa všetkých dôležitých parametrov. Súčet typických koncentrácií hlavných zložiek ( $\geq 10\%$ ) a nečistôt ( $< 10\%$ ) by mal byť 100 %.

Na správnu identifikáciu mnohozložkovej látky sa nemajú do hmotnostnej bilancie začleňovať zámerné pridávané látky (napr. látky na úpravu pH alebo farbivá).

<sup>12</sup> Rozdiel medzi zmesou a mnohozložkovou látkou spočíva v tom, že zmes sa získava zmiešaním dvoch alebo viacerých látok bez toho, aby prebehla chemická reakcia. Mnohozložková látka je výsledkom chemickej reakcie.

<sup>13</sup> Z registrácie podľa ustanovení nariadenia REACH je vyňatých množstvo látok (napr. látky uvedené v prílohe IV).

<sup>14</sup> Tento prístup sa nevzťahuje na množstvo konkrétnych látok, napríklad minerály (podrobnejšie informácie pozri v kapitole 7.5).

Nečistoty prítomné v koncentrácii  $\geq 1\%$  sa majú špecifikovať podľa názvu a všetkých dostupných identifikátorov. Nečistoty, ktoré sú dôležité pri klasifikácii a/alebo hodnotení látok PBT, sa majú vždy a bez ohľadu na koncentrácie špecifikovať podľa rovnakých identifikátorov.

Príklad								
Hlavná zložka	Horná hranica obsahu (%)	Typický obsah (%)	Dolná hranica obsahu (%)	Nečistota	Horná hranica obsahu (%)	Typický obsah (%)	Dolná hranica obsahu (%)	Identita látky
anilín	90	75	65	fenantrén	5	4	1	Reakčná zmes anilínu a naftalénu
naftalén	35	20	10					

Podľa pravidiel v tomto usmerňovacom dokumente je táto látka mnohozložková. Aj keď rozsah jednej zložky je  $> 80\%$ , stáva sa to len výnimočne, a typické zloženie je  $< 80\%$ .

Vždy, keď je hlavná zložka mnohozložkovej látky  $\geq 80\%$  alebo  $< 10\%$  hmotnostného (w/w), musí sa poskytnúť odôvodnenie tejto odchýlky. Možným príkladom odôvodnenej odchýlky je:

- Zložka má len príležitostne koncentráciu  $\geq 80\%$  alebo  $< 10\%$ .

Látka napríklad obsahuje dve zložky, jednu v koncentrácii  $85\%$  a druhú v koncentrácii  $10\%$ , zvyšok tvoria nečistoty. Obe zložky tvoria základ požadovaného technického účinku látky. V tomto prípade možno látku napriek tomu, že jedna zložka je prítomná v koncentrácii  $> 80\%$ , opísať ako dvojzložkovú látku.

### Analytické informácie

Na potvrdenie identity zložiek a nečistôt mnohozložkovej látky sa musí poskytnúť dostatok kvalitatívnych údajov. Na potvrdenie identity látky môže byť vhodných niekoľko spektroskopických metód, ako sú ultrafialová a viditeľná absorpčná spektroskopia (UV/Vis), infračervená spektroskopia (IR), spektroskopia nukleárnej magnetickej rezonancie (NMR) a hmotnostná spektroskopia (MS). Pri anorganických látkach alebo organických a/alebo kovovo-organických látkach, ktoré možno zistiť/merať podľa kryštálovej štruktúry, môže byť vo väčšine prípadov vhodnejšie použitie difrakcie röntgenových lúčov (XRD).

Na potvrdenie zloženia látky sa musia uviesť kvantitatívne metódy, akými sú chromatografické metódy, napr. plynová chromatografia (GC) alebo vysokoúčinná kvapalinová chromatografia (HPLC) spolu s metódou detekcie. Pri anorganických látkach môže byť vhodnejšie použitie difrakcie röntgenových lúčov (XRD), röntgenovej fluorescenčnej analýzy (XRF), atómovej absorpčnej spektroskopie (AAS), optickej emisnej spektrometrie s indukčne viazanou plazmou (ICP-OES) alebo hmotnostnej spektrometrie s indukčne viazanou plazmou (ICP-MS). V prípade potreby sa musia použiť aj iné platné metódy separácie zložiek.

Opis musí pozostávať z použitých experimentálnych protokolov a príslušnej interpretácie výsledkov.

Analytické metódy sa neustále vyvíjajú a zdokonaľujú. Registrujúci je zodpovedný za predloženie primeraných analytických údajov.

### Registrácia jednotlivých zložiek mnohozložkovej látky

Vo všeobecnosti platí, že pri zaznamenávaní identity látok na účely registrácie by sa mal využiť prístup pre mnohozložkové látky (t. j. registráciu mnohozložkovej látky). Odchylne od

tohto prístupu je možné v opodstatnených prípadoch zaregistrovať aj jednotlivé zložky. Možnosť odchyliť sa od štandardného prípadu identifikácie (a možnej registrácie) látok podľa ich jednotlivých zložiek sa poskytuje, keď:

- nie sú zmiernené požiadavky na informácie,
- existujú dostatočné údaje na odôvodnenie prístupu registrácie jednotlivých zložiek, t. j. prístupu, pri ktorom sa zvyčajne v porovnaní so štandardným prístupom nepodporuje dodatočné testovanie (na stavovcoch),
- registrácia jednotlivých zložiek vedie k efektívnosti (t. j. k zabráneniu množstvu registrácií látok zložených z rovnakých zložiek),
- sa poskytnú informácie o zložení jednotlivých reakčných zmesí.

Ponúkaná flexibilita nesmie slúžiť ako odôvodnenie nesplnenia požiadaviek na údaje. V prípade napríklad 1 200 ton ročne mnohozložkovej látky (C + D) so zložením 50 % látky C a 50 % látky D bude mať tento prístup za následok dve registrácie s týmito informáciami:

Látka C

- Hmotnosť 600
- Požiadavky na údaje sa musia splniť pre množstvo > 1 000 ton (príloha X)

Látka D

- Hmotnosť 600
- Požiadavky na údaje sa musia splniť pre množstvo > 1 000 ton (príloha X)

Tento prístup je potrebné kombinovať s požiadavkou nariadenia REACH na sčítanie objemov rovnakej látky pre každý právny subjekt. Navrhuje sa stanoviť požiadavky na údaje takto:

- sčítať všetky objemy jednotlivých zložiek (podľa množstva v látke),
- odkaz na najvyšší objem látky, ktorý obsahuje danú zložku.

Požiadavky na informácie by sa mali stanoviť na základe najvyššieho výsledku. V prípade oznamovania hmotností by sa mal zohľadniť výsledok sčítania hmotností všetkých jednotlivých zložiek. Na ilustrovanie praktického uplatňovania tohto prístupu sa poskytujú zjednodušené príklady:

#### *Príklad 1*

Mnohozložková látka C + D + E je výsledkom procesu realizovaného v jednom právnom subjekte, v rámci ktorého dosiahli rôzne látky tieto výsledky:

- Látka 1: 50 % látky C a 25 % látky D a 25 % látky E, 1 100 ton ročne
- Látka 2: 50 % látky C a 50 % látky D, 500 ton ročne

V tomto prípade je tiež produkt reakcie východiskovým bodom: dve látky by sa mali zaregistrovať ako mnohozložkové látky. Ak sa dodrží prístup registrácie jednotlivých zložiek<sup>15</sup>, uplatňujú sa tieto výsledky:

Oznámenie látky D by v tomto prípade znamenalo:

- Hmotnosť:  $(25 \% * 1\ 100) + (50 \% * 500) = 525$  ton ročne

Určovanie požiadaviek na informácie vychádza z najzávažnejšej požiadavky. V tomto prípade: > 1 000 ton ročne, keďže celková hmotnosť mnohozložkovej látky C + D + E je viac než 1 000 ton ročne.

Poznámka: V tomto príklade by sa podľa toho mali zaregistrovať aj látky C a E.

---

<sup>15</sup> Príklad má slúžiť len na ilustráciu stanovenia požiadaviek na informácie a oznámenie objemov. Nerieši sa v ňom, či je v tomto prípade prístup odôvodnený.

### Príklad 2

Mnohozložková látka G + H + I je výsledkom procesu realizovaného v jednom právnom subjekte, v rámci ktorého dosiahli rôzne látky tieto výsledky:

- Látka 3: 65 % látky G a 15 % látky H a 20 % látky I, 90 ton ročne
- Látka 4: 60 % látky G a 40 % látky H, 90 ton ročne

Oznámenie látky G:

- Hmotnosť:  $(65 \% * 90) + (60 \% * 90) = 112,5$  ton ročne

Určovanie požiadaviek na informácie vychádza z najzávažnejšej požiadavky. V tomto prípade: > 100 ton ročne, keďže celková hmotnosť zložky G je viac než 100 ton ročne.

Poznámka: V tomto príklade by sa podľa toho mali zaregistrovať aj látky H a I.

Okrem stanovenia uvedených požiadaviek na informácie je potrebné zvážiť aj počet nových štúdií (na stavovcoch), ktoré je potrebné realizovať. Pred prijatím rozhodnutia o stratégii musia potenciálni registrujúci zvážiť, či existuje dostatok štúdií (na stavovcoch) a či navrhovaná flexibilita povedie k menšiemu alebo väčšiemu počtu nových testovaní (na stavovcoch). Mala by sa prijať stratégia, ktorou sa zabráni novému testovaniu (na stavovcoch).

V prípade pochybností má byť vždy štandardným postupom zaznamenania identity látky na účely registrácie identifikácia látky vo forme, v akej sa vyrába.

### 4.2.3. Látky definovaného chemického zloženia a iné hlavné identifikátory

Niektoré látky (napr. anorganické minerály), ktoré sa dajú identifikovať podľa svojho chemického zloženia, je potrebné podrobnejšie špecifikovať podľa ďalších identifikátorov s cieľom získať vlastnú identifikáciu látky. Tieto látky môžu byť jednozložkové alebo mnohozložkové, na zaznamenanie jednoznačnej identity látky sú však okrem identifikačných parametrov látky opísaných v predchádzajúcich kapitolách potrebné ďalšie hlavné identifikátory.

#### Príklady

Pri niektorých nekovových mineráloch (z prírodných zdrojov alebo syntetických) s jedinečnými štruktúrami sú na jednoznačnú identifikáciu látky potrebné aj informácie o morfológii a minerálnom zložení. Príkladom je kaolín (CAS 1332-58-7) zložený z kaolinitu, kremičitanu hlinitodraselného, živca a kremeňa.

Usmernenie k splneniu osobitných povinností podľa nariadenia REACH pre látky vo forme „nanoštruktúr“ sa uvádza v *Dodatku pre nanoštruktúry uplatniteľnom na Usmernenie k registrácii a identifikácii látky*<sup>16</sup>. Poskytnuté odporúčania zahŕňajú otázky špecifické pre nanoštruktúry, ktoré súvisia s identifikáciou a charakterizáciou nanoštruktúr.

### Konvencia pomenovania

V zásade je potrebné dodržať rovnakú konvenciu pomenovania ako v prípade jednozložkových látok (pozri kapitolu 4.2.1) alebo mnohozložkových látok (pozri kapitolu 4.2.2).

V prípade anorganických minerálov možno pre zložky použiť mineralogické názvy. Apatit je

<sup>16</sup> Dodatok pre nanoštruktúry uplatniteľný na Usmernenie k registrácii a identifikácii látky, dostupný na <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>

napríklad mnohozložková látka zložená zo skupiny fosfátových minerálov, ktorá sa zvyčajne nazýva hydroxylapatit, fluórapatit a chlórapatit, pričom je pomenovaná podľa vysokých koncentrácií OH<sup>-</sup>, F<sup>-</sup>, alebo Cl<sup>-</sup> iónov, v tomto poradí, v kryštáli. Vzorec zmesi troch najbežnejších druhov je Ca<sub>5</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>(OH, F, Cl). Ďalším príkladom je aragonit, jedna z osobitných kryštalických štruktúr uhličitanu vápenatého.

### Identifikátory

Tieto látky sa identifikujú a pomenúvajú podľa pravidiel pre jednozložkové látky (pozri kapitolu 4.2.1) alebo mnohozložkové látky (pozri kapitolu 4.2.2). Ďalšie špecifické hlavné identifikačné parametre, ktoré sa majú pridať, závisia od látky. Príkladom ďalších hlavných identifikátorov môže byť elementárne zloženie so spektrálnymi údajmi, kryštalická štruktúra určená na základe analýzy pomocou difrakcie röntgenových lúčov (XRD), infračervené absorpčné maximá, index rozpínania, výmenná kapacita katiónov alebo iné fyzikálne a chemické vlastnosti.

V prípade minerálov je na identifikáciu mineralogického zloženia a kryštalickej štruktúry dôležité kombinovať výsledky elementárneho zloženia so spektrálnymi údajmi. To sa následne potvrdí charakteristickými fyzikálno-chemickými vlastnosťami ako kryštalická štruktúra (určená na základe analýzy pomocou difrakcie röntgenových lúčov), tvar, tvrdosť, schopnosť rozpínania, hustota a/alebo veľkosť povrchu.

Pre špecifické minerály je možné zadať osobitné ďalšie hlavné identifikátory, keďže minerály majú charakteristické fyzikálno-chemické vlastnosti, ktoré umožňujú dokončenie ich identifikácie, a to: veľmi nízka tvrdosť v prípade mastenca, schopnosť rozpínania v prípade bentonitu, tvary v prípade diatomitu, veľmi vysoká hustota v prípade baritu a povrchová plocha (adsorpcia dusíka).

### Analytické informácie

Hlavným kritériom je, že všetky potrebné informácie by sa mali poskytnúť na potvrdenie štruktúry látky. Musia sa poskytnúť rovnaké analytické informácie ako v prípade jednozložkových látok (pozri kapitolu 4.2.1) alebo mnohozložkových látok (pozri kapitolu 4.2.2).

## 4.3. Látky UVCB

Látky (neznámeho) **Unknown** alebo (variabilného) **Variable** zloženia, produkty komplexných (**Complex**) reakcií alebo biologické (**Biological**) materiály<sup>17, 18, 19</sup>, nazývané tiež látky UVCB, sa nedajú dostatočne identifikovať podľa svojho chemického zloženia, pretože:

- obsahujú pomerne veľký počet zložiek a/alebo
- ich zloženie je do značnej miery neznáme a/alebo
- rôznorodosť zloženia je relatívne veľká alebo ťažko predvídateľná.

Preto sú na identifikáciu látok UVCB, okrem toho, čo je známe o ich chemickom zložení,

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

<sup>18</sup> US EPA (2005-B): Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Combinations of two or more substances: complex reaction products (Registrácia zoznamu kombinácií dvoch alebo viacerých látok podľa zákona o kontrole toxických látok: produkty komplexných reakcií).

<sup>19</sup> 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 (Registrácia zoznamu chemických látok neznámeho alebo variabilného zloženia, produktov komplexných reakcií a biologických materiálov podľa zákona o kontrole toxických látok: látky UVCB).

potrebné aj iné typy informácií.

Z informácií v Tabuľka 5 vyplýva, že hlavné identifikátory rôznych typov látok UVCB sa týkajú zdroja látky a použitého procesu alebo patria do skupiny iných hlavných identifikátorov (napr. chromatografických alebo iných záznamov). Počet a druh identifikátorov uvedených v Tabuľka 5 predstavujú príklad variability typov a nemajú sa považovať za komplexný prehľad. Ak je známe chemické zloženie napr. produktu komplexnej reakcie alebo látky biologického pôvodu, identifikácia látky by mala byť jednozložková alebo mnohozložková, podľa potreby. Po definovaní látky ako látky UVCB bude každá významná zmena zdroja alebo procesu pravdepodobne viesť k inej látke, ktorú treba znovu registrovať. Ak je reakčná zmes identifikovaná ako mnohozložková látka, látka môže byť odvodená z iného zdroja a/alebo na základe rôznych procesov, keďže zloženie záverečnej látky zostáva v zadanom rozsahu. Nová registrácia sa preto nevyžaduje.

Všeobecné usmernenie k látkam UVCB sa nachádza v kapitole 4.3.1 a osobitné usmernenie k látkam s odchýlkou dĺžky uhlíkového reťazca, látkam získaným z ropy alebo ropných zdrojov a enzýmov ako k osobitným typom látok UVCB sa nachádza v kapitole 4.3.2.

### 4.3.1. Všeobecné usmernenie k látkam UVCB

V tejto kapitole usmerňovacieho dokumentu sa nachádza všeobecné usmernenie k používaniu určitých hlavných identifikátorov, okrem identifikačných parametrov látky uvedených v prílohe VI (časť 2) k nariadeniu REACH, na identifikáciu látok UVCB.

#### Informácie o chemickom zložení

Látky UVCB buď nemožno jedinečne špecifikovať pomocou názvu IUPAC zložiek, keďže všetky zložky sa nedajú identifikovať, alebo ich možno všeobecne špecifikovať, podrobnosti však nebudú k dispozícii z dôvodu variability presného zloženia. Z dôvodu malých rozdielov medzi zložkami a nečistotami by sa pojmy „hlavné zložky“ a „nečistoty“ nemali pre látky UVCB považovať za podstatné.

Chemické zloženie a identifikáciu zložiek by sa však mali uviesť, ak sú tieto informácie známe. Opis zloženia možno často poskytnúť všeobecnejšie, napríklad „lineárne mastné kyseliny C8 až C16“ alebo „etoxyláty alkoholu s alkoholmi C10 až C14 a 4 až 10 jednotkami etoxylátu“. Informácie o chemickom zložení možno poskytnúť aj na základe známych referenčných vzoriek alebo noriem. V mnohých prípadoch je tiež možné použiť indexy a existujúce kódy. K ďalším všeobecným informáciám o zložení môžu patriť tzv. „záznamy“, čiže chromatografické alebo spektrálne obrazy zobrazujúce charakteristický distribučný vzorec maxím.

V prípade látok UVCB sa musia špecifikovať všetky zložky prítomné v koncentráciách  $\geq 10\%$  a všetky ostatné známe zložky prítomné v koncentráciách  $< 10\%$  podľa názvu IUPAC v angličtine, typických koncentrácií a rozsahov koncentrácií.

Okrem toho musíte pre každú zložku uviesť číselný identifikátor (číslo CAS a/alebo EC číslo alebo číslo v zozname), ak je dostupné.

Zložky, ktoré nie je možné identifikovať jednotlivo, sa majú opísať v skupinách na základe chemickej povahy. V tomto prípade musíte pre každú skupinu uviesť aspoň chemický názov, typickú koncentráciu a rozsah koncentrácie. Okrem toho musíte uviesť molekulárne a štruktúrne vzorce, ak sú dostupné.

Zložky, ktoré sú dôležité pri klasifikácii a/alebo hodnotení látok PBT<sup>20</sup>, sa majú vždy a bez

<sup>20</sup> Ďalšie informácie o hodnotení látok PBT a o príslušných kritériách sa nachádzajú v Usmernení k požiadavkám na informácie a k hodnoteniu chemickej bezpečnosti v kapitole R11: Hodnotenie látok PBT.

ohľadu na koncentrácie špecifikovať podľa rovnakých identifikátorov.

Neznáme zložky, ktoré neprispievajú ku klasifikácii, sa musia identifikovať v možno najväčšej možnej miere pomocou všeobecného opisu ich chemického charakteru. Prísady sa musia úplne špecifikovať podobne ako bolo opísané v prípade presne definovaných látok.

### **Hlavné parametre identifikácie – názov, zdroj a proces**

Keďže samotné chemické zloženie nie je na identifikáciu látky dostatočné, látka sa má vo všeobecnosti identifikovať podľa jej názvu, pôvodu alebo zdroja a opisu výrobného procesu. Dôležitými identifikátormi, a to buď príslušnými všeobecnými (napr. bod varu), alebo dôležitými pre konkrétne skupiny látok (napr. katalytická činnosť enzýmov), môžu byť aj iné vlastnosti látky.

#### **1. Konvencia pomenovania**

Názov látky UVCB tvorí vo všeobecnosti kombinácia zdroja a procesu vo všeobecnom formáte: najskôr zdroj a potom proces (procesy).

- Látka odvodená z biologických zdrojov sa identifikuje podľa názvu druhov.
- Látka odvodená z nebiologických zdrojov sa identifikuje podľa východiskových materiálov.
- Procesy sa identifikujú podľa typu chemickej reakcie, ak je jej súčasťou syntéza nových molekúl, alebo ako typ rafinačného kroku, napr. extrakcia, frakcionovanie, koncentrácia alebo rezíduum.

#### **Príklady**

<b>EC číslo</b>	<b>Názov EC</b>
296-358-2	Levanduleň, Lavandula hybrida, extrakty, acetylované
307-507-9	Levanduleň, Lavandula latifolia, extrakt, sírený, soľ s paládiom

V prípade produktov reakcií sa v zozname EC používajú rôzne formáty, napr.:

- EINECS hlavný východiskový materiál, produkty reakcií iných východiskových materiálov
- ELINCS produkty reakcií východiskových materiálov

#### **Príklady**

<b>EC číslo</b>	<b>Názov EC</b>
232-341-8	Kyselina dusitá, produkty reakcií so 4-metyl-1,3-benzéndiamín hydrochloridom
263-151-3	Mastné kyseliny, kokos, produkty reakcií s dietyléntriámínom
400-160-5	Produkty reakcií mastných kyselín talového oleja, dietanolamínu a kyseliny boritej
428-190-4	Produkt reakcie: 2,4-diamino-6-[2-(2-metyl-1H-imidazol-1-yl)etyl]-1,3,5-triazínu a kyseliny kyanurovej

V tomto usmerňovacom dokumente sa používa všeobecný formát názvu produktov reakcií „Produkty reakcie [názvy východiskových materiálov]“. Názvy by sa mali v zásade uvádzať v angličtine podľa pravidiel názvoslovia IUPAC. Ďalšie medzinárodne uznané pomenovania sa uvádzajú dodatočne. Odporúča sa nahradiť slovo „reakcia“ v názve špecifického typu reakcie opísanej vo všeobecných pojmoch, napr. esterifikácia alebo tvorba solí atď. (pozri usmernenie k štyrom špecifickým podtriedam látok UVCB ďalej).

## 2. Zdroj

Zdroje môžeme rozdeliť na dve skupiny:

### 2.1. Biologické zdroje

Látky biologického pôvodu sa musia definovať podľa rodu, druhu a čeľade, napr. *Pinus cembra*, *Pinaceae* zanmená *Pinus* (rod), *cembra* (druh), *Pinaceae* (čeľaď) a v prípade potreby aj podľa kmeňa alebo genotypu. V prípade potreby treba uviesť aj tkanivo alebo časť organizmu použité na extrakciu látky, napr. kostná dreň, pankreas alebo byl', semená alebo korene.

Príklady	
EC číslo	Názov EC
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae, extrakt  <b>Opis EC</b> Extrakty a ich fyzikálne modifikované deriváty, ako sú tinktúry, konkréty, absolúty, vonné oleje, oleoživice, terpény, bezterpénované frakcie, destiláty, zvyšky atď. získané zo <i>Saccharomyces cerevisiae</i> , <i>Saccharomycelaceae</i> .
296-350-9	Arnica mexicana, extrakt  <b>Opis EC</b> Extrakty a ich fyzikálne modifikované deriváty, ako sú tinktúry, konkréty, absolúty vonné oleje, oleoživice, terpény, bezterpénované frakcie, destiláty, zvyšky atď. získané z <i>Arnica mexicana</i> , <i>Compositae</i> .

### 2.2. Chemické alebo minerálne zdroje

V prípade produktov chemických reakcií sa musia pomocou názvu IUPAC v angličtine opísať východiskové materiály. Minerálne zdroje sa musia opísať vo všeobecných pojmoch, napr. fosfátové rudy, bauxit, kaolín, zemný plyn, uhlie, rašelina.

## 3. Proces

Procesy sa identifikujú podľa typu chemickej reakcie, ak je jej súčasťou syntéza nových molekúl, alebo ako typ rafinačného kroku, napr. extrakcia, frakcionovanie, koncentrácia alebo rezíduum rafinácie.



V prípade niektorých látok, napr. chemických derivátov, sa proces opisuje ako kombinácia rafinácie a syntézy.

### 3.1 Syntéza

Medzi východiskovými materiálmi dochádza k určitej chemickej alebo biochemickej reakcii, ktorej výsledkom je látka. Napríklad Grignardova reakcia, sulfonácia, enzymatické štiepenie proteázou alebo lipázou atď. K tomuto typu patrí aj množstvo derivačných reakcií.

V prípade novosyntetizovaných látok, pre ktoré nie je možné poskytnúť chemické zloženie, sú hlavným identifikátorom východiskové materiály spolu so špecifikáciou reakcie, t. j. typom chemickej reakcie. Typ chemickej reakcie je príznačný pre molekuly, ktorých prítomnosť sa v látke očakáva. Existuje niekoľko typov finálnej chemickej reakcie: hydrolýza, esterifikácia, alkylácia, chlorinácia atď. Keďže typ reakcie poskytuje iba všeobecné informácie o možných vyrobených látkach, v mnohých prípadoch bude na úplnú charakterizáciu a identifikáciu látky potrebný aj chromatografický záznam.

Príklady	
Číslo EC	Názov EC
294-801-4	Ľanový olej, epoxidovaný, produkty reakcie s tetraetylénpentamínom
401-530-9	Produkt reakcie (2-hydroxy-4-(3-propenoxy)benzofenónu a trietoxysilánu) s (produktom hydrolýzy oxidu kremičitého a metyltrimetoxysilánu)

### 3.2 Rafinácia

Rafináciu možno použiť rôznymi spôsobmi na látky prírodného alebo minerálneho pôvodu, ak sa nezmenila chemická identita zložiek, ale zmenila sa koncentrácia zložiek, napr. po spracovaní rastlinných tkanív za studena nasleduje extrakcia alkoholom.

Rafinácia sa môže ďalej vymedziť v procesoch ako extrakcia. Identifikácia látky závisí od typu procesu:

- V prípade látok odvodených fyzikálnymi metódami, napr. rafináciou alebo frakcionovaním, sa má špecifikovať hraničné pásmo a parameter frakcie (napr.: molekulovú veľkosť, dĺžku reťazca, bod varu, rozsah prchavosti atď.).
- V prípade látok odvodených koncentráciou, napr. produktov metalurgických procesov, odstredených zrazenín, rezíduí filtra atď., sa má spolu so všeobecným zložením výslednej látky špecifikovať krok koncentrácie v porovnaní s východiskovým materiálom.

Príklady	
EC číslo	Názov EC
408-250-6	Koncentrát organovolfrámových zlúčenín (produkty reakcie chloridu volfrámového s 2-metylpropán-2-olom, nonylfenolom a pentán-2,4-diólom)

- V prípade rezíduí špecifickej reakcie, napr. kalov, dechtov a ťažkých frakcií, sa proces opisuje spolu so všeobecným zložením výslednej látky.

<b>Príklady</b>	
<b>EC číslo</b>	<b>Názov EC</b>
283-659-9	<p>Cín, pretavené rezíduá</p> <p><b>Opis EC</b></p> <p>Látka vznikajúca pri používaní a výrobe cínu a jeho zliatin získaných z primárnych a sekundárnych zdrojov a vrátane recyklovaných medziproduktov z tovární. Primárne pozostáva zo zlúčenín cínu a môže obsahovať aj iné zvyškové neželezné kovy a ich zlúčeniny.</p>
293-693-6	<p>Sójová múčka, zvyšok po extrakcii proteínov</p> <p><b>Opis EC</b></p> <p>Vedľajší produkt etanolovej extrakcie odtučnenej sójovej múčky, ktorý obsahuje predovšetkým sacharidy.</p>

- V prípade extraktov sa uvedie metóda extrakcie, rozpúšťadlo použité na extrakciu a iné dôležité podmienky, napr. teplota/teplotný rozsah).
- V prípade kombinovaného spracovania sa okrem zdrojových informácií špecifikuje aj každý krok postupu (všeobecne). Toto kombinované spracovanie má osobitnú dôležitosť v prípade chemických derivácií.

