

# Poradnik dotyczący identyfikacji i nazewnictwa substancji w systemie REACH



**Czerwiec 2007**

## **INFORMACJA PRAWNA**

Niniejszy dokument zawiera wytyczne dotyczące systemu REACH, wyjaśniające wynikające z niego obowiązki oraz jak je wypełniać. Niemniej jednak, użytkownicy muszą pamiętać, że jedynym autentycznym odnośnikiem prawnym jest tekst rozporządzenia REACH, a informacje zawarte w niniejszym dokumencie nie stanowią porady prawnej. Europejska Agencja Chemikaliów nie bierze odpowiedzialności za zawartość niniejszego dokumentu.

## **SŁOWO WSTĘPNE**

Niniejszy dokument opisuje jak nazywać i identyfikować substancję w systemie REACH. Stanowi on element serii dokumentów z wytycznymi mających pomóc wszystkim zainteresowanym w przygotowaniu się do wypełnienia obowiązków wynikających z rozporządzenia REACH. Dokumenty te obejmują szczegółowe wytyczne dotyczące zakresu podstawowych procesów REACH, jak również niektórych określonych naukowych i/lub technicznych metod, które przemysł lub odpowiednie organy władzy muszą zastosować zgodnie z REACH.

Dokumenty zawierające wytyczne zostały opracowane i przedyskutowane w ramach Projektów Wdrażania REACH (REACH Implementation Projects – RIPs), prowadzonych przez służby Komisji Europejskiej i obejmujących wszystkich partnerów: Państwa Członkowskie, przemysł oraz organizacje pozarządowe. Dostęp do tych dokumentów możliwy jest poprzez stronę internetową Europejskiej Agencji Chemikaliów ([http://echa.europa.eu/reach\\_en.html](http://echa.europa.eu/reach_en.html)). Kolejne dokumenty zawierające wytyczne zostaną opublikowane na tej stronie po zakończeniu ich opracowania lub aktualizacji.



---

# SPIS TREŚCI

SPIS TREŚCI.....	5
TABELE.....	6
1 INFORMACJE OGÓLNE .....	7
1.1 CELE .....	8
1.2 ZAKRES .....	8
1.3 STRUKTURA DOKUMENTU .....	9
2 DEFINICJE I SKRÓTY .....	10
2.1 SKRÓTY .....	10
2.2 DEFINICJE.....	11
3 RAMY IDENTYFIKACJI SUBSTANCJI W SYSTEMIE REACH .....	14
3.1 DEFINICJA SUBSTANCJI .....	14
3.2 WYKAZ WE .....	14
3.2.1 Rola wykazu WE w momencie wejścia w życie rozporządzenia REACH.....	15
3.2.2 Wykaz REACH po wejściu w życie rozporządzenia REACH.....	15
3.3 WYMAGANIA DOTYCZĄCE REJESTRACJI SUBSTANCJI W SYSTEMIE REACH.....	16
4 WYTYCZNE DOTYCZĄCE IDENTYFIKACJI I NAZYWANIA SUBSTANCJI W SYSTEMIE REACH	18
4.1 WPROWADZENIE.....	18
4.2. SUBSTANCJE O DOBRZE OKREŚLONYM SKŁADZIE.....	22
4.2.1 Substancje jednoskładnikowe.....	23
4.2.2 Substancje wieloskładnikowe.....	24
4.2.3 Substancje o określonym składzie chemicznym oraz inne podstawowe parametry identyfikujące... 28	
4.3 WYTYCZNE DOTYCZĄCE SUBSTANCJI O SŁABO OKREŚLONYM LUB ZRÓZNICOWANYM SKŁADZIE (UVCB).....	29
4.3.1. Ogólne wytyczne dotyczące substancji UVCB.....	30
4.3.2. Substancje UVCB szczególnego typu.....	38
AMINOPEPTYDAZY .....	43
DIPEPTYDAZY .....	43
5 SPRAWDZANIE JEDNAKOWOŚCI SUBSTANCJI - KRYTERIA.....	46
6 TOŻSAMOŚĆ SUBSTANCJI W RAMACH REJESTRACJI WSTĘPNEJ I ZBIERANIA INFORMACJI.....	51
6.1 REJESTRACJA WSTĘPNA.....	51
6.2 ZBIERANIE INFORMACJI.....	52
7 PRZYKŁADY.....	53

7.1 PEROKSYDIWĘGLAN DIETYLU.....	53
7.2 ZOLIMIDYNA.....	54
7.3 MIESZANINA IZOMERÓW.....	54
7.4 AROMAT AH.....	57
7.5 MINERAŁY.....	62
7.6 OLEJEK ETERYCZNY Z LAWENDY (LAVANDIN GROSSO).....	64
7.7 OLEJEK CHRYZANTEMOWY I JEGO WYODRĘBNIONE IZOMERY.....	68
7.8 FOSFORAN IZOPROPYLOWANEGO FENOLU.....	72
7.9 CZWARTORZĘDOWE ZWIĄZKI AMONIOWE.....	73
7.10 SUBSTANCJE ROPOPOCHODNE.....	77
7.10.1 Frakcja benzynowa (C4-C12).....	77
7.10.2 Oleje gazowe (ropa naftowa).....	78
7.11 ENZYMY.....	78
7.11.1 Subtylizyna.....	78
7.11.2. $\alpha$ -Amylaza.....	80
8. OPIS SUBSTANCJI W SYSTEMIE IUCLID 5.....	81
8.1 ZASADY OGÓLNE.....	81
8.1.1 Wykazy.....	82
8.1.2 Zbiór danych o substancjach (części 1.1, 1.2., 1.3 i 1.4 w systemie IUCLID).....	84
8.2 Przykłady uzupełniania IUCLID 5.....	86
8.2.1 Substancje jednoskładnikowe.....	87
8.2.2 Substancje wieloskładnikowe.....	88
8.2.3 Substancje określone za pomocą składu chemicznego oraz innych parametrów identyfikujących.....	90
8.2.4 Substancje UVCB.....	91
8.3 RAPORTOWANIE INFORMACJI ANALITYCZNYCH.....	92
9 LITERATURA.....	94

## TABELE

Tabela 1.1 RIP 3 – dokumenty zawierające wytyczne dla systemu REACH.....	7
Tabela 2.1 Skróty.....	10
Tabela 2.2 Definicje.....	11
Tabela 3.1 Parametry identyfikujące substancje określone w załączniku VI, poz. 2 rozporządzenia REACH...	17
Tabela 4.1 Podstawowe parametry identyfikujące dla przykładów różnych substancji dobrze określonych.....	19
Tabela 4.2 Podstawowe parametry identyfikujące substancje dla przykładów różnych substancji UVCB.....	20

## 1. INFORMACJE OGÓLNE

Po opublikowaniu propozycji Komisji Europejskiej w sprawie rozporządzenia REACH dnia 29 października 2003 r. [KE, 2003-A do KE, 2003-F], służby Komisji wspólnie z Krajami Członkowskimi rozpoczęły wdrażanie „strategii przejściowej” mającej na celu przygotowanie wszystkich podmiotów do zastosowania w praktyce systemu REACH.

W ramach przygotowań technicznych do REACH Komisja Europejska koordynuje prace związane z opracowaniem koniecznej metodologii, narzędzi i wskazówek technicznych poprzez projekty wdrożenia systemu REACH (REACH Implementation Projects) (projekty RIP).

Pomimo, iż niniejszy poradnik (TGD) dla projektu RIP 3.10 nie posiada mocy prawnej, porusza on kwestie związane z metodologią identyfikacji, nazywania i raportowania substancji chemicznej w ramach systemu REACH.

Rozporządzenie REACH koncentruje się wyłącznie na „substancjach”. W celu zapewnienia prawidłowego funkcjonowania systemu REACH konieczna jest jednoznaczna identyfikacja substancji. Niniejszy dokument dotyczący identyfikacji substancji ma stanowić materiał pomocniczy dla przemysłu, Krajów Członkowskich oraz Europejskiej Agencji Chemikaliów.

Niniejszy dokument powstał w oparciu o doświadczenia związane z procesem identyfikacji substancji zgodnym z obowiązującymi wcześniej przepisami w tej kwestii (zwłaszcza z dyrektywą 67/548/EWG w sprawie substancji niebezpiecznych) oraz innymi przepisami UE. Obejmuje on powszechną praktykę właściwą z punktu widzenia przepisów REACH. Uwzględnia również rozwiązania stosowane w systemach identyfikacji i nazewnictwa chemikaliów spoza Wspólnoty Europejskiej.

Dokument zawiera wytyczne dostosowane dla substancji różnego rodzaju.

Niniejszym dokumentem można posługiwać się jako samodzielnym materiałem, stanowi on jednakże część zbioru dokumentów TGD dostępnych w odpowiedniej części strony internetowej Europejskiej Agencji Chemikaliów: [http://echa.europa.eu/reach\\_eu.html](http://echa.europa.eu/reach_eu.html). Wykaz dokumentów zawierających wytyczne dla przemysłu znajduje się w **tabeli 1.1**. Więcej informacji można znaleźć pod adresem: <http://ecb.jrc.it/REACH>.

**Tabela 1.1** RIP 3 – dokumenty zawierające wytyczne dla systemu REACH

RIP	Tematyka
3.1	Poradnik dotyczący rejestracji Poradnik dotyczący półproduktów Poradnik dotyczący polimerów Poradnik dotyczący PPORD
3.2	Poradnik dotyczący wymogów informacyjnych oraz oceny bezpieczeństwa chemicznego (CSR)
3.3	Poradnik dotyczący wymagań względem informacji
3.4	Poradnik dotyczący wymiany informacji
3.5	Poradnik dla dalszych użytkowników
3.6	Poradnik dotyczący klasyfikacji, znakowania i pakowania
3.7	Poradnik dotyczący dokumentacji niezbędnej w procesie udzielania zezwoleń
3.8	Poradnik dotyczący wyrobów
3.9	Poradnik dotyczący analizy społeczno-ekonomicznej
3.10	Poradnik dotyczący identyfikacji substancji

## 1.1 CELE

Celem niniejszego dokumentu jest określenie przejrzystych wytycznych dla producentów oraz importerów w zakresie rejestracji substancji w systemie REACH. Niniejszy dokument zawiera wytyczne dotyczące nazywania substancji, co stanowi istotny element ich identyfikacji. Zawiera również wskazówki pozwalające stwierdzić, czy w ramach systemu REACH substancje mogą być uznane za jednakowe. Identyfikacja jednakowych substancji jest istotna w procesie rejestracji wstępnej substancji wprowadzonych, zbierania danych na temat substancji niewprowadzonych, wymiany informacji oraz wspólnego przedkładania danych w ramach konsorcjów.

Identyfikacja substancji powinna być prowadzona przez ekspertów z branży przemysłowej. Dodatkowe wytyczne dotyczące parametrów identyfikujących dla podmiotów działających w branży przemysłowej nieposiadających specjalistycznej wiedzy w tym zakresie znajdują się w załączniku do niniejszego dokumentu.

Ponadto niniejszy dokument zawiera odnośniki do narzędzi wspomagających określanie i sprawdzanie chemicznej tożsamości substancji.

## 1.2 ZAKRES

Zgodnie z art. 1 rozporządzenia REACH dotyczy ono kwestii związanych z produkcją, importem, wprowadzaniem do obrotu oraz stosowaniem substancji jako takich oraz substancji występujących w preparatach oraz wyrobach. Przepisy obowiązujące w ramach REACH nie obejmują samych preparatów i wyrobów.

Zgodnie z artykułem 10 rozporządzenia REACH do rejestracji substancji wymagane jest zapisanie jej tożsamości przy użyciu parametrów określonych w pozycji 2 załącznika VI rozporządzenia REACH (patrz: **tabela 3.1**). Niniejszy dokument koncentruje się na właściwej identyfikacji substancji, które są objęte prawną definicją substancji stosowaną w REACH oraz zawiera wytyczne dotyczące parametrów służących do identyfikacji substancji wymienionych w załączniku VI, poz. 2. Przedłożone informacje muszą umożliwić pełną identyfikację każdej substancji. Możliwe jest pominięcie jednego parametru lub większej liczby parametrów identyfikujących substancje, w przypadku gdy uwzględnienie ich jest technicznie niewykonalne lub podanie wymaganej informacji wydaje się niepotrzebne z naukowego punktu widzenia. Powody takiego pominięcia należy jasno uzasadnić.

Wybór metody identyfikacji substancji zależy od rodzaju danej substancji. Niniejszy dokument kieruje użytkownika do stosownych rozdziałów opisujących substancje różnego rodzaju.

Wykazy WE stosowane w ramach dyrektywy 67/548/EWG (EINECS, ELINCS oraz lista NLP) stanowią istotne narzędzie służące do identyfikacji substancji. Wytyczne dotyczące roli tych wykazów w systemie REACH znajdują się w rozdziale 3.2.

Substancje, których dotyczy rozporządzenie REACH (oraz niniejszy dokument), to na ogół produkty reakcji chemicznej w procesie produkcji mogące zawierać wiele różnych składników. Do substancji, zgodnie z definicją stosowaną w rozporządzeniu REACH, zaliczamy również substancje otrzymywane w wyniku reakcji chemicznej z materiałów występujących w przyrodzie, które mogą zawierać pojedynczy pierwiastek lub pojedynczą cząsteczkę (np. czyste metale i niektóre minerały) albo kilka składników (np. olejki eteryczne, kamienie hutnicze). Jednakże substancje objęte innymi przepisami prawodawstwa wspólnotowego są w pewnych przypadkach zwolnione z rejestracji w systemie REACH (patrz: artykuł 2 rozporządzenia REACH). Z obowiązku rejestracji zwolnione są również substancje wymienione w załączniku IV do rozporządzenia REACH oraz substancje spełniające niektóre kryteria określone w załączniku V. Należy zauważyć, że choć substancja może być zwolniona z rejestracji, to niekonieczne musi to oznaczać, że nie podlega innym przepisom rozporządzenia (np. przepisom Tytułu XI Wykaz klasyfikacji i oznakowania).



Rejestrujący powinni się zatem zapoznać z definicjami i zasadami zwolnienia z obowiązku rejestracji przewidzianymi w ramach systemu REACH w celu ustalenia, czy dane substancje podlegają rejestracji lub innym obowiązkom.

Rejestracja w ramach systemu REACH dotyczy wyłącznie substancji. Jednakże postanowienia rozporządzenia dotyczą również produkcji, wprowadzania do obrotu oraz stosowania substancji jako takich, w preparatach oraz wyrobach.

Niniejszy dokument nie zawiera wytycznych dotyczących grupowania substancji o podobnej strukturze. Zagadnienia dotyczące tej kwestii znajdują się w dokumencie RIP 3.4 zawierającym wytyczne techniczne dotyczące wymagań względem informacji o właściwościach substancji.

W celu uzyskania informacji nieuwzględnionych w niniejszym dokumencie należy zapoznać się z pozostałymi dokumentami zawierającymi wytyczne dotyczące systemu REACH (wymienionymi w **tabeli 1.1**) lub zwrócić się do jednostki zapewniającej wsparcie techniczne.

### **1.3. STRUKTURA DOKUMENTU**

Informacje ogólne dotyczące m.in. celów oraz zakresu dokumentu zostały przedstawione w rozdziale 1, skróty i definicje w nim zastosowane znajdują się w rozdziale 2, a informacje dotyczące ram dla identyfikacji substancji w systemie REACH, np. definicja substancji i wymagania odnośnie informacji w tekście - w rozdziale 3.

Praktyczne wskazówki dotyczące identyfikacji i nazywania substancji prezentuje rozdział 4.

- Rozdział 4.1 opisuje rozróżnienie pomiędzy substancjami „dobrze określonymi” oraz „słabo określonymi”; w obrębie tych dwóch głównych grup różne rodzaje substancji można identyfikować na podstawie określonych wytycznych. Do odpowiedniego rozdziału zawierającego wytyczne dotyczące identyfikacji danego typu substancji kieruje użytkownika stosowny schemat.
- Kolejne rozdziały prezentują konkretne wytyczne dla poszczególnych rodzajów substancji w postaci zasad z podanymi objaśnieniami i przykładami.

Rozdział 5 zawiera wytyczne do sprawdzania, czy dane substancje można uznać za jednakowe czy nie. W rozdziale 6 znajdują się wytyczne dotyczące identyfikacji substancji na etapie rejestracji wstępnej oraz zbierania informacji.

Ponadto w rozdziale 7 przedstawiono szczegółowe, praktyczne przykłady przygotowane na podstawie wytycznych określonych w rozdziale 4 ilustrujące w jaki sposób wytyczne zawarte w niniejszym dokumencie mogą być stosowane przez branżę przemysłową.

Wreszcie rozdział 8 zawiera wytyczne dotyczące opisu substancji w IUCLID 5.

Załącznik I zawiera wykaz odnośników do odpowiednich materiałów pomocniczych ułatwiających charakteryzowanie i sprawdzanie chemicznej tożsamości substancji.

Załącznik II zawiera dodatkowe informacje dotyczące parametrów wykorzystywanych w procesie identyfikacji substancji takich jak zasady nazewnictwa, numeracja WE, numeracja CAS, zapis wzoru cząsteczkowego i strukturalnego oraz metody analityczne.

## 2

## DEFINICJE I SKRÓTY

### 2.1

### SKRÓTY

Podstawowe skróty stosowane w niniejszym dokumencie zostały podane i objaśnione w **tabeli 2.1**.

**Tabela 2.1** Skróty

<b>Skrót</b>	<b>Znaczenie</b>
AISE	Międzynarodowe Stowarzyszenie Mydeł, Detergentów i Środków Czystości
CAS	Chemical Abstracts Service
KE	Komisja Europejska
EINECS	Europejski Wykaz Istniejących Substancji o Znaczeniu Komercyjnym
ELINCS	Europejski Wykaz Notyfikowanych Substancji Chemicznych
ENCS	Spis Nowych i Istniejących Substancji Chemicznych (Japonia)
ESIS	Europejski System Informacji o Substancjach Chemicznych
UE	Unia Europejska
GC	Chromatografia gazowa
GHS	Globalnie Zharmonizowany System
HPLC	Wysokosprawna chromatografia cieczowa
InChI	IUPAC International Chemical Identifier (Międzynarodowy Identyfikator Chemiczny IUPAC)
INCI	Międzynarodowe Nazewnictwo Składników Kosmetycznych
IR	Spektroskopia w podczerwieni
ISO	Międzynarodowa Organizacja Normalizacyjna
IUCLID	Międzynarodowa Jednolita Baza Danych Informacji Chemicznej
IUBMB	Międzynarodowa Unia Biochemii i Biologii Molekularnej
IUPAC	Międzynarodowa Unia Chemii Czystej i Stosowanej
MS	Spektroskopia masowa
NLP	No Longer Polymer (już nie polimer)
NMR	Magnetyczny rezonans jądrowy
ppm	Parts per milion (części na milion)
REACH	Rejestracja, Ocena, Udzielanie Zezwoleń i Stosowanych Ograniczeń w zakresie Chemikaliów
RIP	Projekt wdrożenia systemu REACH
SIEF	Forum Wymiany Informacji o Substancji
SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry Specification (uproszczony zapis struktury cząsteczek w postaci liniowej informacji tekstowej)
TGD	Dokument zawierający wytyczne techniczne (poradnik)
TSCA	Ustawa o kontroli substancji toksycznych (USA)
UVCB	Substancje o nieznanym lub zmiennym składzie, złożone produkty reakcji lub materiały biologiczne
UV/VIS	Spektroskopia w ultrafiolecie/zakresie widzialnym
XRD	Analiza rentgenowska dyfrakcyjna
XRF	Analiza rentgenowska fluorescencyjna

## 2.2

## DEFINICJE

Podstawowe definicje stosowane w niniejszym dokumencie zamieszczono w **tabeli 2.2**.

Definicje te uwzględniają definicje stosowane w rozporządzeniu REACH oraz przyszłych przepisach dotyczących klasyfikacji, pakowania i oznakowania substancji i mieszanin. Z tego względu niektóre pojęcia zostały zdefiniowane w sposób odmienny niż w dyrektywie 67/548/EWG.

**Tabela 2.2** Definicje

<b>Definicja</b>	<b>Opis</b>
Dodatek	Substancja, która została dodana do danej substancji celowo jako środek stabilizujący <sup>1</sup>
Stop*	Jednolity w skali makroskopowej materiał metaliczny składający się z dwóch lub większej liczby pierwiastków połączonych w taki sposób, że nie można ich łatwo rozdzielić w sposób mechaniczny.
Wyrób*	Przedmiot, który podczas produkcji otrzymuje określony kształt, powierzchnię, konstrukcję lub wygląd zewnętrzny, co decyduje o jego funkcji w stopniu większym niż jego skład chemiczny.
Chromatogram typu fingerprint	Wyrażenie składu substancji za pomocą charakterystycznego rozłożenia składników w chromatogramie analitycznym
Komponent	Substancja dodana w celu otrzymania danego preparatu
Składnik	Każde indywiduum obecne w danej substancji, które może zostać scharakteryzowane na podstawie swojej niepowtarzalnej tożsamości chemicznej.
Wykaz WE	Trzy europejskie wykazy substancji stosowane w ramach obowiązujących wcześniej przepisów UE. EINECS, ELINCS oraz lista NLP są nazywane łącznie wykazem WE. Parametrem identyfikującym substancję w wykazie WE jest numer WE.
Zanieczyszczenie	Składnik, który znalazł się w wytwarzanej substancji w sposób niezamierzony. Może on pochodzić z materiałów wyjściowych lub być rezultatem pobocznych lub niekompletnych reakcji zachodzących podczas procesu wytwarzania. Mimo, iż występuje w substancji końcowej, nie został on do niej dodany celowo.