Príklady:

- Najskôr sa extrahuje rastlina, potom sa extrakt destiluje a destilovaná frakcia rastlinného extraktu sa použije na chemickú deriváciu. Výsledná látka sa môže ďalej čistiť. Vyčistený produkt sa môže nakoniec presne definovať podľa svojho chemického zloženia a látku nie je potrebné identifikovať ako UVCB. Ak sa má produkt stále považovať za látku UVCB, kombinované spracovanie sa môže opísať ako „vyčistená chemická derivácia destilovanej frakcie rastlinného extraktu“.
- Ak ďalšie spracovanie extraktu obsahuje iba fyzickú deriváciu, zloženie sa zmení, ale bez zámernej syntézy nových molekúl. Zmena zloženia však bude mať za následok inú látku, napr. destilát alebo zrazeninu rastlinného extraktu.
- Pri výrobe ropných produktov sa často používa kombinácia chemickej derivácie a frakcionovania. Pri destilácii ropy krakovaním sa napríklad vytvorí frakcia východiskového materiálu a aj nové molekuly. V tom prípade by sa potom mali identifikovať oba typy procesov alebo sa destilát špecifikuje ako východiskový materiál krakovania. To sa týka najmä ropných derivátov, ktoré sú často výsledkom kombinácie procesov. Na identifikáciu ropných látok sa však používa samostatný špecifický systém (pozri kapitolu 4.3.2.2).

Kedže chemický derivát extraktu neobsahuje rovnaké zložky ako zdrojový extrakt, považuje sa za inú látku. V dôsledku tohto pravidla sa identifikácia podľa názvu a opisu odchyľuje od predchádzajúceho názvu a opisu EINECS. V čase zavádzania zoznamu EINECS sa extrakty z rôznych procesov, rôzne rozpúšťadlá a dokonca aj fyzikálne alebo chemické deriváty často uvádzali v jedinom zázname. Podľa nariadenia REACH by však tieto látky mali zaregistrovať ako samostatné.

#### **4. Iné parametre identifikácie látky**

Látka UVCB musí okrem chemického názvu, zdroja a špecifikácie procesu obsahovať aj ďalšie dôležité informácie vyžadované podľa časti 2 prílohy VI k nariadeniu REACH.

Najmä pre určité typy látok UVCB môžu byť dôležité aj ďalšie parametre identifikácie. K ďalším identifikátorom môžu patriť:

- všeobecný opis chemického zloženia,
- chromatografický záznam alebo ďalšie typy stôp,
- referenčný materiál (napr. ISO),
- fyzikálno-chemické parametre (napr. bod varu),
- číslo v indexe farieb,
- číslo AISE.

V ďalšej časti sa pre rôzne typy zdrojov a procesov uvádza osobitné usmernenie k pravidlám a kritériám, používaniu názvu a informáciám o zdroji a procese na identifikáciu látok UVCB. V nasledujúcich odsekoch sa ako kombinácia biologických alebo chemických/minerálnych zdrojov a procesov (syntéza alebo rafinácia) opisujú štyri podtypy látok UVCB.

### **Podtyp UVCB 1, pri ktorom je zdroj biologický a procesom je syntéza**

Látky biologického pôvodu je možné modifikovať (bio)chemickým spracovaním tak, aby sa vytvorili zložky, ktoré neboli prítomné vo východiskovom materiáli, napr. chemické deriváty rastlinných extraktov alebo produkty enzymatickej úpravy extraktov. Proteíny je napríklad možné hydrolyzovať proteázou, aby sa vytvorili oligopeptidy, alebo je celulózu z dreva možné karboxylovať s cieľom získať karboxymetylcelulózu (CMC).

K tomuto podtypu látok UVCB môžu patriť aj produkty fermentácie. Napríklad vináza je produkt fermentácie cukru, ktorý v porovnaní s cukrom obsahuje množstvo rôznych zložiek. Ak sa produkty fermentácie ďalej čistia, látky môžu byť nakoniec úplne identifikovateľné podľa svojho chemického zloženia a nemusia sa identifikovať ako látky UVCB.

Enzymy tvoria osobitnú skupinu látok, ktoré sa môžu derivovať extrakciou a ďalej rafinovať zo zdroja biologického pôvodu. Napriek tomu, že zdroj a proces možno podrobne špecifikovať, nepredstavuje to osobitné informácie o enzýmoch. V prípade týchto látok sa má použiť osobitný systém klasifikácie, pomenovania a identifikácie (pozri kapitolu 4.3.2.3).

V prípade identifikácie látky sa má uviesť záverečný krok procesu a/alebo všetky ďalšie kroky procesu, ktoré sú pri identifikácii látky dôležité.

Opisom chemického procesu má byť všeobecný opis typu procesu (esterifikácia, alkalická hydrolýza, alkylácia, chlorinácia, substitúcia atď.) spolu s dôležitými okolnosťami procesu.

Opisom biochemického procesu môže byť všeobecný opis katalyzovanej reakcie spolu s názvom enzýmu, ktorý reakciu katalyzuje.

V prípade látok vyrábaných fermentáciou alebo (tkanivových) kultúr druhov je potrebné uviesť druhy fermentácie, typ a všeobecné podmienky fermentácie (dávková alebo súvislá, aeróbná, anaeróbná, anoxická, teplotná, pH atď.) spolu so všetkými ďalšími krokmi procesu, ktoré sa uplatňujú pri izolácii produktov fermentácie, napr. odstreďovanie, zrážanie, extrakcia atď. Ak sa tieto látky ďalej rafinujú, môže sa získať frakcia, koncentrát alebo rezíduum. Tieto ďalej spracované látky sa identifikujú pomocou dodatočných špecifikácií ďalších krokov procesu.

### **Podtyp UVCB 2, pri ktorom je zdroj chemický alebo minerálny a procesom je syntéza**

Látky UVCB získané z chemických alebo minerálnych zdrojov a derivované pomocou procesu, v ktorom sa syntetizujú nové molekuly, sa nazývajú „produkty reakcií“. Príkladmi produktov chemickej reakcie sú produkty esterifikácie, alkylácie alebo chlorinácie. Osobitné typy chemických reakcií tvoria biochemické reakcie využívajúce izolované enzýmy. Ak sa však použije zložitá biochemická cesta syntézy s využitím úplných mikroorganizmov, výslednú látku je lepšie považovať za produkt fermentácie a identifikovať ju podľa procesu fermentácie

a druhov fermentácie, a nie podľa východiskových materiálov (pozri podtyp UVCB 4).

Každý produkt reakcie nie je možné automaticky špecifikovať ako UVCB. Ak sa dá produkt reakcie dostatočne definovať podľa chemického zloženia (vrátane určitej variability), mal by sa identifikovať ako mnohozložková látka (pozri kapitolu 4.2.2). Látku je možné identifikovať ako látku UVCB (produkt reakcie) iba vtedy, ak nie je zloženie produktu reakcie dostatočne známe alebo dostatočne predvídateľné. Identifikácia produktu reakcie vychádza z východiskových materiálov procesu reakcie a (bio)chemickej reakcie, počas ktorého sa látka vytvára.

<b>Príklady</b>		
EC číslo	Názov EINECS	Číslo CAS
294-006-2	Kyselina nonándiová, produkty reakcie s 2-amino-2-metyl-1-propanolom	91672-02-5
294-148-5	Formaldehyd, produkty reakcie s dietylénglykolom a fenolom	91673-32-4

Hlavným identifikátorom produktov reakcií je opis výrobného procesu. V prípade identifikácie látky sa má uviesť posledný alebo najvýznamnejší krok procesu. Opis chemického procesu musí byť všeobecný opis typu procesu (napr. esterifikácia, alkalická hydrolýza, alkylácia, chlorinácia, substitúcia atď.) spolu s dôležitými okolnosťami procesu. Biochemický proces sa opisuje ako typ reakcie spolu s názvom enzýmu, ktorý reakciu katalyzuje.

### **Podtyp UVCB 3, pri ktorom je zdroj biologický a procesom je rafinácia**

Látkami UVCB biologického pôvodu, ktoré sú výsledkom procesu rafinácie bez zámerného tvorenia nových molekúl, môžu byť napr. extrakty, frakcie extraktu, koncentráty extraktu, vyčistený extrakt alebo rezíduá procesu látok biologického pôvodu.

Okamžite po ďalšom spracovaní extraktu už látka nie je identická s extraktom, stáva sa inou látkou, ktorá patrí k inému podtypu UVCB, napr. frakcii alebo rezíduu extraktu. Tieto látky sa majú špecifikovať pomocou dodatočných (ďalších) parametrov spracovania. Ak sa extrakt modifikuje v chemických alebo biochemických reakciách, pričom sa vytvárajú nové molekuly (deriváty), látka sa identifikuje podľa usmernenia k podtypu UVCB 2 alebo kapitoly 4.2 o presne definovaných látkach.

Táto diferenciácia ďalej spracovaných extraktov môže mať za následok odlišnosť nového názvu a opisu od názvu a opisu v zozname EINECS. V čase zavádzania zoznamu sa takáto diferenciácia neuplatňovala a všetky typy extraktov s rôznymi rozpúšťadlami a ďalšími krokmi spracovania sa uvádzali v jedinej položke.

Prvým hlavným identifikátorom tohto podtypu látok UVCB je čeľad', rod a druh organizmu, z ktorého látka pochádza. V prípade potreby treba uviesť aj tkanivo alebo časť organizmu použité na extrakciu látky, napr. kostná dreň, pankreas alebo byl', semená alebo korene. V prípade látok mikrobiologického pôvodu sa má definovať kmeň a genotyp druhu.

Ak je látka UVCB odvodená od iného druhu, bude sa považovať za inú látku, a to aj vtedy, ak má podobné chemické zloženie.

Príklady	
EC číslo	Názov EINECS
290-977-1	Oxidovaný extrakt kamepeškovníka (Haematoxylon campechianum) <b>Opis EC</b> Táto látka je identifikovaná v indexe farieb pod identifikačným číslom indexu farieb C.I. 75290, oxidovaná.
282-014-9	Pankreatické extrakty, zbavené proteínov

Druhým hlavným identifikátorom je spracovanie látky, napr. proces extrakcie, frakcionovania, čistenia alebo koncentrácie, alebo proces, ktorý ovplyvňuje zloženie rezídua. Rafinácie extraktov pomocou iných procesov, napr. s využitím rôznych rozpúšťadiel alebo krokov čistenia, môžu preto vyústiť do rôznych látok.

Čím viac krokov sa pri rafinácii použije, tým reálnejšia je možnosť definovať látku podľa jej chemického zloženia. V takom prípade nevedú rôzne zdrojové druhy alebo rôzne modifikácie procesu automaticky k rôznym látkam.

Hlavným identifikačným parametrom látok biologického pôvodu je opis významných procesov. V prípade extraktov sa má opísať proces extrakcie čo najpodrobnejšie, aby sa zabezpečila identifikácia látky. Má sa špecifikovať aspoň rozpúšťadlo.

Ak sa pri výrobe látky používajú ďalšie kroky procesu, napríklad frakcionovanie alebo koncentrácia, opíše sa kombinácia dôležitých krokov procesu, napr. kombinácia extrakcie a frakcionovania vrátane hraničného pásma.

#### **Podtyp UVCB 4, pri ktorom je zdroj chemický alebo minerálny a procesom je rafinácia**

Látky nebiologického pôvodu, t. j. minerály, rudy, uhlie, zemný plyn a ropa alebo iné suroviny pre chemický priemysel, alebo látky, ktoré v nich majú pôvod, a látky, ktoré sú výsledkom spracovania bez zámerných chemických reakcií, môžu byť (vyčistenými) frakciami, koncentrátmi alebo rezíduami týchto procesov.

Uhlie a ropa sa používajú pri destilačných alebo splyňovacích procesoch na výrobu veľkého rozsahu látok, napr. ropných látok a palivových plynov atď., ale aj rezíduí, ako napr. dechtov a kalov. Destilovaný alebo inak frakcionovaný produkt sa veľmi často okamžite ďalej spracúva, a to vrátane chemických reakcií. V takých prípadoch sa musí pri identifikácii látky postupovať podľa usmernenia k podtypu UVCB 2, keďže proces je dôležitejší ako zdroj.

V prípade ropných látok sa používa osobitný systém identifikácie (pozri kapitolu 4.3.2.2). K látkam, ktorých sa týka tento systém, patria frakcie a produkty chemických reakcií.

K ostatným látkam podtypu UVCB 4 môžu patriť rudy, rudné koncentráty a kaly obsahujúce rôzne objemy kovov, ktoré možno extrahovať metalurgickým spracovaním.

Minerály, ako napríklad bentonit alebo uhličitan vápenatý, sa môžu spracovať napríklad rozpustením v kyseline a/alebo chemickým zrážaním, ako aj v ionexovej kolóne. Ak sa plne definuje chemické zloženie, minerály by sa mali identifikovať podľa usmernenia v príslušnej časti kapitoly 4.2. Ak sa minerály spracúvajú iba mechanickými metódami, napr. brúsením, preosievaním, odstreďovaním, flotáciou atď., považujú sa za rovnaké minerály ako vyčistené

minerály. Minerály získavané procesom výroby sa môžu na účely identifikácie<sup>21</sup> považovať za rovnaké ako ich ekvivalenty vyskytujúce sa v prírode, za predpokladu, že majú podobné zloženie a identický profil toxicity.

Hlavným identifikačným parametrom látok nebiologického pôvodu je opis významných krokov procesu.

V prípade frakcií sa proces frakcionovania opisuje pomocou parametrov a hraničného pásma izolovanej frakcie spolu s opisom predchádzajúcich krokov procesu, ak je to potrebné.

V prípade kroku koncentrácie sa má okrem informácií o predchádzajúcich krokoch procesu uviesť typ procesu, napr. odparovanie, zrážanie atď., a pomer medzi východiskovou koncentráciou a konečnou koncentráciou hlavných zložiek.

Hlavným parametrom identifikácie rezíduí nebiologického pôvodu je opis procesu, pri ktorom rezíduum vzniká. Týmto procesom môže byť akákoľvek fyzická reakcia, ktorej výsledkom sú rezíduá, napr. čistenie, frakcionovanie, koncentrácia.

### **Analytické informácie**

Látky UVCB zahŕňajú veľmi rôznorodé typy látok, ktoré sa líšia v parametroch, ako sú zdroj a výrobný proces. V dôsledku toho by sa mali poskytnúť vhodné analytické metódy na predloženie informácií o zložení látky UVCB, ktoré závisia od daného prípadu. Okrem toho poznatky o tom, ako sa majú tieto metódy používať, sa neustále dopĺňajú a vylepšujú. V záujme poskytnutia čo možno najlepších informácií, ktoré umožnia identifikáciu látky, je preto registrujúci zodpovedný za predloženie primeraných analytických údajov.

Na charakterizáciu látok UVCB možno použiť niekoľko kvalitatívnych metód. Medzi príklady patria UV/Vis, infračervená a hmotnostná spektroskopia, nukleárna magnetická rezonancia, difrakcia röntgenových lúčov (XRD).

Kvantitatívne údaje, ako sú chromatogramy alebo údaje o difrakcii, ktoré sa môžu použiť ako záznamy, sa majú poskytnúť na charakterizáciu zloženia látky.

Opis musí pozostávať z použitých experimentálnych protokolov a príslušnej interpretácie výsledkov.

### **4.3.2. Špecifické typy látok UVCB**

V tejto časti sa uvádza usmernenie k špecifickým skupinám látok UVCB: látkam s variáciami v dĺžke uhlíkového reťazca (4.3.2.1), látkam získaným z ropy alebo ropných zdrojov (4.3.2.2) a enzýmom (4.3.2.3).

#### **4.3.2.1 Látky s variáciami v dĺžke uhlíkového reťazca**

Táto skupina látok UVCB obsahuje alkylové látky s dlhým reťazcom, ktoré majú variácie v dĺžke uhlíkového reťazca, napr. parafíny a olefíny. Tieto látky sú odvodené z prírodných tukov alebo olejov alebo sa vyrábajú synteticky. Prírodné tuky majú rastlinný alebo živočíšny pôvod. Látky s dlhým uhlíkovým reťazcom, ktoré sú rastlinného pôvodu, bežne majú dĺžku reťazca s párnym počtom atómov uhlíka, pričom látky s dlhým uhlíkovým reťazcom získané zo živočíšnych zdrojov obsahujú aj (niekoľko) dĺžok reťazca s nepárnym počtom atómov uhlíka. Synteticky vyrábané látky s dlhým uhlíkovým reťazcom môžu obsahovať celý rozsah uhlíkových reťazcov, s párnym aj nepárnym počtom.

<sup>21</sup> Rovnaký prístup k identifikácii minerálov vyskytujúcich sa v prírode a chemicky vyrobených minerálov nemusí znamenať, že na obe skupiny sa vzťahujú rovnaké právne požiadavky (napr. výnimky z registrácie).

## Identifikátory a konvencia pomenovania

Táto skupina pozostáva z látok, ktorých jednotlivé zložky majú spoločné štruktúrne vlastnosti: jednu alebo viac alkylových skupín s dlhým reťazcom, často s pridanou funkčnou skupinou. Zložky sa navzájom líšia jednou alebo viacerými týmito vlastnosťami skupiny s alkylovým reťazcom:

- o dĺžkou uhlíkového reťazca (uhlíkové číslo),
- o nasýtenosťou
- o štruktúrou (lineárnou alebo rozvetvenou),
- o pozíciou funkčnej skupiny.

Chemickú identitu zložiek možno dostatočne opísať a systematicky pomenovať pomocou týchto troch deskriptorov:

- o **deskriptor alkylu**, ktorým sa opisuje počet atómov uhlíka v dĺžkach uhlíkového reťazca alkylových skupín,
- o **deskriptor funkčnej skupiny**, ktorým sa identifikuje funkčná skupina látky, napr. amín, amónium, karboxylová kyselina,
- o **deskriptor soli**, kation/anión akejkoľvek soli, napr. sodná soľ ( $\text{Na}^+$ ), uhličitan ( $\text{CO}_3^{2-}$ ), chlorid ( $\text{Cl}^-$ ).

### Deskriptor alkylu

- o Deskriptor alkylu  $\text{C}_{x-y}$  sa vo všeobecnosti vzťahuje na nasýtené lineárne alkylové reťazce pozostávajúce zo všetkých dĺžok reťazca od x do y, napr.  $\text{C}_{8-12}$  zodpovedá  $\text{C}_8$ ,  $\text{C}_9$ ,  $\text{C}_{10}$ ,  $\text{C}_{11}$  a  $\text{C}_{12}$ .
- o Musí sa uviesť, ak deskriptor alkylu odkazuje iba na alkylové reťazce s párnym alebo nepárnym počtom uhlíkov, napr.  $\text{C}_{8-12}$  (párne)
- o Musí sa uviesť, ak deskriptor alkylu odkazuje (aj) na rozvetvené alkylové reťazce, napr.  $\text{C}_{8-12}$  (rozvetvené) alebo  $\text{C}_{8-12}$  (lineárne a rozvetvené)
- o Musí sa uviesť, ak deskriptor alkylu odkazuje (aj) na nenasýtené alkylové reťazce, napr.  $\text{C}_{12-22}$  ( $\text{C}_{18}$  nenasýtené)
- o Kratšie rozpätie dĺžok alkylového reťazca neobsahuje širšie rozpätie a naopak, napr.  $\text{C}_{10-14}$  nezodpovedá  $\text{C}_{8-18}$ .
- o Deskriptor alkylu môže odkazovať aj na zdroj alkylových reťazcov, napr. kokos alebo loj. Rozpätie dĺžky uhlíkového reťazca však musí zodpovedať rozpätiu zdroja.

Opísaný systém by sa mal používať na opis látok s variáciami v dĺžkach uhlíkového reťazca. Nehodí sa pre presne definované látky, ktoré možno identifikovať podľa jasnej chemickej štruktúry.

Informácie o deskriptore alkylu, deskriptore funkčnej skupiny a deskriptore soli tvoria základ pomenovania tohto typu látok UVCB. Na presnejšiu identifikáciu látky môžu byť užitočné aj informácie o zdroji a procese.

### Príklady

Deskriptory	Názov
<b>Deskriptor alkylu</b> <b>Deskriptor funkčnej skupiny</b> <b>Deskriptor soli</b>	dĺžky alkylového reťazca $\text{C}_{10-18}$ mastné kyseliny (karboxylová kyselina) soli kadmia
	mastné kyseliny ( $\text{C}_{10-18}$ ) soli kadmia

<b>Deskriptor alkylu</b> <b>Deskriptor funkčnej skupiny</b> <b>Deskriptor soli</b>	di-C <sub>10-18</sub> -alkyl-dimetyl amónium chlorid	di-C <sub>10-18</sub> -alkyl- dimetylamónium chlorid
<b>Deskriptor alkylu</b> <b>Deskriptor funkčnej skupiny</b> <b>Deskriptor soli</b>	trimetyl alkyl (alkyl je z tuku) amónium chlorid	trimetyl-alkyl-amónium- chlorid (alkyl je z tuku)

#### 4.3.2.2 Látky získané z ropy alebo ropných zdrojov

Látky získané z ropy (ropné látky) alebo ropných zdrojov (napr. uhlie) sú látky veľmi komplikovaného a variabilného alebo čiastočne nedefinovaného zloženia. V tejto kapitole sa ako príklad identifikácie tohto osobitného typu látky UVCB používajú ropné látky. Ten istý prístup však možno uplatniť aj na iné látky získané z ropných zdrojov, napríklad uhlie.

Východiskovými materiálmi používanými v petrochemickom priemysle môžu byť ropa alebo akékoľvek špecifické rafinačné frakcie získané z jedného alebo viacerých procesov. Zloženie konečných produktov závisí od ropy použitej pri výrobe (keďže zloženie ropy sa líši v závislosti od miesta pôvodu) a následných rafinačných procesov. V zložení ropných látok preto existujú prirodzené, od procesu nezávislé variácie<sup>17</sup>.

##### 1. Konvencia pomenovania

Pri identifikácii ropných látok sa odporúča látky pomenovať podľa zavedeného systému názvoslovia<sup>22</sup>. Tento názov zvyčajne pozostáva z rafinačného procesu, zdroja prúdu a všeobecného zloženia alebo vlastností. Ak látka obsahuje > 5 % hmotnostných (w/w) zo 4 až 6-členných kondenzovaných cyklických aromatických uhľovodíkov, táto informácia sa začlení do opisu. V prípade ropných látok s číslom EINECS sa použije názov pridelený v zozname EC.

##### 2. Identifikátory

K pojmom a vymedzeniam na identifikáciu ropných látok patria vo všeobecnosti zdroj prúdu, rafinačný proces, všeobecné zloženie, počet uhlíkov, rozpätie teploty varu alebo iné príslušné fyzikálne vlastnosti a hlavný typ uhľovodíkov<sup>22</sup>.

Mal by sa uviesť parametre identifikácie podľa časti 2 prílohy VI k nariadeniu REACH. Uznáva sa, že ropné látky sa vyrábajú podľa výkonnostných špecifikácií, a nie podľa špecifikácií zloženia. Preto sú pre čo najjednoduchšiu identifikáciu ropnej látky vo všeobecnosti užitočnejšie vlastnosti ako názov, rozsah dĺžky uhlíkového reťazca, bod varu, viskozita, hraničné pásmo a ďalšie fyzikálne vlastnosti než informácie o zložení.

Napriek tomu, že primárnym identifikátorom látok UVCB nie je chemické zloženie, majú sa uviesť všetky zložky v koncentrácii  $\geq 10\%$  a známe zložky v koncentrácii  $< 10\%$  a vo všeobecných pojmoch sa majú opísať zloženie, napr. rozsah molekulovej hmotnosti,

<sup>22</sup> US EPA (1978) TSCA PL 94-469: Candidate list of chemicals substances Addendum I. Generic terms covering petroleum refinery process streams (Kandidátsky zoznam chemických látok, dodatok I. Všeobecné pojmy týkajúce sa frakcií procesov ropnej rafinácie). US EPA, Office of Toxic Substances, Washington DC 20460.



alifatickosť alebo aromatickosť, stupeň hydrogenizácie a ďalšie základné informácie. Skupiny zložiek, ktoré nie je možné identifikovať jednotlivo, by sa mali opísať pomocou rovnakých parametrov. Okrem toho je na základe názvu a typickej koncentrácie sa majú identifikovať aj všetky ďalšie zložky s nižšími koncentraciami, ktoré majú vplyv na klasifikáciu nebezpečnosti.

#### **4.3.2.3 Enzýmy**

Enzýmy sa najčastejšie vyrábajú fermentáciou mikroorganizmov, niekedy však majú aj rastlinný alebo živočíšny pôvod. Kvapalný enzýmový koncentrát, ktorý je výsledkom fermentácie alebo extrakcie a následného čistenia, obsahuje okrem vody aj aktívny enzýmový proteín a iné zložky obsahujúce rezíduá z fermentácie, t. j. proteíny, peptidy, aminokyseliny, sacharidy, lipidy a anorganické soli.

Za látku je na účely identifikácie by sa mal považovať aj enzýmový proteín spolu s ďalšími zložkami odvodenými z procesu fermentácie alebo extrakcie, okrem vody, ktoré sa môžu separovať, neovplyvnia však stabilitu enzýmového proteínu, ani nezmenia jeho zloženie.

Enzýmová látka bežne obsahuje 10 až 80 % hmotnostných (w/w) enzýmového proteínu. Ostatné zložky sa percentuálne líšia a závisia od produkčného organizmu, fermentačného média a operačných parametrov procesu fermentácie, ako aj od následného čistenia, zloženie však bude zvyčajne v rozsahu uvedenom v tejto tabuľke.

Aktívny enzýmový proteín	10 – 80 %
Ostatné proteíny + peptidy a aminokyseliny	5 – 55 %
Sacharidy	3 – 40 %
Lipidy	0 – 5 %
Anorganické soli	1 – 45 %
Celkom	100 %

Enzýmová látka by sa pre jej variabilitu a čiastočne neznáme zloženie mala považovať za látku UVCB. Enzýmový proteín by sa mala považovať za zložku látky UVCB. Vysoko purifikované enzýmy sa môžu identifikovať ako látky s presne definovaným zložením (jednozložkové alebo mnohozložkové) a podľa toho by sa mali identifikovať.

V zozname EINECS je hlavným identifikátorom enzýmov katalytická aktivita. Enzýmy sa tam uvádzajú ako všeobecné záznamy bez ďalších špecifikácií alebo so špecifickými záznamami, v ktorých sa uvádzajú zdrojové organizmy alebo substráty.

#### **Príklady**

<b>EC číslo</b>	<b>Názov EINECS</b>	<b>Číslo CAS</b>
278-547-1	Proteináza, Bacillus neutral	76774-43-1
278-588-5	Proteináza, Aspergillus neutral	77000-13-6
254-453-6	Elastáza (z prasacieho pankreasu)	39445-21-1

262-402-4	Mananáza	60748-69-8
-----------	----------	------------

V štúdií o enzýmoch, ktorej vypracovanie zadala Európska komisia, sa navrhuje identifikovanie enzýmov podľa medzinárodného systému IUBMB (Medzinárodná únia biochémie a molekulárnej biológie) pre názvoslovie enzýmov<sup>23</sup>. V tomto usmerňovacom dokumente sa tento prístup využíva. Umožní systematickejšiu, podrobnejšiu a komplexnejšiu identifikáciu enzýmov než systém EINECS.

## 1. Konvencia pomenovania

Enzýmy sa pomenúvajú podľa konvencií názvoslovia IUBMB.

Systém klasifikácie IUBMB poskytuje pre každý typ enzýmu a katalytickú funkciu jedinečné štvormiestne číslo (napr. 3.2.1.1 pre  $\alpha$ -amylázu)<sup>24</sup>. Každé číslo môže obsahovať enzýmy variabilnej sekvencie aminokyselín a pôvodu, funkčnosť enzýmu je však rovnaká. Pri identifikácii látok by sa mal použiť názov a číslo z názvoslovia IUBMB. V názvosloví IUBMB sa enzýmy klasifikujú do šiestich hlavných skupín:

- 1. oxidoreduktázy;
- 2. transferázy;
- 3. hydrolázy;
- 4. lyázy;
- 5. izomerázy;
- 6. ligázy.