Ciąg dalszy tabeli 2.2 na następnej stronie

<sup>1</sup> Dodatek może pełnić również inne funkcje, np. regulatora pH lub środka barwiącego. W rozporządzeniu REACH oraz w niniejszym dokumencie dodatek oznacza środek stabilizujący.

Ciąg dalszy tabeli 2.2 Definicje

Definicja	Opis
Półprodukt*	<p>Substancja, która jest produkowana, używana lub stosowana do przetwarzania chemicznego (zwanego dalej <i>syntezą</i>) w celu przekształcenia w inną substancję:</p> <p>(a) <i>półprodukt niewyodrębniany</i> oznacza półprodukt, który podczas syntezy nie jest celowo usuwany (z wyjątkiem procesu pobierania próbek) z urządzenia, w którym przeprowadzana jest synteza. Urządzenie takie oznacza pojemnik do przeprowadzania reakcji, wyposażenie pomocnicze i urządzenia, przez które przemieszczają się substancje podczas stałego procesu ciągłego lub okresowego, a także rurociągi do transportowania z jednego pojemnika do drugiego w celu przeprowadzenia następnego etapu reakcji; urządzenie takie nie oznacza zbiorników i innych pojemników, w których substancje są magazynowane po wyprodukowaniu;</p> <p>(b) <i>półprodukt wyodrębniany w miejscu wytwarzania</i> oznacza półprodukt niespełniający kryteriów półproduktu niewyodrębnianego i w którego przypadku produkcja samego półproduktu i synteza innej (innych) substancji z tego półproduktu odbywa się w tym samym miejscu wytwarzania obsługiwanym przez jedną lub więcej osób prawnych;</p> <p>(c) <i>transportowany półprodukt wyodrębniany</i> oznacza półprodukt niespełniający kryteriów półproduktu niewyodrębnianego i transportowany pomiędzy innymi miejscami wytwarzania lub do nich dostarczany.</p>
IUCLID	IUCLID to baza danych i system zarządzania danymi dotyczącymi substancji chemicznych.
Główny składnik	Składnik nie będący dodatkiem ani zanieczyszczeniem, który stanowi znaczną część danej substancji i w związku z tym jest wykorzystywany w celu nazwania oraz szczegółowej identyfikacji danej substancji.
Produkcja*	Wytwarzanie albo ekstrakcja substancji w stanie, w jakim występują w przyrodzie
Monomer*	Substancja, która jest w stanie tworzyć wiązania kowalencyjne z serią innych podobnych lub niewykazujących podobieństwa cząsteczek w reakcji tworzenia polimerów, w odpowiednich warunkach wykorzystywanych w danym procesie.
Substancja jednoskładnikowa	Jest to na ogół substancja definiowana na podstawie swojego składu, w której jeden główny składnik stanowi 80% wagowych substancji.
Substancja wieloskładnikowa	Jest to na ogół substancja definiowana na podstawie swojego składu, w której więcej niż jeden główny składnik jest obecny w stężeniu $\geq 10\%$ wagowych i $< 80\%$ wagowych.
Substancja niewprowadzona	Substancja wymagająca rejestracji, której nie obejmuje okres przejściowy stosowany w systemie REACH w przypadku substancji wprowadzonych.
Substancja niemodyfikowana chemicznie*	Substancja, której struktura chemiczna pozostaje niezmienną nawet jeżeli została ona poddana procesowi chemicznemu lub obróbce lub też fizycznej transformacji mineralogicznej, np. w celu usunięcia zanieczyszczeń.

Ciąg dalszy tabeli 2.2 na następnej stronie

**Ciąg dalszy tabeli 2.2 Definicje**

<b>Definicja</b>	<b>Opis</b>
Substancja wprowadzona*	Substancja, która spełnia co najmniej jedno z następujących kryteriów: (a) jest zamieszczona w Europejskim wykazie istniejących substancji o znaczeniu komercyjnym (EINECS); (b) przynajmniej raz w ciągu 15 lat poprzedzających wejście w życie rozporządzenia REACH została wyprodukowana na terytorium Wspólnoty lub krajów, które przystąpiły do Unii Europejskiej w dniu 1. stycznia 1995 r. lub 1. maja 2004 r., lecz nie została wprowadzona do obrotu przez producenta lub importera, pod warunkiem że producent lub importer dysponuje pisemnym dowodem potwierdzającym ten fakt; (c) była wprowadzona do obrotu na terytorium Wspólnoty lub w krajach przystępujących do Unii Europejskiej z dniem 1. stycznia 1995 r. lub z dniem 1. maja 2004 r. przed wejściem w życie rozporządzenia REACH, przez producenta lub importera i była uznana za zgłoszoną zgodnie z art. 8, ust. 1 dyrektywy 67/548/EWG, lecz nie spełnia definicji polimeru zawartej w rozporządzeniu REACH, pod warunkiem że wytwórca lub importer dysponuje pisemnym dowodem potwierdzającym ten fakt.
Preparat*	Mieszania lub roztwór składający się z dwóch lub większej liczby substancji <sup>2</sup> .
Polimer*	Substancja składająca się z cząsteczek stanowiących sekwencję jednego lub kilku rodzajów jednostek monomeru. Cząsteczki takie muszą charakteryzować się statystycznym rozkładem masy cząsteczkowej w pewnym zakresie, a różnice w masie cząsteczkowej powinny wynikać przede wszystkim z różnic w liczbie jednostek monomeru w cząsteczce. Polimer zawiera : (a) cząsteczki stanowiące prostą większość wagową, które zawierają co najmniej trzy jednostki monomeru związane kowalencyjnie z co najmniej jeszcze jedną jednostką monomeru lub innym reagentem; (b) cząsteczki niestanowiące prostej większości wagowej wśród cząsteczek o tej samej masie cząsteczkowej. W kontekście tej definicji „jednostka monomeru” oznacza przereagowaną formę monomeru w polimerze.
Substancja*	Pierwiastek chemiczny lub jego związki w stanie, w jakim występują w przyrodzie lub zostają uzyskane za pomocą procesu produkcyjnego, z wszelkimi dodatkami wymaganymi do zachowania ich trwałości oraz wszelkimi zanieczyszczeniami powstałymi w wyniku zastosowanego procesu, wyłączając rozpuszczalniki, które można oddzielić bez wpływu na stabilność i skład substancji.
Substancja występująca w przyrodzie*	Substancja w sposób naturalny występująca w postaci własnej, nieprzetworzona lub przetworzona jedynie ręcznie, mechanicznie lub z wykorzystaniem siły grawitacji; poprzez rozpuszczanie w wodzie, flotację, ekstrakcję wodą oraz destylację z parą wodną lub ogrzewanie jedynie w celu usunięcia wody lub substancja, która w jakikolwiek sposób wyodrębniana jest z powietrza.

\* Definicje zgodne z art. 3 rozporządzenia REACH

<sup>2</sup> Definicja w GHS: „Mieszanina oznacza mieszaninę lub roztwór dwóch lub więcej niereagujących substancji (Mieszanina i preparat są synonimami)”

*Uwaga:* Mieszaniny/preparaty nie są tym samym jako substancje wieloskładnikowe. Substancje wieloskładnikowe nazywane są jako „masa reakcyjna ...”. Substancje wieloskładnikowe są rezultatem reakcji chemicznej, podczas gdy w czasie sporządzania preparatu nie zachodzi żadna zamierzona reakcja.

### 3 **RAMY IDENTYFIKACJI SUBSTANCJI W SYSTEMIE REACH**

Rozporządzenie REACH zawiera definicję substancji (art. 3) oraz parametry identyfikujące substancję (załącznik VI, poz. 2), które należy uwzględnić w celu identyfikacji substancji przy jej rejestracji.

Niniejszy rozdział zawiera definicję substancji stosowaną w systemie REACH (rozdział 3.1), ogólne wytyczne dotyczące korzystania z wykazu WE utworzonego w ramach wcześniej obowiązujących przepisów w zakresie chemikaliów (rozdział 3.2) oraz dodatkowe informacje o wymogach związanych z identyfikacją substancji w systemie REACH (rozdział 3.3).

#### 3.1 **DEFINICJA SUBSTANCJI**

Substancja w rozporządzeniu REACH (art. 3, definicja 1) jest definiowana następująco:

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

Definicja substancji w REACH jest jednakowa z definicją substancji stosowaną w poprawce 7 do dyrektywy w sprawie substancji niebezpiecznych (dyrektywa 92/32/ EWG zmieniająca dyrektywę 67/548/EWG). W obu przypadkach definicja wykracza poza definicję substancji jako czystego związku chemicznego określanego na podstawie pojedynczej cząsteczki. Definicja substancji obejmuje inne składniki, takie jak zanieczyszczenia.

#### 3.2 **WYKAZ WE**

W ramach obowiązujących wcześniej przepisów dotyczących chemikaliów stosowano trzy oddzielne wykazy: Europejski Wykaz Istniejących Substancji o Znaczeniu Komercyjnym (EINECS), Europejski Wykaz Substancji Notyfikowanych (ELINCS) oraz listę NLP.

Substancje znajdujące się na rynku europejskim pomiędzy 1. stycznia 1971 r. a 18. września 1981 r. wymienione zostały w Europejskim Wykazie Istniejących Substancji o Znaczeniu Komercyjnym (EINECS)<sup>3</sup>. Substancje notyfikowane i wprowadzone do obrotu po 18. września 1981 r. figurują na Europejskim Wykazie Substancji Notyfikowanych (ELINCS).

Raportowaniem do spisu EINECS nie zostały objęte polimery podlegające szczególnym zasadom określonym dyrektywą 67/548/EWG. Poprawka 7 do dyrektywy 67/548/EWG (dyrektywa 92/32/EWG) poszerzyła definicję pojęcia „polimer”. W wyniku zastosowania tej definicji niektóre substancje uznawane za polimery zgodnie z zasadami zgłaszania substancji do wykazu EINECS nie są już uważane za polimery na podstawie poprawki 7. Ponieważ wszystkie

---

<sup>2</sup> EINECS powstał w oparciu o Europejski Spis Podstawowy (EICON). Substancje w EICON mogła również rejestrować branża przemysłowa (zgodnie z kryteriami obowiązującymi w przypadku EINECS). EICON został utworzony na podstawie różnych spisów chemikaliów znajdujących się w obrocie na rynku europejskim (np. TSCA)

substancje, które nie figurują w EINECS podlegają zgłoszeniu, substancje typu No Longer Polymer (już nie polimer) (NLP) teoretycznie powinny być zgłaszane. Rada Ministrów stwierdziła jednakże, iż substancje typu NLP nie powinny podlegać zgłoszeniu z działaniem wstecznym. Substancje wymienione na tej liście znajdowały się w obrocie na rynku UE pomiędzy 18. września 1981 r. a 31. października 1993 r. i spełniają wymóg uznania za polimery zgodnie z zasadami zgłaszania substancji do wykazu EINECS, ale nie są jednakże uznawane za polimery na podstawie poprawki 7. Lista NLP nie jest wykazem zamkniętym.

Te trzy wykazy substancji – EINECS, ELINCS oraz lista NLP – nazywane są łącznie wykazem WE. Każda substancja figurująca w tym wykazie posiada numer WE nadany przez Komisję Europejską (szczegółowe informacje dotycząca numeru WE znajduje się w załączniku II).

Informacje dotyczące tych substancji znajdują się na stronie Europejskiego Biura Chemicznego (<http://ecb.jrc.it>) w zakładce „ESIS”. W przyszłości wykaz substancji zarejestrowanych będzie prowadzony i publikowany przez Europejską Agencję Chemikaliów.

### **3.2.1 Rola wykazu WE w chwili wejścia w życie rozporządzenia REACH**

Wykaz WE może być stosowany przez producentów i importerów jako narzędzie służące do określenia, czy dana substancja jest substancją wprowadzoną czy niewprowadzoną. Dzięki wykazowi WE producenci i importerzy dowiedzą się, *kiedy* należy zarejestrować daną substancję i czy konieczna jest rejestracja wstępna oraz zbieranie informacji o danej substancji.

Substancja figurująca w wykazie EINECS lub na liście NLP jest uznawana za substancję wprowadzoną dla dowolnego producenta lub importera. W pewnych warunkach za substancje wprowadzone można uznać substancje niewymienione w EINECS ani na liście NLP: (1) Substancja spełniająca kryteria NLP, ale niewymieniona na liście NLP; (2) Substancja wyprodukowana na terytorium Wspólnoty lub w krajach przystępujących do Unii Europejskiej w maju 2004 r., ale ani raz nie wprowadzona do obrotu przez producenta lub importera w ciągu 15 lat przed wejściem w życie rozporządzenia REACH.

Jeśli substancja była wcześniej zgłoszona zgodnie z dyrektywą nr 67/548/EWG, przez co figuruje w wykazie ELINCS, przedłożone zgłoszenie jest uznawane za rejestrację na potrzeby systemu REACH (art. 24). Substancje takie są uznawane za zarejestrowane przez danego producenta lub importera i nie wymagają rejestracji wstępnej ze strony danego producenta/importera. Jednakże producent/importer ma obowiązek na bieżąco aktualizować rejestrację substancji. Pozostali producenci/importerzy substancji wymienionej w ELINCS i nieobjętej wcześniejszym zgłoszeniem lub zgłoszeniami są zobowiązani do rejestracji (jak w przypadku substancji niewprowadzonej) oraz wymiany informacji z poprzednim rejestrującym substancję. Więcej wytycznych w tym względzie znajduje się w Poradniku dotyczącym rejestracji.

### **3.2.2 Wykaz REACH po wejściu w życie rozporządzenia REACH**

Po wejściu w życie rozporządzenia REACH wykaz rejestrowanych substancji będzie prowadzony przez Europejską Agencję Chemikaliów. Przy każdej rejestracji substancji rejestrujący otrzyma numer rejestracyjny. Europejska Agencja Chemikaliów przyporządkuje również numer WE substancjom, które go nie posiadają (numery EINECS, ELINCS oraz NLP). Europejska Agencja Chemikaliów będzie regularnie aktualizować wykaz. Dodawane będą nowe substancje (w systemie REACH zwane substancjami niewprowadzonymi). Proces rejestracyjny

umożliwi „korektę” obecnego wykazu EINECS, w którym znajdują się pewne „pomyłki”<sup>4</sup>. Numery WE będą nadawane nowym substancjom rejestrowanym w systemie REACH prawdopodobnie w oparciu o metodę stosowaną w odniesieniu do wykazów EINECS, ELINCS oraz listy NLP.

Zdarza się, iż opis substancji w wykazie EINECS jest stosunkowo szeroki. W takich przypadkach potencjalnego rejestrującego substancję zachęca się do opisanie danej substancji w sposób bardziej szczegółowy (np. za pomocą nazwy IUPAC lub innych parametrów identyfikujących). Aby skorzystać z ułatwień przysługujących w kwestii substancji wprowadzonych, rejestrujący powinien jednakże wskazać wpis w wykazie EINECS, który obejmuje daną substancję. W takich przypadkach Europejska Agencja Chemikaliów podejmuje decyzję, czy danej substancji należy przyporządkować nowy numer WE.

Dalsze wytyczne dotyczące rejestracji wstępnej, tworzenia SIEF i wspólnego przedkładania danych w ramach konsorcjum w związku z identyfikacją substancji podano w RIP 3.4 Poradnik dotyczący wymiany informacji.

### **3.3. WYMAGANIA DOTYCZĄCE IDENTYFIKACJI SUBSTANCJI W SYSTEMIE REACH**

Przepisy obowiązujące w ramach systemu REACH określają, iż w przypadku wymaganej rejestracji substancji należy przedłożyć informacje dotyczące identyfikacji danej substancji zgodnie z załącznikiem VI, poz. 2. W przypadku każdej substancji taka informacja powinna umożliwić jej całkowitą identyfikację. Jeśli podanie informacji dotyczącej jednego parametru identyfikującego substancję lub większej ich liczby nie jest technicznie możliwe bądź nie wydaje się konieczne z naukowego punktu widzenia, należy przedłożyć stosowne uzasadnienie każdego takiego przypadku [patrz: uwagi w załączniku VI].

Zgodnie z art. 28 rozporządzenia REACH rejestracji wstępnej podlegają substancje wprowadzone, tak aby producenci i importerzy mogli skorzystać z okresu przejściowego i kontynuować swoją działalność przygotowując się do rejestracji. Na tym etapie dostarczenie kompletnej dokumentacji zgodnej z załącznikiem VI, poz. 2 nie jest konieczne. Potencjalny rejestrujący musi jedynie podać nazwę substancji lub, w stosownych przypadkach, grupy substancji, wraz z jej numerem WE oraz numerem CAS, jeśli są one dostępne.

Przegląd parametrów identyfikujących substancję określonych w załączniku IV rozporządzenia REACH przedstawiono w **tabeli 3.1**.

---

<sup>4</sup> Wykaz EINECS został opublikowany 15. czerwca 1990 r. i zawiera spis ponad 100000 substancji. W trakcie korzystania z tego wykazu stwierdzono szereg błędów (błędów drukarskich, np. niewłaściwa nazwa chemiczna, wzór, numer rejestracyjny CAS). W związku z zaistniałą sytuacją 1. marca 2002 r. opublikowano stosowną erratę. Jednakże w wykazie wciąż znajdowane są kolejne niezgodności.



**Tabela 3.1** Parametry identyfikujące substancję określone w załączniku VI, poz. 2 do rozporządzenia REACH

<b>2.</b>	<b>IDENTYFIKACJA SUBSTANCJI</b> Podane informacje dotyczące każdej substancji muszą być wystarczające do identyfikacji tej substancji. Jeśli przedstawienie informacji dotyczących jednej lub kilku pozycji nie jest technicznie możliwe lub nie wydaje się konieczne z naukowego punktu widzenia, należy wyraźnie przedstawić powody takiego stanu rzeczy.
<b>2.1</b>	<b>Nazwa lub inne dane identyfikujące każdą z substancji</b>
2.1.1	<i>Nazwa lub nazwy zgodne z nomenklaturą IUPAC lub inna międzynarodowa nazwa lub nazwy chemiczne</i>
2.1.2	<i>Inne nazwy (zwyczajowa, handlowa, skrót)</i>
2.1.3	<i>Numer substancji w wykazie EINECS lub ELINCS (jeśli są dostępne i odpowiednie)</i>
2.1.4	<i>Nazwa wg CAS i numer CAS (jeśli są dostępne)</i>
2.1.5	<i>Inne kody identyfikujące (jeśli są dostępne)</i>
<b>2.2</b>	<b>Informacje związane z wzorem cząsteczkowym i strukturalnym każdej substancji</b>
2.2.1	<i>Wzór cząsteczkowy i strukturalny (w tym zapis SMILES, jeśli jest dostępny)</i>
2.2.2	<i>Informacja o czynności optycznej substancji oraz typowych proporcjach izomerów (przestrzennych) (jeśli jest to możliwe i właściwe)</i>
2.2.3	<i>Masa cząsteczkowa lub zakres masy cząsteczkowej</i>
<b>2.3</b>	<b>Skład każdej substancji</b>
2.3.1	<i>Stopień czystości (%)</i>
2.3.2	<i>Charakter zanieczyszczeń, włączając izomery i produkty uboczne</i>
2.3.3	<i>Procentowy udział (istotnych) głównych zanieczyszczeń</i>
2.3.4	<i>Charakter dodatków (np. stabilizatorów lub inhibitorów) i rząd wielkości ich ilości (...ppm, ...%)</i>
2.3.5	<i>Dane spektralne (UV, IR, NMR, MS)</i>
2.3.6	<i>Wysokosprawny chromatogram cieczowy, chromatogram gazowy</i>
2.3.7	<i>Opis metod analitycznych lub odpowiednich odniesień literaturowych identyfikujących substancję oraz, w stosownych przypadkach, identyfikujących zanieczyszczenia i dodatki. Informacje te powinny być wystarczające do odtworzenia tych metod.</i>

## 4. WYTYCZNE DOTYCZĄCE IDENTYFIKACJI I NAZYWANIA SUBSTANCJI W SYSTEMIE REACH

### 4.1 WPROWADZENIE

Zasady identyfikacji oraz nazywania są różne dla różnych typów substancji. Ze względów praktycznych struktura niniejszego dokumentu kieruje użytkownika bezpośrednio do rozdziału, w którym znajdują się stosowne wytyczne dotyczące danej substancji. Dlatego też poniżej przedstawiono objaśnienia dotyczące różnych rodzajów substancji oraz wskazówki, jak odnaleźć rozdział, w którym substancje te zostały omówione.

W procesie identyfikacji substancji należy stosować przynajmniej te parametry, które zostały wymienione w załączniku IV, poz. 2 rozporządzenia REACH (patrz: **tabela 3.1**). Każda substancja musi być zatem zidentyfikowana za pomocą kombinacji stosownych parametrów:

- Nazwy IUPAC oraz/lub innej nazwy, a także innych parametrów identyfikujących, np. numeru CAS, numeru WE (załącznik IV, poz. 2.1);
- Informacji o budowie cząsteczkowej i strukturalnej (załącznik IV, poz. 2.2);
- Składu chemicznego (załącznik IV, poz. 2.3).