Záznam podľa názvoslovia IUBMB ilustruje tento príklad:

EC 3.4.22.33

**Zavedený názov:** bromelaín z plodu

**Reakcia:** Hydrolýza proteínov so širokou špecifickosťou na peptidové väzby. Bz-Phe-Val-Arg<sup>+</sup>NHMec predstavuje dobrý syntetický substrát, ale nedochádza k žiadnemu účinku na Z-Arg-Arg-NHMec (*porovnaj* bromelaín zo stonky).

**Iné názvy:** bromelaín zo šľavy, ananáza, bromeláza, bromelín, extranáza, bromelaín zo šľavy, pináza, ananásový enzým, traumanáza, bromelaín z plodu FA2

**Poznámky:** Z rastlín ananásu, *Ananas comosus*. Zriedkavo inhibovaný kuracím cystatínom. Ďalšia cysteínová endopeptidáza s podobným účinkom na malomolekulové substráty, pinguinaín (pôvodne EC 3.4.99.18), sa získava z príbuznej rastliny, *Bromelia pinguin*, od plodového bromelaínu sa však pinguinaín odlišuje v tom, že je inhibovaný kuracím cystatínom [4]<sup>25</sup>. V čeľadi peptidáza C1<sup>26</sup> (čeľaď papaín). Pôvodne EC 3.4.22.5 a zahrnutý

<sup>23</sup> UBA (2000) Umweltbundesamt Austria. Zber informácií o enzýmoch. Záverečná správa. Spolupráca medzi Spolkovou environmentálnou agentúrou Rakúska a Medziuniverzitným výskumným centrom pre technológie, prácu a kultúru (IFF/IFZ). Č. zmluvy: B4-3040/2000/278245/MAR/E2.

<sup>24</sup> Pojmy „EC číslo“ (≡ číslo Komisie pre enzýmy) a „číslo IUBMB“ sa často používajú ako synonymá. S cieľom vyhnúť sa nedorozumeniam sa odporúča pre štvorčíselný kód IUBMB používať pojem „číslo 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>.

pod EC 3.4.22.4, číslo v zozname CAS: 9001-00-7

**Prepojenia na iné databázy:**

[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)

**Všeobecné referencie:**

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

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

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

**Príklady klasifikácie enzýmov podľa systému IUBMB**

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

**Proteázy sú číslované podľa týchto kritérií:**

3.	<b>Hydrolázy</b>
3.4	<b>Pôsobiace na peptidových väzbách (peptidázy), s podtriedami:</b>
3.4.1	α-amino-acyl-peptidové hydrolázy (teraz v EC 3.4.11)
3.4.2	peptidyl-aminokyselinové hydrolázy (teraz v EC 3.4.17)
3.4.3	dipeptidové hydrolázy (teraz v EC 3.4.13)
3.4.4	peptidyl-peptidové hydrolázy (teraz preklasifikované v rámci EC 3.4)
3.4.11	aminopeptidázy
3.4.12	peptidyl-aminokyselinové hydrolázy alebo acyl-aminokyselinové hydrolázy (teraz preklasifikované v rámci 3.4)
3.4.13	dipeptidázy
3.4.14	dipeptidyl-peptidázy a tripeptidyl-peptidázy
3.4.15	peptidyl-dipeptidázy
3.4.16	karboxypeptidázy serínového typu
3.4.17	metalokarboxypeptidázy
3.4.18	karboxypeptidázy cysteínového typu

3.4.19	omega peptidázy
3.4.21	serínové endopeptidázy
<b>a ďalšie, špecifické enzýmy, ktoré sú identifikované:</b>	
3.4.21.1	chymotrypsín
3.4.21.2	chymotrypsín C
3.4.21.3	metridín
3.4.21.4	trypsín
3.4.21.5	trombín
3.4.21.6	koagulačný faktor Xa
3.4.21.7	plazmín
3.4.21.8	teraz uvedené v EC 3.4.21.34 a EC 3.4.21.35
3.4.21.9	enteropeptidáza
3.4.21.10	akrozín
3.4.21.11	teraz uvedené v EC 3.4.21.36 a EC 3.4.21.37
3.4.21.12	12 a-lytická endopeptidáza
...	
3.4.21.105	
3.4.99	endopeptidázy s neznámym katalytickým mechanizmom

### Príklady zo zoznamu EINECS s pridanými číslami IUBMB

EC číslo	Názov EINECS	Číslo CAS	Číslo IUBMB
278-547-1	Proteináza, Bacillus neutral	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilizín	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Celuláza	9012-54-8	3.2.1.4

## **2. Identifikátory**

Enzymové látky sa identifikujú podľa prítomného enzymového proteínu (názvoslovie IUBMB)

a ostatných zložiek z fermentácie. Okrem enzýmového proteínu nie je zvyčajne prítomná žiadna špecifická zložka v koncentráciách nad 1 %. Ak nie sú známe identity týchto špecifických zložiek, možno ich uviesť na základe uplatnenia metódy zoskupovania (t. j. proteíny, peptidy, aminokyseliny, sacharidy, lipidy a anorganické soli). Jednotlivé zložky sa však musia uviesť, ak sú známe ich identity alebo ak sú prítomné v koncentrácii rovnajúcej sa alebo vyššej ako 10 % alebo ak sú dôležité pre klasifikáciu a označovanie a/alebo hodnotenie látok PBT<sup>27</sup>.

### **Enzýmové proteíny**

Enzýmové proteíny v koncentrácii by sa mali identifikovať podľa:

- čísla IUBMB,
- názvov pridelených podľa IUBMB (systematického názvu, názvov enzýmov, synonym),
- poznámok IUBMB,
- reakcie a typu reakcie,
- čísla a názvu EC, ak je to potrebné,
- čísla a názvu CAS, ak sú k dispozícii.

Mala by sa špecifikovať reakcia indukovaná enzýmom. Táto reakcia sa vymedzuje podľa IUBMB.

#### **Príklad**

.alfa.-amyláza: polysacharid obsahujúci glukózové jednotky viazané v polohe .alfa.-(1-4) + H<sub>2</sub>O = maltooligosacharidy, endohydrolyza 1,4-.alfa.-d-glukozidových väzieb v polysacharidoch obsahujúcich tri alebo viac d-glukózových jednotiek viazaných v polohe 1,4-.alfa.

Typ reakcie sa prideli v závislosti od triedy enzýmov. Môže ním byť oxidácia, redukcia, eliminácia, adícia alebo názov reakcie.

#### **Príklad**

.alfa.-amyláza: hydrolyza O-glykozylovej väzby (endohydrolyza)

### **Zložky iné ako enzýmový proteín**

Mali by sa identifikovať všetky zložky  $\geq 10$  % hmotnostných (w/w) alebo zložky dôležité pre klasifikáciu a označovanie a/alebo hodnotenie látok PBT<sup>28</sup>. Identitu zložiek prítomných v množstve menšom ako 10 % možno uviesť ako chemickú skupinu. Je potrebné uviesť ich typickú koncentráciu alebo rozsahy koncentrácií, t. j.:

- (glyko)proteíny,
- peptidy a aminokyseliny,
- sacharidy,

<sup>27</sup> Ďalšie informácie o hodnotení látok PBT a o príslušných kritériách sa nachádzajú v Usmernení k požiadavkám na informácie a k hodnoteniu chemickej bezpečnosti v kapitole R11: Hodnotenie látok PBT.

<sup>28</sup> Ďalšie informácie o hodnotení látok PBT a dôležitých koncentračných limitoch sa nachádzajú v usmernení k projektu RIP 3.2 o posúdení chemickej bezpečnosti, v časti o hodnotení látok PBT.

- lipidy,
- anorganický materiál (napr. chlorid sodný alebo iné anorganické soli).

Ak sa nedajú dostatočne presne identifikovať ostatné zložky enzýmového koncentrátu, názov produkčného organizmu (rod, kmeň alebo genotyp, ak je to dôležité) by sa mali uviesť tak, ako je to v prípade látok UVCB biologického pôvodu.

Ak sú k dispozícii, možno uviesť aj ďalšie parametre, napr. funkčné parametre (t. j. pH alebo teplotné optimá a rozsahy), kinetické parametre (t. j. špecifická aktivita alebo číslo premeny), ligandy, substráty a produkty a kofaktory.

## 5. Kritériá na kontrolu toho, či sú látky rovnaké

Pri posudzovaní zhodnosti látok, ktoré pochádzajú od rôznych výrobcov/dovozcov, je potrebné dodržiavať určité pravidlá. Tieto pravidlá, ktoré sa uplatnili pri vytváraní zoznamu EINECS, je potrebné považovať za spoločný základ na identifikáciu a pomenovanie látky, a teda aj na vyhľadanie potenciálneho spoluregistrujúceho tejto konkrétnej látky<sup>5, 6, 16, 29, 30</sup>. Látky, ktoré sa nepovažujú za rovnaké, sa však môžu na základe odborného posudku považovať za štruktúrne podobné. Ak je to vedecky odôvodnené, v prípade týchto látok je možné spoločné využívanie údajov. To však nie je predmetom tohto usmerňovacieho dokumentu, rieši sa to v *Usmernení k spoločnému využívaniu údajov*.

- Je potrebné uplatňovať pravidlo „ $\geq 80\%$ “ pre jednozložkové látky, ako aj vymedzenie pojmu mnohozložkových látok.

Nerozlišuje sa medzi technickým, čistým alebo analyticky čistým stupňom čistoty látok. To znamená, že tá istá látka môže mať rôzny profil čistoty/nečistoty v závislosti od jej stupňa. Presne definované látky by však mali obsahovať rovnaké hlavné zložky, pričom sa pripúšťa iba prítomnosť nečistôt, ktoré pochádzajú z výrobného procesu (podrobnosti pozri v kapitole 4.2), a prísad, ktoré sú potrebné na stabilizáciu látky.

- Na účely registrácie je potrebné hydratované a bezvodné formy zlúčením považovať za rovnakú látku.

Príklady			
Názov a vzorec	Číslo CAS	EC číslo	Pravidlo
Síran meďnatý (Cu · H <sub>2</sub> O <sub>4</sub> S).	7758-98-7	231-847-6	
Kyselina sírová, meďnatá soľ (2+) (1:1), pentahydrát (Cu·H <sub>2</sub> O <sub>4</sub> S · 5 H <sub>2</sub> O)	7758-99-8		Tieto látky sa týka registrácia v jej bezvodnej forme (EC číslo: 231-847-6)

Hydratované a bezvodné formy majú rozdielne chemické názvy a rozdielne čísla CAS.

- Kyseliny alebo zásady a ich soli sa považujú za rozdielne látky.

Príklady		
EC číslo	Názov	Pravidlo
201-186-8	Kyselina peroctová C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	Táto látka sa nepovažuje za rovnakú, ako napr. príslušná sodná soľ (EINECS 220-624-9).

<sup>29</sup> Vollmer a kol. (1999): Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. Tox Env Chem Vol. 65, s. 113 – 122.

<sup>30</sup> Manual of Decisions, Criteria for reporting substances for EINECS (Príručka rozhodnutí, Kritériá ohlasovania látok v zozname EINECS), webová stránka ECB, Geiss a kol. 1992, Vollmer a kol. 1998, Rasmussen a kol. 1999.

220-624-9	Glykolát sodný $C_2H_4O_3 \cdot Na$	Táto látka sa nepovažuje za rovnakú, ako napr. príslušná kyselina (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-chlóranilín $C_6H_6ClN$	Táto látka sa nepovažuje za rovnakú, ako napr. hydrobromid 2-chlóranilínu (1:1) ( $C_6H_6ClN \cdot HBr$ )

- Jednotlivé soli (napr. sodné alebo draselné) sa považujú za rozdielne látky.

<b>Príklady</b>		
<b>EC číslo</b>	<b>Názov</b>	<b>Pravidlo</b>
208-534-8	Benzoan sodný $C_7H_5O_2 \cdot Na$	Táto látka sa nepovažuje za rovnakú, ako napr. príslušná draselná soľ (EINECS 209-481-3).
209-481-3	Benzoan draselný $C_7H_5O_2 \cdot K$	Táto látka sa nepovažuje za rovnakú, ako napr. príslušná sodná soľ (EINECS 208-534-8).

- Rozvetvené alebo lineárne alkylové reťazce sa považujú za rozdielne látky.

<b>Príklady</b>		
<b>EC číslo</b>	<b>Názov</b>	<b>Pravidlo</b>
295-083-5	Kyselina fosforečná, dipentylester, rozvetvený a lineárny	Táto látka sa nepovažuje za rovnakú ako samostatné látky kyselina fosforečná, dipentylester, rozvetvený alebo kyselina fosforečná, dipentylester, lineárny.

- Rozvetvené skupiny sa v názve uvádzajú ako také. Ak nie je uvedené inak, látky obsahujúce alkylové skupiny bez akýchkoľvek ďalších informácií sa vzťahujú len na nerozvetvené lineárne reťazce.



Príklady		
EC číslo	Názov	Pravidlo
306-791-1	Mastné kyseliny, C12-16	Iba látky s lineárnymi a nerozvetvenými alkylovými skupinami sa považujú za rovnakú látku.
279-420-3	Alkoholy, C12-14	
288-454-8	Amíny, C12-18-alkylmetyl	

- Látky s alkylovými skupinami, pri ktorých sa používajú ďalšie pojmy ako izo, neo, rozvetvené atď., sa nepovažujú za rovnaké látky ako látky bez tejto špecifikácie.

Príklady		
EC číslo	Názov	Pravidlo
266-944-2	Glyceridy, C <sub>12-18</sub> Táto látka je identifikovaná v SDA pod názvom: C12-C18-trialkylglycerid a pod registračným číslom SDA: 16-001-00	Táto látka sa nepovažuje za rovnakú ako C <sub>12-18</sub> -izo. Látka s nasýtenými alkylovými reťazcami, ktorá je rozvetvená na ktoromkoľvek mieste.

- Ak sa výslovne nešpecifikuje inak, alkylové reťazce v kyselinách alebo alkoholoch atď. sa považujú len za nasýtené reťazce. Nenasýtené reťazce sa výslovne uvedú a považujú sa za rozdielne látky.

Príklady		
EC číslo	Názov	Pravidlo
200-313-4	Kyselina stearová, čistá, C18H36O2	Táto látka sa nepovažuje za rovnakú ako kyselina olejová, čistá, C18H34O2 (EINECS 204-007-1).

- Látky s chirálnymi centrami

Látka s jedným stereocentrom môže existovať v ľavotočivej a pravotočivej forme (enantioméry). Ak sa neuvedie inak, predpokladá sa, že látka je racemická zmes dvoch foriem v rovnakom pomere.

Príklady		
EC číslo	Názov	Pravidlo
201-154-3	2-chlórpropán-1-ol	Jednotlivé enantioméry (R)-2-chlórpropán-1-ol

	a (S)-2-chlórpropán-1-ol sa nepovažujú za zhodné s týmto záznamom.
--	---

Racemické látky sa považujú za mnohozložkové látky. Ak bola látka obohatená o jednu enantiomérnu formu, platia pre ňu pravidlá pre jedno- alebo mnohozložkové látky, t. j. v závislosti od rozsahu koncentrácií izomérov je látka jednozložková alebo mnohozložková.

Látky s viacerými stereocentrami môžu existovať vo formách  $2^n$  (pričom  $n$  znamená počet stereocentier). Tieto rozdielne formy môžu mať navzájom odlišné fyzikálno-chemické, toxikologické a/alebo ekotoxikologické vlastnosti. Je potrebné ich považovať za odlišné látky.

- Anorganické katalyzátory

Anorganické katalyzátory sa považujú za zmesi. Na účely identifikácie je potrebné kovové zložky alebo kovové zlúčeniny považovať za samostatné látky (bez špecifikácie použitia).

Príklady		
	Názov	Pravidlo
	Katalyzátor oxid kobaltu – oxid hlinitý	Potrebné identifikovať osobitne ako: - oxid kobaltnatý (II), - oxid kobaltitý (III), - oxid hlinitý, - zmesný oxid hliníka a kobaltu.

- Koncentráty enzýmov s rovnakým číslom IUBMB možno považovať za rovnaké látky, a to aj napriek tomu, že ich produkujú rozdielne organizmy, za predpokladu, že sa nebezpečné vlastnosti výrazne nelíšia a sú rovnako klasifikované.

### Mnohozložkové látky

V smernici 67/548/EHS sa upravovalo uvádzanie látok na trh. Spôsob výroby látok nebol dôležitý. Mnohozložková látka, ktorá sa uvádzala na trh, preto patrila do zoznamu EINECS, ak bola *každá* zložka tejto látky uvedená v zozname EINECS, napr. izoména zmes difluórbenzénov patrila do záznamov zoznamu EINECS pre 1,2-difluórbenzén (206-680-7), 1,3-difluórbenzén (206-746-5) a 1,4-difluórbenzén (208-742-9), hoci samotná izoména zmes sa v zozname EINECS neuvádzala.

Podľa nariadenia REACH sa vyžaduje registrácia vyrobenej látky. Rozhodnutie o tom, do akej miery sa na jednotlivé kroky pri výrobe látky vzťahuje vymedzenie pojmu „výroba“ (napr. rôzne čistiace a destilačné kroky), sa prijíma v každom prípade osobitne. Ak sa vyrobí mnohozložková látka, musí sa registrovať (pokiaľ nepatrí do registrácie jednotlivých zložiek, pozri kapitolu 4.2.2.4), napr. ak sa vyrobí izoména zmes difluórbenzénu, musí sa registrovať difluórbenzén ako izoména zmes. V prípade mnohozložkových látok však platí, že ak sa profil nebezpečnosti látky dostatočne opíše v informáciách o jednotlivých zložkách, látku ako takú nie je potrebné testovať. Ak sa vyrobí samostatné izoméry 1,2-difluórbenzén, 1,3-difluórbenzén a 1,4-difluórbenzén a zmiešajú sa až potom, musia sa registrovať jednotlivé izoméry a izoména zmes sa bude považovať za zmes.

Mnohozložková látka pozostávajúca z hlavných zložiek A, B a C sa nepovažuje za rovnakú ako mnohozložková látka pozostávajúca z hlavných zložiek A a B, ani ako reakčná zmes zložiek A, B, C a D.

- Mnohozložková látka sa nepovažuje za rovnakú ako látka, ktorá obsahuje iba podmnožinu jednotlivých zložiek.

Príklady		
EC číslo	Názov	Pravidlo
207-205-6	2,5-difluórtoluén	Tieto dve látky sa nepovažujú za rovnaké ako izoméerna zmes difluórtoluénov, pretože sú iba podskupinou zo všetkých možných izomérov.
207-211-9	2,44-difluórtoluén	

- Registrácia mnohozložkovej látky sa netýka jednotlivých zložiek.

Príklady		
EC číslo	Názov	Pravidlo
208-747-6	1,2-dibrómetylén	Táto látka vyjadruje zmes cis- a transizomérov. Na jednotlivé látky (1Z)-1,2-dibrómetén a (1E)-1,2-dibrómetén sa nevzťahuje registrácia izomérskej zmesi.

## Látky UVCB

- Látka UVCB s malým počtom zložiek sa nepovažuje za rovnakú ako látka UVCB s veľkým počtom zložiek a naopak.

Príklady		
EC číslo	Názov	Pravidlo
288-450-6	Amíny, C12-18-alkyl, acetáty	Látky „amíny, C12-14-alkyl, acetáty“ alebo „amíny, C12-20-alkyl, acetáty“ alebo „amíny, dodecyl (C12-alkyl), acetáty“ alebo látky s alkylovým reťazcom iba s párnym počtom uhlíkov sa nepovažujú za rovnaké ako táto látka.

- Látka, ktorá je charakterizovaná druhom/rodom, sa nepovažuje za rovnakú ako látka izolovaná z iného druhu/rodu.

<b>Príklady</b>		
<b>EC číslo</b>	<b>Názov</b>	<b>Pravidlo</b>
296-286-1	Diglyceridy, slnečnicový olej	Táto látka sa nepovažuje za rovnakú ako látka diglyceridy, zo sóje (EINECS: 271-386-8), ani za rovnakú ako látka diglyceridy, z loja (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	Ľanový olej, epoxidovaný	Táto látka sa nepovažuje za rovnakú ako ľanový olej, oxidovaný (EINECS: 272-038-8), ani za rovnakú ako ľanový olej, derivatizovaný kyselinou maleínovou (EINECS: 268-897-3), ani za rovnakú ako ricínový olej, epoxidovaný (neuvedený v zozname EINECS).

- Vyčistený extrakt alebo koncentrát sa považujú za rozdielnu látku, než je extrakt.

<b>Príklady</b>		
<b>EC číslo</b>	<b>Názov</b>	<b>Pravidlo</b>
232-299-0	Repkový olej Extrakty a ich fyzikálne modifikované deriváty. Pozostáva najmä z glyceridov mastných kyselín, kyseliny erukovej, linolovej a olejovej. (Brassica napus, Cruciferae)	Látka kyselina (Z)-dokoz-13-énová (kyselina eruková) je zložka látky repkový olej. Kyselina eruková sa nepovažuje za rovnakú látku ako repkový olej, pretože sa izoluje ako čistá látka z repkového oleja. Kyselina eruková má vlastný záznam v zozname EINECS (204-011-3). Izolovaná zmes kyseliny palmitovej, kyseliny olejovej, kyseliny linolovej, kyseliny linolénovej, kyseliny erukovej a kyseliny ikozénovej sa nepovažuje za rovnakú látku ako repkový olej, pretože tieto zložky nepredstavujú celý olej.

## 6. Identita látky pri žiadosti o informácie

Usmernenie k identifikácii a pomenovaniu látok sa nachádza v kapitole 4 tohto usmerňovacieho dokumentu. Z tohto usmernenia je potrebné vychádzať pri určovaní toho, či látky možno považovať na účely nariadení REACH a CLP za rovnaké. Tento postup sa ďalej upresňuje pre žiadosti o informácie o látkach.

V súlade s článkom 4 môže každý výrobca alebo dovozca pre všetky postupy uvedené v hlave III, ku ktorým patria diskusie s inými výrobcami alebo dovozcami, vymenovať za svojho zástupcu tretiu stranu, pričom naďalej plne zodpovedá za dodržanie svojej povinnosti podľa nariadenia REACH.

V prípade všetkých látok musia potenciálni registrujúci pred registráciou požiadať agentúru o informácie, či už pre tú istú látku bola predložená registrácia (článok 26 nariadenia REACH). Táto žiadosť obsahuje informácie o:

- identite potenciálneho registrujúceho, ako je uvedená v časti 1 prílohy VI k nariadeniu REACH, s výnimkou miest použitia,
- identite látky, ako je uvedená v časti 2 prílohy VI k nariadeniu REACH,
- tom, na základe ktorých požiadaviek na informácie by potenciálny registrujúci bol povinný vykonať nové štúdie na stavovcoch,
- tom, na základe ktorých požiadaviek na informácie by sa mohlo od potenciálneho registrujúceho vyžadovať uskutočnenie ďalších nových štúdií.

Potenciálny registrujúci má poskytnúť identitu a názov látky podľa pravidiel stanovených v kapitole 4 tohto usmerňovacieho dokumentu.

Agentúra zistí, či už bola tá istá látka registrovaná. Stane sa tak aj na základe uplatnenia pravidiel ustanovených v kapitole 4 tohto usmerňovacieho dokumentu. Výsledok sa oznámi potenciálnemu registrujúcemu a všetkým predchádzajúcim alebo ďalším potenciálnym registrujúcim.

Ďalšie informácie o procese žiadostí o informácie sa nachádzajú v *Usmernení k spoločnému využívaniu údajov* a na príslušnej webovej stránke agentúry ECHA:

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

## 7. Príklady

Príklady uvedené na nasledujúcich stranách majú len názorne ukázať, akým spôsobom môže používateľ pracovať s usmernením v tomto usmerňovacom dokumente. Nepredstavujú žiadny precedens v oblasti povinností vyplývajúcich z nariadenia REACH.

Uvádzajú sa tieto príklady:

- dietyl-peroxydikarbonát je príkladom jednozložkovej látky obsahujúcej rozpúšťadlo, ktoré pôsobí aj ako stabilizátor (pozri kapitolu 7.1),
- zolimidín je príkladom látky, ktorá by mohla byť identifikovaná ako jednozložková alebo mnohozložková látka (pozri kapitolu 7.2),
- zmes izomérov vytvorená reakciou počas výroby sa uvádza ako príklad mnohozložkovej látky (pozri kapitolu 7.3); táto látka predtým patrila do záznamov pre jednotlivé izoméry v zozname EINECS,
- vonná látka AH je príkladom látky vyrábanej v rôznych kvalitách, ktorú možno opísať ako reakčnú zmes piatich zložiek s rozsahmi koncentrácií (kapitola 7.4); je tiež príkladom odôvodnenej odchýlky od prahových hodnôt 80 % a 10 %,
- nekovové minerály vrátane montmorillonitu predstavujú príklad presne definovanej látky, ktorá vyžaduje dodatočnú fyzikálnu charakterizáciu, sú uvedené v kapitole 7.5,
- esenciálny olej z levandule je príkladom látky UVCB získanej z rastlín (kapitola 7.6),
- chryzantémový olej a z neho izolované izoméry je príkladom látky UVCB biologického pôvodu, ktorá sa ďalej spracúva (kapitola 7.7),
- fenol, izopropylovaný, fosfát je príkladom látky UVCB s variabilným zložením, ktorá sa nedá úplne definovať (kapitola 7.8),
- kvartérne amóniové zlúčeniny sú príkladmi látok s variabilnou dĺžkou uhlíkového reťazca (kapitola 7.9),
- dva príklady ropných látok, katalyticky reformovaný benzín a plynové oleje, sú uvedené v kapitole 7.10,
- dva príklady identifikácie enzýmov, lakázy a amylázy, sú uvedené v kapitole 7.11.

### 7.1. Dietyl-peroxydikarbonát

Látka dietyl-peroxydikarbonát (EC 238-707-3, CAS 14666-78-5,  $C_6H_{10}O_6$ ) sa vyrába ako 18 % roztok v izododekáne (EC 250-816-8, CAS 31807-55-3). Izododekán tiež pôsobí ako stabilizátor proti výbušnosti. Najvyššou možnou koncentráciou, ktorá zaručuje bezpečné zaobchádzanie s látkou, je 27 % roztok.

Ako sa má opísaná látka pri registrácii identifikovať a pomenovať?

V zmysle vymedzenia pojmu látka v nariadení REACH je potrebné vylúčiť rozpúšťadlá, ktoré možno separovať bez toho, aby sa narušila stabilita látky alebo aby sa zmenilo jej zloženie. Podobne ako v uvedenom prípade, aj izododekán pôsobí ako stabilizátor a v dôsledku výbušných vlastností látky ho nemožno úplne separovať. Izododekán sa musí považovať za prísadu, a nie výlučne za rozpúšťadlo. Látku je však napriek tomu potrebné považovať za jednozložkovú. Preto je látku potrebné registrovať ako roztok s najnižšou možnou koncentráciou izododekánu, ktorá zaručuje bezpečné zaobchádzanie:

dietyl-peroxydikarbonát (horný limit koncentrácie: 27 %). Izodekán je potrebné oznámiť ako prísadu a je potrebné špecifikovať jeho stabilizačnú funkciu.

### 7.2. ZOLIMIDÍN

Vyrobený metanolový roztok obsahuje zolimidín (EC 214-947-4; CAS 1222-57-7,  $C_{14}H_{12}N_2O_2S$ ) a imidazol (EC 206-019-2; CAS 288-32-4,  $C_3H_4N_2$ ). Po odstránení rozpúšťadla metanolu a po optimalizácii výrobného procesu má látka ešte stále široký rozsah čistoty pri

obsahu 74 až 86 % zolimidínu a 4-12 % imidazolu.

Ako sa má opísaná látka pri registrácii identifikovať a pomenovať?

V zmysle vymedzenia pojmu látka v nariadení REACH je potrebné vylúčiť rozpúšťadlá, ktoré možno separovať bez toho, aby sa narušila stabilita látky alebo aby sa zmenilo jej zloženie. Ako v predchádzajúcom prípade, aj metanol možno bez problémov separovať a registrovať sa musí látka bez rozpúšťadla.

Látka sa vo všeobecnosti považuje za jednozložkovú, ak je jedna hlavná zložka prítomná v objeme  $\geq 80$  %. Látka sa považuje za mnohozložkovú látku, ak je viac ako jedna hlavná zložka prítomná v objeme  $\geq 10$  % a  $< 80$  %. Uvedený príklad je hraničný prípad, pretože sú prekročené prahové hodnoty. Látku preto možno považovať za jednozložkovú látku zolimidín alebo za mnohozložkovú látku, reakčnú zmes zolimidínu a imidazolu.

V takomto hraničnom prípade sa na rozhodnutie o tom, ako najlepšie opísať túto látku, môže použiť typická koncentrácia hlavných zložiek látky, napr.:

(1) Ak je typická koncentrácia pre zolimidín 77 % a pre imidazol 11 %, odporúča sa látku považovať za reakčnú zmes zolimidínu a imidazolu.

(2) Ak je typická koncentrácia pre zolimidín 85 % a pre imidazol 5 %, odporúča sa látku považovať za jednozložkovú látku zolimidín.

### **7.3. Zmes izomérov**

Príslušná látka je zmesou (reakčnou zmesou) dvoch izomérov vytvorených počas reakcie pri výrobe. Jednotlivé izoméry boli oznámené do zoznamu EINECS. V smernici 67/548/EHS sa upravovalo uvádzanie látok na trh. Keďže spôsob výroby látky nebol podstatný, zmes patrila k záznamom dvoch jednotlivých izomérov v zozname EINECS. Podľa nariadenia REACH sa vyžaduje registrácia vyrobených látok. Rozhodnutie o tom, do akej miery sa na jednotlivé kroky pri výrobe látky vzťahuje vymedzenie pojmu „výroba“, sa prijíma v každom prípade osobitne. Ak sa zmes izomérov registruje ako mnohozložková látka (podľa usmernenia v kapitole 4.2.2), látku ako takú nie je potrebné testovať, ak je možné jej profil nebezpečnosti dostatočne opísať informáciami o jednotlivých zložkách.

1. **Názov a ďalšie identifikátory**

<b>Príklady</b>	
<b>Názov IUPAC alebo iný medzinárodný chemický názov (látky)</b>	Reakčná zmes 2,2'-[[[(4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanolu a 2,2'-[[[(5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanolu
<b>Iné názvy (látky)</b>	2,2'-[[[(metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol Reakčná zmes etanolu, 2,2'-[[[(metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di- a vody Etanol, 2,2'-[[[(metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di-(9CI) izoméerna zlúčenina
<b>EC číslo (látky)</b> <b>Názov EC</b> <b>Opis EC</b>	Keďže zmes izomérov nebola uvedená v zozname EINECS, táto látka nemá žiadne EC číslo. Látka však patrí do záznamov zoznamu EINECS pre zložky (279-502-9, 279-501-3).
<b>Číslo CAS (látky)</b> <b>Názov CAS</b>	Nie je k dispozícii. Nie je k dispozícii.
<b>EC číslo (zložky A)</b> <b>Názov EC</b> <b>Opis EC</b>	279-502-9 2,2'-[[[(4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol /
<b>EC číslo (zložky B)</b> <b>Názov EC</b> <b>Opis EC</b>	279-501-3 2,2'-[[[(5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol /
<b>Číslo CAS (zložky A)</b> <b>Názov CAS</b>	80584-89-0 Etanol, 2,2'-[[[(4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di-
<b>Číslo CAS (zložky B)</b> <b>Názov CAS</b>	80584-88-9 Etanol, 2,2'-[[[(5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di-
<b>Iný identifikačný kód</b> <b>Odkaz</b>	Číslo ENCS 5-5917



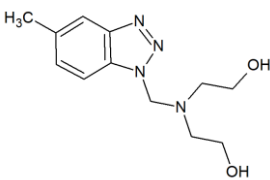
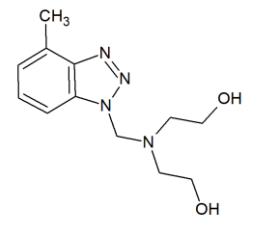
## 2. Informácie o zložení – hlavné zložky

Hlavné zložky						
	Názov IUPAC	Číslo CAS	EC číslo	Molekulárny vzorec Hillova metóda	Typická konc. (% w/w)	Rozsah konc. (% w/w)
<b>A</b>	Etanol, 2,2'-[[[4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di-	80584-89-0	279-502-9	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	60	50-70
<b>B</b>	Etanol, 2,2'-[[[5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di-	80584-88-9	279-501-3	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	40	30-50

Hlavné zložky	
Iné názvy	
<b>A</b>	2,2'-[[[4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol
<b>B</b>	2,2'-[[[5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol

Hlavné zložky		
	Názov EC	Opis EC
<b>A</b>	2,2'-[[[4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol	/
<b>B</b>	2,2'-[[[5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]dietanol	/

Hlavné zložky		
	Názov CAS	Číslo CAS
<b>A</b>	Etanol, 2,2'-[[[4-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di-	80584-89-0
<b>B</b>	Etanol, 2,2'-[[[5-metyl-1H-benzotriazol-1-yl)metyl]imino]di-	80584-88-9

Hlavné zložky			
	Molekulárny vzorec metóda CAS	Štruktúrny vzorec	Kód SMILES
<b>A</b>	/		OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12
<b>B</b>	/		OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)cccc12

Hlavné zložky		
	Molekulová hmotnosť [g/mol]	Rozsah molekulovej hmotnosti
<b>A</b>	250	/
<b>B</b>	250	/

## 7.4. Vonná látka AH

Vonná látka AH pozostáva z gama(izo-alfa)-metyl-jonónu a jeho izomérov. Vyrába sa v troch rôznych stupňoch kvality (stupeň kvality A, B a C), ktoré sa líšia pomerom izomérov.

V nasledujúcej tabuľke sa uvádza prehľad zloženia rôznych stupňov kvality.

Zloženie rôznych stupňov kvality vonnej látky AH				
Rozsah koncentrácie [%]	Kvalita A	Kvalita B	Kvalita C	Celkové rozsahy
Gama(izo-alfa)-metyl-jonón	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
Delta(izo-beta)-metyl-jonón	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
Alfa-n-metyl-jonón	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
Gama-n-metyl-jonón	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4	0,5 - 4
Beta-n-metyl-jonón	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15	0,5 - 15
Pseudo-metyl-jonóny	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3	0,5 - 3

Existuje viacero možností, ako látku identifikovať:

- Stupeň kvality A obsahuje najmenej 80 % izoméru gama(izo-alfa)-metyl-jonónu, preto sa môže považovať za jednozložkovú látku, ktorej základ tvorí izomér gama(izo-alfa)-metyl-jonón, pričom ostatné izoméry sú prítomné ako nečistoty.
- Stupne kvality B a C obsahujú menej ako 80 % izoméru gama(izo-alfa)-metyl-jonónu a  $\geq 10$  % iných izomérov. Preto sa môžu považovať za mnohozložkové látky:
  - Stupeň kvality B : reakčná zmes gama(izo-alfa)-metyl-jonónu (65 - 75 %) a alfa-n-metyl-jonónu (10 - 20 %), pričom ostatné izoméry sú prítomné ako nečistoty.
  - Stupeň kvality C : reakčná zmes gama(izo-alfa)-metyl-jonónu (50 - 60 %) a alfa-n-metyl-jonónu (20 - 30 %), pričom ostatné izoméry sú prítomné ako nečistoty.

Zloženie je variabilné a niekedy je izomér prítomný v koncentrácii  $\geq 10$  % (preto sa za normálnych okolností nazýva hlavnou zložkou) a niekedy  $< 10$  % (preto sa za normálnych okolností nazýva nečistotou).

Jednotlivé stupne kvality je možné registrovať samostatne. Znamená to tri registrácie. Použitie prístupu preberania údajov je však potrebné odôvodniť.

Možno uvažovať aj o:

- jednej registrácii jednozložkovej látky, ktorá má dva podstupne kvality; v tomto prípade sa podstupne kvality odchyľujú od pravidla 80 % (pozri kapitolu 4.2.1),
- jednej registrácii definovanej reakčnej zmesi 5 izomérov (mnohozložková látka); v tomto prípade sa niektoré izoméry (hlavné zložky) odchyľujú od prahovej hodnoty 10 %, podľa ktorej sa rozlišuje medzi hlavnými zložkami a nečistotami (pozri kapitolu 4.2.2),
- jednej registrácii definovanej reakčnej zmesi, v ktorej k variabilite zloženia dochádza v celom rozsahu, čo platí pre každý izomér.

Môže byť dôležité zvážiť, že:

- tri stupne kvality majú rovnaké alebo veľmi podobné fyzikálno-chemické vlastnosti,
- tri stupne kvality majú podobné použitie a expozičné scenáre,
- všetky stupne kvality majú rovnakú klasifikáciu a označovanie nebezpečnosti a obsah kariet bezpečnostných údajov a správ o chemickej bezpečnosti je identický,
- dostupné údaje z testov (a ďalšie testovanie) sa vzťahujú na variabilitu všetkých troch stupňov kvality.

V tomto príklade je opísaná identifikácia látky ako definovanej reakčnej zmesi 5 izomérov (mnohozložková látka). Vzhľadom na odchýlku od pravidla 80 % (pozri kapitolu 4.2.1) a od prahovej hodnoty 10 % (vymedzenie pojmu mnohozložkovej látky, pozri kapitolu 4.2.2) je potrebné odôvodnenie. Keďže každý stupeň kvality sa vyrába samostatne, v registračnej dokumentácii je potrebné špecifikovať zloženie každého z troch stupňov kvality. Z formálneho hľadiska však môžu byť potrebné minimálne dve registrácie: 1. gama(izo-alfa)-metyl-jonónu a 2. reakčnej zmesi gama(izo-alfa)-metyl-jonónu a alfa-n-metyl-jonónu.

### **Identifikácia látky**

Vonná látka AH sa vyrába v troch rôznych stupňoch kvality (A, B a C) s rovnakým kvalitatívnym, ale rôznym kvantitatívnym zložením. Všetky tri stupne kvality sú opísané v jednej registračnej dokumentácii pre mnohozložkovú látku. Aj keď z toho vyplýva, že definícia sa dôsledne neuplatňuje, registrácia ako jednej mnohozložkovej látky je odôvodnená, keďže 1.) dostupné údaje z testov sa pokrývajú variabilitu všetkých troch stupňov kvality; 2.) všetky tri stupne kvality majú veľmi podobné fyzikálno-chemické vlastnosti; 3.) všetky stupne kvality sa z hľadiska nebezpečnosti klasifikujú a označujú rovnako (takže karty bezpečnostných údajov sú identické) a 4.) všetky tri stupne kvality majú podobné použitie a expozičné scenáre (t. j. podobné správy o chemickej bezpečnosti).

#### **1. Názov a ďalšie identifikátory**

Názov IUPAC alebo iný medzinárodný chemický názov	Reakčná zmes 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexén-1-yl)but-3-én-2-ón 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexén-1-yl)but-3-én-2-ón [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexén-1-yl)pent-1-én-3-ón 1-(6,6-dimetyl-2-metylcyklohex-1-yl)pent-1-én-3-ón 1-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexén-1-yl)pent-1-én-3-ón
Iné názvy	Gama-metyl-jonón kvalita A Gama-metyl-jonón kvalita B Gama-metyl-jonón kvalita C
EC číslo Názov EC Opis EC	Nie je k dispozícii. / /
Číslo CAS Názov CAS	Nie je k dispozícii. /

## 2. Informácie o zložení – hlavné zložky

Teoreticky sú možné ďalšie enantioméry. Analyzovali sa však tieto izoméry:

Hlavné zložky						
	Názov IUPAC	Číslo CAS	EC číslo	Molekulárny vzorec Hillova metóda	Min. konc. (% w/w)	Max. konc. (% w/w)
<b>A</b>	3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexén-1-yl)but-3-én-2-ón	127-51-5	204-846-3	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	50	85
<b>B</b>	3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexén-1-yl)but-3-én-2-ón	79-89-0	201-231-1	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	3	10
<b>C</b>	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexén-1-yl)pent-1-én-3-ón	127-42-4	204-842-1	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	3	30
<b>D</b>	1-(6,6-metyl-2-metylcyklohex-1-yl)pent-1-én-3-ón	Nie je k dispozícii.	Nie je k dispozícii.	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	0,5	4
<b>E</b>	1-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexén-1-yl)pent-1-én-3-ón	127-43-5	204-843-7	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	0,5	15

Hlavné zložky	
Iné názvy	
<b>A</b>	Alfa-izo-metyl-jonón, gama metyl-jonón
<b>B</b>	Beta-izo-metyl-jonón, delta metyl-jonón
<b>C</b>	Alfa-n-metyl-jonón

<b>D</b>	Gama-n-metyl-jonón
<b>E</b>	Beta-n-metyl-jonón

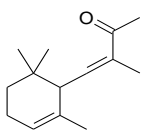
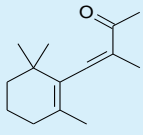
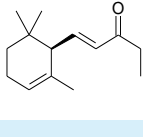
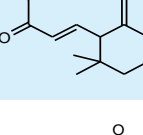
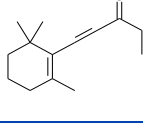
### Hlavné zložky

	Názov EC	Opis EC
<b>A</b>	3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexén-1-yl)but-3-butén-2-ón	/
<b>B</b>	3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexén-1-yl)but-3-butén-2-ón	/
<b>C</b>	[ <i>R-(E)</i> ]-1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexén-1-yl)pent-1-én-3-ón	/
<b>D</b>	1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexén-1-yl)pent-1-én-3-ón	/
<b>E</b>	1-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexén-1-yl)pent-1-én-3-ón	/

### Hlavné zložky

	Názov CAS	Číslo CAS
<b>A</b>	3-butén-2-ón, 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexén-1-yl)-	127-51-5
<b>B</b>	3-butén-2-ón, 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexén-1-yl)-	79-89-0
<b>C</b>	1-pentén-3-ón, 1-[(1 <i>R</i> )-2,6,6-trimetyl-2-cyklohexén-1-yl]-, (1 <i>E</i> )-	127-42-4
<b>D</b>	Nie je k dispozícii.	Nie je k dispozícii.
<b>E</b>	1-pentén-3-ón, 1-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexén-1-yl)-	127-43-5

Hlavné zložky		
	Iný identifikačný kód	Odkaz
<b>A</b>	2714 07.036	FEMA Register vôní EÚ
<b>B</b>	07.041	Register vôní EÚ
<b>C</b>	2711 07.009	FEMA Register vôní EÚ
<b>D</b>	Nie je k dispozícii.	Nie je k dispozícii.
<b>E</b>	2712 07.010	FEMA Register vôní EÚ

Hlavné zložky			
	Molekulový vzorec metóda CAS	Štruktúrny vzorec	Kód 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>Hlavné zložky</b>		
	<b>Molekulová hmotnosť/g/mol</b>	<b>Rozsah molekulovej hmotnosti</b>
<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. Informácie o zložení – nečistoty a prísady

<b>Nečistoty</b>						
	<b>Názov IUPAC</b>	<b>Číslo CAS</b>	<b>EC číslo</b>	<b>Molekulárny vzorec</b>	<b>Typická konc. (% w/w)</b>	<b>Rozsah konc. (% w/w)</b>
<b>F</b>						
Množstvo nešpecifikovaných nečistôt: Celková koncentrácia nešpecifikovaných nečistôt:				11 (pseudo-metyl-jonóny) 0,5 – 3 % hmotnostného (w/w)		
<b>Prísady</b>						
	<b>Názov IUPAC</b>	<b>Číslo CAS</b>	<b>EC číslo</b>	<b>Molekulárny vzorec</b>	<b>Typická konc. (% w/w)</b>	<b>Rozsah konc. (% w/w)</b>
<b>G</b>	Butylovaný hydroxytoluén (BHT)	128-37-0	204-881-4	C15H24O	0,1	0,05 – 0,15

### 4. Informácie o rôznych stupňoch kvality

Nasledujú rozsahy piatich hlavných zložiek v troch rôznych stupňoch kvality:



Rozsah koncentrácie [%]	Kvalita A	Kvalita B	Kvalita C
Gama(izo-alfa)-metyl-jonón	80 - 85	65 - 75	50 - 60
Delta(izo-beta)-metyl-jonón	6 - 10	3 - 7	3 - 7
Alfa-n-metyl-jonón	3 - 11	10 - 20	20 - 30
Gama-n-metyl-jonón	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4
Beta-n-metyl-jonón	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15
Pseudo-metyl-jonóny	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3

## 7.5. Minerály

Minerál je vymedzený ako kombinácia anorganických zložiek v podobe, v akej sa vyskytuje v zemskej kôre, s charakteristickým súborom chemických zložení, kryštalických foriem (od vysokokryštalickej po amorfnú) a fyzikálno-chemických vlastností.

Na minerály sa vzťahuje výnimka z povinnosti registrácie, ak spĺňajú vymedzenie pojmu „látka“, ktorá sa vyskytuje v prírode (článok 3 ods. nariadenia REACH), a ak neboli chemicky upravené (článok 3 ods. 40 nariadenia REACH). Týka sa to minerálov, ktorých chemická štruktúra ostáva nezmenená, aj keď prešli chemickým procesom alebo úpravou alebo fyzikálnou mineralogickou transformáciou, napríklad na odstránenie nečistôt.

Zatiaľ čo niektoré minerály možno jedinečne opísať iba podľa ich chemického zloženia (pozri kapitolu 4.2.1 a 4.2.2 pre jednozložkové látky a mnohozložkové látky), v prípade iných samotné chemické zloženie na jedinečnú identifikáciu týchto látok nepostačuje (pozri kapitolu 4.2.3).

Na rozdiel od iných jednozložkových a mnohozložkových látok sa pri identifikácii mnohých minerálov musí vychádzať z chemického zloženia a vnútornej štruktúry (napr. ako sa zistilo pomocou difrakcie röntgenových lúčov), keďže tie spolu predstavujú základ minerálu a určujú jeho fyzikálno-chemické vlastnosti.

Podobne ako v prípade mnohozložkových látok aj pri mineráloch sa ako súčasť identifikácie používa číslo CAS (t. j. kombinácia anorganických zložiek). Čísla CAS anorganických zložiek (ako sú vymedzené v systematickej mineralógii) sa používajú na opis rôznych zložiek. Ak sa vyrobí samostatná anorganická zložka (jednozložková látka), na identifikáciu látky je potrebné použiť číslo CAS tejto látky. Napríklad:

- Minerál kaolín (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) pozostáva v podstate z primárnych a sekundárnych kaolinitov (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7), čo je v podstate hydratovaný hlinito-kremičitý íl.

V prípade, že by bol na kaolín použitý proces rafinácie s cieľom výroby jedinej zložky kaolónu, napr. kaolinitu, potom by číslo CAS/EINECS pre látku bolo podľa čísla EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Minerál bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9), ktorý je opísaný v systéme EINECS ako „koloidný íl A. Skladá sa hlavne z montmorillonitu“, obsahuje vysoký pomer anorganickej zložky montmorillonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), ale aj iné

zložky.

V prípade, že sa vyrobí čistý montmorillonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), na identifikáciu látky je potrebné použiť číslo CAS montmorillonitu.

Je potrebné zdôrazniť, že bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) a montmorillonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) sa nepovažujú za rovnakú látku.

Na záver je potrebné uviesť, že minerál sa zvyčajne pomenúva podľa kombinácie svojich anorganických zložiek. Možno ich považovať za jednozložkové alebo mnohozložkové látky (všeobecné usmernenie sa nachádza v kapitolách 4.2.1 a 4.2.2). Niektoré minerály nemožno jedinečne opísať iba podľa ich chemického zloženia, ale na ich dostatočnú identifikáciu je potrebná ďalšia fyzikálna charakterizácia alebo parametre spracovania (pozri kapitolu 4.2.3). V tabuľke sa uvádza niekoľko príkladov.

**Príklady minerálov**

Názov	CAS	EINECS	Doplňujúci opis
Kristobalit	14464-46-1	238-455-4	O <sub>2</sub> Si (kryštalová sústava: kubická/tetragonálna)
Kremeň	14808-60-7	238-878-4	O <sub>2</sub> Si (kryštalová sústava: trigonálna/hexagonálna)
Kremelina	61790-53-2	-	Známa aj ako diatomit, kieselgur a celit Opis: Jemná kremičitá tuhá látka zložená zo skeletov malých predhistorických vodných rastlín. Obsahuje najmä kremík.
Dolomit	16389-88-1	240-440-2	CH <sub>2</sub> O <sub>3</sub> .1/2Ca.1/2Mg
Skupina živcových minerálov	68476-25-5	270-666-7	Anorganická látka vzniknutá vysokoteplotnou kalcináciou zmesi s rôznym zastúpením oxidov bária, hliníka, horčíka, kremíka, stroncia a vápnika, ktoré vzájomnou homogénnou iónovou difúziou utvorili kryštalickú mriežku.
Mastenec	14807-96-6	238-877-9	Mg <sub>3</sub> H <sub>2</sub> (SiO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>
Vermikulit	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)

### **Analytické informácie požadované pre minerály**

<b>Elementárne zloženie</b>	Chemické zloženie poskytuje celkový prehľad o zložení minerálu bez ohľadu na počet zložiek a ich podiely v mineráli. Na základe dohody sa chemické zloženie vyjadruje pre oxidy.
<b>Spektrálne údaje (XRD alebo ekvivalentné)</b>	XRD alebo iné techniky môžu identifikovať minerály na základe ich kryštalografickej štruktúry. Uvádzajú sa aj charakteristické maximá XRD alebo vhodné alternatívne údaje, ktoré identifikujú minerál spolu so stručným opisom analytickej metódy alebo bibliografickým odkazom.
<b>Typické fyzikálno-chemické vlastnosti</b>	Minerály majú charakteristické fyzikálno-chemické vlastnosti, ktoré umožňujú ich úplnú identifikáciu, napr. <ul style="list-style-type: none"> <li>- veľmi nízka tvrdosť,</li> <li>- rozpínanie,</li> <li>- tvary diatomitu (optický mikroskop),</li> <li>- veľmi vysoká hustota,</li> <li>- povrchová plocha (adsorpcia dusíka).</li> </ul>

## **7.6. Esenciálny olej Lavandin grosso**

Esenciálne oleje sú látky, ktoré sa získavajú z rastlín. Preto sa esenciálne oleje môžu charakterizovať aj ako látky získané z rastlinného materiálu.

Látky získané z rastlinného materiálu sú zvyčajne komplexné prírodné látky získané spracovaním rastliny alebo jej častí postupmi, ako sú extrakcia, destilácia, lisovanie, frakcionácia, čistenie, koncentrácia alebo fermentácia. Zloženie týchto látok sa mení v závislosti od rodu, druhu, podmienok rastu a termínu zberu zdrojov, ako aj od použitých technológií spracovania.

Esenciálne oleje sa môžu definovať podľa svojich hlavných zložiek, ako je to v prípade mnohozložkových látok. Esenciálne oleje však môžu pozostávať až z niekoľkých stoviek zložiek, ktoré sa môžu významne meniť v závislosti od množstva faktorov (napr. rodu, druhu, podmienok rastu, termínu zberu, použitých postupov spracovania). Preto na opis týchto látok UVCB často nepostačuje opis ich hlavných zložiek. Esenciálne oleje je potrebné opisovať podľa rastlinného zdroja a postupu spracovania, ako sa uvádza v kapitole 4.3.1 (pomocou podtypu UVCB 3).

V mnohých prípadoch sú pre esenciálne oleje k dispozícii priemyselné normy (pre mnohé esenciálne oleje aj normy ISO). Informácie o normách sa môžu poskytnúť navyše. Pri identifikácii látky by sa však malo vychádzať z látky v takej forme, v akej je vyrobená.

V ďalšom príklade sa opisuje esenciálny olej Lavandin grosso, pre ktorý existuje norma ISO (ISO 8902-1999).

## 1. Názvy a ďalšie identifikátory

### Zdroj

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

### Proces

#### Opis (bio)chemických reakcií používaných pri výrobe látky:

Destilácia kvitnúcich vňatí *Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae) s vodnou parou a následná separácia vodnej fázy z esenciálneho oleja

Následná separácia je spontánnny, fyzikálny proces, ktorý sa bežne uskutočňuje v separátore (nazývanom florentská banka), ktorý umožňuje jednoduchú izoláciu separovaného oleja. Teplota v tomto stupni destilačného procesu je asi 40 °C.

### Názov

Názov IUPAC alebo iný medzinárodný chemický názov	Esenciálny olej <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
EC číslo Názov EC Opis EC	297-385-2 Levandula, <i>Lavendula hybrida grosso</i> , extrakt Extrakty a ich fyzikálne modifikované deriváty, ako tinktúry, konkréty, absolúty, esenciálne oleje, balzamy, terpény, neterpénované frakcie, destiláty, rezíduá atď. získané z <i>Lavendula hybrida grosso</i> , Labiatae <sup>31</sup> .
Číslo CAS Názov CAS	93455-97-1 Levandula, <i>Lavendula hybrida grosso</i> , extrakt

<sup>31</sup> Labiatae a Lamiaceae sú synonymá.