Substancja jest w pełni zidentyfikowana na podstawie swojego składu chemicznego, tożsamości chemicznej oraz zawartości każdego swojego składnika. Pomimo, iż taka jednoznaczna identyfikacja jest możliwa dla większości substancji, w przypadku niektórych nie jest ona wykonalna lub właściwa w ramach systemu REACH. W takich przypadkach należy przedłożyć inne lub dodatkowe informacje identyfikujące daną substancję.

Substancje można zatem podzielić na dwie główne grupy:

1. „Substancje dobrze określone” to substancje o określonym składzie jakościowym i ilościowym, które można w pełni zidentyfikować na podstawie parametrów identyfikujących substancję wymienionych w załączniku IV, poz. 2 rozporządzenia REACH.
2. „Substancje UVCB”: substancje o nieznanym lub zmiennym składzie, złożone produkty reakcji lub materiały biologiczne. Substancji tych nie można w pełni zidentyfikować na podstawie wyżej wymienionych parametrów.

Dozwolona zmienność składu dla substancji dobrze określonych jest ograniczona przez górną i dolną granicę zakresu(ów) koncentracji głównego(ych) składnika(ów). W przypadku substancji UVCB zmienność ta jest względnie duża oraz/lub nieprzewidywalna.

Uznaje się, że występować będą przypadki z pogranicza substancji dobrze określonych (produktów reakcji o wielu składnikach, każdy o szerokim zakresie stężenia) i substancji UVCB (produktów reakcji o zmiennym i słabo przewidywalnym składzie). Zidentyfikowanie danej substancji w najbardziej odpowiedni sposób jest obowiązkiem rejestrującego.

Zasady identyfikacji i nazewnictwa są różne dla „substancji dobrze określonych” z jednym głównym składnikiem i dla substancji posiadających więcej niż jeden główny składnik. Odmienne zasady identyfikacji i nazywania obowiązują również dla różnych substancji UVCB.

W tabelach 4.1 i 4.2 wymienione zostały podstawowe parametry identyfikujące dla przykładowych substancji różnego typu. Przykłady te zostały pogrupowane w taki sposób, aby ułatwić rozpoznanie podobieństw i różnic w procesie identyfikacji substancji.

Tabele 4.1 oraz 4.2 nie zawierają pełnego wykazu wszystkich możliwych rodzajów substancji. Nie należy traktować takiego zestawienia substancji oraz zaprezentowanych zasad identyfikacji i nazywania jako oficjalnego systemu klasyfikacji substancji, ale jako praktyczną wskazówkę, jak stosować określone zasady oraz posługiwać się niniejszym dokumentem.

**Tabela 4.1** Podstawowe parametry identyfikujące dla przykładowych substancji dobrze określonych

Cechy wspólne	Przykłady	Podstawowe parametry identyfikujące
Substancje określone na podstawie składu chemicznego <i>[Rozdział 4.2]</i>	Substancje jednoskładnikowe, np. - benzen (95%) - nikiel (99%) <i>[Rozdział 4.2.1]</i>	Skład chemiczny: jeden główny składnik $\geq 80\%$ :  - Tożsamość chemiczna głównego składnika (nazwa chemiczna, numer CAS, numer WE, itd.)  - Typowe stężenie oraz jego górna i dolna wartość
	Substancje wieloskładnikowe np. określone produkty reakcji takie jak  Mieszanina 2-, 3- i 4-chlorotoluenu (po 30%)  <i>[Rozdział 4.2.2]</i>	Skład chemiczny: mieszanina głównych składników; stężenie składników w przedziale $\geq 10 - < 80\%$ ;  - Tożsamość chemiczna każdego głównego składnika;  - Typowe stężenie oraz górna i dolna jego wartość dla każdego składnika oraz samej mieszaniny
	Substancje definiowane na podstawie innych parametrów niż skład chemiczny, np.  Grafit i diament  <i>[Rozdział 4.2.3]</i>	Skład chemiczny tak jak w przypadku substancji jedno- i wieloskładnikowych  oraz  Inne parametry fizyczne i parametry służące do scharakteryzowania substancji, takie jak np. krystalomorfologia, skład mineralogiczny, itd.

**Tabela 4.2** Podstawowe parametry identyfikujące substancję dla przykładowych substancji UVCB

Cechy wspólne		Przykłady lub przedstawiciele	Podstawowe parametry identyfikujące		
			Źródło	Proces	Inne parametry identyfikujące
Substancje UVCB (o nieznanym lub zmiennym składzie, złożone produkty reakcji lub materiały biologiczne  [Rozdział 4.3]	Materiały biologiczne (B)	Ekstrakty z materiałów biologicznych, np. naturalne aromaty, naturalne olejki, barwniki i pigmenty	- Gatunek i rodzina rośliny lub zwierzęcia  - Część rośliny/ zwierzęcia	- Ekstrakcja  - Frakcjonowanie, koncentracja, wyodrębnianie, oczyszczenie, itd.  - <u>Otrzymywanie pochodnych*</u>	- Skład znany lub rodzajowy  - Chromatogramy typu fingerprint oraz inne „odciski palca”  - Odwołanie się do wzorca  - Colour Index
		Złożone makrocząsteczki biologiczne, np. enzymy, białka, fragmenty DNA lub RNA, hormony, antybiotyki			- Standardowy wskaźnik enzymatyczny  - Kod genetyczny  - Konfiguracja przestrzenna  - Właściwości fizyczne  - Funkcja/ aktywność  - Struktura  - Sekwencja aminokwasów
		Produkty fermentacji  antybiotyki, biopolimery, mieszaniny enzymów, wywary melasowe (produkty fermentacji cukru), itp.	- Pożywka hodowlana  - Zastosowane mikro organizmy	- Fermentacja  - Wyodrębnienie produktów  - Etapy rafinacji	- Rodzaj produktów, np. antybiotyki, biopolimery, białka, itd.  - Znany skład
	Substancje chemiczne lub mineralne o słabo określonym, złożonym lub zmiennym składzie (UVC)	Masy reakcyjne o słabo przewidywalnym oraz/lub zmiennym składzie	- Materiały wyjściowe	- <u>Rodzaj reakcji chemicznej</u> , np. estyfikacja, alkilacja, uwodornienie	- Znany skład  - Chromatogramy typu fingerprint oraz inne „odciski palca”  - Odwołanie się do wzorców
		- Frakcje lub destylaty, np. substancje ropopochodne  - Gлина, np. bentonit  - Smoły	- Ropa naftowa  - Węgiel/ torf  - Gazy mineralne  - Minerale	- Frakcjonowanie, destylacja  - <u>Przemiana frakcji</u>  - Obróbka fizyczna  - Pozostałości	- Wartości graniczne  - Zakres długości łańcucha  - Stosunek ilości związków aromatycznych do alifatycznych  - Znany skład  - Standardowy wskaźnik
		Koncentraty lub wytopy, np. minerały metaliczne lub pozostałości po wytopie lub procesach metalurgicznych, np. żużel	- Rudy	- Wytop  - Obróbka cieplna  - Różne procesy metalurgiczne	- Skład znany lub rodzajowy  - Stężenie metali

\* Procesy podkreślone wskazują na syntezę nowej cząsteczki

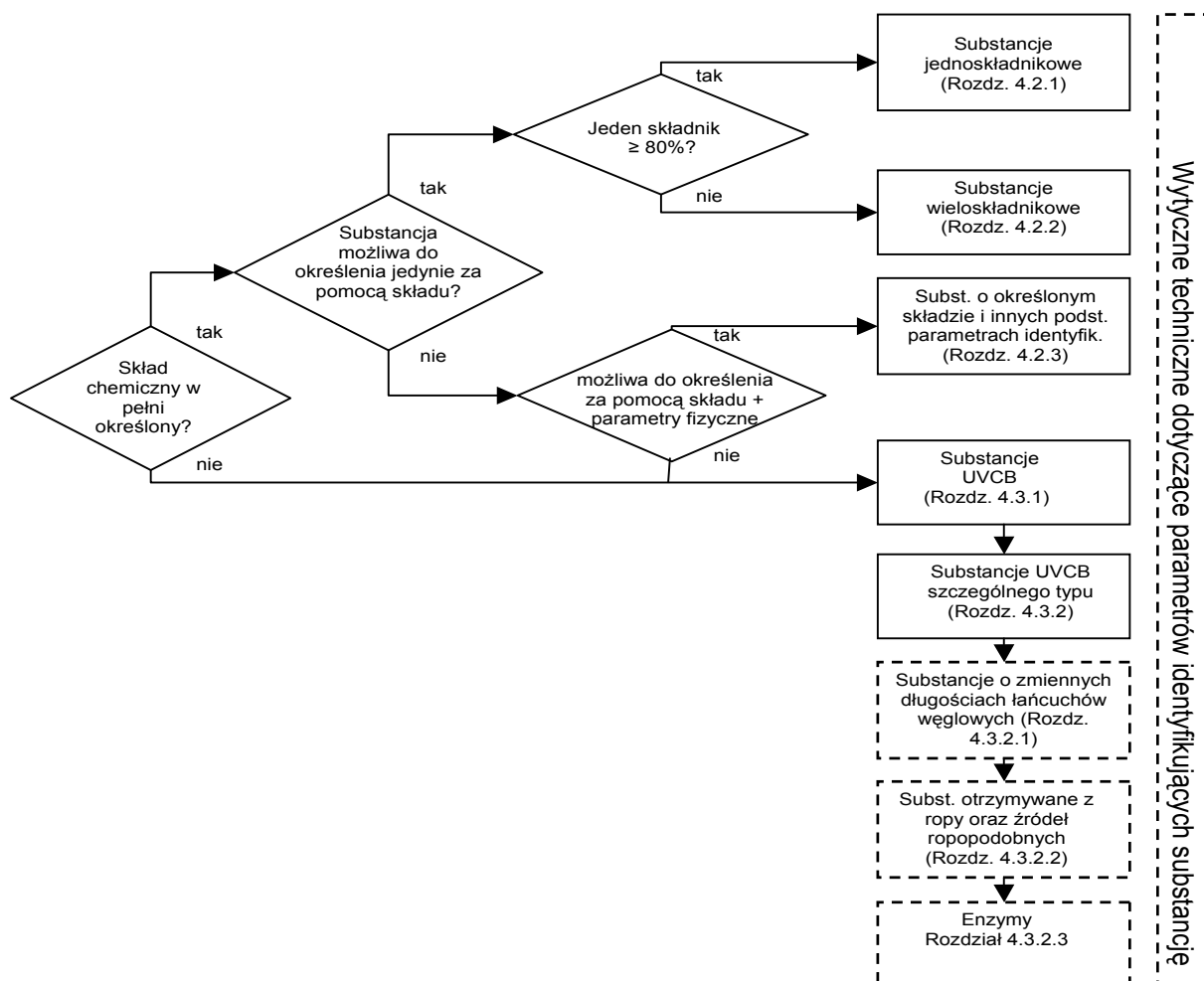
Niniejszy rozdział został podzielony na podrozdziały, które zawierają określone wytyczne dotyczące identyfikacji substancji różnego typu. Wskazówki kierujące użytkownika tekstu do odpowiednich rozdziałów znajdują się na **rysunku 4.1**.

Wskazówki na **rysunku 4.1** zostały opracowane w oparciu o przesłanki praktyczne. Rejestrujący substancję jest zobowiązany do wybrania najbardziej stosownego rozdziału i zarejestrowania substancji zgodnie z zasadami i kryteriami określonymi dla substancji danego typu.

Substancje należy definiować przede wszystkim na podstawie ich składu chemicznego oraz w pełni zidentyfikowanych składników. Tylko w przypadku gdy taka identyfikacja nie jest możliwa ze względów technicznych, należy uwzględnić inne parametry identyfikujące określone dla substancji UVCB różnego typu.

Jeśli rejestrujący substancję nie stosuje się do zasad identyfikacji substancji oraz kryteriów określonych niniejszym dokumentem, wówczas zobowiązany jest dostarczyć uzasadnienie zaistniałej sytuacji. Identyfikacja substancji powinna być przejrzysta, wytłumaczalna oraz spójna.

**Rysunek 4.1** Stosowne rozdziały oraz załączniki dokumentu zawierające określone wytyczne dla substancji różnego typu



Należy przedłożyć przegląd metod analitycznych i/lub wykaz literatury wykorzystanej w celu identyfikacji substancji, a także, w stosownych przypadkach, identyfikacji zanieczyszczeń oraz dodatków (REACH, załącznik VI, poz. 2.3.5, 2.3.6 i 2.3.7). Podane informacje powinny być wystarczające do odtworzenia zastosowanych metod.

## 4.2

### SUBSTANCJE O DOBRZE OKREŚLONYM SKŁADZIE

Nazwa substancji o dobrze określonym składzie chemicznym tworzona jest na podstawie głównego składnika (lub składników). Pewnych rodzajów substancji nie można scharakteryzować wyłącznie za pomocą składu chemicznego. W takich przypadkach identyfikacja substancji musi uwzględnić dodatkowe parametry fizyczne dotyczące struktur chemicznych.

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

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

Wszystkie składniki, z wyjątkiem dodatków, które nie są głównymi składnikami substancji jednoskładnikowej lub wieloskładnikowej są uznawane za zanieczyszczenia. Mimo, iż w niektórych sektorach stosowane jest często pojęcie „ilości śladowe”, w niniejszym dokumencie pojawia się jedynie termin „zanieczyszczenia”.

Dla składników obowiązują różne wymagania dotyczące identyfikacji substancji:

- Na podstawie nazw głównych składników tworzona jest nazwa substancji i każdy główny składnik musi być określony za pomocą wszystkich odpowiednich parametrów identyfikujących; Zanieczyszczenia nie są uwzględniane w nazwie substancji i określa się je podając tylko nazwę, numer CAS i numer WE i/lub wzór cząsteczkowy.
- Dodatki wchodzi w skład substancji (ale nie są uwzględniane przy tworzeniu nazwy) i wymagają zawsze pełnej identyfikacji.

Substancje jednoskładnikowe od wieloskładnikowych odróżnia się zgodnie z następującymi zasadami:

Substancja jednoskładnikowa to substancja, w której jeden składnik osiąga stężenie co najmniej 80% wagowych i która zawiera do 20% wagowych zanieczyszczeń.

Nazwa substancji jednoskładnikowej jest tworzona na podstawie głównego składnika.

Substancja wieloskładnikowa to substancja składająca się z kilku głównych składników na ogół o stężeniu  $\geq 10\%$  i  $< 80\%$  wagowych.

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

Powyższe zasady stanowią wytyczne. Odstępstwo od nich jest możliwe pod warunkiem przedstawienia wiarygodnego uzasadnienia.

Normalnie zanieczyszczenia obecne w stężeniu  $\geq 1\%$  powinny być wyspecyfikowane. Jednakże w każdym przypadku należy wyspecyfikować zanieczyszczenia istotne dla klasyfikacji danej substancji i/lub oceny PBT (trwałości, zdolności do biokumulacji i toksyczności)<sup>5</sup>. Zasadniczo informacje o składzie substancji powinny być kompletne w 100%.

<sup>5</sup> Więcej informacji na temat oceny PBT i stosownych stężeń dopuszczalnych podano w RIP 3.2 Poradnik dotyczący wymogów informacyjnych oraz oceny bezpieczeństwa chemicznego

W rozporządzeniu REACH oraz w niniejszym dokumencie dodatki oznaczają środki stabilizujące potrzebne do zachowania stabilności substancji. Dodatki są zatem niezbędnym składnikiem danej substancji branej pod uwagę przy tworzeniu bilansu masowego. Jednakże poza definicją stosowaną w systemie REACH oraz w niniejszym dokumencie pojęcie „dodatek” jest także stosowane w odniesieniu do celowo dodanych substancji o odmiennym działaniu, np. regulatorów pH oraz środków barwiących. Takie celowo dodane substancje nie stanowią części substancji jako takiej i dlatego nie są uwzględniane w bilansie masowym.

Zgodnie z definicją stosowaną w REACH, preparaty to celowe mieszaniny substancji, których w konsekwencji nie można uznawać za substancje wieloskładnikowe<sup>6</sup>.

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

## 4.2.1 Substancje jednoskładnikowe

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

### 4.2.1.1 Konwencja nazywania

Nazwa substancji jednoskładnikowej tworzona jest na podstawie nazwy głównego jej składnika. Nazwa zasadniczo powinna zostać podana w języku angielskim zgodnie z zasadami stosowanymi przez IUPAC (patrz: załącznik I). Ponadto możliwe jest dodatkowo przedłożenie innych uznanych nazw międzynarodowych.

### 4.2.1.2 Parametry identyfikujące

Substancja jednoskładnikowa jest identyfikowana na podstawie nazwy oraz innych parametrów (w tym wzoru cząsteczkowego i strukturalnego) identyfikujących główny składnik oraz tożsamość chemiczną zanieczyszczeń oraz/ lub dodatków, a także na podstawie ich typowego stężenia oraz zakresu(ów) stężenia, potwierdzanych za pomocą informacji spektroskopowych i analitycznych.

Główny składnik	Zawartość (%)	Zanieczyszczenie	Zawartość (%)	Substancja zarejestrowana
m-ksylen	91	o-ksylen	5	m-xylene
o-ksylen	87	m-ksylen	10	o-xylene

Zwykle główny składnik występuje w stężeniu  $\geq 80\%$  i powinien być w pełni scharakteryzowany za pomocą wszystkich wspomnianych parametrów. Zanieczyszczenia obecne w stężeniu  $\geq 1\%$  należy określić za pomocą przynajmniej jednego z następujących parametrów identyfikujących: nazwy chemicznej (nazwa IUPAC i/lub CAS), numeru CAS i numeru WE oraz/lub wzoru cząsteczkowego. W każdym przypadku należy określić zanieczyszczenia wpływające na klasyfikację substancji i/lub ocenę PBT<sup>7</sup> niezależnie od ich stężenia.

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

<sup>6</sup> Zgodnie z Globalnie Zharmonizowanym Systemem Klasyfikacji i Oznakowania „preparaty” będą nazywane „mieszaninami”.

<sup>7</sup> Więcej informacji na temat oceny PBT i stosownych stężeń dopuszczalnych podano w odpowiedniej sekcji RIP 3.2 Poradnik dotyczący wymogów informacyjnych oraz oceny bezpieczeństwa chemicznego

„Regułę 80%” stosuje się w celu zgłoszenia substancji nowych (dyrektywa 67/548/EWG). Można ją więc traktować jako zasadę opartą o przesłanki praktyczne. Odstępstwo od reguły 80% należy jednakże uzasadnić. Do możliwych przykładów uzasadnionego odstępstwa zaliczamy następujące przypadki:

- Stężenie składnika wynosi  $< 80\%$ , ale możliwe jest wykazanie, iż substancja posiada podobne właściwości fizykochemiczne oraz taką samą ocenę zagrożenia jak inne substancje jednoskładnikowe o tym samym składzie, które spełniają regułę 80%.
- Zakres stężenia dla głównego składnika i zanieczyszczeń jest zbieżny z kryterium 80%, a stężenie głównego składnika jedynie sporadycznie wynosi  $\leq 80\%$ .

Przykłady									
Subst.	Główny składnik	Górna granica (%)	Typowa zawartość (%)	Dolna granica (%)	Zanieczyszczenie	Górna granica (%)	Typowa zawartość (%)	Dolna granica (%)	Zarejestrowana substancja
1	o-ksylen	90	$> 80$	65	m-ksylen	35	15	10	o-xylene
2	o-ksylen m-ksylen	90 35	85 15	65 10	p-ksylen	5	4	1	o-xylene

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

Wytyczne dotyczące opisu substancji jednoskładnikowych w IUCLID 5 znajdują się w rozdziale 8.2.1.

#### 4.2.1.3 Informacje analityczne

Aby potwierdzić strukturę danej substancji jednoskładnikowej należy podać stosowne dane spektralne. Jest kilka odpowiednich metod spektroskopowych, w szczególności spektroskopia absorpcyjna w ultrafiolecie i zakresie widzialnym (UV/VIS), spektroskopia w podczerwieni (IR), magnetyczny rezonans jądrowy (NMR) i spektroskopia masowa (MS). W przypadku substancji nieorganicznych bardziej odpowiednia może być analiza rentgenowska dyfrakcyjna (XRD), analiza rentgenowska fluorescencyjna (XRF) albo spektroskopia absorpcji atomowej (AAS).

Dla potwierdzenia składu substancji należy stosować metody chromatograficzne takie jak chromatografia gazowa (GC) lub wysokosprawna chromatografia cieczowa (HPLC). Można stosować też inne odpowiednie metody rozdziału i analizy składników.

Metody spektroskopowe i analityczne ulegają ciągłej zmianie. Przedłożenie stosownych danych spektralnych i analitycznych jest zatem obowiązkiem rejestrującego.

#### 4.2.2 Substancje wieloskładnikowe

Substancja wieloskładnikowa to substancja określana na podstawie swojego składu ilościowego, gdzie więcej niż jeden główny składnik występuje w stężeniu  $\geq 10\%$  wagowych i  $< 80\%$  wagowych. Substancja wieloskładnikowa jest rezultatem procesu wytwórczego<sup>8</sup>.

<sup>8</sup> Różnica pomiędzy preparatem a substancją wieloskładnikową polega na tym, że preparat uzyskuje się przez mieszanie dwóch lub większej ilości substancji bez reakcji chemicznej, natomiast substancja wieloskładnikowa jest rezultatem reakcji chemicznej.



W systemie REACH konieczna jest rejestracja substancji takiej jaką uzyskuje się w produkcji. Jeśli wytwarzana jest substancja wieloskładnikowa, to rejestrować należy substancję wieloskładnikową<sup>9,10</sup>. Decyzja w jakim stopniu poszczególne etapy produkcji substancji obejmuje definicja „wytwarzania” zależy od konkretnego przypadku. Wszystkie substancje uprzednio ujęte w systemie EINECS (np. substancje wieloskładnikowe były ujęte jeśli wszystkie pojedyncze składniki były na liście EINECS) kwalifikowane byłyby jako substancje wprowadzone. Nie ma potrzeby badania substancji jeśli jej charakterystykę zagrożenia można w sposób zadowalający opisać za pomocą informacji o poszczególnych składnikach.

#### 4.2.2.1 Konwencja nazywania

Substancja wieloskładnikowa nazywana jest masą reakcyjną głównych składników substancji jako takiej, tzn. nie materiałów wyjściowych potrzebnych do wyprodukowania tej substancji. Nazwa tworzona jest według następującego wzoru: „Reaction mass of [nazwy głównych składników]”. Nazwy substancji wymieniane są w kolejności typowego stężenia procentowego począwszy od stężenia najwyższego. Nazwa substancji jest tworzona jedynie na podstawie nazw głównych składników występujących w stężeniu  $\geq 10\%$ . Nazwę należy podawać w języku angielskim zgodnie z zasadami nomenklatury IUPAC. Dodatkowo możliwe jest przedłożenie innych uznawanych nazw międzynarodowych.

#### 4.2.2.2 Parametry identyfikujące

Substancja wieloskładnikowa identyfikowana jest na podstawie nazwy chemicznej oraz parametrów identyfikujących daną substancję, a także ilościowego i jakościowego składu chemicznego (tożsamości chemicznej, włącznie z wzorem cząsteczkowym i strukturalnym) składników i jest potwierdzana za pomocą informacji analitycznych.

Przykład				
Główny składnik	Zawartość (%)	Zanieczyszczenie	Zawartość (%)	Zarejestrowana substancja
m-ksylen	50	p-ksylen	5	Reaction mass of m-xylene and o-xylene
o-ksylen	45			

Substancje wieloskładnikowe posiadają znany skład chemiczny, a ich identyfikacja odbywa się na podstawie więcej niż jednego głównego składnika. Ponadto skład chemiczny danej substancji jest przewidywalny pod względem typowych wielkości i zakresów. Główne składniki muszą zostać w pełni scharakteryzowane na podstawie wszelkich stosownych parametrów. Suma typowych stężeń głównych składników ( $\geq 10\%$ ) i zanieczyszczeń ( $< 10\%$ ) musi wynieść 100%.

W celu właściwego stosowania reguły 10% i 80%, nie należy uwzględniać w bilansie masowym substancji dodanych celowo, np. regulatorów pH lub środki barwiących.

Zanieczyszczenia obecne w stężeniu  $\geq 1\%$  należy określić na podstawie co najmniej jednego z następujących parametrów identyfikujących: nazwy chemicznej, numeru CAS, numeru WE i/ lub wzoru cząsteczkowego. W każdym przypadku należy określić zanieczyszczenia istotne dla klasyfikacji substancji i/lub oceny PBT, niezależnie od ich stężenia.

<sup>9</sup> Szereg substancji nie podlega rejestracji w systemie REACH (np. substancje wymienione w załączniku IV)

<sup>10</sup> Takie postępowanie nie dotyczy szeregu określonych substancji, takich jak minerały (więcej szczegółów - patrz: rozdział 7.5)

Przykład								
Główny składnik	Górna granica (%)	Typowa zawartość (%)	Dolna granica (%)	Zanieczyszczenie	Górna granica (%)	Typowa zawartość (%)	Dolna granica (%)	Zarejestrowana substancja
anilina	90	75	65	fenantren	5	4	1	Reaction mass of aniline and naphthalene
naftalen	35	20	10					

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

Czasami warto rozpatrywać daną substancję jako substancję wieloskładnikową, nawet jeśli stężenie jednego składnika wynosi  $\geq 80\%$ . Przykładowo niech substancja zawiera dwa składniki – jeden w stężeniu 85% i drugi w stężeniu 10%, reszta to zanieczyszczenia. Oba składniki mają wpływ i decydujące znaczenie na pożądany skutek techniczny tej substancji. Dlatego też w takim przypadku substancję taką można określić jako dwuskładnikową pomimo, iż zawartość jednego składnika wynosi > 80%.

Wytyczne dotyczące opisu substancji wieloskładnikowych w IUCLID 5 znajdują się w rozdziale 8.2.2.

#### 4.2.2.3 Informacje analityczne

W przypadkach gdy dane spektralne dostarczają informacji o składzie substancji wieloskładnikowej, to informacje te należy przedłożyć. Jest kilka odpowiednich metod spektroskopowych, w szczególności spektroskopia absorpcyjna w ultrafiolecie i zakresie widzialnym (UV/VIS), spektroskopia w podczerwieni (IR), magnetyczny rezonans jądrowy (NMR) i spektroskopia masowa (MS). W przypadku substancji nieorganicznych bardziej odpowiednia może być analiza rentgenowska dyfrakcyjna (XRD), analiza rentgenowska fluorescencyjna (XRF) albo spektroskopia absorpcji atomowej (AAS).

Dla potwierdzenia składu substancji należy stosować metody chromatograficzne takie jak chromatografia gazowa (GC) lub wysokosprawna chromatografia cieczowa (HPLC). Można stosować też inne odpowiednie metody rozdziału i analizy składników.

Metody spektroskopowe i analityczne ulegają ciągłej zmianie. Przedłożenie stosownych danych spektralnych i analitycznych jest zatem obowiązkiem rejestrującego.

#### 4.2.2.4 Rejestracja poszczególnych składników substancji wieloskładnikowej

Na ogół zapis tożsamości substancji do celów rejestracji lub rejestracji wstępnej powinien być zgodny ze schematem stosowanym dla substancji wieloskładnikowych (tj. rejestracji substancji wieloskładnikowej). Odstępstwem od tego postępowania może być, o ile jest to uzasadnione, rejestracja poszczególnych składników. Odstępstwo od procedury standardowej w celu identyfikacji (i ewentualnie rejestracji) substancji na podstawie jej poszczególnych składników jest możliwe gdy

- nie ma zmniejszenia wymagań odnośnie informacji;
- istnieją dostateczne dane uzasadniające procedurę rejestracji poszczególnych składników, tzn. że procedura ta nie powinna zwykle powodować konieczności badań dodatkowych (na kręgowcach) w stosunku do procedury standardowej;
- rejestracja poszczególnych składników podwyższa efektywność (tzn. unika się licznych rejestracji substancji złożonych z tych samych składników);

- przekazane są informacje o składzie poszczególnych mas reakcyjnych.

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

Substancja C

- tonaż 600
- wymagania odnośnie danych muszą być spełnione przy ilości >1000 ton (załącznik X)

Substancja D

- tonaż 600
- wymagania odnośnie danych muszą być spełnione przy ilości >1000 ton (załącznik X)

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

- dodać ilości wszystkich indywidualnych składników (zależnie od zawartości w substancji)
- odnieść do największej ilości substancji zawierającej dany składnik

Wymagania odnośnie informacji należy ustalić na podstawie najwyższego wyniku. Jako tonaż należy podawać wynik sumowania tonażu każdego oddzielnego składnika. Dalej przedstawiono uproszczone przykłady ilustrujące praktyczną realizację takiej procedury:

Przykład 1:

Substancja wieloskładnikowa „C+D+E” powstaje w wyniku procesu prowadzonego w całości przez jeden podmiot i daje w rezultacie różne substancje:

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

Substancja 2: 50% C i 50 % D, 500 t/rok

Również w tym przypadku produkt reakcji stanowi punkt wyjścia: obie substancje należy zarejestrować jako substancje wieloskładnikowe. Jeśli wybierze się procedurę rejestracji indywidualnych składników<sup>11</sup>, to sytuacja będzie następująca:

Raportowanie substancji D w tym przypadku oznacza:

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

---

<sup>11</sup> Przykład ten ma na celu tylko zilustrować ustalenie wymagań odnośnie informacji i raportowania ilości. Nie przesądza on o zasadności tego przypadku.

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

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

#### Przykład 2

Substancja wieloskładnikowa „G+H+I” powstaje w wyniku procesu prowadzonego w całości przez jeden podmiot i daje w rezultacie różne substancje:

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

Substancja 4: 60% G i 40 % H, 90 t/rok

Raportowanie substancji G:

Tonaż:  $(65\% * 900) + (60\% * 90) = 112,5$  t/rok

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

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

Oprócz ustalenia wspomnianego wymagania odnośnie informacji, innym zagadnieniem jest liczba nowych badań (na kręgowcach) które trzeba wykonać. Przed podjęciem decyzji co do strategii postępowania potencjalni rejestrujący muszą rozważyć czy przeprowadzono już dostateczną liczbę badań (na kręgowcach) i czy proponowana elastyczność oznaczać będzie zmniejszenie czy zwiększenie liczby badań (na kręgowcach). Wybrać należy strategię w której unika się nowych badań (na kręgowcach).

W przypadku wątpliwości standardowym sposobem zapisu tożsamości substancji do celów rejestracji powinna zawsze być identyfikacja substancji w postaci w jakiej jest wytwarzana.

#### 4.2.3 Substancje o określonym składzie chemicznym oraz inne podstawowe parametry identyfikujące

Całkowita identyfikacja niektórych substancji (np. minerałów nieorganicznych), które można określić na podstawie składu chemicznego, wymaga zastosowania dodatkowych parametrów. Substancje te mogą być substancjami jednoskładnikowymi bądź wieloskładnikowymi, jednakże do jednoznacznego ustalenia ich tożsamości, poza przedstawionymi powyżej parametrami identyfikującymi substancję, konieczne są także inne dane.

##### **Przykład**

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

Obecny postęp w nanotechnologii i zrozumienie zagrożeń może w przyszłości wymagać dodatkowych informacji na temat tych substancji. Aktualny stan nie jest na tyle zaawansowany aby móc zamieścić w niniejszym dokumencie wytyczne do identyfikacji substancji w postaci nanomateriałów.

#### 4.2.3.1 Konwencja nazywania

Zasadniczo nazwy tych substancji tworzone są zgodnie z zasadami obowiązującymi dla substancji jednoskładnikowych (rozdział 4.2.1) oraz wieloskładnikowych (rozdział 4.2.2).

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

#### 4.2.3.2 Parametry identyfikujące

Substancje te są identyfikowane zgodnie z zasadami obowiązującymi dla substancji jednoskładnikowych (rozdział 4.2.2) lub wieloskładnikowych (rozdział 4.2.3). Konieczność uwzględnienia dodatkowych, stosownych parametrów identyfikujących zależy od rodzaju substancji. Przykładem takich dodatkowych, podstawowych parametrów identyfikujących substancję mogą być: skład pierwiastkowy oraz dane spektralne, struktura krystaliczna określona za pomocą dyfrakcji rentgenowskiej (XRD), maksima absorpcji w paśmie podczerwieni, wskaźnik pęcznienia, zdolność wymiany kationowej lub inne właściwości fizykochemiczne.

W przypadku minerałów należy zatem uwzględnić wyniki analizy składu pierwiastkowego oraz dane spektralne w celu identyfikacji składu mineralogicznego oraz struktury krystalicznej, które są następnie potwierdzane przez charakterystyczne właściwości fizykochemiczne minerału takie jak struktura krystaliczna (określona za pomocą dyfrakcji rentgenowskiej), kształt, twardość, zdolność pęcznienia, gęstość i/lub powierzchnia właściwa.

Ponieważ minerały posiadają charakterystyczne właściwości fizykochemiczne uzupełniające ich identyfikację, dla określonych minerałów można podać przykłady stosownych, dodatkowych parametrów: np. bardzo niską twardość dla talku, zdolność pęcznienia dla bentonitu, kształty diatomitu, wysoką gęstość barytu oraz powierzchnię właściwą (oznaczoną za pomocą adsorpcji azotu).

Wskazówki dotyczące opisu substancji o określonym składzie chemicznych oraz innych podstawowych parametrów identyfikujących znajdują się w rozdziale 8.2.3.

#### 4.2.3.3 Informacje analityczne

W przypadku tych substancji należy przedstawić takie same informacje analityczne jak w przypadku substancji jednoskładnikowych (rozdział 4.2.1) oraz wieloskładnikowych (rozdział 4.2.2). Jeśli dane spektralne oraz chromatogramy GC lub HPLC nie są wystarczające w celu zidentyfikowania danej substancji, należy podać informacje uzyskane w wyniku zastosowania innych technik analitycznych, np. dyfrakcji rentgenowskiej dla minerałów, analizy pierwiastkowej itp. Podstawowym kryterium jest przedłożenie informacji wystarczających do potwierdzenia struktury substancji.

### 4.3

#### SUBSTANCJE UVCB

Pełna identyfikacja substancji o słabo określonym lub zmiennym składzie, złożonych produktów reakcji i materiałów biologicznych (zwanymi również substancjami UVCB) na podstawie ich składu chemicznego nie jest możliwa z następujących przyczyn:

- liczba składników jest względnie duża i/lub
- skład jest w znacznej części nieznanymi i/lub
- zmienność składu jest względnie duża lub trudno przewidywalna.

W celu identyfikacji substancji UVCB należy zatem uwzględnić, poza informacjami dotyczącymi ich składu chemicznego, również inne rodzaje informacji.

**Tabela 4.2** ukazuje, iż podstawowe parametry identyfikujące różnego rodzaju substancje UVCB odnoszą się do źródła pochodzenia danej substancji i zastosowanego procesu, bądź też należą do grupy „inne podstawowe parametry identyfikujące” (np. „chromatogramy typu fingerprint oraz inne <<odciski palca>> substancji”). Liczba i rodzaj danych identyfikujących substancję podane w **tabeli 4.2** wskazuje na ich różnorodność. Informacje te nie są jednakże wyczerpujące. W przypadku gdy skład chemiczny np. złożonego produktu reakcji lub substancji pochodzenia biologicznego jest znany, substancję taką należy zidentyfikować za pomocą metod stosowanych w identyfikacji substancji jednoskładnikowej lub wieloskładnikowej. Jeśli substancja została zdefiniowana jako „substancja UVCB” oznacza to, iż każda istotna zmiana źródła pochodzenia lub zastosowanego procesu może się przyczynić do powstania innej substancji, którą należy ponownie zarejestrować. Jeśli masa reakcyjna została zidentyfikowana jako „substancja wieloskładnikowa”, substancję taką można pozyskiwać z innego źródła i/lub za pośrednictwem innych procesów pod warunkiem, iż skład substancji końcowej jest zgodny z określonym dla niej zakresem stężeń. W takim przypadku nowa rejestracja nie jest konieczna. Ogólne wytyczne dotyczące substancji UVCB zostały przedstawione w rozdziale 4.3.1, a szczegółowe wytyczne dotyczące substancji o zróżnicowanych długościach łańcuchów węglowych, substancji pozyskiwanych z ropy naftowej oraz źródeł ropopodobnych i enzymów jako substancji UVCB szczególnego rodzaju – w rozdziale 4.3.2.

#### 4.3.1

##### Ogólne wytyczne dotyczące substancji UVCB

Niniejszy rozdział zawiera ogólne wytyczne dotyczące stosowania niektórych podstawowych parametrów identyfikujących poza parametrami określonymi w załączniku IV (poz. 2) REACH.

#### 4.3.1.1

##### Informacje dotyczące składu chemicznego

Gdy identyfikacja wszystkich składników substancji UVCB nie jest możliwa, to nie można tej substancji jednoznacznie określić na podstawie nazw IUPAC tych składników. Gdy skład substancji UVCB jest zmienny, to substancję taką można scharakteryzować tylko w sposób ogólny. Z powodu braku rozróżnienia pomiędzy składnikami a zanieczyszczeniami, w odniesieniu do substancji UVCB nie należy stosować pojęć „główne składniki” oraz „zanieczyszczenia”. Niemniej jednak należy określić skład chemiczny oraz nazwy składników, jeśli są one znane. Opis składu chemicznego można przedstawić w sposób bardziej ogólny, np. „liniowe kwasy tłuszczowe C8-C16” lub „etoksyłany alkoholi C10-14 z 4-10 jednostkami oksyetylenowymi”. Ponadto dane dotyczące składu chemicznego można podać w oparciu o znane próbki odniesienia lub wzorce pierwotne. W wielu przypadkach można również zastosować indeksy oraz istniejące kody. Inne ogólne informacje dotyczące składu substancji mogą zawierać tzw. chromatogramy typu fingerprint – obrazy chromatograficzne lub spektralne ukazujące charakterystyczny wzorec rozmieszczenia pików.

Wszystkie znane składniki substancji UVCB obecne w stężeniu  $\geq 10\%$  należy określić co najmniej za pomocą ich angielskiej nazwy IUPAC oraz numeru CAS. Ponadto należy podać typowe stężenia i przedziały stężeń znanych składników. W każdym przypadku należy zawsze zidentyfikować składniki mające wpływ na klasyfikację i/lub ocenę PBT danej substancji, niezależnie od ich stężenia.

---

<sup>12</sup> Więcej informacji na temat oceny PBT i stosownych stężeń dopuszczalnych podano w odpowiedniej sekcji RIP 3.2 Poradnik dotyczący wymogów informacyjnych oraz oceny bezpieczeństwa chemicznego

Nieznane składniki, jeśli to możliwe, identyfikowane są na podstawie ogólnego opisu ich charakteru chemicznego. Dodatki charakteryzowane są w pełni tak jak w przypadku substancji dobrze określonych.

#### 4.3.1.2 Podstawowe parametry identyfikujące – nazwa, źródło pochodzenia i proces

Ponieważ sam skład chemiczny nie jest wystarczający, aby zidentyfikować daną substancję UVCB, należy podać jej nazwę, źródło pochodzenia oraz najistotniejsze etapy jej wytwarzania. Istotnymi parametrami identyfikującymi, czy to ogólnymi (np. temperatura wrzenia) czy istotnymi dla określonych grup substancji (np. aktywność katalityczna w przypadku enzymów), mogą być również inne właściwości substancji.

### 1. Konwencja nazywania

Nazwa substancji UVCB to na ogół kombinacja źródła pochodzenia oraz procesu zapisywana w sposób następujący: najpierw źródło pochodzenia, a potem proces(y).

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

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

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

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

Przykłady	
Numer WE	Nazwa WE
232-341-8	Nitrous acid, reaction products with 4-methyl-1,3-benzenediamine hydrochloride
263-151-3	Fatty acids, coco, reaction products with diethylenetriamine
400-160-5	Reaction products of tall-oil fatty acids, diethanolamine and boric acid
428-190-4	Reaction product of: 2,4-diamino-6-[2-(2-methyl-1H-imidazol-1-yl)ethyl]-1,3,5-triazine and cyanuric acid

W niniejszym dokumencie ogólne nazwy produktów reakcji zapisywane są w sposób następujący: „Reaction product of [nazwy materiałów wyjściowych]”. Zasadniczo nazwy należy podawać w języku angielskim zgodnie z zasadami nomenklatury IUPAC. Dodatkowo można przedłożyć inne uznawane określenia międzynarodowe. Zaleca się zastąpienie w nazwie słowa „reaction” (reakcja) stosownym rodzajem reakcji np. „esterification” (ang. estryfikacja) lub „salt formation” (ang. tworzenie soli) itd. (patrz poniżej: wytyczne dla czterech podklas substancji UVCB).

## 2. Źródło

Można rozróżnić dwa rodzaje źródła pochodzenia:

### 2.1. Źródła o charakterze biologicznym

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

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

### 2.2 Źródła chemiczne lub mineralne

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

## 3. Proces

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

W przypadku niektórych substancji, np. pochodnych chemicznych, proces należy opisać jako kombinację rafinacji i syntezy.

### - Synteza

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

W przypadku substancji będących wynikiem syntezy, które posiadają nieokreślony skład chemiczny, głównymi parametrami identyfikującymi są materiały wyjściowe oraz specyfikacja reakcji, tzn. podanie typu reakcji chemicznej. Typ reakcji chemicznej wskazuje, jakie cząstki mogą wchodzić w skład substancji. Istnieje kilka rodzajów końcowej reakcji chemicznej m.in.: hydroliza, estryfikacja, alkilowanie, chlorowanie, itp. Ze względu na to, iż parametry



te dostarczają jedynie ogólnych informacji o potencjalnie wyprodukowanych substancjach, w wielu przypadkach w celu pełnego scharakteryzowania i identyfikacji substancji należy również przedłożyć chromatogram typu fingerprint.

<b>Przykłady</b>	
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa WE</b>
294-801-4	Linseed oil, epoxidised, reaction products with tetraethylenepentamine
401-530-9	Reaction product of (2-hydroxy-4-(3-propenoxy)benzophenone and triethoxysilane) with (hydrolysis product of silica and methyltrimethoxysilane)

- Rafinacja

Rafinacji można poddawać substancje występujące w przyrodzie oraz substancje pochodzenia mineralnego. Jest to proces, który nie wpływa na zmianę tożsamości chemicznej składników, ale powoduje zmianę stężenia składników. Przykładem rafinacji jest obróbka na zimno tkanki roślinnej, a następnie ekstrakcja za pomocą alkoholu.