## 2. Informácie o zložení – známe zložky

Známe zložky					
	Názov chemickej látky EC CAS IUPAC iný	Číslo EC CAS	Mol. vzorec Hillova metóda	Typická konc. (% w/w)	Rozsah konc. (% w/w)
<b>A</b>	<b>EC</b> linalyl-acetát <b>CAS</b> 1,6-oktadién-3-ol, 3,7- dimetyl-, acetát <b>IUPAC</b> 3,7-dimetyl okta-1,6-dién-3- yl acetát	<b>EC</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>EC</b> linalool <b>CAS</b> 1,6-oktadién-3-ol, 3,7- dimetyl- <b>IUPAC</b> 3,7-dimetyl okta-1,6-dién-3- ol	<b>EC</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>EC</b> bornán-2-ón <b>CAS</b> bicyklo[2.2.1] heptán-2-ón, 1,7,7-trimetyl- <b>IUPAC</b> 1,7,7-trimetylbicyklo[2.2.1]- 2-heptanón <b>Iné</b> gáfor	<b>EC</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> cineol <b>CAS</b> 2-oxabicyklo [2.2.2]oktán, 1,3,3-trimetyl- <b>IUPAC</b> 1,3,3-trimetyl-2- oxabicyklo[2.2.2]oktán <b>Iné</b> 1,8-cineol	<b>EC</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>EC</b> p-ment-1-én-4-ol</p> <p><b>CAS</b> 3-cyklohexén-1-ol, 4-metyl-1-(1-metyletyl)-</p> <p><b>IUPAC</b> 1-(1-metyletyl)-4-metyl-3-cyklohexén-1-ol</p> <p><b>Iné</b> terpinén-4-ol</p>	<p><b>EC</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>EC</b> 2-izopropenyl-5-metylhex-4-enyl acetát</p> <p><b>CAS</b> 4-hexén-1-ol, 5-metyl-2-(1-metyletenyl)-, acetát</p> <p><b>IUPAC</b> 2-(1-metyletenyl)-5-metylhex-4-én-1-ol</p> <p><b>Iné</b> (±)-lavandulyl-acetát</p>	<p><b>EC</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>EC</b> DL-borneol</p> <p><b>CAS</b> bicyklo[2.2.1]heptán-2-ol, 1,7,7-trimetyl-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p><b>IUPAC</b> (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimetyl bicyklo[2.2.1]heptán-2-ol</p> <p><b>Iné</b> borneol</p>	<p><b>EC</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>EC</b> karyofylén</p> <p><b>CAS</b> bicyklo[7.2.0]undec-4-én, 4,11,11-trimetyl-8-metylen-, (1R,4E,9S)-</p> <p><b>IUPAC</b> (1R,4E,9S)-4,11,11-trimetyl-8-metylen bicyklo[7.2.0]undec-4-én</p> <p><b>Iné</b> trans-beta-karyofylén</p>	<p><b>EC</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>EC</b> (E)-7,11-dimetyl-3-metylendodeka-1,6,10-trién</p> <p><b>CAS</b> 1,6,10-dodekatrién, 7,11-dimetyl-3-metylen-, (6E)-</p> <p><b>IUPAC</b> (E)-7,11-dimetyl-3-metylen-1,6,10-dodekatrién</p> <p><b>Iné</b> trans-beta-farnezén</p>	<p><b>EC</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

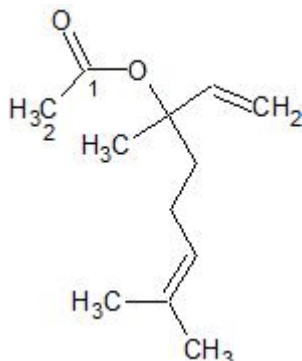
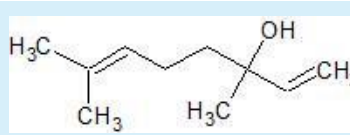
<b>J</b>	<b>EC</b> (R)-p-menta-1,8-dién <b>CAS</b> cyklohexén, 1-metyl-4-(1-metyletenyl)-, (4R)- <b>IUPAC</b> (4R)-1-metyl-4-(1-metyletenyl)cyklohexén <b>Iné</b> limonén	<b>EC</b> 227-813-5 <b>CAS</b> 5989-27-5	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1	0,5 – 1,5
<b>K</b>	<b>EC</b> 3,7-dimetylokta-1,3,6-trién <b>CAS</b> 1,3,6-oktatrién, 3,7-dimetyl- <b>IUPAC</b> 3,7-dimetylokta-1,3,6-trién <b>Iné</b> cis-beta-ocimén	<b>EC</b> 237-641-2 <b>CAS</b> 13877-91-3	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1	0,5 – 1,5

**Známe zložky ≥ 10 %**

Známe zložky		
	Názov EC	Opis EC
<b>A</b>	linalyl acetát 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	



Známe zložky		
	Názov CAS	Súvisiace čísla CAS
<b>A</b>	linalyl acetát 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

Známe zložky			
	Molekulový vzorec metóda CAS	Štruktúrny vzorec	Kód 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		

Známe zložky		
	Molekulová hmotnosť	Rozsah molekulovej hmotnosti
A	196,2888	/
B	154,2516	/

## 7.7. Chryzantémový olej a z neho izolované izoméry

Spoločnosť vyrába chryzantémový olej, ktorý sa extrahuje po rozdrvení kvetov a listov rastlín *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae rozpúšťadlom obsahujúcim zmes vody a etanolu (1:10). Po extrakcii sa rozpúšťadlo odstráni a „čistý“ extrakt sa rafinuje v ďalších krokoch, výsledkom čoho je konečný chryzantémový olej.

Okrem toho sa z extraktu izolujú dva izoméry ako reakčná zmes:

### Jasmolín I

(kyselina cyklopropánkarboxylová, 2,2-dimetyl-3-(2-metyl-1-propenyl)-, (1S)-2-metyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyklopentén-1-yl ester, (1R,3R)-, číslo CAS 4466-14-2) a

### Jasmolín II

(kyselina cyklopropánkarboxylová, 3-[(1E)-3-metoxy-2-metyl-3-oxo-1-propenyl]-2,2-dimetyl-, (1S)-2-metyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyklopentén-1-ylester, (1R,3R)-, číslo CAS 1172-63-0).

Spoločnosť sa ďalej rozhodla, že bude syntetizovať aj izoméru reakčnú zmes jasmolínu I a II.

Spoločnosť kladie tieto otázky:

1. Ako identifikovať chryzantémový olej na účely registrácie?
2. Týka sa reakčnej zmesi izolovaných izomérov jasmolín I a II registrácia oleja?
3. Možno syntetizovanú zmes dvoch izomérov považovať za rovnakú ako zmes izomérov izolovaných z chryzantémového oleja?

### 1. Ako identifikovať chryzantémový olej na účely registrácie?

Chryzantémový olej sa považuje za látku UVCB, ktorá sa nedá dostatočne identifikovať podľa chemického zloženia (podrobné usmernenie je uvedené v kapitole 4.3). Dôležité sú iné identifikačné parametre, ako napr. zdroj a proces. Chryzantémový olej má biologický charakter a je ho potrebné identifikovať podľa druhu a časti organizmu, z ktorého sa získava, a rafinačného procesu (extrakcie rozpúšťadlom). Chemické zloženie a identifikáciu zložiek je však potrebné uviesť, ak sú tieto informácie známe.

Za nevyhnutné sa na dostatočnú identifikáciu látky považujú tieto informácie:

Názov látky	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae; olej získaný z rozdrvených kvetov a listov extrakciou vody s etanolom (1:10)
Zdroj	
Rod, druh, poddruh	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae
Časť rastliny používaná na olej	Kvety a listy
Proces	
Metóda výroby	Drvenie nasledované extrakciou

Rozpúšťadlo používané na extrakciu	voda:etanol (1:10)			
<b>Informácie o zložení – známe zložky v % (w/w)</b>				
Názov zložky	EC číslo	Číslo CAS	Min. %	Max. %
<b>Pyretrín I:</b> 2-metyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyklopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-chryzantemát	204-455-8	121-21-1	30	38
<b>Pyretrín II:</b> 2-metyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyklopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-3-(3-metoxo-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-dimetylcyklopropánkarboxylát	204-462-6	121-29-9	27	35
<b>Cinerín I:</b> 3-(but-2-enyl)-2-metyl-4-oxocyklopent-2-enyl 2,2-dimetyl-3-(2-metylprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát	246-948-0	25402-06-6	5	10
<b>Cinerín II:</b> 3-(but-2-enyl)-2-metyl-4-oxocyklopent-2-enyl 2,2-dimetyl-3-(3-metoxo-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát	204-454-2	121-20-0	8	15
<b>Jasmolín I:</b> 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl[1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-2,2-dimetyl-3-(2-metylprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát	žiadne	4466-14-2	4	10
<b>Jasmolín II:</b> 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-én-1-yl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ (E)]]-2,2-dimetyl-3-(3-metoxo-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát	žiadne	1172-63-0	4	10
Okrem toho látka obsahuje až do 40 zložiek pod 1 %.				

Je možné uvažovať aj o identifikácii látky ako presne definovanej mnohozložkovej látky so šiestimi hlavnými zložkami (reakčná zmes pyretrínu I, pyretrínu II, cinerínu I, cinerínu II, jasmolínu I a jasmolínu II).

Látka sa považuje za „látku prírodného pôvodu“, ak výrobný proces spočíva len v drvení, a v takom prípade sa na ňu vzťahuje výnimka z povinnosti registrácie, okrem prípadu, keď spĺňa kritériá smernice 67/548/EHS na klasifikáciu ako nebezpečná.

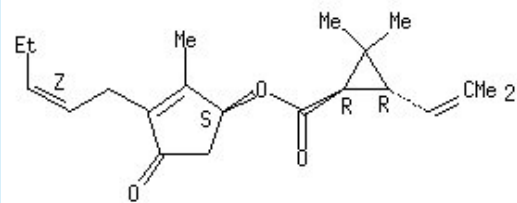
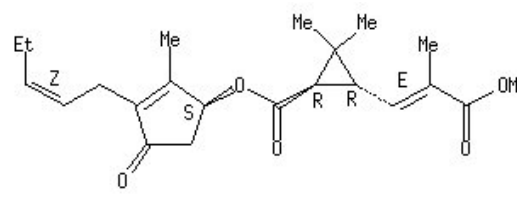
## 2. Týka sa reakčnej zmesi izolovaných izomérov jasmolín I a II registrácia oleja?

Reakčnej zmesi izolovaných izomérov jasmolínu I a II sa netýka registrácia oleja *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae, keďže jednotlivé zložky sa neprekrývajú s celou látkou UVCB a naopak. Reakčná zmes jasmolínu I a II sa považuje za rozdielnú látku.

Reakčnú zmes jasmolínu I a jasmolínu II možno považovať za mnohozložkovú látku (podrobné usmernenie pozri v kapitole 4.2.3) s dvomi hlavnými zložkami.

Za nevyhnutné sa na dostatočnú identifikáciu látky považujú tieto informácie:

Názov IUPAC látky	Reakčná zmes 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl[1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimetyl-3-(2-metylprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát) a (2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-én-1-yl[1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimetyl-3-(3-metoxo-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát)			
Iný názov	Reakčná zmes jasmolínu I a jasmolínu II			
Čistota látky	95 – 98 % (w/w)			
Informácie o zložení – hlavné zložky v % (w/w)				
Názov zložky	EC číslo	Číslo CAS	Min. %	Max. %
Jasmolín I: 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-enyl[1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-dimetyl-3-(2-metylprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát	žiadne	4466-14-2	40	60

<p>Molekulárny vzorec</p> <p>Štruktúrny vzorec</p> <p>Molekulová hmotnosť</p>		 <p>C<sub>22</sub>H<sub>30</sub>O<sub>5</sub> M = 374 g/mol</p>		
<p>Jasmolín II: 2-metyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyklopent-2-én-1-yl [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimetyl-3-(3-metoxi-2-metyl-3-oxoprop-1-enyl)cyklopropánkarboxylát</p> <p>Molekulárny vzorec</p> <p>Štruktúrny vzorec</p> <p>Molekulová hmotnosť</p>	<p>žiadne</p>	<p>1172-63-0</p>  <p>C<sub>21</sub>H<sub>30</sub>O<sub>3</sub> M = 374 g/mol</p>	<p>35</p>	<p>65</p>

### 3. Možno syntetizovanú zmes (reakčnú zmes) dvoch izomérov považovať za rovnakú ako zmes izomérov izolovaných z chryzantémového oleja?

V prípade chemicky presne definovaných látok, ktoré sú dostatočne opísané podľa svojich zložiek, nezáleží na tom, či je látka izolovaná z extraktu alebo syntetizovaná chemickým procesom. Syntetizovanú reakčnú zmes jasmolínu I a jasmolínu II preto možno považovať za rovnakú ako zmes izomérov izolovaných z chryzantém, a to aj vtedy, ak pochádza z rôznych výrobných procesov, za predpokladu, že čistota zmesi a rozsah koncentrácií hlavných zložiek sú rovnaké.

### 4. Záver

Identifikujú sa dve látky:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae; olej získaný z rozdrvených kvetov a listov extrakciou vody s etanolom (1:10)
2. Reakčná zmes izomérov jasmolínu I a jasmolínu II, nezávisle od výrobného procesu látky.

Ak by sa uvedené látky použili len v prípravkoch na ochranu rastlín a biocídnych výrobkoch, považovali by sa podľa nariadenia REACH (článok 15) za registrované.

## 7.8. Fenol, izopropylovaný, fosfát

Fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1) je látka UVCB, v prípade ktorej sa variabilita izopropylovanej jednotky nedá úplne definovať.

**1. Názov a ďalšie identifikátory**

<b>Názov IUPAC alebo iný medzinárodný chemický názov</b>	Fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1)
<b>Iné názvy</b>	Fenol, izopropylovaný, fosfát Fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1) (na základe molárneho pomeru 1:1 propylénu s fenolom)
<b>EC číslo</b> <b>Názov EC</b> <b>Opis EC</b>	273-066-3 Fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1) /
<b>Číslo CAS</b> <b>Názov CAS</b>	68937-41-7 Fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1)

**2. Informácie o zložení – hlavné zložky**

<b>Hlavné zložky</b>					
<b>Názov IUPAC</b>	<b>Číslo CAS</b>	<b>EC číslo</b>	<b>Molekulárny vzorec Hillova metóda</b>	<b>Typická konc. (% w/w)</b>	<b>Rozsah konc. (% w/w)</b>
Fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Nešpecifikované		

Hlavné zložky	
Názov EC	Opis EC
Fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1)	/
Názov CAS	Číslo CAS
Fenol, izopropylovaný, fosfát (3:1)	68937-41-7

## 7.9. Kvartérne amóniové zlúčeniny

Spoločnosť syntetizuje tieto látky:

### Látka A

Kvartérne amóniové zlúčeniny, di-C<sub>10-18</sub>-alkyldimethyl, chloridy

EC číslo 294-392-2

Č. CAS 91721-91-4

Rozdelenie podľa dĺžok uhlíkového reťazca:

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 %

### Látka B

Kvartérne amóniové zlúčeniny, dikokoalkyldimetyl, chloridy

EC číslo 263-087-6

Číslo CAS 61789-77-3

Spoločnosť nepozná presné zloženie tejto látky.

### Látka C

Didodecyldimetylamónium bromid

**Látka D**

Didodecyldimetylamónium chlorid

**Látka E**

Látka E sa vyrába ako reakčná zmes didodecyldimetylamónium bromidu a didodecyldimetylamónium chloridu (reakčná zmes látok C a D).

**Látka F**

Kvartérne amóniové zlúčeniny, di-C<sub>14-18</sub>-alkyldimetylamónium, chloridy

EC číslo 268-072-8

Číslo CAS 68002-59-5

Rozdelenie podľa dĺžok uhlíkového reťazca:

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 %

**Látka G**

Kvartérne amóniové zlúčeniny, di-C<sub>4-22</sub>-alkyldimetyl, chloridy

Rozdelenie podľa dĺžok uhlíkového reťazca (jedna čiarka v indexe označuje dvojitú väzbu, dve čiarky v indexe označujú trojitú väzbu):

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 %
C <sub>14</sub>	24,0 %
C <sub>16</sub>	20,0 %
C <sub>18</sub>	16,0 %
C <sub>18'</sub>	2,0 %
C <sub>18''</sub>	0,5 %
C <sub>20</sub>	4,0 %
C <sub>22</sub>	2,0 %

Spoločnosť na pomenovanie zatiaľ používa iba látku B (kvartérne amóniové zlúčeniny, dikokoalkyldimetyl chloridy, EC číslo 263-087-6 a číslo CAS 61789-77-3), pretože je najvhodnejšia pre všetky látky (látky A až G). Spoločnosť chce vedieť, či je možné všetky látky (A až G) zahrnúť do jednej registrácie látky B.



## **1. Všeobecné poznámky**

Uhlíkovodíky (parafíny, olefíny) pochádzajúce z tukov alebo olejov alebo syntetických náhrad sa identifikujú podľa distribúcie uhlíkového reťazca alebo podľa pôvodu (deskriptor alkylu), podľa funkčnej skupiny (deskriptor funkčnej skupiny), napr. amónium, a podľa aniónu/katiónu (deskriptor soli), napr. chlorid. Distribúcia dĺžok reťazca, napr. C<sub>8-18</sub>, sa vzťahuje na uhlíkovodíky

nasýtené,

lineárne (nerozvetvené),

s uvedením všetkých hodnôt počtu uhlíkov (C<sub>8</sub>, C<sub>9</sub>, C<sub>10</sub>, C<sub>11</sub>,..., C<sub>18</sub>) pričom úzky rozsah počtu uhlíkov sa neprekrýva so širším a naopak.

V opačnom prípade sa uvádza takto:

nenasýtené (C<sub>16</sub> nenasýtené),

rozvetvené (C<sub>10</sub> rozvetvené),

s párnym počtom uhlíkov (C<sub>12-18</sub> párne).

Uhlíkové reťazce opísané podľa zdroja musia pozostávať z distribúcie, ktorá sa vyskytuje v zdroji, napr. alkylamíny z loja:

Alkylamíny z loja sú z 99 % primárne, lineárne alkylamíny s lineárnym reťazcom, pri ktorých je takéto rozdelenie podľa dĺžok uhlíkového reťazca (Ullmann, 1985) [jedna čiarka v indexe označuje dvojitú väzbu, dve čiarky v indexe označujú trojitú väzbu]:

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

## **2. Ako identifikovať látky na účely registrácie?**

Každá látka sa porovnáva s látkou B (ktorá sa doteraz používala na pomenovanie), aby sa posúdilo, či obe látky možno považovať za rovnaké.

Porovnanie látok A a B

V prípade látky B pochádzajúcej z kokosu je rozdelenie podľa dĺžok uhlíkového reťazca takéto (Ullmann, 1985) [jedna čiarka v indexe označuje dvojitú väzbu, dve čiarky v indexe označujú trojitú väzbu]:

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

Rozdelenie podľa dĺžok uhlíkového reťazca látky A sa teda líši od rozdelenia podľa dĺžok uhlíkového reťazca látky B z kokosu. Keďže kvalitatívne a kvantitatívne zloženie týchto dvoch látok sa výrazne líši, nemožno ich považovať za rovnaké.

#### Porovnanie látok B a C

Látka B „kvartérne amóniové zlúčeniny, dikokoalkyldimetyl, chloridy“ sa opisuje ako zmes zložiek s rôznymi dĺžkami uhlíkového reťazca (C<sub>6</sub> to C<sub>18</sub> párne, lineárne, nasýtené a nenasýtené), pričom látka C sa opisuje len jednou zložkou s jednou vymedzenou a nasýtenou dĺžkou reťazca (C<sub>12</sub>) s rozdielnym aniónom (bromidom). Látku C preto nemožno považovať za rovnakú ako látka B.

#### Porovnanie látok B a D

Látka B „kvartérne amóniové zlúčeniny, dikokoalkyldimetyl, chloridy“ sa opisuje ako zmes zložiek s rôznymi dĺžkami uhlíkového reťazca (C<sub>6</sub> to C<sub>18</sub> párne, lineárne, nasýtené a nenasýtené), pričom látka D sa opisuje jednou zložkou s definovaným a nasýteným reťazcom (C<sub>12</sub>) a s rovnakým aniónom (chloridom). Látky B a D majú rôzne názvy a nemožno ich považovať za rovnakú látku, pretože látka s jednou zložkou nepatrí do zmesi, ktorá obsahuje aj túto zložku a naopak.

#### Porovnanie látok B a E

Látka E je zmesou látok C a D. Obidve majú nasýtený reťazec C<sub>12</sub>, ale rôzne anióny (bromid a chlorid). Látka B „kvartérne amóniové zlúčeniny, dikokoalkyldimetyl, chloridy“ sa opisuje ako zmes zložiek s rôznymi dĺžkami uhlíkového reťazca (C<sub>6</sub> to C<sub>18</sub> párne, lineárne, nasýtené a nenasýtené) a chloridu ako aniónu. Látka E sa však opisuje len podľa uhlíkového reťazca C<sub>12</sub> s bromidom ako ďalším aniónom. Látky B a E preto nemožno považovať za rovnaké. V dôsledku toho je látku E potrebné registrovať samostatne.

#### Porovnanie látok B a F

Látka F „kvartérne amóniové zlúčeniny, di-C<sub>14-18</sub>-alkyldimetylamónium, chloridy“ je zmesou zložiek s rôznymi dĺžkami uhlíkového reťazca (C<sub>14</sub> to C<sub>18</sub> párne a nepárne, lineárne a nasýtené). Látka F sa od látky B líši zložením a rozsahom rozdelenia podľa dĺžok uhlíkového reťazca. Látka F má úzke rozdelenie podľa dĺžok uhlíkového reťazca a okrem toho aj uhlíkové

reťazce C<sub>15</sub> a C<sub>17</sub>. Látky B a F preto nemožno považovať za rovnaké.

### Porovnanie látok B a G

Látky B a G vyzerajú veľmi podobne, pretože rozdelenie podľa dĺžok uhlíkového reťazca sa pohybuje takmer v rovnakom rozsahu. V látke G sú však aj uhlíkové reťazce C<sub>4</sub>, C<sub>20</sub> a C<sub>22</sub>. Látka G má širší rozsah rozdelenia podľa dĺžok uhlíkového reťazca ako látka B. Látky B a G preto nemožno považovať za rovnaké.

### 3. Záver

Uhlíkovodíky (parafíny, olefíny) možno považovať za rovnakú látku len vtedy, keď sú všetky tri deskriptory (deskriptor alkylu, deskriptor funkčnej skupiny a deskriptor soli) rovnaké.

V uvedenom príklade sa deskriptory vždy navzájom líšia. Látky preto nemožno zaregistrovať v jednej registrácii látky B.

## 7.10. Ropné látky

Používanie usmernení ku konkrétnym látkam UVCB z kapitoly 4.3.2, uvedené sú dva príklady.

### 7.10.1. Benzínová zmesná frakcia (C4-C12)

#### 1. *Názov a ďalšie identifikátory*

Názov

<b>Názov IUPAC alebo iný medzinárodný chemický názov</b>	Katalytický reformovaný benzín (ropný)
--	--

Zdroj

<b>Identifikácia alebo opis zdroja frakcie</b>	Ropa
--	------

Proces

<b>Opis rafinačného procesu</b>	<b>Katalytický reformačný proces</b>
<b>Uhlíkový rozsah</b>	C4 – C12
<b>Rozsah teploty varu alebo konečná teplota varu</b>	30 °C až 220 °C

<b>Ďalšie fyzikálne vlastnosti, napr. viskozita</b>	pod 7 mm <sup>2</sup> /s s pri 40 °C (viskozita)
<b>EC číslo</b>	273-271-8
<b>Číslo CAS</b>	68955-35-1
<b>Názov EC/názov CAS</b>	Katalytický reformovaný benzín (ropný)
<b>Opis EC/opis CAS</b>	Komplexná zmes uhľovodíkov získaná destiláciou produktov katalytického reformačného procesu. Pozostáva z uhľovodíkov, ktoré majú počet uhlíkov prevažne v rozmedzí od C4 do C12 a teplotu varu v rozmedzí približne od 30 °C do 220 °C (90 °F až 430 °F). Obsahuje relatívne vysoký podiel aromatických uhľovodíkov a uhľovodíkov s rozvetveným reťazcom. Táto frakcia môže obsahovať 10 alebo viac objemových % benzénu.

## 2. Informácie o zložení

<b>Známe zložky</b>			
<b>Názov IUPAC</b>	<b>Číslo CAS</b>	<b>EC číslo</b>	<b>Rozsah konc. (% w/w)</b>
Benzén	71-43-2	200-753-7	1-10
Toluén	108-88-3	203-625-9	20-25
Xylén	1330-20-7	215-535-7	15-20

### 7.10.2. Plynové oleje (ropa)

#### 1. Názov a ďalšie identifikátory

<b>Názov IUPAC alebo iný medzinárodný chemický názov</b>	Plynové oleje (ropné), ťažké atmosférické
--	---

Zdroj

<b>Identifikácia alebo opis zdroja frakcie</b>	Ropa
--	------

Proces

<b>Opis rafinačného procesu</b>	<b>Atmosférická destilácia</b>
<b>Uhlíkový rozsah</b>	C7 – C35
<b>Rozsah teploty varu alebo konečná teplota varu</b>	121 °C až 510 °C
<b>Ďalšie fyzikálne vlastnosti, napr. viskozita</b>	20 mm <sup>2</sup> /s s pri 40 °C (viskozita)
<b>EC číslo</b> <b>Číslo CAS</b> <b>Názov EC/názov CAS</b> <b>Opis EC/opis CAS</b>	272-184-2 68783-08-4 Plynové oleje (ropné), ťažké atmosférické Komplexná zmes uhľovodíkov získaná destiláciou ropy. Pozostáva z uhľovodíkov s počtom uhlíkov prevažne v rozmedzí od C7 do C35 a s teplotou varu približne od 121 °C do 510 °C (250 °F až 950 °F).

## 2. Chemické zloženie

K dispozícii nie sú žiadne informácie.

### 7.11. Enzýmy

V usmernení ku konkrétnym látkam UVCB z kapitoly 4.3.2.3 sa uvádzajú dva príklady enzýmových koncentrátov: subtilizín (identifikovaný podľa názvoslovia IUBMB + ďalších zložiek) a  $\alpha$ -amyláza (identifikovaná podľa názvoslovia IUBMB + produkčného organizmu)

#### 7.11.1. Subtilizín

Enzýmový proteín	Subtilizín
Číslo IUBMB	3.4.21.62

<b>Názvy podľa IUBMB</b> (systematický názov, názov enzýmu, synonymá)	Subtilizín alkaláza, alkaláza 0.6L, alkaláza 2.5L, ALK-enzým, bacilopeptidáza A, bacilopeptidáza B; Bacillus subtilis alkalická proteináza, biopráza, biopráza AL 15, biopráza APL 30, kolistináza (pozri tiež poznámky), subtilizín J, subtilizín S41, subtilizín Sendai, subtilizín GX, subtilizín E atď.
<b>Poznámky IUBMB</b>	Subtilizín je serínová endopeptidáza, príklad typu <a href="#">skupiny peptidáz S8</a> . Neobsahuje žiadne cysteínové rezíduá (hoci sa nachádzajú v homologických enzýmoch). Varianty druhov obsahujú subtilizín BPN' (tiež subtilizín B, subtilopeptidázu B, subtilopeptidázu C, Nagarse, proteinázu Nagarse, subtilizín Novo, bakteriálnu proteinázu Novo) a subtilizín Carlsberg (subtilizín A, subtilopeptidázu A, alkalázu Novo). Pôvodne EC 3.4.4.16 a zahrnuté v EC 3.4.21.14. Podobné enzýmy sú produkované rôznymi kmeňmi <i>Bacillus subtilis</i> a inými druhmi <i>Bacillus</i> [1,3]
<b>Reakcia</b>	Hydrolýza proteínov so širokou špecifickosťou peptidových väzieb a preferenciou pre veľké neutrálne rezíduum v P1. Hydrolyzuje peptidové amidy.
<b>Reakčný typ</b>	Hydrolázy Pôsobiace na peptidové väzby (peptidázy) Serínové endopeptidázy
<b>EC číslo</b>	232-752-2
<b>Názov EC</b>	Subtilizín
<b>Číslo CAS</b>	9014-01-1
<b>Názov CAS</b>	Subtilizín
<b>Koncentrácia enzýmového proteínu</b>	26 %

Iné zložky	
Iné proteíny, peptidy a aminokyseliny	39 %
Sacharidy	11 %
Lipidy	1 %
Anorganické soli	23 %
Doplňujúce parametre	
<b>Substráty a produkty</b>	Proteíny alebo oligopeptidy, voda Peptidy

### 7.11.2. $\alpha$ -amyláza

Enzymový proteín	$\alpha$ -amyláza
<b>Číslo IUBMB</b>	3.2.1.1
<b>Názvy podľa IUBMB</b> (systematický názov, názov enzýmu, synonymá)	1,4- $\alpha$ -D-glukán-glukanohydroláza, glykogenáza, $\alpha$ -amyláza, alfa-amyláza, endoamyláza, taka-amyláza A.
<b>Poznámky IUBMB</b>	Občas pôsobí na škrob, glykogén a príbuzné polysacharidy a oligosacharidy, redukujúce skupiny sa uvoľňujú v $\alpha$ -konfigurácii. Výraz $\alpha$ sa vzťahuje na počiatočnú anomérnu konfiguráciu uvoľnenej voľnej skupiny cukru, a nie na konfiguráciu hydrolyzovanej väzby.
<b>Reakcia</b>	Endohydrolýza 1,4- $\alpha$ -D-glukozidických väzieb v polysacharidoch obsahujúcich tri alebo viac 1,4- $\alpha$ -D-glukózových jednotiek

<b>Reakčný typ</b>	Hydrolázy Glykozidázy Glykozidázy, t. j. enzýmy hydrolyzujúce O- a S- glykozylové zlúčeniny
<b>EC číslo</b>	232-565-6
<b>Názov EC</b>	Amyláza, $\alpha$ -
<b>Číslo CAS</b>	9000-90-2
<b>Súvisiace čísla CAS</b>	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319- 50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (všetky sú zrušené)
<b>Názov CAS</b>	Amyláza, $\alpha$ -
<b>Koncentrácia enzýmového proteínu</b>	37 %
<b>Iné zložky</b>	
Iné proteíny, peptidy a aminokyseliny	30 %
sacharidy,	19 %
Anorganické soli	14 %
<b>Doplňujúce parametre</b>	
<b>Substráty a produkty</b>	škrob; glykogén; voda; polysacharid; oligosacharid;



## Dodatok I - Podporné materiály

Tento dodatok obsahuje zoznam webových sídiel, databáz a príručiek, ktoré môžu byť užitočné pri vyhľadávaní príslušných názvov IUPAC, CAS a EC, čísel CAS a EC čísel, molekulárnych a štruktúrnych vzorcov vrátane notácie SMILES a iných parametrov, ktoré sa požadujú pri identifikácii látky. Komerčné databázy a nástroje usmernenia neboli zahrnuté.