Rafinację można dokładniej zdefiniować w procesach takich jak ekstrakcja. Identyfikacja danej substancji zależy od rodzaju zachodzącego procesu:

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

<b>Przykłady</b>	
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa WE</b>
408-250-6	Organotungsten compound concentrate (reaction products of tungsten hexachloride with 2-methylpropan-2-ol, nonylphenol and pentane-2-4-dione)

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

<b>Przykłady</b>	
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa WE</b>
283-659-9	Tin, melting residues
	<b>Opis WE</b>
	Substancja powstała w wyniku stosowania i produkcji cyny oraz jej stopów pozyskiwanych ze źródeł pierwotnych i wtórnych łącznie z recykulowanymi półproduktami zakładowymi. Substancja ta składa się głównie ze związków cyny i może zawierać pozostałości innych metali nieżelaznych i ich związki.
293-693-6	Soybean meal, protein extn., residue
	<b>Opis WE</b>
	Produkt uboczny zawierający głównie węglowodany, otrzymywany w wyniku ekstrakcji etanolem odtłuszczonej soi.

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

#### Przykłady

- o Roślina jest najpierw poddawana ekstrakcji, otrzymany ekstrakt jest następnie destylowany, a destylowana frakcja ekstraktu roślinnego jest wykorzystywana w celu otrzymania substancji pochodnej. Pozyskiwana w ten sposób substancja może być poddawana dalszemu oczyszczeniu. Zdarza się, iż scharakteryzowanie takiego rafinowanego produktu na podstawie składu chemicznego staje się ostatecznie możliwe i w takiej sytuacji nie ma potrzeby identyfikować danej substancji jako UVCB. Jeśli jednakże produkt ten uznaje się za substancję UVCB, obróbkę metodą łączoną można wówczas opisać jako „rafinowana pochodna chemiczna destylowanej frakcji ekstraktu roślinnego”.

Jeśli dalsza obróbka ekstraktu polega wyłącznie na pozyskiwaniu pochodnej metodami fizycznymi, wówczas zmieni się skład, ale bez udziału zamierzonej syntezy nowych cząsteczek. Tym niemniej zmiana składu daje w efekcie inną substancję, np. destylat lub osad ekstraktu roślinnego.

- o W procesie wytwarzania produktów ropopochodnych często stosowana jest kombinacja procesu otrzymywania pochodnych oraz frakcjonowania. Na przykład w wyniku destylacji ropy naftowej, po której stosuje się kraking, powstaje frakcja materiału wyjściowego oraz nowe cząsteczki. W takiej sytuacji należy więc zidentyfikować oba rodzaje procesów bądź scharakteryzować destylat jako materiał wyjściowy krakingu. Odnosi się to w szczególności do pochodnych ropy naftowej, które otrzymywane są często w wyniku kombinacji procesów. W celu określenia tożsamości substancji ropopochodnych można jednakże zastosować osobny system identyfikacji (patrz: rozdział 4.3.2.2).

Ponieważ pochodna chemiczna ekstraktu nie zawiera tych samych składników co ekstrakt wyjściowy, należy ją uznać za substancję odmienną. W konsekwencji zastosowania tej zasady nazwa i opis utworzone w procesie identyfikacji mogą odbiegać od nazwy i opisu stosowanego w wykazie EINECS. W momencie tworzenia wykazu EINECS jeden wpis obejmował często ekstrakty otrzymywane w wyniku różnych procesów, zastosowania różnych rozpuszczalników, a nawet pochodne fizyczne i chemiczne. W ramach systemu REACH substancje te można rejestrować jako jedną substancję, pod warunkiem, iż niebezpieczne właściwości tych substancji są jednakowe i umożliwiają taką samą klasyfikację danej substancji. Jednakże w pewnych przypadkach (np. obszerny opis substancji w wykazie EINECS) różne substancje mogą być identyfikowane za pomocą jednego numeru EINECS.

#### **4 Pozostałe parametry identyfikujące substancję**

Zgodnie z załącznikiem IV, poz. 2 rozporządzenia REACH, substancję UVCB należy identyfikować za pomocą nazwy chemicznej, źródła i specyfikacji procesu, a także wszelkich innych stosownych danych.

Inne parametry identyfikujące mogą być szczególnie istotne w przypadku substancji UCVB określonego typu. Do dodatkowych parametrów identyfikujących zaliczyć można:

- ogólny opis składu chemicznego;
- chromatogram typu fingerprint oraz inne „odciski palca” substancji;
- dokument odniesienia (np. ISO);
- parametry fizykochemiczne (np. temperatura wrzenia);
- numer Colour Index (Indeks barw);
- numer wg AISE.

Szczegółowe wytyczne dotyczące zasad i kryteriów, sposobów wykorzystania nazwy, danych o źródle i procesie w celu identyfikacji substancji UVCB pozyskiwanych z różnych źródeł i w wyniku różnych procesów znajdują się w dalszej części rozdziału. Poniżej zaprezentowane zostały cztery podtypy substancji UVCB opisane za pomocą kombinacji biologicznego lub chemicznego/mineralnego źródła pochodzenia oraz zastosowanych procesów (synteza lub rafinacja).

Wytyczne dotyczące sposobów opisu substancji w IUCLID 5 znajdują się w rozdziale 8.2.4.

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

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

Do tego podtypu substancji UVCB można również zaliczyć produkty fermentacji. Przykładowo wywar melasowy jest produktem fermentacji cukru zawierającym, w porównaniu z cukrem, wiele różnych składników. Jeśli dzięki dalszemu oczyszczaniu produktów fermentacji możliwa może stać się całkowita identyfikacja substancji na podstawie składu chemicznego, wówczas takich substancji nie należy identyfikować jako substancji UVCB.

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

Aby zidentyfikować substancję, należy podać końcowy etap procesu i/lub każdy inny etap procesu mający wpływ na chemiczną tożsamość substancji.

Opis procesu chemicznego należy przedstawić wskazując na jego rodzaj (estryfikacja, hydroliza alkaliczna, alkilowanie, chlorowanie, reakcja substytucji itd.) oraz odpowiednie warunki przebiegu danego procesu.

Opis procesu biochemicznego można przedłożyć w formie opisu rodzajowego reakcji katalizowanej podając nazwę enzymu katalizującego daną reakcję.

W przypadku substancji otrzymywanych w wyniku fermentacji lub hodowli (tkankowych) należy określić drobnoustroje fermentacyjne, rodzaj oraz ogólne warunki fermentacji (okresowa lub ciągła, tlenowa, beztlenowa, anoksyczna, temperatura, pH), a także dalsze etapy procesu zastosowane w celu wyodrębnienia produktów fermentacji takie jak np. wirowanie, wytrącanie, ekstrakcja itd. Jeśli substancje te poddawane są dalszej rafinacji, rezultatem takiego procesu może być frakcja, koncentrat lub pozostałość. Takie przetworzone substancje są identyfikowane na podstawie dodatkowego opisu dalszych etapów procesu.

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

Substancje UVCB pochodzenia chemicznego lub mineralnego otrzymywane w procesie, w którym syntetyzowane są nowe cząsteczki to „produkty reakcji”. Przykładami produktów reakcji chemicznej są produkty estryfikacji, alkilowania lub chlorowania. Reakcje biochemiczne z udziałem izolowanych enzymów należą do reakcji chemicznych szczególnego typu. W przypadku zastosowania złożonego procesu biochemicznego syntezy z wykorzystaniem całych mikroorganizmów wskazane jest rozpatrywanie otrzymanej substancji jako produktu fermentacji i zidentyfikowanie jej na podstawie procesu fermentacji i gatunku drobnoustrojów fermentacyjnych, a nie na podstawie materiałów wyjściowych (patrz: substancje UVCB podtypu 4).

Nie każdy produkt reakcji powinien zostać automatycznie scharakteryzowany jako substancja UVCB. Jeśli dany produkt reakcji można zdefiniować w sposób wystarczający na podstawie składu chemicznego (przy uwzględnieniu pewnej zmienności składu), zalecana jest identyfikacja produktu jako substancji wieloskładnikowej (patrz: rozdział 4.2.2). Tylko w przypadku gdy skład produktu reakcji nie jest wystarczająco znany lub słabo przewidywalny, substancję należy zidentyfikować jako substancję UVCB („produkt reakcji”). Produkt reakcji identyfikowany jest w oparciu o materiały wyjściowe zastosowane w reakcji i proces reakcji (bio)chemicznej, w wyniku którego powstaje dana substancja.

<b>Przykłady</b>		
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa EINECS</b>	<b>Numer CAS</b>
294-006-2	Nonanedioic acid, reaction products with 2-amino-2-methyl-1-propanol	91672-02-5
294-148-5	Formaldehyde, reaction products with diethylene glycol and phenol	91673-32-4

Głównym parametrem identyfikującym produkty reakcji jest opis procesu produkcyjnego. W celu identyfikacji substancji należy podać końcowy, najbardziej istotny etap procesu. W opisie procesu chemicznego należy wskazać rodzaj procesu (np. estryfikacja, hydroliza alkaliczna, alkilowanie, chlorowanie, reakcja substytucji itd.) wraz z warunkami przebiegu tego procesu. Proces biochemiczny musi zostać opisany za pomocą typu reakcji oraz nazwy enzymu katalizującego reakcję.

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

Substancjami UVCB pochodzenia biologicznego otrzymywanymi w procesie rafinacji, w którym nie wytworzono celowo nowych cząsteczek, mogą być np. ekstrakty, frakcje ekstraktu, koncentraty ekstraktu, oczyszczony ekstrakt lub pozostałości obróbki substancji pochodzenia biologicznego.

W przypadku gdy ekstrakt poddawany jest dalszemu przetwarzaniu, otrzymywana substancja nie jest identyczna z ekstraktem i należy do innego podtypu substancji UVCB (np. frakcja lub pozostałość ekstraktu). Takie substancje charakteryzowane są na podstawie dodatkowych parametrów związanych z (dalszą) obróbką. Jeśli ekstrakt ulega modyfikacji w reakcjach chemicznych lub biochemicznych generujących nowe cząsteczki (pochodne), substancja jest identyfikowana zgodnie z wytycznymi opisanymi dla substancji UVCB podtypu 2 lub substancji dobrze określonych (patrz: rozdział 4.2).

Z powodu takiego rozróżnienia ekstraktów poddawanych dalszej obróbce nowa nazwa i opis substancji mogą się różnić od nazwy i opisu stosowanych w wykazie EINECS. W tworzonym spisie EINECS nie uwzględniono takiego rozróżnienia, przez co jeden wpis mógł objąć wszystkie rodzaje ekstraktów pozyskiwanych za pomocą różnych rozpuszczalników oraz na dalszych etapach procesu.

Pierwszym podstawowym parametrem służącym do identyfikacji tego podtypu substancji UVCB jest rodzina, rodzaj oraz gatunek organizmu, z którego otrzymywana jest substancja. W stosownych przypadkach należy również podać tkankę lub część organizmu wykorzystane w celu ekstrakcji substancji (np. szpik kostny, trzustka; albo łądyga, nasiona lub korzenie). Identyfikując substancje pochodzenia mikrobiologicznego, należy określić odmianę lub typ genetyczny danego gatunku.

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

Przykłady	
Numer WE	Nazwa EINECS
290-977-1	Oxidised logwood (Haematoxylon campechianum) extract
	<b>Opis WE</b> Substancja ta jest identyfikowana w "Colour Index" (Indeks barw) pod numerem struktury C.I. 75290 jako utleniona
282-014-9	Pancreatic extracts, deproteinated

Kolejnym głównym parametrem identyfikującym daną substancję jest zastosowana obróbka, np. proces ekstrakcji, frakcjonowanie, oczyszczanie, proces koncentracji lub proces wpływający na skład pozostałości. A zatem w wyniku rafinacji ekstraktów przeprowadzonej za pomocą różnych procesów, np. przy wykorzystaniu różnych rozpuszczalników lub różnych etapów oczyszczania, powstaną odmienne substancje.

Im większa liczba etapów rafinacji, tym bardziej możliwe staje się zdefiniowanie substancji na podstawie składu chemicznego. W takim przypadku wynikiem zastosowania różnych źródeł lub różnych modyfikacji zachodzących w trakcie procesu nie musi być automatycznie odmienna substancja.

Głównym parametrem identyfikującym substancję pochodzenia biologicznego jest opis istotnych procesów. W przypadku ekstraktów opis procesu ekstrakcji powinien być na tyle szczegółowy by móc określić tożsamości substancji. Podać należy co najmniej rodzaj zastosowanego rozpuszczalnika.

Jeśli w celu wyprodukowania substancji stosowane są dalsze etapy obróbki takie jak frakcjonowanie lub koncentracja, należy opisać kombinację istotnych etapów procesu, np. kombinację ekstrakcji i frakcjonowania wraz z wartościami granicznymi.

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

Substancjami pochodzenia niebiologicznego, tj. takimi które są lub wywodzą się z minerałów, rud, węgla, gazu ziemnego, ropy naftowej lub innych surowców dla przemysłu chemicznego, i będącymi wynikiem obróbki bez udziału celowych reakcji chemicznych mogą być (oczyszczone) frakcje, koncentraty lub pozostałości procesów.

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

Dla substancji ropopochodnych stosowany jest specjalny system identyfikacji (patrz: rozdział 4.3.2.2). Do substancji objętych tym systemem należą frakcje i produkty reakcji chemicznych.

Innymi substancjami UVCB podtypu 4 są rudy, koncentraty rud i żużle zawierające różne ilości metali, które można uzyskiwać w procesach metalurgicznych.

Minerały takie jak bentonit lub węglan wapnia można poddawać obróbce poprzez np. rozpuszczanie w kwasie i/lub strącanie chemiczne, bądź w kolumnach jonitowych. W przypadku gdy skład chemiczny jest w pełni określony, minerały należy identyfikować zgodnie z wytycznymi opisanymi w stosownej części rozdziału 4.2. Jeśli minerały poddawane są jedynie obróbce mechanicznej, np. poprzez mielenie, przesiewanie, odwirowywanie, flotację itd., to uważa się je nadal za tożsame z minerałami. Minerały uzyskiwane w procesie produkcyjnym mogą – dla celów identyfikacji<sup>13</sup> – być uważane za takie same jak ich naturalnie występujące odpowiedniki pod warunkiem, że ich skład jest podobny, a właściwości toksyczne identyczne.

Jednym z głównych parametrów identyfikujących substancje pochodzenia niebiologicznego jest opis stosownego etapu (lub etapów) procesu.

W przypadku frakcji należy opisać proces frakcjonowania i podać parametry oraz wartości graniczne dla frakcji wyodrębnionej, a w stosownych przypadkach wcześniejsze etapy procesu. Opisując etap koncentracji, poza informacjami dotyczącymi wcześniejszego(ych) etapu(ów) procesu, należy podać rodzaj procesu (np. odparowanie, wytrącanie itd.) oraz stosunek pomiędzy stężeniem wyjściowym a stężeniem końcowym głównych składników.

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

#### **4.3.1.3 Informacja analityczna**

Gdy dane spektralne dostarczają informacji o składzie substancji UVCB, to informacje takie należy podawać. Do otrzymywania widm (UV/VIS, w podczerwieni, magnetycznego rezonansu jądrowego, masowe) stosuje się kilka metod spektroskopowych. Ponieważ metody oraz podejście do ich stosowania ulegają ciągłej zmianie, przedłożenie stosownych danych spektralnych jest obowiązkiem rejestrującego.

W celu określenia składu substancji należy przedstawić chromatogram typu fingerprint. A w stosownych przypadkach można zastosować inne skuteczne techniki rozdziału składników.

#### **4.3.2 Substancje UVCB szczególnego typu**

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

##### **4.3.2.1 Substancje o zróżnicowanych długościach łańcuchów węglowych**

Do tej grupy substancji UVCB należą długołańcuchowe substancje alkilowe o zróżnicowanych długościach łańcuchów węglowych, np. parafiny i olefiny. Substancje te są pozyskiwane z naturalnych tłuszczów lub olejów, bądź produkowane w sposób syntetyczny. Tłuszcze naturalne są otrzymywane z roślin lub zwierząt. Substancje o długich łańcuchach węglowych pochodzenia roślinnego mają na ogół jedynie parzystą liczbę atomów węgla w łańcuchu, podczas gdy substancje o długich łańcuchach węglowych pochodzenia zwierzęcego posiadają (niektóre z nich) także nieparzystą liczbę atomów węgla. Produkowane w sposób syntetyczny substancje o długich łańcuchach węglowych mogą zawierać różne łańcuchy węglowe – o parzystych lub nieparzystych liczbach atomów węgla.

---

<sup>13</sup> Takie samo podejście do identyfikacji minerałów występujących w przyrodzie i otrzymywanych w procesach chemicznych niekoniecznie oznacza, że takie same są dotyczące nich wymagania prawne (np. zwolnienie z obowiązku rejestracji)

## Parametry identyfikujące oraz nazewnictwo

W grupie tej znajdują się substancje, których poszczególne składniki mają wspólną cechę strukturalną: jedną długołańcuchową grupę alkilową lub więcej takich grup z przyłączoną grupą funkcyjną. Składniki te różnią się od siebie pod względem jednej lub większej liczby następujących właściwości grup łańcucha alkilowego:

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

Tożsamość chemiczną składników można określić za pomocą trzech deskryptorów. Na ich podstawie można również utworzyć nazwę systematyczną danych składników. Deskryptory te to:

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

### Deskryptor alkilowy

- Deskryptor alkilowy  $\text{C}_{x-y}$  odnosi się do nasyconych, liniowych łańcuchów alkilowych o długościach łańcuchów od x do y, np.  $\text{C}_{8-12}$  odpowiada  $\text{C}_8$ ,  $\text{C}_9$ ,  $\text{C}_{10}$ ,  $\text{C}_{11}$  i  $\text{C}_{12}$ .
- Należy wskazać, czy deskryptor alkilowy odnosi się tylko do parzystych czy jedynie do nieparzystych łańcuchów alkilowych, np.  $\text{C}_{8-12}$  (even numbered)
- Należy wskazać, czy deskryptor alkilowy odnosi się (także) do rozgałęzionych łańcuchów alkilowych, np.  $\text{C}_{8-12}$ (branched) lub  $\text{C}_{8-12}$ (linear and branched)
- Należy wskazać, czy deskryptor alkilowy odnosi się (również) do nienasyconych łańcuchów alkilowych, np.  $\text{C}_{12-22}$  ( $\text{C}_{18}$  unsaturated)
- Wąski zakres długości łańcucha alkilowego nie obejmuje szerszego zakresu długości łańcucha alkilowego i odwrotnie, np.  $\text{C}_{10-14}$  nie odpowiada  $\text{C}_{8-18}$
- Deskryptor alkilowy może się również odnosić do źródła łańcuchów alkilowych, np. coco (kokos) lub tallow (łój). Jednakże rozkład długości łańcuchów węglowych musi odpowiadać rozkładowi długości łańcuchów źródła.

Powyższy system należy stosować w celu opisywania substancji o zmiennych długościach łańcuchów węglowych. Nie ma on jednakże zastosowania w przypadku substancji dobrze określonych, które można zidentyfikować na podstawie precyzyjnej struktury chemicznej.

Na podstawie informacji dotyczących deskryptora alkilowego, deskryptora funkcyjności i deskryptora soli tworzona jest nazwa substancji UVCB tego typu. W celu bardziej szczegółowej identyfikacji substancji posłużyć mogą również informacje o źródle pochodzenia i procesie, w wyniku którego otrzymywana jest dana substancja.

Przykłady		
Deskryptory		Nazwa
<b>Deskryptor alkilowy</b>	długości łańcucha alkilowego C <sub>10-18</sub>	Fatty acids (C10-18) cadmium salts
<b>Deskryptor funkcyjności</b>	kwasy tłuszczowe (kwas karboksylowy)	
<b>Deskryptor soli</b>	sole kadmu	
<b>Deskryptor alkilowy</b>	dialkilo(C8-C10)-dimetylo	di-C8-C10-alkyl-dimethylammonium chloride
<b>Deskryptor funkcyjności</b>	amon	
<b>Deskryptor soli</b>	chlerek	
<b>Deskryptor alkilowy</b>	trimetylo łój-alkilo	trimethyl-tallowalkyl-ammonium chloride
<b>Deskryptor funkcyjności</b>	amon	
<b>Deskryptor soli</b>	chlerek	

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

Substancje pozyskiwane z ropy (substancje ropopochodne) lub ze źródeł ropopodobnych (np. węgiel kamienny) są to substancje posiadające bardzo złożony, zróżnicowany lub częściowo nieokreślony skład chemiczny. W niniejszym rozdziale posłużono się substancjami ropopochodnymi by pokazać jak identyfikować ten szczególny rodzaj substancji UVCB. Taką samą metodę identyfikacji można jednakże stosować w stosunku do substancji pozyskiwanych ze źródeł ropopodobnych takich jak węgiel kamienny.

Materiałem wyjściowym używanym w przemyśle rafineryjnym może być ropa naftowa lub każdy określony produkt rafineryjny otrzymywany w wyniku jednego procesu lub większej ich liczby. Skład produktów końcowych jest uzależniony od ropy naftowej wykorzystanej do produkcji (jej skład różni się w zależności od miejsca pochodzenia) oraz od kolejnych procesów rafinacji. Zróżnicowanie składu substancji ropopochodnych jest zatem zjawiskiem naturalnym, niezależnym od zastosowanego procesu [Rasmussen et al., 1999].

#### 1. Nazewnictwo

W przypadku identyfikacji substancji ropopochodnych wskazane jest podanie nazwy zgodnej z ustalonym systemem nomenklatury [stosowanym także przez US EPA – Agencję Ochrony Środowiska USA]. Nazwa taka wskazuje zazwyczaj na proces rafineryjny, źródło produktu oraz ogólny skład lub właściwości substancji. Jeśli substancja zawiera > 5 % wagowych węglowodorów aromatycznych o 4-6 skondensowanych pierścieniach, taka informacja powinna zostać uwzględniona w opisie. W przypadku substancji ropopochodnych posiadających numer EINECS, należy zastosować nazwę podaną w wykazie WE.

#### 2. Parametry identyfikujące

Terminy oraz definicje stosowane w celu identyfikacji substancji ropopochodnych uwzględniają na ogół źródło produktu, proces rafineryjny, ogólny skład substancji, liczbę atomów węgla, zakres temperatury wrzenia lub inne stosowne właściwości fizyczne oraz przeważający rodzaj węglowodorów [US EPA].

Należy podać parametry identyfikujące określone w załączniku VI, poz. 2 REACH. Uznaje się, iż produkcja substancji ropopochodnych ma na celu wytworzenie substancji o określonych właściwościach, a nie składzie. Parametry takie jak nazwa, zakres długości łańcucha węglowego, temperatura wrzenia, lepkość, wartości graniczne oraz pozostałe właściwości fizyczne są zatem bardziej przydatne w celu jak najdokładniejszej identyfikacji substancji niż informacje dotyczące jej składu.



Mimo, iż skład chemiczny nie jest podstawowym parametrem identyfikującym substancję UVCB, należy podać znane, główne składniki substancji ( $\geq 10\%$ ), a jej skład opisać za pomocą parametrów takich jak np. zakres masy cząsteczkowej, alifaty/aromaty, stopień uwodornienia oraz innych istotnych danych. Ponadto należy podać nazwę i typowe stężenie każdego składnika o mniejszym stężeniu, który ma wpływ na klasyfikację zagrożeń.

#### 4.3.2.3 Enzymy

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

Białko enzymatyczne wraz z innymi składnikami pochodzącymi z procesu fermentacji lub ekstrakcji - ale z wyłączeniem wody, którą można oddzielić bez wpływu na trwałość białka enzymatycznego lub na jego skład - należy do celów identyfikacji traktować jako substancję.

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

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

Substancje enzymatyczne ze względu na ich zmienność i częściowo nieznany skład należy zaliczyć do substancji UVCB. Białko enzymatyczne należy traktować jak składnik substancji UVCB. Enzymy o wysokim stopniu czystości można uznawać za substancje o dobrze określonym składzie (jedno- i wieloskładnikowe) i stosownie je identyfikować.

W spisie EINECS głównym parametrem identyfikującym enzymy jest ich aktywność katalityczna. Enzymy figurują w postaci wpisów ogólnych bez dodatkowej specyfikacji lub z wpisami szczegółowymi określającymi organizm źródłowy lub substrat).

<b>Przykłady</b>		
<b>Numer WE</b>	<b>Nazwa EINECS</b>	<b>Numer CAS</b>
278-547-1	Proteinase, Bacillus neutral	76774-43-1
278-588-5	Proteinase, Aspergillus neutral	77000-13-6
254-453-6	Elastase (pig pancreas)	39445-21-1
262-402-4	Mannase	60748-69-8

W studium enzymów zleconym przez Komisję Europejską [UBA, 2000] proponuje się identyfikację enzymów zgodnie z międzynarodowym systemem nomenklatury enzymów IUBMB (Międzynarodowa Unia Biochemii i Biologii Molekularnej; [www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/](http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/)).

Podejście takie zastosowano w niniejszym dokumencie. Umożliwia ono bardziej systematyczną, szczegółową i pełną identyfikację enzymów w porównaniu do EINECS.

## 1. Nazewnictwo

Enzymom nadaje się nazwy zgodnie z zasadami nomenklatury IUBMB [<http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html>].

W systemie klasyfikacji IUBMB przewidziano niepowtarzalny czterocyfrowy numer dla każdego typu enzymu i funkcji katalitycznej (np. 3.2.1.1 dla  $\alpha$ -amylazy)<sup>14</sup>. Pod jednym numerem sklasyfikowane mogą być enzymy o różnej sekwencji aminokwasów i różnym pochodzeniu, ale ich funkcjonalność jest identyczna. Do identyfikacji substancji należy stosować nazwę i numer z klasyfikacji IUBMB. W nomenklaturze IUBMB enzymy dzieli się na sześć głównych grup:

1. Oksydoreduktazy
2. Transferazy
3. Hydrolazy
4. Liazy
5. Izomerazy
6. Ligazy

Poniższy przykład przytoczono by zilustrować wpis zgodny z nomenklaturą IUBMB:

### EC 3.4.22.33

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

**Reakcja:** Hydroliza białek o szerokiej selektywności w kierunku wiązań peptydowych. Dobrym substratem syntetycznym jest Bz-Phe-Val-Arg+NHMe, ale nie ma oddziaływania na Z-Arg-Arg-NHMe (por. stem bromelain (*bromelaina lodygowa*))

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

**Uwagi:** Otrzymywana z ananasa, *Ananas comosus*. W niewielkim stopniu ulega inhibicji przez kurzą cystatynę. Inna endopeptydaza cysteinowa o podobnym działaniu na substraty małowcząsteczkowe - pinguinaina (dawniej EC 3.4.99.18) - uzyskiwana jest z pokrewnej rośliny - *Bromelia pinguin* - jednak pinguinaina różni się od bromelainy owocowej tym, że ulega inhibicji przez kurzą cystatynę [4]. W rodzinie peptydaz C1 (rodzina papainy). Poprzednio EC 3.4.22.5 i ujeta w EC 3.4.22.4.

**Odnosińki do innych baz danych:** BRENDA, EXPASY, MEROPS, numer rejestracyjny CAS: 9001-00-7

### Literatura:

1. Sasaki, M., Kato, T. i Iida, S. Antigenic determinant common to four kinds of thiol proteases of plant origin. *J. Biochem. (Tokyo)* 74 (1973) 635-637. [Medline UI: [74041600](#)]

---

<sup>14</sup> Terminy „numer WE” oraz „numer IUBMB” są często używane synonimicznie. Aby uniknąć nieporozumień zaleca się stosowanie terminu „numer IUBMB” dla czterocyfrowego kodu stosowanego przez IUBMB.

2. 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. [Medline UI: [76260156](#)]
3. 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. [Medline UI: [86008148](#)]
4. 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](#)]

**Przykłady klasyfikacji enzymów wg systemu IUBMB**  
<http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html>

**Proteazy są numerowane wg następujących kryteriów**

3. **Hydrolases**

3.4 **Acting on peptide bonds (peptidases), with subclasses:**

- 3.4.1  $\alpha$ -Amino-Acyl-Peptide Hydrolases (now in EC 3.4.11)
- 3.4.2 Peptidyl-Amino-Acid Hydrolases (now in EC 3.4.17)
- 3.4.3 Dipeptide Hydrolases (now in EC 3.4.13)
- 3.4.4 Peptidyl Peptide Hydrolases (now reclassified within EC 3.4)
- 3.4.11 Aminopeptidases
- 3.4.12 Peptidylamino-Acid Hydrolases or Acylamino-Acid Hydrolases (now reclassified within 3.4)
- 3.4.13 Dipeptidases
- 3.4.14 Dipeptidyl-peptidases and tripeptidyl-peptidases
- 3.4.15 Peptidyl-dipeptidases
- 3.4.16 Serine-type carboxypeptidases
- 3.4.17 Metallo-carboxypeptidases
- 3.4.18 Cysteine-type carboxypeptidases
- 3.4.19 Omega peptidases
- 3.4.21 Serine endopeptidases

**I dalej identyfikuje się konkretne enzymy:**

- 3.4.21.1 chymotrypsin
- 3.4.21.2 chymotrypsin C
- 3.4.21.3 metridin
- 3.4.21.4 trypsin
- 3.4.21.5 thrombin
- 3.4.21.6 coagulation factor Xa
- 3.4.21.7 plasmin
- 3.4.21.8 now covered by EC 3.4.21.34 and EC 3.4.21.35
- 3.4.21.9 enteropeptidase
- 3.4.21.10 acrosin
- 3.4.21.11 now covered by EC 3.4.21.36 and EC 3.4.21.37
- 3.4.21.12 12 a-Lytic endopeptidase
- ...
- 3.4.21.105
- 3.4.99 Endopeptidases of unknown catalytic mechanism

Przykłady z EINECS uzupełnione o numer IUBMB			
Numer WE	Nazwa EINECS	Numer CAS	Numer IUBMB
278-547-1	Proteinase, Bacillus neutral	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilisin	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Cellulase	9012-54-8	3.2.1.4

## 2. Parametry identyfikujące

Substancje enzymatyczne identyfikuje się na podstawie białka enzymatycznego (nomenklatura IUBMB) i innych składników pochodzących z fermentacji. Oprócz białka enzymatycznego inne składniki zwykle nie występują w stężeniu wyższym niż 1%. Jeśli tożsamości tych składników nie są znane, to można je wskazać grupowo (tj. białka, peptydy, aminokwasy, węglowodany, lipidy i sole nieorganiczne). Jednak składniki należy wskazać jeśli ich tożsamości są znane i należy je identyfikować jeśli ich stężenie przekracza 10% lub jeśli mają istotne znaczenie dla klasyfikacji i oznaczania i/lub oceny PBT<sup>15</sup>.

### **Białka enzymatyczne**

Białka enzymatyczne zawarte w koncentracji powinny być identyfikowane za pomocą:

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

Należy określić reakcję wywoływaną przez enzym. Reakcja taka jest definiowana przez IUBMB.

#### **Przykład**

.alpha.-amylase: Polysaccharide containing .alpha.-(1-4)-linked glucose units + H<sub>2</sub>O = maltooligosaccharides; endohydrolysis of 1,4- $\alpha$ -D-glucosidic linkages in polysaccharides containing three or more 1,4- $\alpha$ -linked D-glucose units.

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

<sup>15</sup> Więcej informacji na temat oceny PBT i stosownych stężeń dopuszczalnych podano w RIP 3.2 Poradnik dotyczący wymogów informacyjnych oraz oceny bezpieczeństwa chemicznego

<b>Przykład</b>
.alpha.-amylase: O-glycosyl bond hydrolysis (endohydrolysis)

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

Identyfikować należy wszystkie składniki obecne w ilości  $\geq 10\%$  wagowych albo istotne dla klasyfikacji i oznakowania i/lub oceny PBT<sup>16</sup>. Tożsamość składników obecnych w ilości poniżej 10% można wskazać jako grupę chemiczną. Należy podać typowe stężenie/ stężenia lub zakres stężeń, tj.:

- (gliko)proteiny
- peptydy i aminokwasy
- węglowodany
- lipidy
- materiał nieorganiczny (np. chlorek sodu lub inne sole nieorganiczne)

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

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

---

<sup>16</sup> Więcej informacji na temat oceny PBT i stosownych stężeń dopuszczalnych podano w RIP 3.2 Poradnik dotyczący wymogów informacyjnych oraz oceny bezpieczeństwa chemicznego

## 5

### KRYTERIA SPRAWDZANIA JEDNAKOWOŚCI SUBSTANCJI

Jednakowość substancji pochodzących od różnych producentów/importerów należy sprawdzać przestrzegając określonych zasad. Zasady te zastosowane w trakcie tworzenia EINECS [Manual of Decisions, Criteria for reporting substances for EINECS, strona internetowa ECB; Geiss et al. 1992, Vollmer et al. 1998, Rasmussen et al. 1999] powinno się uznać za podstawę identyfikacji i nazywania substancji, umożliwiającą odnalezienie potencjalnego współrejestrującego daną substancję. W niniejszej części dokumentu znajdują się wytyczne dotyczące identyfikacji i nazewnictwa substancji. Na podstawie opinii specjalisty substancje uznawane za odmienne można jednakże uznać za strukturalnie pokrewne. W przypadku takich substancji możliwa jest wymiana informacji, jeśli jest ona naukowo uzasadniona. Nie jest to jednak przedmiot niniejszego dokumentu - zostało to omówione w dokumencie RIP 3.4 Wymiana informacji.

- Dla substancji jednoskładnikowych należy stosować regułę „ $\geq 80\%$ ”, a dla substancji wieloskładnikowych regułę „ $< 80\% / \geq 10\%$ ”.

W tym przypadku nie stosuje się rozróżnienia pomiędzy gatunkami technicznymi, czystymi lub analitycznymi substancji. „Taka sama” substancja może być otrzymywana w wyniku procesu produkcyjnego w postaci różnych gatunków i zawierać różne ilości różnych zanieczyszczeń. Jednakże substancje dobrze określone powinny na ogół zawierać główny składnik/główne składniki, a jedynymi dozwolonymi zanieczyszczeniami są zanieczyszczenia pochodzące z procesie produkcji (szczegóły - patrz: rozdział 4.2) oraz dodatki stabilizujące substancję.

Jeśli ocena zanieczyszczenia substancji dobrze określonej pochodzącej z różnych źródeł produkcji różni się w sposób znaczący, wówczas należy posłużyć się oceną specjalisty w celu określenia, czy różnice te wpłyną na decyzję o udostępnieniu danych z badań jednej substancji innym członkom SIEF.

- Wodziany oraz bezwodne formy związków chemicznych są uznawane za substancje tożsame.

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

Formy uwodnione i bezwodne posiadają różne nazwy chemiczne oraz różne numery CAS. Jednakże w ich przypadku należy przedłożyć jedną dokumentację rejestracyjną. Należy zarejestrować formę bezwodną substancji. Rejestracja ta obejmuje jej formy uwodnione.

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

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

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

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

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

Przykłady		
Numer WE	Nazwa	Zasada
295-083-5	Phosphoric acid, dipentyl ester, branched and linear	Substancji tej nie należy uznać za tożsamą z substancjami odrębnymi – kwasem fosforowym, estrem dipentylowym, rozgałęzionym lub liniowym, estrem n-dipentylowym

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

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

- Substancje z grupami alkilowymi posiadającymi nazwy zawierające dodatkowe określenia takie jak „izo”, „neo”, „rozgałęzione” itd. nie należy uznawać za tożsame z substancjami bez takiej specyfikacji.

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

- Bez wyraźnej specyfikacji, łańcuchy alkilowe w kwasach lub alkoholach itd. uznaje się jedynie za łańcuchy nasycone. Łańcuchy nienasycone określa się jako takie i uznaje za substancje odmienne.

Przykłady		
Numer WE	Nazwa	Zasada
200-313-4	Stearic acid, pure C <sub>18</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>	Niniejszej substancji nie należy uznawać za tożsamą z kwasem oleinowym, czystym, C <sub>18</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub> (EINECS 204-007-1)

- Substancje z centrami chiralności

Substancja z jednym centrum chiralności może istnieć w formach lewo- i prawoskrętnych (enancjomery). Jeśli nic nie wskazuje na sytuację przeciwną, zakłada się, iż substancja ta jest równą mieszaniną równomolową dwóch form (racemiczną).

Przykłady		
Numer WE	Nazwa	Zasada
201-154-3	2-chloropropan-1-ol	Indywidualnych enancjomerów - (R)-2-chloropropan-1-ol oraz (S)-2-chloropropan-1-ol - nie uważa się za tożsame z tym wpisem

W przypadku gdy substancja została wzbogacona jedną formą enancjomeru, stosuje się zasady określone dla substancji wieloskładnikowych.

Substancje z wieloma centrami chiralności mogą istnieć w 2<sup>n</sup> formach (gdzie „n” to liczba centrów chiralnych). Te odmienne formy mogą mieć różne właściwości fizykochemiczne, toksykologiczne i/lub ekotoksykologiczne. Należy je uznać za substancje odrębne.

- Katalizatory nieorganiczne

Katalizatory nieorganiczne uważa się za preparaty. Dla celów identyfikacji składniki metaliczne lub związki metali należy uważać za indywidualne substancje (bez wyspecyfikowania zastosowania).



Przykłady		
	Nazwa	Zasada
	Cobalt oxide-aluminium oxide catalyst	Należy identyfikować oddzielnie jako: - Cobalt II oxide - Cobalt III oxide - Aluminium oxide - Aluminium cobalt oxide

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

### Substancje wieloskładnikowe

Dyrektywa 67/548/EWG określiła zasady dotyczące wprowadzania substancji do obrotu. Ponieważ w świetle tych zasad sposób produkcji substancji był nieistotny, spis EINECS objął określoną substancję wieloskładnikową wprowadzaną do obrotu, jeśli wszystkie jej poszczególne składniki figurowały w EINECS. I tak np. izomeryczna mieszanina difluorobenzenów objęta została w wykazie wpisami 1,2-Difluorobenzene (206-680-7), 1,3-Difluorobenzene (206-746-5) oraz 1,4-Difluorobenzene (208-742-9), pomimo, iż ona sama nie została w nim wymieniona.

System REACH wymaga natomiast rejestracji substancji wyprodukowanej. Decyzja do jakiego stopnia różne etapy wytwarzania substancji są zgodne z definicją „produkcji” (np. różne etapy oczyszczania lub destylacji) jest podejmowana na podstawie każdego indywidualnie analizowanego przypadku. Jeśli w wyniku procesu produkcji wytwarzana jest substancja wieloskładnikowa, to substancja ta podlega rejestracji (i nie jest objęta rejestracją poszczególnych składników). I tak na przykład w przypadku wyprodukowanej izomerycznej mieszaniny difluorobenzenu, rejestracji podlega „difluorobenzen” jako mieszanina izomeryczna. Testowanie danej substancji wieloskładnikowej nie jest jednakże konieczne, jeśli ocenę zagrożenia substancji można w pełni określić na podstawie danych o poszczególnych składnikach. Natomiast jeśli izomery 1,2-difluorobenzenu, 1,3-difluorobenzenu oraz 1,4-difluorobenzenu produkowane są oddzielnie, a następnie mieszane, należy zarejestrować poszczególne izomery, a mieszanina izomeryczna jest wówczas uznawana za preparat.

Substancji wieloskładnikowej zawierającej główne składniki A, B i C nie należy uznawać za tożsamą z substancją wieloskładnikową zawierającą główne składniki A i B, bądź z masą reakcyjną A, B, C i D.

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

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

- Rejestracja substancji wieloskładnikowej nie obejmuje poszczególnych składników.

Przykłady		
Numer WE	Nazwa	Zasada
208-747-6	1,2-dibromoethylene	Substancja ta opisuje mieszaninę izomerów cis i trans. Odrębne substancje - (1Z)-1,2-dibromoethene oraz (1E)-1,2-Dibromoethene - nie są objęte rejestracją mieszaniny izomerycznej.

### Substancje UVCB

- Substancja wieloskładnikowa o małej liczbie składników nie jest uznawana za tożsamą z substancją wieloskładnikową o większej liczbie składników i odwrotnie.

Przykłady		
Numer WE	Nazwa	Zasada
288-450-6	Amines, C <sub>12-18</sub> -alkyl, acetates	Substancje „amines, C <sub>12-14</sub> -alkyl, acetates” lub „amines, C <sub>12-20</sub> -alkyl, acetates”, bądź „amines, dodecyl (C <sub>12</sub> -alkyl), acetates”, jak również substancje posiadające jedynie łańcuchy alkilowe o parzystej liczbie atomów węgla nie są uznawane za tożsame z tą substancją

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

Przykłady		
Numer WE	Nazwa	Zasada
296-286-1	Glycerides, sunflower-oil di-	Substancja ta nie jest uznawana za tożsamą z substancjami „Glycerides, soya di-” (EINECS: 271-386-8) lub „Glycerides, tallow di-” (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	Linseed oil, epoxidized	Substancja ta nie jest uznawana za tożsamą z substancją „linseed oil, oxidized” (EINECS: 272-038-8) lub z substancją „linseed oil, maleated” (EINECS: 268-897-3) oraz substancją „castor oil, epoxidized” (nie zamieszczony w EINECS)

- Oczyszczony ekstrakt lub koncentrat jest uznawany za substancję odmienną od ekstraktu.

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

## 6

# TOŻSAMOŚĆ SUBSTANCJI W RAMACH REJESTRACJI WSTĘPNEJ I ZBIERANIA INFORMACJI

Wytyczne dotyczące identyfikacji i nazywania substancji znajdują się w rozdziale 4 niniejszego dokumentu. Wytycznymi tymi należy się kierować w celu określenia, czy w ramach systemu REACH dane substancje można uznać za tożsame. Poniżej podane zostały szczegółowe wytyczne dotyczące rejestracji wstępnej substancji wprowadzonych oraz zasięgania informacji w sprawie substancji niewprowadzonych.

Zgodnie z art. 4 każdy producent lub importer może, zachowując pełną odpowiedzialność za wypełnianie swoich zobowiązań przewidzianych rozporządzeniem REACH, wyznaczyć osobę trzecią, przedstawiciela reprezentującego go w postępowaniu zgodnym z tytułem III rozporządzenia dotyczącym rozmów z innymi producentami lub importerami. Ponieważ tytuł III określa również zasady dla substancji niewprowadzonych oraz substancji wprowadzonych, które nie zostały poddane rejestracji wstępnej oraz zasady dla substancji wprowadzonych, które zostały poddane rejestracji wstępnej, zwrot „potencjalny rejestrujący” w niniejszym rozdziale należy interpretować jako „potencjalny producent”, „potencjalny importer” lub „osoba trzecia wyznaczona jako przedstawiciel potencjalnego producenta lub potencjalnego importera”.