Všeobecné informácie		
Identifikačný parameter látky	Zdroj	Opis zdroja
Ministerstvo zdravotníctva a sociálnych vecí USA	<a href="https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/">https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/</a>	Skupina databáz a nástrojov určených používateľom na vyhľadávanie informácií o chemických látkach.
Perkin Elmer Informatics	<a href="https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice">https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice</a>	Voľne dostupná databáza chemických štruktúr, fyzikálnych vlastností a hypertextových prepojení na súvisiace informácie.
BIOVIA Experiment Knowledge Base (EKB)	<a href="https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/">https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/</a>	Chemický softvér, Accord Alphabetical Product Listing.

<b>Názov a ďalšie identifikátory</b>		
<b>Parameter identifikácie látky</b>	<b>Zdroj</b>	<b>Opis zdroja</b>
Názov IUPAC	<a href="https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/">https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/</a>	Oficiálne webové sídlo IUPAC.
	<a href="https://iupac.qmul.ac.uk/">https://iupac.qmul.ac.uk/</a>	Chemické názvoslovie a odporúčania IUPAC (podľa IUPAC).
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) [Názvoslovie v organickej chémii (Modrá kniha)], Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Základné publikácie o názvosloví IUPAC, predpokladaná aktualizácia 2006.
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) [Príručka IUPAC názvoslovia organických zlúčenín (odporúčania 1993) (doplnok k Modrej knihe)], Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Základné publikácie o názvosloví IUPAC, predpokladaná aktualizácia 2006.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) [Názvoslovie v anorganickej chémii (odporúčania 1990) (Červená kniha)], Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Základné publikácie o názvosloví IUPAC, predpokladaná aktualizácia júl 2005.
Názov IUPAC	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) [Názvoslovie v biochémií a súvisiace dokumenty (Biela kniha)], Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Základné publikácie o názvosloví IUPAC.
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations (Zásady chemického názvoslovia: Príručka odporúčaní IUPAC), Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Úvodný zväzok zaoberajúci sa všetkými typmi zlúčenín.

Názov IUPAC	<a href="http://www.acdlabs.com/products/drawnom/">http://www.acdlabs.com/products/drawnom/</a>	Komerčný počítačový program názvov, ktorý môže byť veľmi užitočný pri pomenovaní stredne zložitých štruktúr. Pre malé molekuly je aj voľne dostupný (freeware) (odporúčaný IUPAC).
	<a href="http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature">http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature</a>	Názvoslovie v organickej chémii podľa IUPAC (odporúčaný IUPAC).
	<a href="http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm">http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm</a>	Úplný zoznam schválených triviálnych a semisystematických koreňových názvov organických zlúčenín.
	<a href="http://www.chemexper.com/">http://www.chemexper.com/</a>	Cieľom adresára ChemExper Chemical Directory je vytvoriť všeobecnú a cez internet voľne dostupnú databázu chemických látok. Táto databáza obsahuje chemické látky s ich fyzikálnymi vlastnosťami. Pomocou internetového prehliadača názvoslovia IUBMB môže poskytnúť a nájsť
informácie o chemických látkach.	<a href="https://iubmb.qmul.ac.uk/">https://iubmb.qmul.ac.uk/</a>	Databáza IUBMB názvoslovia v biochémií (podľa IUBMB).
Iné názvy	<a href="http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name">http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name</a>	Všeobecné názvy podľa indexu farieb, Medzinárodný index farieb, štvrté online vydanie.
	<a href="https://incipedia.personalcarecouncil.org/">https://incipedia.personalcarecouncil.org/</a>	INCI (Medzinárodné názvoslovie kozmetických zložiek), oficiálne webové sídlo Výboru pre výroby osobnej hygieny.
	<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>	Látky US EPA obsahujúce rôzne dĺžky uhlíkového reťazca (rozsahy alkylov využívajúce zápis CX-Y).
Iné identifikátory	<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, oficiálna európska stránka CE.

EC číslo	<a href="https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory">https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory</a>	Zoznam EC: vyhľadávanie v zoznamoch EINECS, ELINCS, NLP a v <i>prílohe I</i> k smernici 67/548/EHS.
Číslo CAS	<a href="http://www.cas.org">http://www.cas.org</a>	Oficiálne webové sídlo registračnej služby CAS.
	<a href="http://www.chemistry.org">http://www.chemistry.org</a>	Oficiálne webové sídlo Americkej chemickej spoločnosti.

### Molekulárny a štruktúrny vzorec

Parameter identifikácie látky	Zdroj	Opis zdroja
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>	Voľne dostupný generátor kódov SMILES.
Molekulová hmotnosť a SMILES	<a href="http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html">http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html</a>	ACDChemsSketch, voľne dostupný softvér (aj komerčne dostupný).
Niektoré fyzikálno-chemické parametre	<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>	EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ je balík programov na odhad fyzikálno-chemických vlastností a osudu látok v životnom prostredí pre operačný systém Windows®, ktorý vyvinulo oddelenie na prevenciu pred znečistením toxickými chemickými látkami spoločnosti EPA a spoločnosť Syracuse Research Corporation (SRC).
Ďalšia podpora týkajúca sa konkrétnych látok	<a href="#">Otázky a odpovede – ECHA</a> <a href="#">Podpora pre jednotlivé odvetvia v súvislosti s identifikáciou látky – ECHA</a>	Podpora týkajúca sa prístupov k pomenovaniu a charakterizácie pre konkrétne látky je uvedená na webovom sídle agentúry ECHA a v časti s otázkami a odpoveďami.

## Dodatok II – Technické usmernenie pre identifikačný parameter látky

Informácie v tomto dodatku sú určené používateľom usmerňujúceho dokumentu, ktorí nie sú oboznámení s technickými pravidlami názvoslovia, používaním rôznych registračných čísel a pravidlami tvorby zápisu pri uvádzaní molekulárnych a štruktúrnych vzorcov, spektrálnych údajov atď.

Vo všeobecnom úvode sa nachádza súhrn hlavných zásad a používateľ je nasmerovaný na pôvodné zdroje obsahujúce úplné informácie.

Tento prehľad je zjednodušenou verziou, nie je úplný ani dôkladný a pre profesionálneho používateľa nie je dostatočne podrobný. V žiadnom prípade sa nemá považovať za ekvivalent oficiálneho zdroja.

### Názov (názvy) v názvosloví IUPAC alebo v inom medzinárodnom názvosloví

Na účely registrácie sa musí uvádzať anglický názov podľa IUPAC alebo iný presne definovaný medzinárodne uznávaný názov látky.

Názov IUPAC vychádza z medzinárodného štandardného chemického názvoslovia, ktoré zaviedla medzinárodná organizácia IUPAC, Medzinárodná únia pre čistú a aplikovanú chémiu (príslušné odkazy pozri v dodatku 1). Názvoslovie IUPAC predstavuje systematický spôsob pomenovania chemických látok, a to organických aj anorganických. V názvosloví IUPAC sa na opis typu a polohy funkčných skupín v látke používajú prefixy, sufixy a infixy.

**Penta-1,3-dién-1-ol**, v tomto príklade:

prefixom je **penta-1,3-**

infixom je **-di** a

sufixom je is **-ol**

**én-** je základom názvu, koreňom názvu.

Súbor pravidiel bol vypracovaný v priebehu viacerých rokov a priebežne sa mení, aby sa zohľadnili nové zložky molekulevej rozmanitosti a odstránili sa prípadné rozpory alebo neistoty, ktoré boli zistené. Pravidlá stanovené organizáciou IUPAC možno použiť len pre presne definované látky.

Nasledujú niektoré všeobecné usmernenia k štruktúre názvu IUPAC. Podrobnejšie informácie sa nachádzajú v usmernení uvedenom v kapitole 4 tohto usmerňovacieho dokumentu.

### 1.1 Organická látka

Krok 1 Zistite počet atómov C v najdlhšom súvislom reťazci atómov uhlíka. Tento počet určuje prefix, prvú časť koreňa názvu:

Počet atómov uhlíka	Koreň
1	met-

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

Krok 2 Zistite nasýtenie reťazca. Nasýtenie reťazca určuje sufix, druhá časť koreňa názvu:

Nasýtenie	Väzba	Sufix
Nenasýtené	Dvojitá Trojitá	-én -ín
Nasýtené	-	-án

V prípade viacnásobných dvojitých alebo trojitých väzieb sa počet väzieb pred sufixom označuje pomocou prepony mono, di, tri atď.:

pentén s 2 dvojitými väzbami: pentadién

Krok 3 Skombinujte prefix, sufix a dodatky ku koreňu názvu

Poznámka: Ako koreň názvu možno použiť aj triviálne a polosystematické názvy schválené organizáciou IUPAC:

benzén, toluén atď.

Krok 4 Použite túto tabuľku:

- Identifikujte substituenty a/alebo funkčné skupiny: uhľikové alebo neuhľikové skupiny pripojené k reťazcu atómov uhlíka identifikovaných v bode 1.
- Určite poradie dôležitosti substituentov a/alebo funkčných skupín.
- Pridajte sufix pre prvý substituent/funkčnú skupinu, ako aj všetky ďalšie, v poradí dôležitosti.
- Pridajte prefix pre ostatné substituenty a funkčné skupiny, v abecednom poradí.

Priorita	Skupina	Vzorec	Sufix	Prefix
1	Karboxylová kyselina	R-COOH	kyselina -ová	karboxy-
2	Ester	R-CO-O-R	-oát	-
3	Amid	R-CONH <sub>2</sub>	-amid	karbamoyl-
4	Kyanid	R-CN	-nitril	kyan-
5	Aldelhyd	R-CHO	-ál	oxo-
6	Ketón	R-CO-R	-ón	oxo-
7	Alkohol	R-OH	-ol	hydroxy-
8	Tiol	R-SH	-tiol	sulfanyl-
9	Amín	R-NH <sub>2</sub>	-amín	amino-

## 1.2 Anorganická látka

### 1.2.1 Pomenovanie jednoduchých anorganických látok

Pomenovanie anorganických látok vychádza zo súboru pravidiel (Červená kniha IUPAC, pozri odkaz v časti 7.1), z ktorých najdôležitejšie sa uvádzajú ďalej:

- 1 Jednoatómové anióny sa pomenúvajú pomocou prípony -id:

**O<sup>2-</sup> je oxid**

- 2 Jednoduché iónové zlúčeniny sa pomenúvajú pomocou kationu, za ktorým nasleduje anión. V prípade kationov s nábojmi >1 sa náboje píše rímskymi číslicami v zátvorke bezprostredne za názvom prvku:

**Cu<sup>2+</sup> je meď (II)**

- 3 Hydráty sa pomenúvajú ako iónová zlúčenina, za ktorou nasleduje číselný prefix a prípona -hydrát. Číselné prefixy sú mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, okta-, nona-, deka-:

**CuSO<sub>4</sub> · 5H<sub>2</sub>O je pentahydrát síranu meďnatého (II)**

Poznámka: na účely registrácie sa hydráty a prípadná bezvodná forma určitej soli kovu považujú za rovnaké látky.

- 4 Anorganické molekulové zlúčeniny sa pred každým prvkom pomenúvajú prefixom (pozri hydráty). Prvok, ktorý je viac elektronegatívny, sa uvedie ako posledný, so sufixom -id:

**CO<sub>2</sub> je oxid uhličitý a CCl<sub>4</sub> je chlorid uhličitý.**

- 5 Kyseliny sa pomenúvajú podľa aniónu, ktorý vzniká po rozpustení kyseliny vo vode. Existuje niekoľko možností:

- a) Ak sa po rozpustení vo vode kyselina rozloží na anión s názvom x-id, kyselina nesie názov kyselina x-vodíková:

**kyselina chlorovodíková vytvára chloridový anión.**

- b) Ak sa po rozpustení vo vode kyselina rozloží na anión s názvom x-ečnan, kyselina nesie názov kyselina x-ečná:

**kyselina chlorečná vo vode disociuje na chlorečnanové anióny.**

- c) Ak sa po rozpustení vo vode kyselina rozloží na anión s názvom x-itan, kyselina nesie názov kyselina x-itá:

**kyselina chloritá disociuje na chloritanové anióny.**

### 1.2.2 Pomenovanie mineralogických fáz

Zložité mineralogické fázy vo všeobecnosti obsahujú kombináciu troch alebo viacerých prvkov. Väčšina prítomných prvkov je zlúčená s kyslíkom a v záujme zjednodušenia identifikácie mineralógovia zvyčajne považujú zložité zlúčeniny za zlúčeniny, ktoré pozostávajú z oxidov, pričom niektoré z nich sú zásadité a iné kyslé. V prípade kremičitanov sa napríklad zaužívalo označenie v podobe súčtu množstva oxidov alebo v podobe soli kyseliny kremičitej alebo kyseliny hlinitokremičitej. V súlade s tým možno ortokremičitan vápenatý označiť ako  $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ , kombináciu samostatných oxidov alebo ako  $\text{Ca}_2\text{SiO}_4$ , ako vápenatú soľ kyseliny ortokremičitej  $\text{H}_4\text{SiO}_4$ . To isté platí aj pre iné zložité minerálne oxidy – pomenúvajú sa prefixom pred každým oxidom (napr.  $\text{Ca}_3\text{SiO}_5$  = kremičitan trojvápenatý =  $3\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ ). V niektorých priemyselných odvetviach sa s cieľom skrátenia vzorca zlúčeniny zaviedlo ďalšie zjednodušenie. V prípade slínku portlandského cementu  $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$  (ortokremičitan vápenatý alebo kremičitan dvojvápenatý) sa napríklad skraca na  $\text{C}_2\text{S}$ , pričom  $\text{C} = \text{CaO}$  and  $\text{S} = \text{SiO}_2$ . V prípade, keď sa majú pomenovať alebo identifikovať zložité mineralogické fázy, sa odporúča konzultovať štandardné mineralogické alebo priemyselné texty.

### 1.3 Prírodné produkty a príbuzné zložky

Pre prírodné produkty vypracovala organizácia IUPAC niekoľko pravidiel systematického pomenovania. V stručnosti to znamená, že v prípade látok extrahovaných z prírodného zdroja, vychádza vždy, keď je to možné, názov z názvu čeľade, rodu alebo druhu organizmu, z ktorého bola látka extrahovaná:

**V prípade hypotetického proteínu *Hypothecalia Exemplare* vychádzajú názvy z *hypothecalia a/alebo exemplare*, napríklad *Horse Exemplare***

Ak je to možné, názov by mal vyjadrovať známu alebo pravdepodobnú distribúciu prírodného produktu. Ak je to vhodné, za základ názvu látky, ktorá sa vyskytuje vo viacerých príbuzných čeľadiach, sa môže použiť aj trieda alebo rad. Názov prírodných produktov neznámej štruktúry nemá obsahovať prefixy, sufixy a/alebo infixy, ktoré sa používajú v organickom názvosloví:

**Kondenzačný produkt *Horse exemplare*, Valarine adovaný na koncový N**

Mnohé látky prírodného pôvodu patria k presne definovaným štruktúrnym triedam, z ktorých každú možno charakterizovať súborom nadradených štruktúr, ktoré sú úzko príbuzné, to znamená, že každú možno odvodiť zo základnej štruktúry. Systematický názov pre tieto látky prírodného pôvodu a ich deriváty môže vychádzať z názvu príslušnej základnej nadradenej štruktúry:



## Presne známe nadradené štruktúry sú alkaloidy, steroidy, terpenoidy a vitamíny

Základná nadradená štruktúra má vyjadrovať základný skelet, ktorý je spoločný pre väčšinu látok danej triedy. Látky prírodného pôvodu alebo deriváty sa pomenúvajú podľa nadradenej štruktúry pridaním prefixov, sufixov alebo infixov, ktorými sa označujú:

- modifikácie skeletovej štruktúry,
- nahradenie atómov v skelete,
- zmeny stavu hydrogenácie, ktoré vyjadruje názov nadradenej štruktúry,
- atómy alebo skupiny, ktoré v nadradenej štruktúre nahrádzajú atómy vodíka,
- konfigurácie, ktoré už nevyjadruje názov nadradenej štruktúry alebo ktoré sú oproti vyjadreným konfiguráciám zmenené.

### Tiamín chlorid je známy aj ako vitamín B<sub>1</sub>

Podrobnejšie informácie o systematickom pomenovaní prírodných produktov a príbuzných látok získate od organizácie IUPAC (pozri dodatok 1).

## 1.4 Názov IUPAC, ktorý sa nedá odvodiť

Ak nie je možné pre určité látky odvodiť názov IUPAC, možno použiť iné medzinárodne uznávané názvoslovie špecifické pre tieto látky:

- minerály a rudy, mineralogické názvy,
- ropné látky,
- všeobecné názvy indexu farieb <sup>3</sup>;
- olejové prísady,
- IINCI (Medzinárodné názvoslovie kozmetických zložiek) <sup>4</sup>;
- Snázvy SDA (Združenie pre mydlá a detergenty) pre povrchovo aktívne látky <sup>5</sup>;
- atď.

## 2 Iné názvy

Na účely registrácie v rámci nariadenia REACH je vhodné uviesť všetky dôležité názvy a/alebo verejné identifikátory vo všetkých jazykoch, v ktorých sa látka uvádza alebo uvedie na trh EÚ (napr. obchodné názvy). Patria sem obchodné názvy, synonymá, skratky atď.

- <http://www.colour-index.com>, Medzinárodný index farieb, štvrté vydanie online
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, oficiálne webové sídlo Výboru pre výroby osobnej hygieny
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, oficiálne webové sídlo American Cleaning Institute (ACI).

## 3 EC číslo zo zoznamov EINECS, ELINCS alebo NLP (zoznam EC)

EC číslo, t. j. zoznamy EINECS, ELINCS alebo NLP, predstavuje oficiálne číslo látky v rámci Európskej únie. EC číslo možno nájsť v oficiálnych publikáciách zoznamov EINECS, ELINCS a NLP a Európskej chemickej agentúry.

EC číslo sa skladá zo 7 číslic typu X<sub>1</sub>X<sub>2</sub>X<sub>3</sub>-X<sub>4</sub>X<sub>5</sub>X<sub>6</sub>-X<sub>7</sub>. Prvá číslica je vymedzená zoznamom, do ktorého látka patrí:

Zoznam	Prvá číslica EC čísla
EINECS	2 alebo 3
ELINCS	4
NLP	5

## 4 Názov CAS a číslo CAS

Služba pre chemické abstrakty (CAS), divízia Americkej chemickej spoločnosti (ACS), prideluje názov a číslo CAS ku každej chemickej látke, ktorá sa zadá do registračnej databázy CAS. Názvy a čísla pridelujú vedeckí pracovníci CAS vo vzostupnom poradí jedinečným látkam. Každá látka registrovaná v službe pre chemické abstrakty má názov podľa názvoslovia CAS, ktorý ACS prijíma na základe odporúčaní výboru ASC pre názvoslovie (pozri odkazy v dodatku 1).

### 4.1 Názov CAS

Názov CAS je názov, ktorý prideluje služba pre chemické abstrakty, a líši sa od názvu IUPAC. Názvoslovie CAS vychádza z obmedzeného súboru kritérií, ktoré vždy nepostačujú na odvodenie názvu látky. Preto sa s cieľom získať správny názov CAS odporúča kontaktovať službu pre chemické abstrakty.

Základné pravidlá názvoslovia sú v stručnosti takéto:

- Za základ alebo nadradenú vlastnosť sa vyberie hlavná časť látky.
- Substituenty sa uvádzajú za základom/nadradenou vlastnosťou, a to v opačnom poradí.
- Ak je prítomných viac substituentov, uvádzajú sa v abecednom poradí (vrátane prefixov):

**o-xylén-3-ol je benzén, 1,2-dimetyl, 3-hydroxy**

### 4.2 Číslo CAS

Číslo CAS možno získať od služby pre chemické abstrakty.

Číslo CAS tvorí minimálne 5 číslic rozdelených na tri časti a oddelených spojovníkom. Druhá časť zvyčajne pozostáva z dvoch číslic, tretia časť z jednej číslice:

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

Na kontrolu správnosti čísla CAS možno použiť kontrolný súčet:

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

Číslo CAS musí byť správne a musí zodpovedať kontrolnému súčtu.

## 5 Iné identifikačné kódy

Možno uviesť aj iné medzinárodne uznávané kódy, ako napríklad:

- colné číslo
- UN kód,
- číslo v indexe farieb,
- číslo farbiva.

## 6 Molekulárny vzorec, štruktúrny vzorec a notácia SMILES

### 6.1 Molekulárny vzorec

Molekulárnym vzorcom sa identifikuje každý typ prvku pomocou jeho chemickej značky a identifikuje sa počet atómov každého takéhoto prvku v jednej diskkrétnej molekule látky.

Molekulárne vzorce je potrebné uvádzať podľa (tradičného) Hillovho systému a okrem toho aj v súlade so systémom CAS v prípadoch, keď sa vzorec odlišuje od vzorca podľa Hillovho systému.

Pri použití Hillovej metódy sa postupuje podľa týchto krokov:

1. Identifikujte prvky a uveďte ich chemické značky.

2. Prvky zoradte v správnom poradí:

a. Látky obsahujúce uhlík:

Uvedie sa chemická značka každého prvku v tomto poradí:

(1) uhlík

(2) vodík;

(3) 3. iné značky prvkov v abecednom poradí:

**pentán: C5H12**

**pentén: C5H10**

**pentanol: C5H12O**

b. Látky neobsahujúce uhlík:

Každý prvok sa uvedie v abecednom poradí:

**kyselina chlorovodíková: ClH**

3. V prípade každého prvku, ktorý má počet atómov > 1, uveďte počet atómov vo forme dolného indexu za chemickými značkami.

4. Informácie, ktoré nesúvisia s hlavnou štruktúrou, uveďte na konci molekulárneho vzorca oddelené bodkou alebo čiarkou:

**benzoan sodný je C7H6O2, sodná soľ**

**dihydrát síranu meďnatého je CuO4S.2H2O**

Ak pre konkrétnu látku nemožno použiť Hillovu metódu, molekulárny vzorec je potrebné uviesť iným spôsobom, napríklad ako empirický vzorec, jednoduchý opis atómov a známy pomer atómov alebo ako vzorec, ktorý udáva službu pre chemické abstrakty (pozri kapitolu 4 tohto usmerňovacieho dokumentu).

### 6.2 Štruktúrny vzorec a opis kryštálovej štruktúry

Štruktúrny vzorec je potrebný na vizuálne znázornenie rozloženia molekúl v látke a ich vzájomných vzťahov. Štruktúrny vzorec má vyjadrovať polohu atómov, iónov alebo skupín a povahu väzieb, ktoré ich spájajú. Patria sem tiež izoméry, t. j. cis/trans, chiralita, enantioméry atď.

Štruktúrny vzorec možno uviesť vo viacerých formátoch: vo forme molekulárneho vzorca a/alebo vo forme štruktúrneho diagramu.

- Štruktúrny vzorec vo forme molekulárneho vzorca

1. Zapište všetky skupiny prvkov v poradí ich výskytu:

**n-pentán: CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>**

2. Každý substituent sa zapiše do zátvoriek bezprostredne za atóm, s ktorým je spojený:

**2-metylbután: CH<sub>3</sub>CH(CH<sub>2</sub>)CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>**

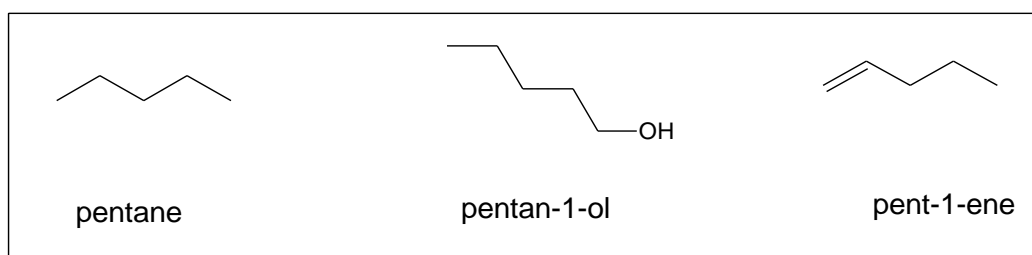
3. V prípade dvojitých alebo trojitých väzieb zobrazte tieto väzby medzi príslušnými skupinami prvkov:

**pent-1-én: CH<sub>2</sub>=CHCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>**

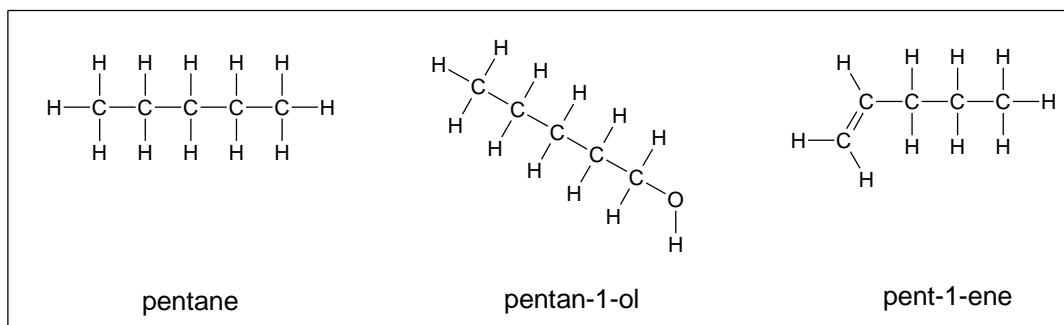
Štruktúrny vzorec vo forme štruktúrneho diagramu

V prípade štruktúrneho diagramu sa prvky a väzby medzi nimi vizuálne znázorňujú dvojrozmerným alebo trojrozmerným obrazcom. Existuje viacero metód:

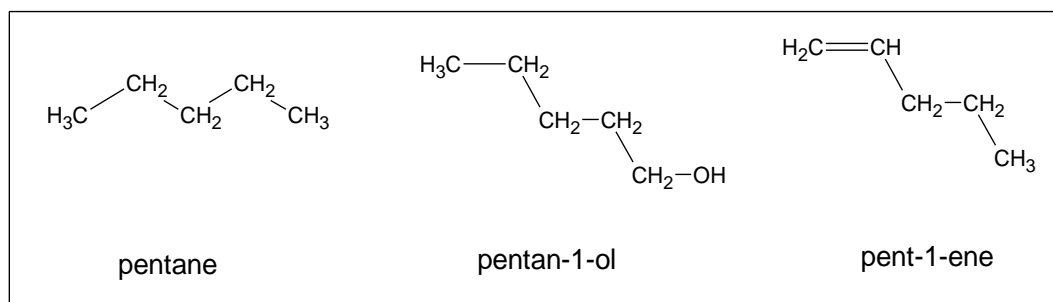
1. Zobrazenie všetkých prvkov okrem uhlíka a vodíka, ktorý je naviazaný na iné prvky ako uhlík.



2. Zobrazenie všetkých prvkov podľa názvu.



3. Zobrazenie uhlíka a vodíka ako skupín (napr. CH<sub>3</sub>), všetkých prvkov okrem uhlíka a všetkých atómov vodíka, ktoré nie sú naviazané na uhlík.