### 6.1 REJESTRACJA WSTĘPNA

Celem procesu rejestracji wstępnej jest skontaktowanie ze sobą potencjalnych osób rejestrujących taką samą substancję w celu uniknięcia powtarzania badań, szczególnie badań prowadzonych na kręgowcach. Rejestracja wstępna dotyczy wyłącznie substancji wprowadzonych.

Rejestracja wstępna składa się z następujących etapów:

1. Potencjalni rejestrujący muszą przedłożyć Europejskiej Agencji Chemikaliów określony zestaw parametrów identyfikujących substancję.
2. W oparciu o przedłożony określony zestaw parametrów Agencja tworzy listę substancji i publikuje ją na swojej stronie internetowej.
3. W oparciu o utworzoną listę inne osoby będące w posiadaniu określonych danych mogą przedłożyć Agencji stosowne informacje.
4. Agencja kontaktuje ze sobą potencjalnych rejestrujących substancje umieszczone na liście opodobnych parametrach identyfikujących oraz pomaga im nawiązać kontakt z osobami będącymi w posiadaniu określonych danych. Weryfikacja czy dana substancja może być uznana za tożsamą z inną substancją figurującą na liście jest zadaniem potencjalnych osób rejestrujących substancję. Weryfikacja ta powinna zostać przeprowadzona zgodnie z zasadami opisanymi w rozdziale 4 niniejszego dokumentu.
5. Z chwilą potwierdzenia jednakowości substancji potencjalni rejestrujący, którzy przekazali Agencji informacje dotyczące takiej samej substancji stają się uczestnikami SIEF (Forum Wymiany Informacji o Substancji).

Na pierwszym etapie rejestracji wstępnej potencjalni rejestrujący muszą przedłożyć określony zestaw parametrów identyfikujących substancję (art. 28):

- numer WE oraz numer i nazwę CAS;
- nazwę chemiczną zgodną z nomenklaturą IUPAC lub inną międzynarodową nazwę chemiczną;
- inne nazwy.

Dostarczenie niniejszych informacji będzie się odbywało przy wsparciu systemu informatycznego. Strona internetowa centralnego systemu informatycznego REACH-IT prowadzi potencjalnego rejestrującego krok po kroku przez system, do którego należy przedkładać informacje dotyczące tożsamości substancji zgodnie z przedstawionymi powyżej wytycznymi.

Na tym etapie nie uwzględnia się innych informacji dotyczących tożsamości substancji (np. identyfikacji zanieczyszczeń). Potencjalny rejestrujący może również wskazać określone zestawy parametrów charakteryzujące inne substancje, w przypadku których informacje takie są istotne w celu zastosowania podejścia QSAR, przekrojowego lub skategoryzowanego.

Dalsze wytyczne dotyczące rejestracji wstępnej, tworzenia SIEF i wspólnego przedkładania w ramach konsorcjum w aspekcie identyfikacji substancji podano w dokumencie RIP 3.4 Poradnik dotyczący wymiany informacji.

## **6.2 ZBIERANIE INFORMACJI**

W przypadku substancji niewprowadzonych lub substancji wprowadzonych, które nie zostały poddane rejestracji wstępnej, potencjalny rejestrujący ma obowiązek zapytania Agencji przed rejestracją, czy rejestracja dotycząca takiej samej substancji została już przedłożona (art. 24). Takie zapytanie musi zawierać następujące dane:

- tożsamość potencjalnego rejestrującego zgodnie z załącznikiem IV, poz.1, z wyłączeniem miejsc wykorzystania;
- tożsamość substancji zgodnie z załącznikiem IV, poz. 2;
- wskazanie, dla których wymagań odnośnie informacji konieczne będzie przeprowadzenie przez potencjalnego rejestrującego nowych badań na kręgowcach;
- wskazanie, dla których wymagań odnośnie informacji konieczne będzie przeprowadzenie przez potencjalnego rejestrującego innych, nowych badań.

Informacje te będą dostarczane przy wsparciu systemu informatycznego oraz IUCLID 5. Potencjalny rejestrujący powinien przedłożyć tożsamość oraz nazwę substancji zgodnie z zasadami określonymi w rozdziale 4 niniejszego dokumentu.

Agencja określa, czy taka sama substancja została już wcześniej zarejestrowana. Odbywa się to również zgodnie z zasadami opisanymi w rozdziale 4 niniejszego dokumentu. Decyzja jest oznajmiana potencjalnemu i poprzedniemu rejestrującemu.

## 7

## PRZYKŁADY

Poniższe przykłady ilustrują jedynie w jaki sposób użytkownik niniejszego dokumentu może wykorzystać znajdujące się w nim wytyczne. Nie stanowią one żadnego precedensu względem obowiązków wynikających z rozporządzenia REACH.

Przedstawiono następujące przykłady:

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

### 7.1 DIETHYL PEROXYDICARBONATE (PEROKSYDIWĘGLAN DIETYLU)

Substancja „diethyl peroxydicarbonate” (*peroksydiwęglan dietylu*) (WE 238-707-3, CAS 14666-78-5, C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O<sub>6</sub>) jest produkowana jako 18% roztwór w izododekanie (WE 250-816-8, CAS 31807-55-3). Izododekan działa również jako środek stabilizujący właściwości wybuchowe. Najwyższym możliwym stężeniem gwarantującym bezpieczne zastosowanie substancji jest roztwór 27%.

W jaki sposób opisana powyżej substancja powinna zostać zidentyfikowana i nazwana na potrzeby rejestracji?

Zgodnie z definicją substancji stosowaną w REACH identyfikacja substancji nie powinna uwzględniać rozpuszczalników, które mogą być wyodrębnione bez wpływu na stabilność substancji lub bez zmiany jej składu. Ponieważ w zaprezentowanym powyżej przypadku izododekan ma zastosowanie również jako środek stabilizujący i nie może być całkowicie wyodrębniony ze względu na właściwości wybuchowe substancji, musi on zostać uznany za dodatek, a nie jedynie rozpuszczalnik. Substancję taką należy wciąż jednak uznać za substancję jednoskładnikową. Powinna ona zostać zatem zarejestrowana jako roztwór o najwyższym możliwym stężeniu gwarantującym bezpieczne użytkowanie:

Diethyl peroxydicarbonate (górna granica: 27%; typowe stężenie: 22%).

## 7.2 ZOLIMIDINE (ZOLIMIDYNA)

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

W jaki sposób opisana powyżej substancja powinna zostać zidentyfikowana i nazwana na potrzeby rejestracji?

Zgodnie z definicją substancji stosowaną w REACH identyfikacja substancji nie powinna uwzględniać rozpuszczalników, które mogą być wyodrębnione bez wpływu na stabilność substancji lub bez zmiany jej składu. Ponieważ w powyższym przypadku metanol może być oddzielony bez żadnych trudności, należy zarejestrować substancję bez rozpuszczalnika.

Ogólnie substancję uznaje się za jednoskładnikową, jeśli jeden główny składnik substancji jest obecny w stężeniu  $\geq 80\%$ . Substancję uznaje się za substancję wieloskładnikową, jeśli więcej niż jeden główny składnik występuje w stężeniu  $\geq 10\%$  oraz  $< 80\%$ . Powyższy przykład jest przypadkiem granicznym, ponieważ wartości progowe zostały przekroczone albo nie zostały osiągnięte. Substancja ta mogłaby więc zostać uznana za substancję wieloskładnikową „zolimidynę” lub za substancję wieloskładnikową masę reakcyjną „zolimidyny” oraz „imidazolu”.

W takim przypadku granicznym, decyzję o tym jak najlepiej opisać substancję można podjąć na podstawie typowego stężenia głównych składników substancji, np.:

- (1) Jeśli typowe stężenie zolimidyny wynosi 77%, a imidazolu 11%, zalecane jest uznanie substancji za masę reakcyjną zolimidyny i imidazolu;
- (2) Jeśli typowe stężenie zolimidyny wynosi 85% , a imidazolu 5%, zalecane jest uznanie substancji za substancję jednoskładnikową o nazwie „zolimidyna”;
- (3) Jeśli nie można ustalić typowego stężenia, ponieważ w wyniku procesu produkcji uzyskuje się produkt o niekontrolowanym, szerokim zakresie stężeń, to zalecane jest uznanie substancji za substancję wieloskładnikową.

## 7.3 MIESZANINA IZOMERÓW

Dana substancja jest mieszaniną (reakcyjną) dwóch izomerów powstałą w wyniku procesu produkcji. Poszczególne izomery zostały zgłoszone do wykazu EINECS. Dyrektywa 67/548/EWG określiła zasady dotyczące wprowadzanie substancji do obrotu. Ponieważ w świetle tych zasad sposób produkcji substancji był nieistotny, wykaz EINECS objął daną mieszaninę wpisami dla dwóch odrębnych izomerów. System REACH wymaga jednakże rejestracji substancji wyprodukowanych. Decyzja do jakiego stopnia różne etapy wytwarzania substancji są zgodne z definicją „produkcja” (np. różne etapy oczyszczania lub destylacji) jest podejmowana na podstawie każdego indywidualnie analizowanego przypadku. W sytuacji gdy mieszanina izomerów jest zarejestrowana jako substancja wieloskładnikowa (zgodnie z wytycznymi przedstawionymi w rozdziale 4.2.2), testowanie danej substancji nie jest konieczne, jeśli ocenę zagrożenia substancji można w pełni określić na podstawie danych o poszczególnych składnikach. Wówczas należy się jednakże odwołać do wpisów dla poszczególnych izomerów figurujących w wykazie EINECS w celu wskazania, iż substancja jest substancją wprowadzoną.

## 1. Nazwa i inne parametry identyfikujące

<b>Nazwa IUPAC lub inna międzynarodowa nazwa chemiczna (substancji)</b>	Reaction mass of 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol and 2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol
<b>Inne nazwy (substancji)</b>	2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol Reaction mass of Ethanol, 2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- and water Ethanol, 2,2'-[[[(methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- (9CI) isomeric compound
<b>Numer WE (substancji) Nazwa WE Opis WE</b>	Mieszanina ta nie posiada numeru WE ponieważ nie została zgłoszona do spisu EINECS. Została jednakże objęta w wykazie EINECS wpisami swoich składników (279-502-9, 279-501-3). Mieszanina ta powinna zostać zatem uznana za substancję wprowadzoną.
<b>Numer CAS (substancji) Nazwa CAS</b>	niedostępny niedostępna
<b>Numer WE (składnik A) Nazwa WE Opis WE</b>	279-502-9 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
<b>Numer WE (składnik B) Nazwa WE Opis WE</b>	279-501-3 2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol /
<b>Numer CAS (składnik A) Nazwa CAS</b>	80584-89-0 Ethanol, 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-
<b>Numer CAS (składnik B) Nazwa CAS Inny kod Odnosićnik</b>	80584-88-9 Ethanol, 2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis- Numer ENCS 5-5917

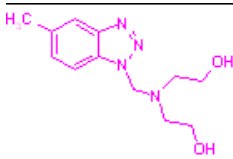
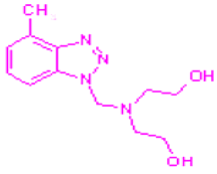
## 2. Informacje dotyczące składu – główne składniki

Główne składniki						
	Nazwa IUPAC	Numer CAS	Numer WE	Wzór cząst. metoda Hilla	Typowe stęż. (% wag.)	Zakres stężeń (% wag.)
<b>A</b>	Ethanol, 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C12H18N4O2	60	50-70
<b>B</b>	Ethanol, 2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C12H18N4O2	40	30-50

Główne składniki	
	Inne nazwy
<b>A</b>	2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol
<b>B</b>	2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol

Główne składniki		
	Nazwa WE	Opis WE
<b>A</b>	2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/
<b>B</b>	2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bisethanol	/

Główne składniki		
	Nazwa CAS	Numery CAS
<b>A</b>	Ethanol, 2,2'-[[[(4-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-89-0
<b>B</b>	Ethanol, 2,2'-[[[(5-methyl-1H-benzotriazol-1-yl)methyl]imino]bis-	80584-88-9

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

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



## 7.4

## AROMAT AH

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

W zamieszczonej poniżej tabelce znajduje się zestawienie przedstawiające skład różnych gatunków aromatu.

Skład różnych gatunków aromatu AH

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

Istnieje kilka sposobów identyfikacji substancji:

- Gatunek A zawiera co najmniej 80% izomeru gamma (izo-alfa) metylojononu, a zatem substancję taką można uznać za substancję jednoskładnikową zawierającą izomer gamma (izo-alfa) metylojononu oraz inne izomery jako zanieczyszczenia.
- Gatunek B i C zawierają mniej niż 80% izomeru gamma (izo-alfa) metylojononu oraz  $\geq 10\%$  innych izomerów. Można je zatem uznać za substancje wieloskładnikowe:
  - Gatunek B: jako masa reakcyjna gamma(izo-alfa) metylojononu (65-75%) i alfa-n metylojononu (10-20%) oraz inne izomery w postaci zanieczyszczeń.
  - Gatunek C: jako masa reakcyjna gamma(izo-alfa) metylojononu (50-60%) i alfa-n metylojononu (20-30%) [i może zawierać beta n-metylojonon (5-15%)] oraz inne izomery w postaci zanieczyszczeń.

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

Możliwe byłoby zarejestrowanie poszczególnych gatunków osobno. To oznaczałoby trzy rejestracje. Jednak uzasadnione może być podejście przekrojowe do danych.

Można rozważyć następujące alternatywy:

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

Istotne może się okazać rozważenie następujących kwestii:

- Wszystkie trzy gatunki substancji mają takie same lub bardzo zbliżone właściwości fizykochemiczne.
- Wszystkie trzy gatunki substancji mają podobne zastosowanie i scenariusze narażenia.
- Wszystkie trzy gatunki substancji mają taką samą klasyfikację i oznaczenie zagrożenia, a ich karty charakterystyki oraz raporty bezpieczeństwa chemicznego są identyczne.
- Dostępne dane otrzymane w wyniku testów (oraz przyszłe testy) uwzględniają różnicowanie tych trzech gatunków substancji.

W niniejszym przykładzie opisano identyfikację substancji jako określonej masy reakcyjnej 5 izomerów (substancja wieloskładnikowa). W tej sytuacji konieczne jest stosowne uzasadnienie odstępstwa od reguły 80% (patrz: rozdział 4.2.1) oraz reguły 10% (patrz: rozdział 4.22). Ponieważ każdy gatunek substancji jest wytwarzany jako odrębny, skład każdego z nich powinien zostać uwzględniony w dossier rejestracyjnym. Ze względów formalnych może jednakże zaistnieć konieczność co najmniej dwóch rejestracji: (1) gamma (izo-alfa) metylojononu oraz (2) masy reakcyjnej gamma (izo-alfa) metylojononu i alfa-n metylojononu.

## Identyfikacja substancji

Aromat AH jest produkowany w trzech różnych gatunkach (A, B i C) o tym samym składzie jakościowym jednakże o odmiennym składzie ilościowym. Wszystkie trzy gatunki są opisane w jednej dokumentacji rejestracyjnej dla substancji wieloskładnikowej. Mimo, iż oznacza to pewne odstępstwo od reguły 80% i 10%, rejestracja substancji jako substancji wieloskładnikowej jest uzasadniona ponieważ: (1) dostępne dane testowe uwzględniają odmienność trzech gatunków substancji, (2) wszystkie trzy gatunki substancji mają podobne właściwości fizykochemiczne, (3) wszystkie gatunki substancji mają taką samą klasyfikację i oznakowanie zagrożenia (a w rezultacie identyczne karty charakterystyki) oraz (4) wszystkie trzy rodzaje substancji mają podobne zastosowanie oraz scenariusze narażenia (a w rezultacie podobne raporty bezpieczeństwa chemicznego).

### 1. Nazwa oraz inne parametry identyfikujące

Nazwa IUPAC lub inna międzynarodowa nazwa chemiczna	Reaction mass of 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one; 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one; [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one; 1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one; 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one
Inne nazwy	Methyl Ionone Gamma Quality A Methyl Ionone Gamma Quality B Methyl Ionone Gamma Quality C
Numer WE Nazwa WE Opis WE	niedostępny / /
Numer CAS Nazwa CAS	niedostępny /

## 2. Informacja dotycząca składu – główne składniki

Teoretycznie występować mogą dodatkowe enancjomery. Analiza uwzględnia jednakże następujące izomery:

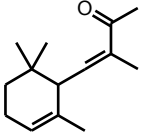
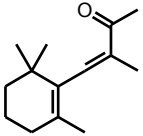
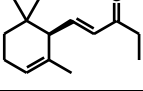
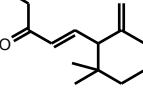
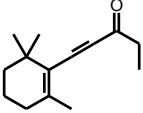
Główne składniki						
	Nazwa IUPAC	Numer CAS	Numer WE	Wzór cząst. metoda Hilla	Min. stęż. (% wag.)	Maks. stęż. (% wag.)
<b>A</b>	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	127-51-5	204-846-3	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	50	85
<b>B</b>	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one	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-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-42-4	204-842-1	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	3	30
<b>D</b>	1-(6,6-methyl-2-methylenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-one	niedostępny	niedostępny	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	0,5	4
<b>E</b>	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	127-43-5	204-843-7	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	0,5	15

Główne składniki	
	Inne nazwy
<b>A</b>	alpha-iso-methyl ionon; gamma methyl ionon
<b>B</b>	beta-iso-methyl ionon; delta methyl ionon
<b>C</b>	alpha-n-methyl ionon
<b>D</b>	gamma-n-methyl ionon
<b>E</b>	beta-n-methyl ionon

Główne składniki		
	Nazwa WE	Opis WE
<b>A</b>	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)- 3-buten-2-one	/
<b>B</b>	3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)- 3-buten-2-one	/
<b>C</b>	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
<b>D</b>	1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/
<b>E</b>	1-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	/

Główne składniki		
	Nazwa CAS	Numer CAS
A	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-	127-51-5
B	3-Buten-2-one, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-	79-89-0
C	1-Penten-3-one, 1-[(1R)-2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl]-, (1E)-	127-42-4
D	niedostępny	niedostępny
E	1-Penten-3-one, 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-,	127-43-5

Główne składniki		
	Inny kod identyfikujący	Odnosićnik
A	2714 07.036	FEMA EU Flavour Register
B	07.041	FEMA
C	2711 07.009	FEMA EU Flavour Register
D	niedostępny	niedostępny
E	2712 07.010	FEMA Flavour Register (UE)

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

<b>Główne składniki</b>		
	<b>Masa cząsteczkowa/ g mol<sup>-1</sup></b>	<b>Zakres masy cząsteczkowej</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. Informacje dotyczące składu – zanieczyszczenia i dodatki

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

### 4. Informacje dotyczące różnych rodzajów substancji

Poniżej podane zostały zakresy stężeń pięciu głównych składników występujących w trzech różnych gatunkach substancji:

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

## 7.5 MINERAŁY

Minerał jest określany jako kombinacja składników nieorganicznych występująca w skorupie ziemskiej i posiadająca charakterystyczne składy chemiczne, postaci krystalicznych (od wysoko-krystalicznych do amorficznych) oraz właściwości fizykochemiczne.

Minerały nie podlegają rejestracji o ile nie są chemicznie modyfikowane. Dotyczy to minerałów których struktura chemiczna pozostaje niezemieniona, nawet jeśli poddane zostały one procesowi lub obróbce chemicznej albo transformacji mineralogicznej, przeprowadzonej na przykład w celu usunięcia zanieczyszczeń.

Niektóre minerały można opisywać jednoznacznie za pomocą składu chemicznego (patrz: rozdziały 4.2.1 i 4.2.2 dotyczące substancji jednoskładnikowych i wieloskładnikowych), w przypadku innych sam skład chemiczny jest niewystarczający do jednoznacznej identyfikacji tych substancji (patrz: rozdział 4.2.3).

W przeciwieństwie do innych substancji jedno- i wieloskładnikowych wiele minerałów należy identyfikować na podstawie składu chemicznego oraz struktury wewnętrznej (np. określonej za pomocą np. dyfrakcji promieni rentgenowskich), ponieważ skład i struktura stanowią istotę minerału i decydują o jego właściwościach fizykochemicznych.

Tak jak w przypadku innych substancji wieloskładnikowych rejestrowana substancja (tj. kombinacja składników nieorganicznych) jest identyfikowana m.in. na podstawie numeru CAS danego minerału. Numery CAS składników nieorganicznych (określonych przez mineralogię systematyczną) są wykorzystywane do opisania poszczególnych składników. W przypadku wyprodukowania odrębnego składnika nieorganicznego (substancji jednoskładnikowej), numer CAS tej substancji należy stosować do identyfikacji substancji. Na przykład:

Kaolin (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) jest minerałem składającym się głównie z kaolinitów pierwotnych i wtórnych (EINECS: 215-284-4, CAS: 1318-74-7), tj. uwodnionego glinokrzemianu.

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

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

W przypadku wyprodukowania czystego montmorylonitu (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) substancja jest identyfikowana za pomocą numeru CAS montmorylonitu.

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

Nazwa minerału jest więc na ogół tworzona na podstawie kombinacji nieorganicznego składnika lub składników wchodzących w jego skład. Minerały można uznać za substancje jednoskładnikowe lub wieloskładnikowe (patrz: rozdział 4.2.1 i 4.2.2). Niektórych minerałów nie można jednoznacznie opisać jedynie za pomocą składu chemicznego. Dla dostatecznej identyfikacji wymagają one dodatkowego opisu fizycznego lub parametrów obróbki (patrz: rozdział 4.2.3). Kilka przykładów podano w poniższej tabeli.