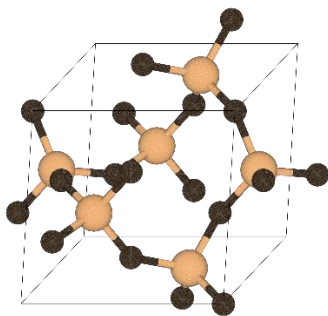


- Štruktúrny vzorec vo forme molekulárneho vzorca:

1. Uvedte molekulárny vzorec



2. Uvedte kryštalovú štruktúru pre látku



3. Uvedte mineralogické a/alebo kryštalografické názvy na základe kryštalovej sústavy<sup>32</sup> a kryštalovej triedy:

*α*-kremeň [*β*-kremeň] /**kryštalová sústava**: trigonálna – hexagonálna, **kryštalová trieda**: trigonálno-trapézová 3 2

### 6.3 Notácia SMILES

SMILES je skratka pre Simplified Molecular Input Line Entry Specification<sup>33</sup>. Ide o systém chemického zápisu, ktorý sa používa na znázorňovanie molekulovej štruktúry pomocou lineárneho sledu značiek. V prípade štandardnej notácie SMILES je názov molekuly synonymom jej štruktúry: nepriamo predstavuje dvojrozmerný obraz molekulovej štruktúry. Keďže dvojrozmernú chemickú štruktúru možno znázorniť rôznymi spôsobmi, pre jednu molekulu existuje viacero správnych notácií SMILES. Základom notácie SMILES je znázornenie valenčného modelu molekuly, preto nie je vhodné opisovať molekuly, ktoré sa nedajú znázorniť valenčným modelom.

Notácie SMILES pozostávajú z atómov, ktoré sú označené značkami prvkov, väzieb, zátvoriek používaných na znázornenie rozvetvenia a čísel označujúcich cyklické štruktúry. Notácia SMILES znázorňuje chemickú štruktúru vo forme grafu s voliteľným označením chiralít. Notácia SMILES, ktorá znázorňuje štruktúru len pomocou väzieb a atómov, sa nazýva všeobecná notácia SMILES. Notácia SMILES, ktorá sa zapisuje pomocou izotopových a chirálnych špecifikácií, je známa ako izoména notácia SMILES.

Notácia SMILES vychádza z niekoľkých základných pravidiel:

1. Atómy sú znázornené atómovými symbolmi.

<sup>32</sup> kubická/tetragonálna/ortorombická/romboedrická (alebo trigonálna)/hexagonálna/monoklinická/triklinická

<sup>33</sup> Weininger (1988) SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules (SMILES, chemický jazykový a informačný systém. Úvod do metodológie a pravidiel kódovania), J. Chem. Inf. Comput. Sci.; 1988; 28(1); 31 – 36.

2. Každý atóm s výnimkou vodíka sa špecifikuje samostatne.
- a. Prvky v organickej podskupine B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br a I sa píše bez zátvoriek a bez pripojeného H, ak počet H zodpovedá najnižšiemu normálnemu mocenstvu (mocenstvám) v súlade s explicitnými väzbami:

Prvok v organickej podskupine	Najnižšie normálne mocenstvo
B	3
C	4
N	3 a 5
O	2
P	3 a 5
S	2, 4 a 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. Prvky v organickej podskupine sa píše v zátvorkách, ak počet H nezodpovedá najnižšiemu mocenstvu:  
**amóniový kation je NH<sub>4</sub><sup>+</sup>**
- c. Prvky, ktoré nie sú obsiahnuté v organickej podskupine, sa píše v zátvorkách spolu s každým pripojeným vodíkom, ktorý je znázornený.
3. Alifatické atómy sa zapisujú veľkými písmenami, aromatické atómy sa zapisujú malými písmenami:  
**benzén je c1ccccc1 a cyklohexán je C1CCCCC1**
4. Vodík sa zapisuje len v týchto situáciách:
- vodík s nábojom, t. j. protón, [H<sup>+</sup>],
  - atómy vodíka, ktoré sú viazané na iné atómy vodíka, t. j. molekulový vodík, [H][H],
  - atómy vodíka, ktoré sú viazané na viac ako jeden atóm, napr. vodíkové mostíky,
  - špecifikácie izotopového vodíka, napr. deutérium ([<sup>2</sup>H]),
  - ak sa vodík viaže na chirálny atóm.

5. Štyri základné väzby sú tieto:

Typ väzby	Notácia SMILES
Jednoduchá	- (netreba znázorňovať)
Dvojitá	=
Trojité	#
Aromatická	malé písmená

6. Substituenty sa znázorňujú v zátvorkách, a to bezprostredne za atómami, na ktoré sú viazané:

**2-metylbután je CC(C)CC**

- a. Substituenty sa vždy uvádzajú bezprostredne za príslušnými atómami, nemôžu nasledovať za znakom dvojitej alebo trojitej väzby:

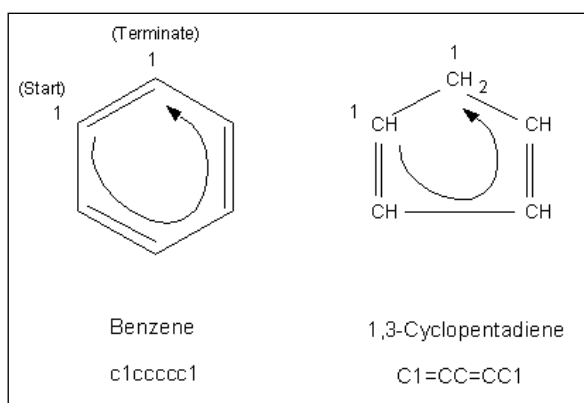
**kyselina pentánová je CCCCC(=O)O**

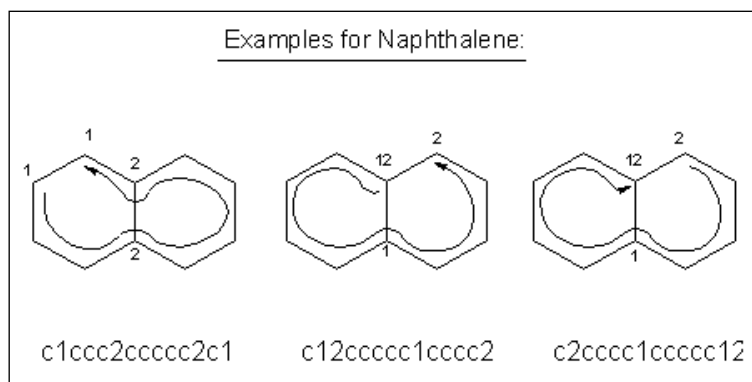
- b. Pripúšťajú sa substituenty v rámci substituentov:

**2-(1-metyletyl)bután je CC(C(C)C)CC**

7. V prípade cyklických štruktúr sa na označenie počiatočného a koncového atómu cyklu používajú čísllice od 1 do 9.

- a. V každom cykle sa na označenie počiatočného a koncového atómu používa to isté číslo. Počiatočný atóm a koncový atóm musia byť navzájom viazané.
- b. Čísla sa zapisujú bezprostredne za atómami, ktoré označujú počiatočnú a koncovú polohu.
- c. Počiatočnému a koncovému atómu môžu byť priradené dve po sebe nasledujúce čísla.





8. Nenaviazané zlúčeniny sa označujú ako samostatné štruktúry alebo ióny oddelené bodkou (.). Susediace atómy oddelené bodkou (.) nie sú navzájom priamo viazané, napr. Van der Waalsova väzba:

**aminopropén hydrochlorid je C=CC(N).HCl**

9. Izoména konfigurácia sa špecifikuje lomkami \ a /. Tieto znaky udávajú relatívny smer medzi dvomi izomérnymi väzbami. (cis = / \, trans = / /). Notácia SMILES používa lokálnu chiralitu, čo znamená, že chiralita sa musí úplne špecifikovať:

**cis-1,2-dibrómetén je Br/C=C\Br**

**trans-1,2-dibrómetén je Br/C=C/Br**

10. Enantioméry alebo chiralita sa špecifikujú symbolom @. Symbol @ udáva, že nasledujúci susedia chirálneho atómu sa uvádzajú proti smeru hodinových ručičiek. Ak sa použije symbol @@, atómy sa uvádzajú v smere hodinových ručičiek. Chirálny atóm a @ sa uvádzajú v zátvorkách:

**kyselina 2-chlór-2-hydroxypropánová so**

**špecifikovanou chiralitou je C[C@](Cl)(O)C(=O)O**

11. Izotopové špecifikácie sa uvádzajú tak, že pred značku atómu sa zapíše číslo, ktoré sa rovná príslušnej celkovej atómovej hmotnosti. Atómovú hmotnosť možno špecifikovať len v zátvorkách:

**uhlík-13 je [13C] a kyslík-18 je [18O]**

Na určenie notácie SMILES možno použiť viacero nástrojov (generátory SMILES) (pozri dodatok 1).

## 7 Informácie o optickej aktivite

Optická aktivita je schopnosť asymetrických látok otáčať orientáciu roviny polarizovaného svetla. Takéto látky a ich zrkadlové obrazy sú známe ako enantioméry a majú jedno alebo viac chirálnych centier. Hoci sa navzájom líšia svojím geometrickým usporiadaním, enantioméry majú identické chemické a fyzikálne vlastnosti. Keďže každý typ enantioméru pôsobí na polarizované svetlo odlišne, pomocou optickej aktivity možno identifikovať, ktorý enantiomér je vo vzorke prítomný, a teda aj určiť čistotu látky. Magnitúda rotácie je vnútornou vlastnosťou molekuly.

Enantioméry majú vždy opačnú rotáciu: polarizujú svetlo v rovnakej miere, ale v opačných smeroch. Optická aktivita enantiomérskej zmesi preto naznačuje pomer medzi dvomi enantiomérmi. Optická aktivita zmesi enantiomérov v pomere 50:50 sa rovná nule.

Pozorovaná rotácia závisí od koncentrácie, dĺžky vzorkovej trubice, teploty a od vlnovej



dĺžky svetelného zdroja.

Optická aktivita je preto určujúcim identifikačným parametrom asymetrickej látky, predstavuje jediný parameter, ktorým možno odlíšiť látku od jej zrkadlového obrazu. Z toho dôvodu, ak je to možné, je potrebné uvádzať optickú aktivitu látky.

Štandard pre optickú aktivitu sa nazýva špecifická rotácia. Špecifická rotácia je vymedzená ako pozorované otáčanie svetla pri hodnote 5 896 angstromov, s dĺžkou dráhy 1 dm a pri koncentrácii vzorky 1 g/ml. Špecifická rotácia sa rovná podielu pozorovanej rotácie a dĺžky dráhy (dm) vynásobenému koncentraciou (g/ml).

Optická aktivita sa môže merať viacerými rozdielnymi metódami. K najbežnejším patria:

- Optická rotácia, pri ktorej sa otáča rovina polarizovaného svetelného lúča prechádzajúceho vzorkou.
- Cirkulárny dichroizmus, pri ktorom sa meria absorpcia pravo a ľavopolarizovaného svetla vzorkou.

Ak látka otáča svetlo doprava (v smere hodinových ručičiek), nazýva sa pravotočivou a označuje sa znakom +. Ak otáča svetlo doľava (proti smeru hodinových ručičiek), nazýva sa ľavotočivou a označuje sa znakom -.

## 8 Molekulová hmotnosť alebo rozpätie molekulovej hmotnosti

Molekulová hmotnosť je hmotnosť molekuly látky vyjadrená atómovými hmotnostnými jednotkami (amu) alebo ako molárna hmotnosť (g/mol). Molekulovú hmotnosť možno vypočítať z molekulárneho vzorca látky: je to súčet atómových hmotností atómov tvoriacich molekulu. V prípade molekúl, ako sú napríklad určité proteíny alebo nevymedzené reakčné zmesi, pri ktorých nemožno stanoviť jedinú molekulovú hmotnosť, sa môže uviesť rozpätie molekulovej hmotnosti.

Na stanovenie molekulovej hmotnosti látok sa dá použiť viacero metód:

- Na stanovenie molekulovej hmotnosti plyných látok sa môže použiť Avogadrov zákon, podľa ktorého za danej teploty a tlaku daný objem plynu obsahuje špecifický počet molekúl plynu.

$$PV = nRT = NkT$$

$n$  = počet mólov

$R$  = univerzálna plynová konštanta = 8,3145 J/mol K

$N$  = počet molekúl

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

$k$  =  $R/NA$

$NA$  = Avogadrovo číslo =  $6,0221 \times 10^{23}$  /mol

- V prípade kvapalín a tuhých látok možno molekulovú hmotnosť stanoviť tak, že sa určí ich vplyv na teplotu topenia, teplotu varu, tlak pár alebo osmotický tlak nejakého rozpúšťadla.
- Hmotnostná spektrometria, veľmi presná metóda merania.
- V prípade molekúl komplexných látok s vysokými molekulovými hmotnosťami, ako sú napríklad proteíny alebo vírusy, možno molekulovú hmotnosť stanoviť napríklad

meraním rýchlosti sedimentácie v ultracentrifúge alebo fotometriou rozptylu svetla.

- Existuje viacero nástrojov, ktorými sa môže vypočítať molekulová hmotnosť na základe štruktúrneho diagramu alebo molekulárneho vzorca látky (pozri dodatok 1).

## 9 Zloženie látky

Pre každú látku sa v súlade s pravidlami a kritériami uvedenými v kapitole 4 tohto usmerňovacieho dokumentu oznamuje jej zloženie ako kombinácia hlavných zložiek, prísad a nečistôt.

Každá zložka, prísada alebo nečistota sa musí dôkladne identifikovať:

- názvom (názvom IUPAC alebo, ak nie je dostupné, iným medzinárodne uznávaným názvom),
- číslom CAS (ak existuje),
- EC číslom (ak existuje),
- všetkými inými dostupnými identifikátormi.

V prípade každej zložky, skupiny zložiek, prísady alebo nečistoty by sa mala uviesť tam, kde je to možné, typická koncentrácia (v percentách) v komerčných veľkostiach šarže (najlepšie vyjadrená hmotnostnými alebo objemovými jednotkami). Súčet uvedených hodnôt by sa mal rovnať 100 %. Vždy by sa mali uviesť horné a dolné koncentračné limity, a síce ako rozsah v komerčnej látke.

## 10 Spektrálne údaje

Spektrálne údaje sú potrebné na potvrdenie štruktúry danej pre jednozložkovú látku alebo na potvrdenie toho, že reakčná zmes nie je prípravkom. Pre spektrá možno použiť niekoľko metód (ultrafialové spektrum, infračervené spektrum, spektrum nukleárnej magnetickej rezonancie a hmotnostné spektrum). Nie všetky metódy sú vhodné pre každý typ látok. Tam, kde je to možné, bude usmerňovací dokument obsahovať návod pre vhodné spektrá, ktoré sa použijú pre rôzne typy látok (ECB, 2004; ECB, 2005).

V prípade niektorých známych metód je potrebné na spektrograme alebo v prílohe uviesť tieto informácie:

### *Ultrafialové-viditeľné (UV-VIS) spektrum*

- Identita látky
- Rozpúšťadlo a koncentrácia
- Rozsah
- Poloha (a hodnoty epsilon) hlavných maxim
- Vplyv kyseliny
- Vplyv zásady

### *Infračervené (IR) spektrum*

- Identita látky
- Médium
- Rozsah
- Výsledky (treba označiť hlavné maximá dôležité na identifikáciu, napr. na interpretáciu oblasti záznamu)

*Spektrum spektroskopie nukleárnej magnetickej rezonancie (NMR)*

- Identita látky
- Jadro a frekvencia
- Rozpúšťadlo
- Interné alebo externé odkazy, ak je to vhodné
- Výsledky (treba označiť na identifikáciu látky dôležité signály a signály zodpovedajúce rozpúšťadlu a nečistotám)
- V prípade spektier  $^1\text{H}$  NMR je potrebné uviesť integračnú krivku
- Intenzita slabých maxím NMR by mala byť vertikálne zvýšená a komplexné časti spektra by mali byť rozšírené

*Spektrum hmotnostnej spektroskopie (MS)*

- Identita látky
- Urýchľovacie napätie
- Metóda dávkovania (priame dávkovanie, pomocou GC atď.)
- Spôsob ionizácie (vplyv elektrónov, chemická ionizácia, desorpcia poľa atď.)
- Molekulový ión (M)
- Fragmenty významné na identifikáciu látky
- Hodnoty M/z alebo priradenie na identifikáciu štruktúry dôležitých maxím
- Komplexné časti spektra by mali byť rozšírené.

*Spektrum hmotnostnej spektroskopie pre difrakciu röntgenových lúčov (XRD)*

- Identita látky
- Napätie
- Prúd
- Zdroj röntgenového žiarenia a všetky bibliografické odkazy umožňujúce identifikáciu kryštalických fáz prítomných v látke.

V prípade, že sa metóda XRD používa na identifikáciu a kvantifikáciu kryštalických alebo amorfných fáz prítomných v látke, je potrebné splniť minimálne ďalej uvedené požiadavky:

- opis použitých rafinačných metód a interných štandardov,
- vyjadrenie efektívnej hodnoty, ktorá odráža zhodu medzi modelovaným/referenčným difrakčným obrazom
- merané spektrum a miera pre vyjadrenie efektívnej hodnoty (napr. 0 – 1 alebo 0 – 100)

Použiť možno aj iné vedecky uznávané metódy, ak spektrálne údaje potvrdia identifikáciu látky, napr. vnútornú štruktúru.

V záujme pochopenia a/alebo interpretácie spektier sa zvyčajne požaduje vykonať toto:

- Opísať prípravu vzorku.
- Zaznamenať významné vlnové dĺžky alebo iné vhodné údaje.
- Poskytnúť ďalšie informácie, napr. spektrá východiskových materiálov.
- Uviesť použité rozpúšťadlo a/alebo iné dôležité údaje, ako už bolo uvedené pri niektorých metódach.
- Poskytnúť kópie (namiesto originálov) s riadne vyznačenými mierkami.
- Poskytnúť informácie o použitých koncentráciách látky.
- Zabezpečiť najintenzívnejšie maximá príslušnej látky v mierke 1:1.

## 11 Vysokoučinná kvapalinová chromatografia, plynová chromatografia

Tam, kde je to vzhľadom na typ látky vhodné, je potrebné na potvrdenie jej zloženia poskytnúť chromatogram. Vhodným chromatogramom sa napríklad potvrdí prítomnosť nečistôt, prísad a zložiek v reakčnej zmesi. Dvomi najznámejšími metódami na separáciu a identifikáciu zmesí sú plynová chromatografia (GC) a vysokoučinná kvapalinová chromatografia (HPLC). Obidve metódy sú založené na interakcii mobilnej fázy so stacionárnou fázou, čo má za následok separáciu zložiek zmesi.

V prípade chromatogramov GC/HPLC je potrebné na samotnom chromatograme alebo v prílohe uviesť tieto informácie (ECB, 2004; ECB, 2005):

### HPLC

- Identita látky
- Vlastnosti kolóny, napr. priemer, náplň, dĺžka
- Teplota, tiež teplotný rozsah, ak sa používa
- Zloženie mobilnej fázy, tiež rozsah, ak sa používa
- Koncentračný rozsah látky
- Vizualizačná metóda, napr. UV-VIS
- Výsledky (treba označiť hlavné maximá dôležité na identifikáciu látky)

### GC

- Identita látky
- Vlastnosti kolóny, napr. priemer, náplň, dĺžka
- Teplota, tiež teplotný rozsah, ak sa používa
- Teplota injektora
- Nosný plyn a tlak nosného plynu
- Koncentračný rozsah látky
- Vizualizačná metóda, napr. MS
- Identifikácia maxím
- Výsledky (treba označiť hlavné maximá dôležité na identifikáciu látky).

## 12 Opis analytických metód

V prílohe VI k nariadeniu REACH sa od registrujúceho vyžaduje, aby opísal analytické metódy a/alebo uviedol bibliografické odkazy na metódy použité na identifikáciu látky a tam, kde je to vhodné, na identifikáciu nečistôt a prísad. Tieto informácie musia byť postačujúce na to, aby bolo možné metódy reprodukovať.

## Dodatok III – Identifikácia látky a spoločné predkladanie údajov

V hlavnej časti týchto usmernení sa stanovujú všeobecné zásady, ktorými sa potencionálni registrujúci musia riadiť pri identifikácii konkrétnych látok ich právneho subjektu, ktoré sa majú zaregistrovať. Tento dodatok obsahuje usmernenia pre potencionálnych registrujúcich o tom, ako sa majú uplatniť zásady identifikácie látky pri kolektívnom definovaní identity a rozsahu identity látky pre spoločnú registráciu v súlade so zásadou podľa nariadenia REACH: „Jedna látka – jedna registrácia“ (OSOR). Ďalšie informácie týkajúce sa povinností pri spoločnom predkladaní a postupe spoločného využívania údajov vo všeobecnosti sú uvedené v Usmernení k spoločnému využívaniu údajov na stránke: <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

Je dôležité, aby sa využívali tie isté zásady identifikácie látky, ktoré sú uvedené v hlavnom usmernení podľa typu látky, pre identitu látky pre spoločnú registráciu.

Prvé časti článku 11 ods. 1 a článku 19 ods. 1 nariadenia REACH ukladajú požiadavku na „spoločné predkladanie údajov viacerými registrujúcimi“. Tieto ustanovenia konkrétnejšie vyžadujú, aby v prípade, „že látku má v spoločenstve vyrábať jeden alebo viacerí výrobcovia a/alebo dovážať jeden alebo viacerí dovozcovia“, informácie týkajúce sa vlastností látky a jej klasifikácie má najprv predložiť registrujúci konajúci po dohode s ďalším registrujúcim (registrujúcimi), ktorý dal súhlas (ďalej len „hlavný registrujúci“).

Vykonávajúce nariadenie komisie (EÚ) 2016/9 o spoločnom predkladaní údajov a spoločnom využívaní údajov opätovne potvrdzuje a konsoliduje povinnosť viacerých registrujúcich látky tej istej identity predkladať určité informácie spoločne. Pri spoločnom predkladaní informácií je prakticky potrebné, aby sa príslušné strany dohodli na hraniciach a rozsahu identity látky. Toto je známe ako profil identifikácie látky alebo SIP. Očakáva sa, že profil identifikácie látky (SIP) bude špecifikovať hranice látky, pre ktoré sa registrujúci dohodli spoločne predkladať údaje. Týka sa to tiež registrujúcich, ktorí sa mohli rozhodnúť, že sa nezúčastnia na spoločnom predkladaní určitých informácií.

Preto je zmluva o rozsahu identity látky zahrnuté v registrácii predpokladom spoločného predkladania. Transparentnosť, čo sa týka rozsahu tejto jednej identity látky a údajov, ktorých sa týka, je pre zavedenie rozhodujúca. Následne je rozsah pôsobnosti pre látku alebo SIP sa musí oznámiť jasnými pojmami v dokumentácii hlavného registrujúceho v mene všetkých ostatných registrujúcich, pričom všetci ostatní registrujúci oznámia svoje informácie o zložení samostatne.

### **Jednoduchý ilustračný príklad spôsobu stanovenia profilu identifikácie látky pre chemické látky vyrobené alebo dovážané v EÚ jednotlivými registrujúcimi je schematicky uvedený na**

Obrázok 2 ďalej. Ilustruje identifikovanie látky, ktorá sa má registrovať, pričom zhrňa rozličné zloženia, vytvára údaje a napokon ich predkladá vo formáte IUCLID v registračnej dokumentácii. Príklad sa týka jednej presne definovanej jednozložkovej látky. V prípade komplexnejších látok môže proces definovania SIP zahŕňať iterácie medzi krokmi 3 a 5 na obrázku.

Počas rozhovorov medzi potenciálnymi registrujúcimi môže mať dokumentácia SIP formu napr. dokumentu v programe Word alebo hárka v programe Excel, kde sú zaznamenané príslušné dohodnuté informácie, ktoré sú poskytnuté všetkým členom a potenciálnym členom. Niektoré priemyselné asociácie vypracovali šablóny, ktoré sú k dispozícii na zdokumentovanie SIP a ktoré použili mnohí registrujúci [napr. šablóny Európskej rady pre

chemický priemysel (CEFIC)<sup>34</sup>]. Iní jednoducho zdokumentovali príslušné informácie v dokumente Word alebo na webovej stránke konzorcia založeného na prácu na registrácii príslušnej látky.

## 2. Definovanie identity a rozsahu látky zodpovedajúcej údajom predkladaným na registráciu

Kroky, ktoré môžu viacerí potenciálni registrujúci podniknúť pri definovaní identity látky zodpovedajúcej údajom, ktoré predkladajú spoločne, sú schematicky znázornené v príklade uvedenom na

Obrázok 2 (kroky 1 až 4) pre jednoduché presne definované látky.

Každý jednotlivý potenciálny registrujúci stanoví svoje povinnosti pre to, čo vyrába alebo dováža, na základe definície látky v článku 3 ods. 1 a s použitím zásad identifikácie látky v hlavnej časti usmernenia (kroky 1 a 2 na

Obrázok 2).

Každý potenciálny registrujúci potom môže skontrolovať, či iní potenciálni registrujúci dospeli k tomu istému „názvu a iným identifikátorom“ (krok 3). Z tohto začiatočného bodu môžu potenciálni registrujúci spoločne uplatniť zásady hlavnej časti tohto usmernenia na definovanie hraníc identity látky, ktoré zodpovedajú údajom, ktoré spoločne predkladajú, t. j. profil identifikácie látky (krok 4).

Tento profil SIP všeobecne opisuje rozsah látky v zmysle informácií o jej zložení (vrátane akýchkoľvek iných príslušných parametrov, ako je morfológia, napr. fyzická forma, tvar), jej názov a iné identifikátory, pre ktoré budú spoločne predkladané údaje o klasifikácii a nebezpečnosti relevantné. Pri definícii profilu SIP sa nemá zaujímať príliš konzervatívny prístup, aby sa vyhlo vylúčeniu konkurencie zo spoločného predkladania.

Tento profil SIP stanovuje vlastné spojenie medzi identitou látky a údajmi o nebezpečnosti, ktoré majú byť spoločne predkladané. Ak sa stanoví dostatočne včas, môže uľahčiť fázu vytvárania či zberu informácií počas procesu plnenia povinností registrácie (uvedených v Usmernení o požiadavkách na informácie a hodnotení chemickej bezpečnosti, krok 5 na

Obrázok 2 ďalej) s cieľom zaistiť, aby vytvárané alebo zhromažďované údaje zahŕňali celý rozsah identity látky.

Ako je uvedené v častiach 4.2.3 a 4.3 hlavného usmernenia pre komplexnejšie látky, potenciálni registrujúci spravidla používajú ďalšie parametre a/alebo deskriptory pre informácie o zložení (napr. opis zdroja /procesu) v krokoch 1 – 3 a tie, na ktorých sa dohodli, možno potom zahrnúť v SIP (krok 4). V niektorých prípadoch spojenie medzi spoločne predloženou hranicou identity látky a údajoch o nebezpečnosti môžu byť dokonca úplne jasné až potom, keď sa zhromaždia všetky dostupné údaje o nebezpečnosti alebo ich časť. Medzi krokmi 3 – 5 sa podľa potreby môžu vyskytnúť iterácie v závislosti od zložitosti identity látky a údajov zhromaždených v kroku 5, napr. keď niektoré zloženia zahŕňajú zložky, ktoré sú dôvodom klasifikácie a označenia a/alebo hodnotenia látok PBT. Súčasťou SIP môže byť viac ako jeden profil zloženia s cieľom presne opísať hranicu identity látky.

---

<sup>34</sup> SIP bol pôvodne opísaný v „Usmernení pre hlavných registrujúcich“ rady CEFIC: <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. Medzi príklady SIP, ktoré vypracovali registrujúci s použitím tejto šablóny patrí napríklad aj webové sídlo centra REACH <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

Profil SIP musí uvádzať všeobecné informácie, ktoré umožnia stanoviť hranice identity látky zodpovedajúce spoločne predkladaným údajom:

- názov látky
- iné identifikátory (napr. CAS, EC, príslušné informácie o molekulárnych a štruktúrnych vzorcoch, opis), ktoré využívajú všetci registrujúci zo skupiny registrujúcich príslušnej identity látky,
- informácie o zložení:
  - identity zložiek týkajúce sa identifikácie látky a príslušné rozsahy koncentrácií,
  - všeobecný zoznam identít stabilizátorov týkajúcich sa identifikácie látky (a v príslušnom prípade príslušné rozsahy koncentrácií),
  - generický zoznam ďalších parametrov, ktoré sú pre typ látky relevantné (napr. deskriptory procesu zdroja pre niektoré UVCB).

Je dôležité, aby sa na parametroch, ktoré vymedzujú hranice identity látky zahrnuté v spoločnom predkladaní, dohodli všetci spoloční registrujúci a aby boli jasne zdokumentované v profile SIP. V súlade s tým bude možno potrebné profil SIP zmeniť alebo rozšíriť v súlade s požiadavkou akéhokoľvek nového potenciálneho registrujúceho,

ak sa dohodne, že všetky spoločne predkladané údaje alebo ich časť sa tiež vzťahujú na látku vyrábanú alebo dovážanú týmito registrujúcimi.

Profil SIP nesmie viesť k spoločnému využívaniu dôverných obchodných informácií medzi registrujúcimi ani k poskytovaniu týchto informácií tretím stranám zo spoločného predloženia. Ak by prípadne spoloční registrujúci potenciálne potrebovali spoločne využívať dôverné obchodné informácie s cieľom jasne vymedziť profil SIP, môžu zvážiť použitie dôverníka, ako je uvedené v usmernení k spoločnému využívaniu údajov.

### 3. Praktické usmernenie o dokumentovaní profilu identifikácie látky

Všeobecné zásady identifikácie látky pre presne definované látky a látky UVCB sú uvedené v hlavnom usmernení. Ďalej sú uvedené niektoré praktické usmernenia o tom, ako použiť tieto zásady spoločne. Hlavné usmernenie predpokladá aj možné výnimky od všeobecných zásad. Takéto výnimky vyžadujú, aby registrujúci mali možnosť preukázať prirodzené prepojenie medzi spoločne predloženou identitou látky a údajmi o nebezpečnosti.

#### 3.1 Presne definované látky

V prípade presne definovanej látky je potrebné pri definovaní hlavnej zložky (hlavných zložiek), ich rozmedzí koncentrácií a nečistôt dodržať zásadu  $\geq 80\%$  hmotnostných percent (w/w) pri identifikácii jednozložkovej látky a zásadu  $< 80\%$  a  $\geq 10\%$  hmotnostných percent (w/w) pri identifikácii mnohozložkovej látky. To sa pri stanovení profilu SIP vzťahuje na každého jednotlivého registrujúceho a na všetkých viacerých registrujúcich spoločne. Je potrebné oznámiť najmä profily nečistôt dohodnuté v profile SIP. Keď profil SIP zahŕňa konkrétne nečistoty, ktoré by mali vplyv na klasifikáciu a označovanie a/alebo hodnotenie PBT, registrujúci, ktorých sa týkajú tieto nečistoty, to budú musieť zvážiť vo fáze zhromažďovania údajov (krok 5). Príslušné informácie podľa prílohy VII – XI možno predkladať spoločne alebo samostatne v súlade s článkom 11 ods. 3 nariadenia REACH (takzvané možnosti zrieknutia sa). Hodnoty o koncentrácii, ktoré je potrebné oznámiť, musia zohľadniť rozsah koncentrácií v rámci spoločného predkladanía.

V prípade látok, ktoré vyžadujú ďalšie parametre na jednoznačné zaznamenanie identifikácie látky, bude musieť každý registrujúci dodržiavať zásady uvedené v kapitole 4.2.3 hlavnej časti tohto usmernenia. Je potrebné zohľadniť, či variabilita týchto

parametrov bude dôvodom na prípadné prispôsobenie klasifikácie spoločne predkladaných údajov o nebezpečnosti. Na účely stanovenia parametrov SIP v súvislosti so spoločným predkladaním možno uplatniť podobné úvahy. Možno bude napríklad potrebné zahrnúť do profilu identifikácie látky tie parametre (napr. fyzickú formu a/alebo morfológické parametre, ako je pórovitosť, veľkosť častíc, tvar častíc), ktoré môžu mať vplyv na vlastnosti týkajúce sa stanovenia profilu nebezpečnosti (napr. rozpustnosť, reaktivita, toxicita pri vdýchnutí atď.). V takomto prípade je potrebné všeobecný rozsah týchto parametrov zahrnutý v tomto SIP poskytnúť transparentne (napr. rozsahy veľkosti častíc vzťahujúce sa na všetkých registrujúcich, zoznam ich tvaru(-ov) a zoznam chemických vlastností povrchu). Tým sa zaistí, že budú spoločne predkladané údaje o nebezpečnosti úplné vo vzťahu k profilu SIP.

Podobne aj rozdiely v kryštálovej fáze anorganických chemických látok môžu vyvolávať rôzne úvahy o profile nebezpečnosti špecifickom pre tieto fázy (napr. kremeň, kristobalit, amorfný oxid kremičitý). Po zohľadnení možných rozdielov vo vlastnostiach týchto rôznych fáz majú potenciálni registrujúci uvedených látok zvážiť, či predložia jednu spoločnú registráciu zahŕňajúcu všetky tieto fázy vrátane údajov o nebezpečnosti špecifických pre jednotlivé fázy alebo predložia rôzne spoločné registrácie pre jednotlivé fázy (t. j. odlišné identity látky). V oboch prípadoch by bolo potrebné príslušné fázy uviesť v profile SIP a príslušné údaje prílohy VII – XI musia zahŕňať všetky fázy, ktorých sa registrácia týka, a tak zaistiť, aby údaje zahŕňali celý rozsah SIP.

Je potrebné uviesť, že nečistota a/alebo profily nebezpečnosti zloženia sa môžu líšiť a tieto rozdiely nemusia nevyhnutne znamenať, že tieto zloženia nemôžu byť registrované v tej istej registrácii.

### 3.2 Látky UVCB

V prípade látok UVCB môže byť identifikácia náročnejšia a z tohto dôvodu je transparentná dokumentácia veľmi užitočná pri dohodnutí si identity látky pre spoločnú registráciu. Každý potenciálny registrujúci by mal zvážiť odporúčanie v hlavnej časti tohto usmernenia samostatne, a potom použiť tie isté zásady spoločne. Upozorňujeme, že zhrnutie rozsahov koncentrácie do SIP by mohlo viesť k profilu s veľmi širokými rozsahmi koncentrácie, možno až do tej miery, že už ich nemožno považovať za jednu látku.

Ako je uvedené v hlavnom usmernení, základom pre identifikáciu niektorých látok UVCB je zdroj a proces použitý pri ich výrobe, skôr ako priamo identity a rozsah koncentrácie ich zložiek. V týchto prípadoch slúžia ostatné deskriptory ako zástupné označenia pre identity zložky a ich príslušné rozsahy koncentrácií. Potenciálni registrujúci môžu opísať ich výrobný proces z hľadiska zdroja a procesu v rozsahu, aký je potrebný na identifikovanie látky. Opis môže zahŕňať akékoľvek ďalšie parametre či charakterizujúce znaky, o ktorých sa registrujúci rozhodnú, že sú relevantné pre identitu ich látky (pozrite si napríklad Tabuľka 5 in v hlavnom usmernení). Na účely spoločnej registrácie sa opisy spoločne využívajú výlučne tak, ako je potrebné na dohodnutie sa na rozsahu identity látky UVCB na registráciu. Potenciálni registrujúci môžu dodržiavať zásady uvedené v hlavnom usmernení individuálne, a potom aj spoločne. Výsledkom SIP je potom uvedenie všeobecných informácií o zdroji a parametroch procesu tak, aby boli v plnom rozsahu zahrnuté zloženia jednotlivých registrujúcich. To je schematicky znázornené na Obrázok 3.

V prípade látok identifikovaných na základe zdroja a procesu, ako sa uvádza v hlavnom usmernení, by každá významná zmena zdroja alebo procesu pravdepodobne viedla k inej identite látky, ktorá by sa mala registrovať osobitne. Výnimky z tejto zásady by znamenali, že registrujúci môžu preukázať, že každá kombinácia postupu a zdroja dáva zloženia, ktoré možno zahrnúť do tej spoločnej registrácie. V profile SIP možno zohľadniť menšie odchýlky



v zdrojových materiáloch a postupoch a/alebo podmienkach procesu. Registrujúci ba sa mali dohodnúť, že každá kombinácia procesu a zdroja vedie k zloženiam, ktoré sú podobné v takom rozsahu, že je to významné na ich zahrnutie do jednej identity látky, a zabezpečiť, aby údaje o nebezpečnosti boli náležité pre celú oblasť odchýlky SIP. Konkrétnejšie musia registrujúci byť schopní odôvodniť, že súbor údajov o nebezpečnosti predložený spoločne sa týka všetkých týchto zložení alebo je v prípade potreby prispôsobený informáciám predloženým samostatne pre konkrétne zloženia podľa článku 11 ods. 3 nariadenia REACH (v prípade rozhodnutia nezapojiť sa).

S cieľom preukázať význam súboru údajov pre každú kombináciu procesu a zdroja musia byť tieto kombinácie transparentne zdokumentované v SIP, aby sa doložili kritériá pre zaradenie či vylúčenie vzťahujúce sa na súčasných a budúcich spoločných registrujúcich.

V prípade iných typov látok UVCB (pozri kapitolu 4.3.2 hlavnej časti usmernenia) môžu potenciálni registrujúci podľa potreby použiť kombináciu deskriptorov zloženia a ďalších deskriptorov. Napríklad v prípade niektorých olejových chemikálií je zloženie variabilné z dôvodu variability rozdelenia zložiek v rámci celej dĺžky alkylového reťazca a rozdelenie v rámci dĺžky alkylového reťazca môže byť ďalším deskriptorom použitým na identifikáciu. Prístup použitý SIEF bude potrebné zdokumentovať transparentne v ich SIP.

### 3.3 Profil identifikácie látky

Všetci registrujúci spoločne predkladajúci informácie sú povinní sa dohodnúť o potrebných parametroch na identifikáciu ich látky a ich transparentné zdokumentovanie v ich príslušnom SIP. Odchýlky alebo výnimky oproti bežným spoločne prijatým zásadám identifikácie látky budú musieť byť transparentne zdokumentované. Keďže SIP dokumentuje kritériá zaradenia alebo vylúčenia, SIEF bude musieť zaistiť, aby boli použité kritériá transparentné a aby príslušné údaje podľa prílohy VII – XI zhromažďované alebo vytvárané preukázateľne zahŕňali všetky dohodnuté profily zložení.

Keď potenciálni registrujúci individuálne zahrnú do svojho profilu identity stabilizačné prísady v súvislosti s článkom 3 ods. 1, ich identity a rozsahy koncentrácie je potrebné dohodnúť a transparentne hlásiť v SIP.

Vo fáze zhromažďovania údajov je potrebné zvážiť význam testovacích materiálov použitých na vytvorenie či zhromažďovanie údajov na splnenie požiadaviek na informácie podľa prílohy VII – XI. Zdôvodnenie záverov o ich reprezentatívnosti pre zloženia uvedené v SIP bude potrebné zdokumentovať a zahrnúť do technickej dokumentácie. To by bolo osobitne náležité pre identity zložitých látok, ktoré sa zahŕňajú široké profily zložení.

Potenciálni registrujúci môžu počas zhromažďovania údajov dospieť k záveru, že ich profil SIP je príliš široký a nevyhovuje účelu spoločného predloženia informácií o nebezpečnosti, ktoré sú reprezentatívne pre príslušnú identitu látky. V takomto prípade sa potenciálni registrujúci môžu rozhodnúť rozdeliť SIEF tak, aby boli dve alebo viacero látok posudzované samostatne<sup>35</sup>. Každá látka by potom mala svoj samostatný profil SIP a svoje vlastné spoločné predloženie informácií o nebezpečnosti, ktoré musia byť špecificky reprezentatívne pre identitu látky. Dôvody, prečo určité informácie o nebezpečnosti neboli reprezentatívne pre určité parametre identifikácie látky bude potrebné samostatne zdokumentovať v SIP pre každú samostatnú registráciu. Príslušní potenciálni registrujúci môžu tiež v tejto fáze dospieť k záveru, že profily zložení je potrebné ďalej spresniť na

---

<sup>35</sup> Úvahy o úlohe EINECS pri stanovení identity látky na základe nariadenia REACH sú k dispozícii v dokumente CARACAL dohodnutom na 4. stretnutí príslušných úradov pre nariadenia REACH a CLP (CARACAL): CA/74/2009 rev.2 „Formulovanie identity látok a SIEF (úloha EINECS)“.

základe zložiek alebo nečistôt, ktoré sú dôvodom na klasifikáciu a označenie, hodnotenie látok PBT atď.

V prípade potenciálnych registrujúcich, ktorí sa chcú pridať k ostatným potenciálnym registrujúcim, ktorí sa už dohodli na SIP, a registrácia zatiaľ nebola predložená, bude potrebné zvážiť, či ich informácie o identite látky spadajú do rámca SIP. Ak nie, musia s potenciálnymi registrujúcimi diskutovať a dohodnúť sa o tom, či je potrebné rozšíriť rozsah profilu tak, aby bolo možné zahrnúť nového člena, alebo sa dohodnúť, že je mimo rozsahu platnosti.

Profil SIP by bolo potrebné upraviť, ak látka, ktorá má byť zaregistrovaná potenciálnym registrujúcim má špecifické parametre identifikácie látky, ktoré môžu meniť reprezentatívnosť spoločne predkladaných informácií o nebezpečnosti, a preto si vyžadujú osobitné zdôvodnenie (napr. špecifická nečistota, odlišný pomer zloženia, odlišná fáza, odlišná veľkosť častíc atď.). Na zabezpečenie transparentnosti bude tento parameter potrebné špecifikovať v SIP.

V jednotlivých prípadoch sa môžu potenciálni a existujúci registrujúci dohodnúť, že spoločne predkladané údaje o nebezpečnosti nie sú v zásade reprezentatívne pre látku potenciálneho registrujúceho z dôvodu odchýlky v parametroch identifikácie látky, ktoré nespádajú do dohodnutého rámca SIP. V tomto prípade potenciálny registrujúci predloží samostatnú registráciu buď spolu s ostatnými registrujúcimi s identitou látky zahŕňajúcou tento parameter alebo samostatne, ak nebudú žiadni iní registrujúci pre tú istú identitu látky.

#### 4. Oznámenie profilu identifikácie látky v registračnej dokumentácii

**Keď potenciálni registrujúci pre svoju látku zhromaždia alebo vytvoria všetky potrebné údaje podľa prílohy VII – XI (t. j. krok 5**

**Obrázok 2), balík údajov je pripravený na oznámenie vo formáte IUCLID v dokumentácii na predloženie agentúre (t. j. krok 6**

Obrázok 2). Na oznámenie profilu SIP vo formáte IUCLID sa názov a iné identifikátory, informácie o zložení a ďalšie parametre podľa potreby oznamujú v častiach 1.1 a 1.2 aplikácie IUCLID.

Profil identifikácie látky	Oznámené v aplikácii IUCLID
Názov a iné identifikátory	Časť 1.1 všetkých dokumentácií
Informácie o zložení a ďalšie príslušné parametre	Časť 1.2 dokumentácie hlavného registrujúceho

Názov SIP a iné identifikátory sú oznamované v časti 1.1 všetkých dokumentácií. Hlavný registrujúci oznámi informácie o zložení podľa profilu SIP a ostatné parametre v súlade s časťou 1.2 jeho dokumentácie vo forme „hraničného zloženia látky“<sup>36</sup>. Hlavný registrujúci musí tiež predložiť všetky príslušné údaje podľa prílohy VII – XI v častiach 4 – 14 (v zmysle

<sup>36</sup> Pokyny na to, ako uvádzať „hraničné zloženie látky“ sú uvedené v príručke „Ako pripraviť registráciu a dokumentáciu technologicky orientovaného výskumu a vývoja“, ktoré sú k dispozícii na stránke <http://echa.europa.eu/manuals>.

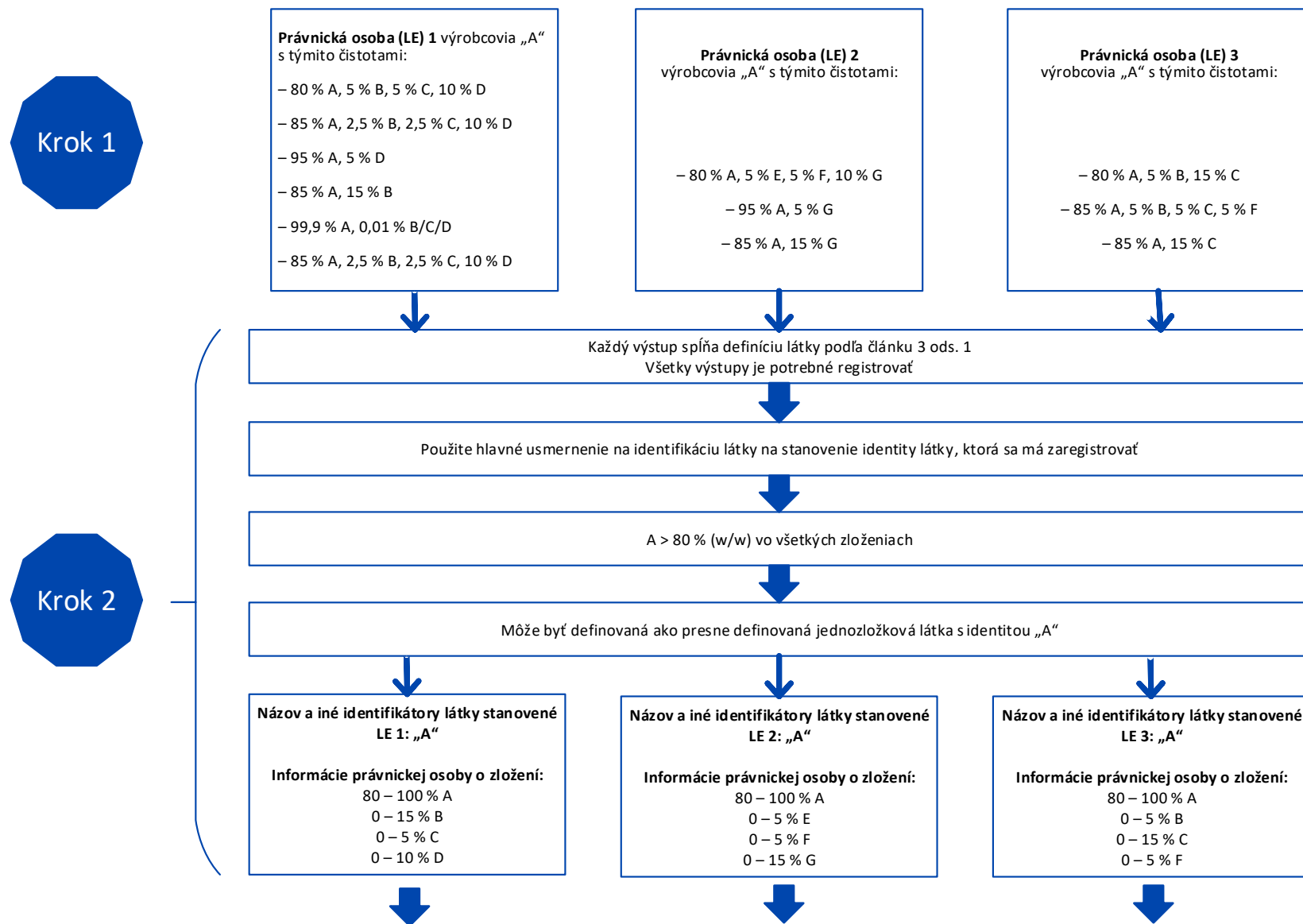
oprávneného zrieknutia sa pre jednu alebo viaceré požiadavky o informácie) v mene všetkých registrujúcich.

Každý registrujúci (vrátane hlavného registrujúceho) oznámi za svoj vlastný právny subjekt informácie o zložení látky, ktorú konkrétne vyrobil alebo doviezol, v časti 1.2 jeho vlastnej dokumentácie. To znamená, že hlavný registrujúci nahlási informácie o zložení SIP a informácie o zložení za svoj vlastný právnický subjekt v časti 1.2 svojej dokumentácie, pričom ostatní registrujúci oznámia svoje vlastné špecifické informácie o zložení. Každá štandardná registrácia musí tiež zahŕňať príslušné analytické informácie v časti 1.4 aplikácie IUCLID.

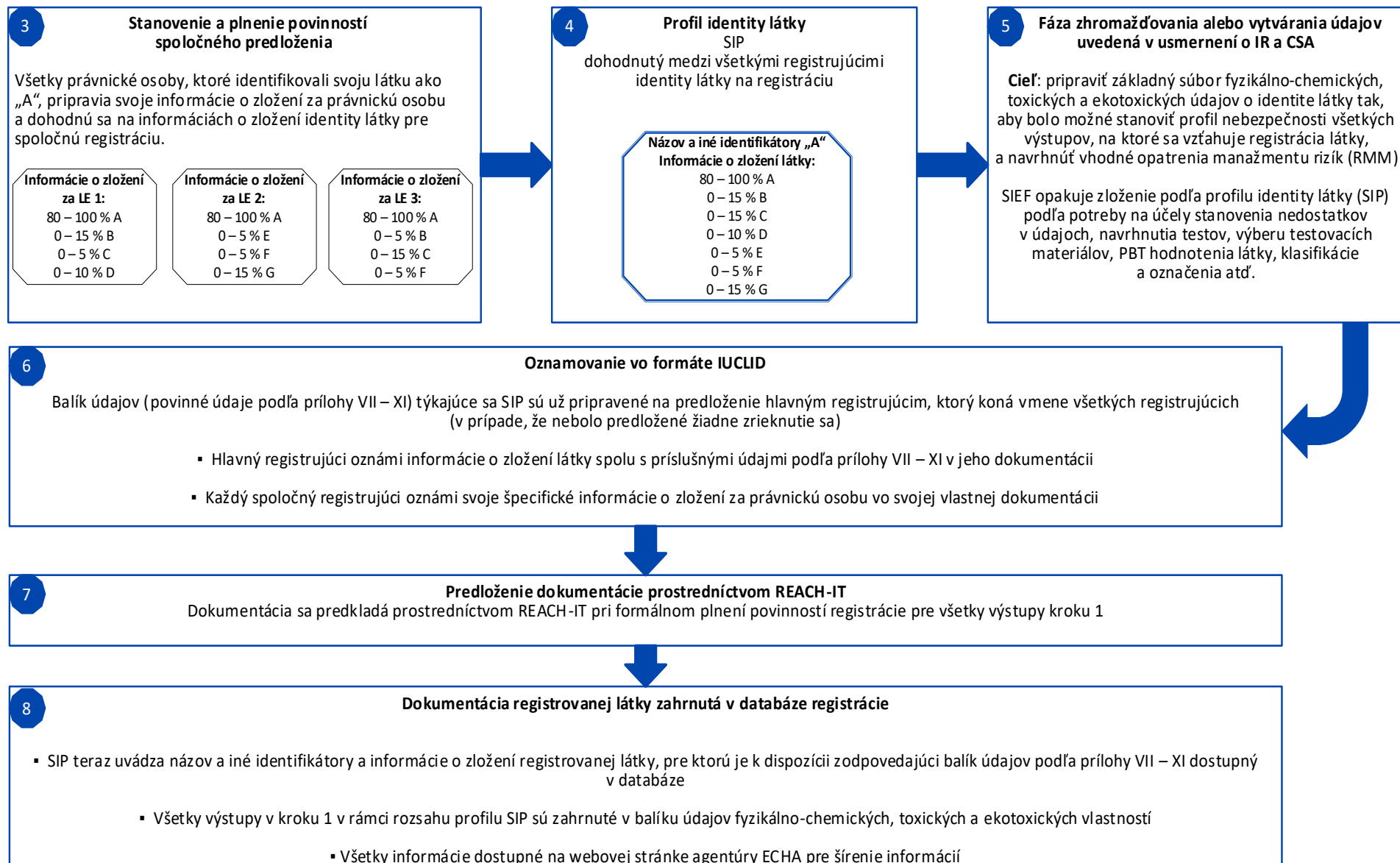
Každý registrujúci má preukázať, že informácie o zložení látok, ktoré špecificky vyrábajú alebo dovážajú, sú zahrnuté v profile SIP, ako sa uvádza v „hraničnom zložení“, a sú tiež zahrnuté v údajoch podľa prílohy VII – XI predložených v dokumentácii hlavného registrujúceho (v prípade, že chýba odôvodnené zrieknutie sa).

Technical instructions on how to report compositional information in IUCLID format is available in the IUCLID manuals (<http://echa.europa.eu/manuals>).

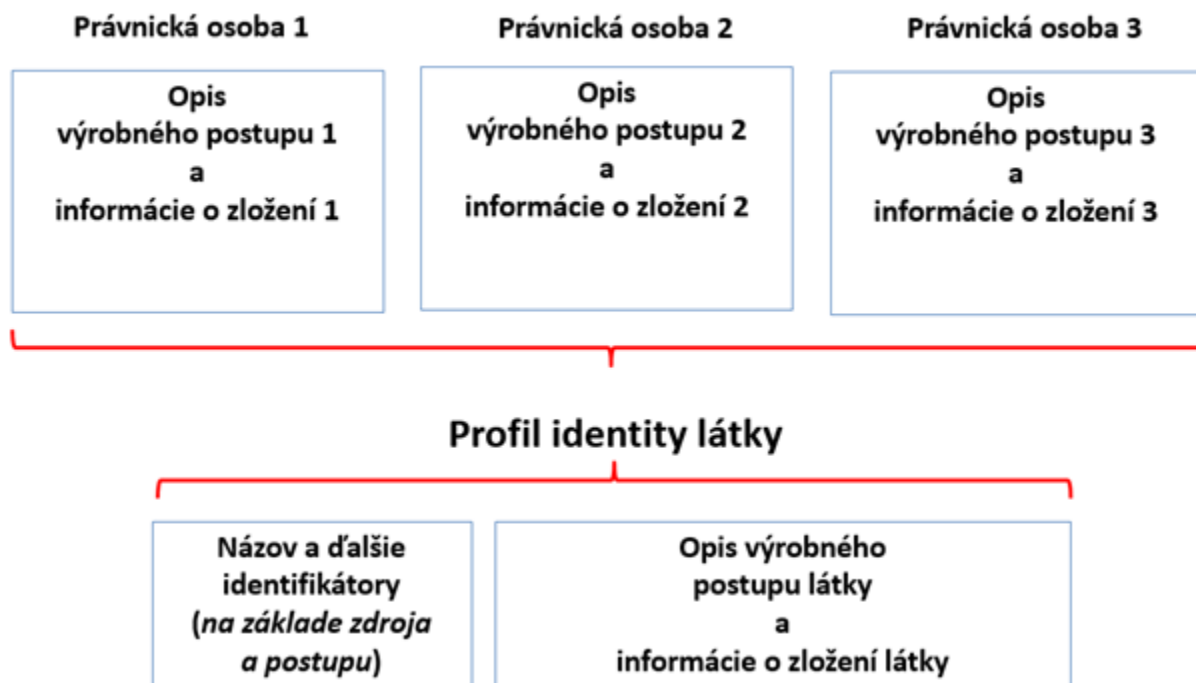
**Obrázok 2 (nasledujúca strana): Schematický prehľad krokov potenciálnych registrujúcich vychádza z určenia ich registračných povinností (1) na vymedzenie ich profilu SIP pre ich jednu identitu látky (4) a nakoniec predloženie ich registrácií v rámci formálneho plnenia povinností registrovať ich látky (8).**



**Poznámka k obrázku:** Identita látky je jednoduchá jednozložková na jednoduchoššie znázornenie. V prípade komplexnejších látok sú kroky také isté, no na definovanie identity látky možno použiť aj ďalšie prvky alebo zástupné znaky pre informácie o zložení. Proces definovania SIP môže tiež zahŕňať iterácie medzi krokmi 3 a 5.



Obrázok 3: Názorná schéma definovania SIP (krok 4 v obrázku 2) pre látku typu UVCB identifikovanú na základe deskriptorov zdroja a postupov z deskriptorov zdroja a postupu právneho subjektu.



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