## Przykłady minerałów

Nazwa	CAS	EINECS	Dodatkowy opis <sup>17</sup>
Cristobalite	14464-46-1	238-455-4	O <sub>2</sub> Si (struktura krystaliczna: symetria sześcienna)
Quartz	14808-60-7	238-878-4	O <sub>2</sub> Si (struktura krystaliczna: symetria romboedryczna)
Kieselguhr	61790-53-2	-	Substancja znana również jako: Diatomite, Kieselgur i Celite  Opis: Miękka krzemionkowa kopalina składająca się ze szczątek niewielkich prehistorycznych roślin wodnych. Zawiera głównie dwutlenek krzemu.
Dolomite	16389-88-1	240-440-2	CH <sub>2</sub> O <sub>3</sub> .1/2Ca.1/2Mg
Feldspar-group minerals	68476-25-5	270-666-7	Substancja nieorganiczna stanowiąca produkt reakcji wysokotemperaturowej kalcynacji, podczas której zachodzi homogeniczna, jonowa dyfuzja wzajemna pomiędzy różnymi ilościami tlenku glinu, tlenku baru, tlenku wapnia, tlenku magnezu, tlenku krzemu oraz tlenku strontu prowadząc do utworzenia struktury krystalicznej.
Talc	14807-96-6	238-877-9	Mg <sub>3</sub> H <sub>2</sub> (SiO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>
Vermiculite	1318-00-9	-	(Mg <sub>0,3</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)

## Wymagane informacje analityczne

<b>Skład pierwiastkowy</b>	Skład chemiczny ukazuje całościowy skład danego minerału bez względu na ilość składników i ich zawartość w minerale. Zgodnie z obowiązującą konwencją skład chemiczny jest wyrażany w formie tlenkowej.
<b>Dane spektralne (XRD lub równoważne)</b>	XRD albo inne techniki mogą służyć do identyfikacji minerałów na podstawie ich struktury krystalograficznej. Charakterystyczne piki XRD lub w widmie IR identyfikujące minerał należy przedłożyć wraz z krótkim opisem metody analitycznej lub odnośnikami do literatury.
<b>Typowe właściwości fizykochemiczne</b>	Minerały mają charakterystyczne właściwości fizykochemiczne umożliwiające uzupełnienie ich identyfikacji, np. - bardzo niska twardość - zdolność pęcznienia - kształty diatomitu (mikroskop optyczny) - bardzo wysoka gęstość - powierzchnia właściwa (adsorpcja azotu)

## 7.6

### OLEJEK ETERYCZNY Z LAWENDY (LAVANDIN GROSSO)

Olejki eteryczne to substancje pozyskiwane z roślin. Można je zatem scharakteryzować jako substancje o pochodzeniu botanicznym.

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

Olejki eteryczne można określać na podstawie głównych składników jak to czyni się w przypadku substancji wieloskładnikowych. Jednakże w skład olejków eterycznych może wchodzić kilkaset różnych składników różniących się w zależności od wielu czynników (np. rodzaju, gatunku, warunków wzrostu, okresu zbioru, zastosowanych procesów). Opis głównych składników jest zatem często niewystarczający do identyfikacji substancji UVCB tego typu. Olejki eteryczne należy opisywać za pomocą rośliny źródłowej oraz procesu obróbki zgodnie z opisem w rozdziale 4.3.1 (substancje UVCB podtypu 3).

Dla wielu olejków eterycznych istnieją normy przemysłowe (dla wielu również normy ISO). Informacje o normach można uwzględnić jako dodatkowe. Daną substancję należy jednakże identyfikować na podstawie substancji wyprodukowanej.

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

#### 1. Nazwy i inne parametry identyfikujące

##### Źródło

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

##### Proces

<b>Opis procesów reakcji (bio)chemicznej zastosowanych do produkcji substancji:</b>
Destylacja z parą wodną kwitnących czubków rośliny <i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae), a następnie oddzielenie wody od olejku eterycznego.
Proces oddzielenia jest samorzutnym procesem fizycznym, który zwykle zachodzi w separatorze (kolbie płaskodennej) umożliwiając łatwe wyodrębnienie odseparowanego olejku. Temperatura na tym etapie procesu destylacji wynosi około 40°C.



## Nazwa

<b>Nazwa IUPAC albo inna międzynarodowa nazwa chemiczna</b>	Essential oil of <i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
<b>Numer WE</b> <b>Nazwa WE</b> <b>Opis WE</b>	297-385-2 Lavender, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ext. Ekstrakty i ich fizycznie modyfikowane związki pochodne takie jak tynktury, konkrety, absoluty, olejki eteryczne, oleozywice, terpeny, frakcje bezterpenowe, destylaty, pozostałości itd. otrzymywane z <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae <sup>18</sup> .
<b>Numer CAS</b> <b>Nazwa CAS</b>	93455-97-1 Lavender, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ext.

## 2. Informacja dotycząca składu – składniki znane

Znane składniki					
	<b>Nazwa chemiczna</b> <b>WE</b> <b>CAS</b> <b>IUPAC</b> <b>inne</b>	<b>Numer</b> <b>WE</b> <b>CAS</b>	<b>Wzór</b> <b>cząsteczkowy</b> <b>Metoda Hilla</b>	<b>Typowe</b> <b>stężenie</b> <b>(% wag.)</b>	<b>Zakres</b> <b>stężenia</b> <b>% wag.)</b>
A	<b>WE</b> linalyl acetate <b>CAS</b> 1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-, acetate <b>IUPAC</b> 3,7-Dimethyl octa-1,6-dien-3-yl acetate	<b>WE</b> 204-116-4 <b>CAS</b> 115-95-7	$C_{12}H_{20}O_2$	33	28 - 38
B	<b>WE</b> linalool <b>CAS</b> 1,6-octadien-3-ol, 3,7-dimethyl- <b>IUPAC</b> 3,7-dimethyl octa-1,6-dien-3-ol	<b>WE</b> 201-134-4 <b>CAS</b> 78-70-6	$C_{10}H_{18}O$	29,5	24 - 35
C	<b>WE</b> Bornan-2-one <b>CAS</b> Bicyclo[2.2.1] heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl- <b>IUPAC</b> 1,7,7-Trimethylbicyclo[2.2.1]-2-heptanone <b>Inne</b> camphor	<b>WE</b> 200-945-0 <b>CAS</b> 76-22-2	$C_{10}H_{16}O$	7	6 - 8

<sup>18</sup> „Labiatae” oraz „Lamiceae” to synonimy

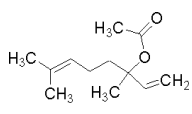
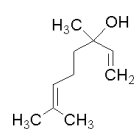
<b>D</b>	<b>WE</b> Cineole <b>CAS</b> 2-oxabicyclo [2.2.2]octane, 1,3,3-trimethyl- <b>IUPAC</b> 1,3,3-trimethyl-2- oxabicyclo[2.2.2]octane <b>Inne</b> 1,8-cineole	<b>WE</b> 207-431-5 <b>CAS</b> 470-82-6	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	5,5	4 – 7
<b>E</b>	<b>WE</b> P-menth-1-en-4-ol <b>CAS</b> 3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1- (1-methylethyl)- <b>IUPAC</b> 1-(1-Methylethyl)-4-methyl-3- cyclohexen-1-ol <b>Inne</b> terpinene-4-ol	<b>WE</b> 209-235-5 <b>CAS</b> 562-74-3	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	3,25	1,5 – 5
<b>F</b>	<b>WE</b> P-menth-1-en-4-ol <b>CAS</b> 3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1- (1-methylethyl)- <b>IUPAC</b> 1-(1-Methylethyl)-4-methyl-3- cyclohexen-1-ol <b>Inne</b> terpinene-4-ol	<b>WE</b> 247-327-7 <b>CAS</b> 25905-14-0	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	2,25	1,5 – 3
<b>G</b>	<b>WE</b> DL-borneol <b>CAS</b> Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, (1R,2S,4R)- rel- <b>IUPAC</b> (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimethyl bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol <b>Inne</b> borneol	<b>WE</b> 208-080-0 <b>CAS</b> 507-70-0	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	2,25	1,5 – 3
<b>H</b>	<b>WE</b> Caryophyllene <b>CAS</b> Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, (1R,4E,9S)- <b>IUPAC</b> (1R,4E,9S)-4,11,11-trimethyl-8- methylene bicyclo[7.2.0]undec-4-ene <b>Inne</b> Trans-beta-caryophyllene	<b>WE</b> 201-746-1 <b>CAS</b> 87-44-5	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	1,75	1 – 2,5

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

### Składniki znane ≥ 10%

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

Składniki znane		
	Nazwa CAS	Numery CAS
<b>A</b>	linalyl acetate C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	115-95-7
<b>B</b>	linalool C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	78-70-6

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

Składniki znane		
	Masa cząsteczkowa	Zakres masy cząsteczkowej
<b>A</b>	196,2888	/
<b>B</b>	154,2516	/

## 7.7 OLEJEK CHRYSANTEMOWY I JEGO WYODRĘBNIONE IZOMERY

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

Ponadto z ekstraktu wyodrębniane są dwa izomery jako masa reakcyjna:

### Jasmolin I

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

### Jasmolin II

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

Ponadto firma postanowiła syntetyzować również mieszaninę izomeryczną jasmoliny I oraz II.

Firma ta stawia następujące pytania:

1. Jak zidentyfikować olejek chryzantemowy na potrzeby rejestracji?
2. Czy masa reakcyjna izomerów jasmoliny I oraz II jest objęta rejestracją olejku?
3. Czy syntetyzowana mieszanina dwóch izomerów może być uznana za tożsamą z mieszaniną izomerów wyodrębnionych z olejku chryzantemowego?

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

Olejek chryzantemowy uznaje się za substancję UVCB, której nie można w pełni zidentyfikować na podstawie składu chemicznego (szczegółowe wytyczne - patrz: rozdział 4.3). W tym celu niezbędne są inne parametry identyfikujące takie jak źródło pochodzenia lub zastosowany proces. Olejek chryzantemowy to substancja pochodzenia biologicznego, a zatem należy go zidentyfikować na podstawie gatunku oraz części organizmu, z którego jest otrzymywany, a także zastosowanego procesu rafinacji (ekstrakcja za pomocą rozpuszczalnika). Należy jednak również podać skład chemiczny oraz tożsamość składników substancji w zakresie w jakim są one znane.

Informacje niezbędne w celu dostatecznej identyfikacji substancji są następujące:

<b>Nazwa substancji</b>	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae; olejek otrzymywany ze zmiażdżonych kwiatów i liści poprzez ekstrakcję wodą/etanolem (w proporcji 1:10)			
<b>Pochodzenie</b>				
Rodzaj, gatunek, podgatunek	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae			
Część rośliny wykorzystana przy wytworzeniu olejku	Kwiaty i liście			
<b>Proces</b>				
Metoda produkcji	Miażdżenie, a następnie ekstrakcja			
Rozpuszczalnik wykorzystany do ekstrakcji	Woda: etanol (1:10)			
<b>Informacja o składzie – składniki znane w % wagowych</b>				
<b>Nazwa składnika</b>	<b>Numer WE</b>	<b>Numer CAS</b>	<b>Min. %</b>	<b>Maks. %</b>
<b>Pyrethrin I:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-chryzanthemate	204-455-8	121-21-1	30	38
<b>Pyrethrin II:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(penta-2,4-dienyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)], 3 $\beta$ ]-3-(3-metoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate	204-462-6	121-29-9	27	35
<b>Cinerin I:</b> 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	246-948-0	25402-06-6	5	10
<b>Cinerin II:</b> 3-(but-2-enyl)-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropane carboxylate	204-454-2	121-20-0	8	15
<b>Jasmolin I:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	brak	4466-14-2	4	10
<b>Jasmolin II:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ (E)]]- 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oksoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	brak	1172-63-0	4	10
Ponadto substancja ta zawiera do 40 składników w stężeniu poniżej 1%.				

Substancję tę można również rozpatrywać jako substancję wieloskładnikową zawierającą sześć głównych składników (masę reakcyjną pyretryny I, pyretryny II, cyneryny I, cyneryny II, jasmoliny I oraz jasmoliny II).

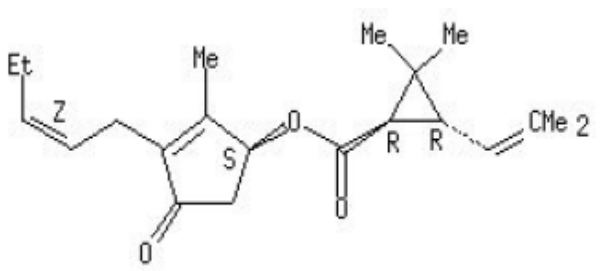
Taka substancja zostałaby uznana za „substancję występującą w przyrodzie”, jeśli proces jej wytwarzania polegałby jedynie na „miażdżeniu”. Byłaby również zwolniona z rejestracji, o ile nie zaistniały przesłanki do zakwalifikowania jej jako substancji niebezpiecznej zgodnie z dyrektywą 67/548/EWG.

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

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

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

Informacje niezbędne w celu dostatecznej identyfikacji substancji są następujące:

<b>Nazwa IUPAC substancji</b>	<b>Masa reakcyjna</b> (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate) <b>i</b> (2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-en-1-yl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ (E)]]- 2,2-dimethyl-3-(3-methoxy-2-methyl-3-oxoprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate)			
<b>Inna nazwa</b>	Masa reakcyjna jasmoliny I and jasmoliny II			
<b>Czystość substancji</b>	95-98% wag.			
<b>Informacja dotycząca składu – główne składniki w % wagowych</b>				
<b>Nazwa składnika</b>	<b>Numer WE</b>	<b>Numer CAS</b>	<b>Min. %</b>	<b>Maks. %</b>
<b>Jasmolin I:</b> 2-methyl-4-oxo-3-(pent-2-enyl)cyclopent-2-enyl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate	brak	4466-14-2	40	60
<b>Wzór cząsteczkowy</b>				
<b>Wzór strukturalny</b> <b>Masa cząsteczkowa</b>	C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> O <sub>5</sub> M = 374 g/mol			



## 7.8

**PHENOL, ISOPROPYLATED, PHOSPHATE**  
(FOSFORAN IZOPROPYLOWANEGO FENOLU)

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

**1. Nazwa oraz inne parametry identyfikujące**

<b>Nazwa IUPC oraz inna międzynarodowa nazwa chemiczna</b>	Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)
<b>Inne nazwy</b>	Phenol, isopropylated, phosphate Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) (na podstawie stosunku molowego 1:1 propylenu do fenolu)
<b>Numer WE</b> <b>Nazwa WE</b> <b>Opis WE</b>	273-066-3 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1) /
<b>Numer CAS</b> <b>Nazwa CAS</b>	68937-41-7 Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)

**2. Informacje o składzie - główne składniki**

<b>Główne składniki</b>					
<b>Nazwa IUPAC</b>	<b>Numer CAS</b>	<b>Numer WE</b>	<b>Wzór cząst. Metoda Hilla</b>	<b>Typowe stęż. (% wag.)</b>	<b>Zakres stęż. (% wag.)</b>
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	68937-41-7	273-066-3	nieokreślony		

<b>Główne składniki</b>	
<b>Nazwa WE</b>	<b>Opis WE</b>
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	/
<b>Nazwa CAS</b>	<b>Numer CAS</b>
Phenol, isopropylated, phosphate (3:1)	68937-41-7



## 7.9

## CZWARTORZĘDOWE ZWIĄZKI AMONIOWE

Pewna firma syntetyzuje następujące substancje:

### Substancja A

Quaternary ammonium compounds, di-C10-18-alkyldimethyl, chlorides

Numer WE 294-392-2

Numer CAS 91721-91-4

Rozkład długości łańcuchów węglowych:

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

### Substancja B

Quaternary ammonium compounds, dicoco alkyldimethyl, chlorides

Numer WE 263-087-6

Numer CAS 61789-77-3

Firma nie zna dokładnego składu tej substancji.

### Substancja C

Didodecyldimethylammonium bromide

### Substancja D

Didodecyldimethylammonium chloride

### Substancja E

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

### Substancja F

Quaternary ammonium compounds, di-C14-18-alkyldimethylammonium, chlorides

Numer WE 268-072-8

Numer CAS 68002-59-5

Rozkład długości łańcuchów węglowych:

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

### Substancja G

Quaternary ammonium compounds, di-C14-18-alkyldimethylammonium, chlorides

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

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

W celu nazywania wyprodukowanych przez siebie substancji firma stosowała dotychczas jedynie nazwę substancji B (Quaternary ammonium compounds, dicocoalkyldimethyl chlorides, numer WE 263-087-6, numer CAS 61789-77-3), gdyż najbardziej pasuje ona do wszystkich substancji (substancje od A do G). Firma ta chciałaby wiedzieć, czy możliwe jest objęcie wszystkich substancji (od A do G) jedną rejestracją substancji B.

#### 1. Uwagi ogólne

Węglowodory (parafiny, olefiny) otrzymywane z tłuszczów oraz olejów lub syntetycznych substytutów są identyfikowane na podstawie rozkładu łańcuchów węglowych lub źródła pochodzenia (deskryptor alkilowy), za pomocą grupy funkcyjnej (deskryptor funkcyjności), np. amonowej, oraz anionu/kationu (deskryptor soli) np. chlorkowego.

Rozkład długości łańcucha węglowego, np. C<sub>8-18</sub>, odnosi się do łańcuchów:

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

W przeciwnym razie należy stosować następujące oznaczenia:

- unsaturated (*nienasycony*) (C<sub>16</sub> unsaturated)
- branched (*rozgałęziony*) (C<sub>10</sub> branched)
- even-numbered (*parzysty*) (C<sub>12-18</sub> even-numbered)

Łańcuchy węglowe opisywane na podstawie źródła pochodzenia muszą posiadać rozkład łańcuchów węglowych występujący w źródle pochodzenia, tak jak w przypadku np. alkiloamin łojowych (ang.: tallow alkyl amines):

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

C <sub>12</sub>	1%
C <sub>14</sub>	3%
C <sub>14'</sub>	1%
C <sub>15</sub>	0,5%
C <sub>16</sub>	29%
C <sub>16'</sub>	3%
C <sub>17</sub>	1%
C <sub>18</sub>	23%
C <sub>18'</sub>	37%
C <sub>18''</sub>	1,5%

## 2. Jak zidentyfikować substancje na potrzeby rejestracji?

Poniżej każdą z substancji porównywano z substancją B (na podstawie której tworzono dotychczas nazwę substancji) w celu stwierdzenia, czy dwie substancje można uznać za tożsame.

### Porównanie substancji A i B

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

C <sub>6</sub>	0,5%
C <sub>8</sub>	8%
C <sub>10</sub>	7%
C <sub>12</sub>	50%
C <sub>14</sub>	18%
C <sub>16</sub>	8%
C <sub>18</sub>	1,5%
C <sub>18'</sub>	6%
C <sub>18''</sub>	1%

Jak widać rozkład długości łańcuchów węglowych substancji A różni się od rozkładu długości łańcuchów węglowych „coco” substancji B. Ponieważ skład ilościowy i jakościowy obu substancji różni się w sposób znaczący, nie można ich uznać za substancje tożsame.

### Porównanie substancji B i C

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

### **Porównanie substancji B i D**

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

### **Porównanie substancji B i E**

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

### **Porównanie substancji B i F**

Substancja F „Quaternary ammonium compounds, di-C14-18-alkyldimethylammonium, chlorides” jest mieszaniną składników o różnych długościach łańcuchów węglowych (od C<sub>14</sub> do C<sub>18</sub> parzyste i nieparzyste, liniowe i nasycone). Substancja F różni się od substancji B pod względem składu oraz zakresu rozkładu łańcuchów węglowych. Substancja F ma wąski rozkład długości łańcuchów węglowych i dodatkowo zawiera łańcuchy węglowe C<sub>15</sub> i C<sub>17</sub>. Substancje B i F nie mogą być więc uznane za substancje tożsame.

### **Porównanie substancji B i G**

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

## **3. Wniosek**

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

W podanym przykładzie deskryptory zawsze różnią się od siebie. Substancje te nie mogą być więc objęte jedną rejestracją substancji B.

## 7.10 SUBSTANCJE ROPOPOCHODNE

Przedstawiono dwa przykłady w których skorzystano z wytycznych dla dwóch określonych substancji UVCB z rozdziału 4.3.3.2.

### 7.10.1 Frakcja benzynowa (C<sub>4</sub>-C<sub>12</sub>)

#### 1. Nazwa i inne parametry identyfikujące

##### Nazwa

Nazwa IUPAC lub inna międzynarodowa nazwa chemiczna	Naphtha (petroleum), catalytic reformed
---	---

##### Źródło

Identyfikacja lub opis pochodzenia produktu	Ropa naftowa
---	--------------

##### Proces

Opis procesu rafineryjnego	Reforming katalityczny
Liczba atomów węgla	C4-C12
Temperatura wrzenia lub wartości graniczne	od 30°C do 220°C
Inne właściwości fizyczne, np. lepkość	Poniżej 7 mm <sup>2</sup> /s w 40°C (lepkość)
Numer WE	273-271-8
Numer WE	68955-35-1
Nazwa WE/nazwa CAS	Naphtha (petroleum), catalytic reformed
Opis WE/opis CAS	Złożona mieszanina węglowodorów, produkt destylacji produktów reformingu katalitycznego. Składa się z węglowodorów o liczbie atomów węgla przeważnie od C <sub>4</sub> do C <sub>12</sub> , i wrzących w zakresie temperatur od ok. 30°C do 220°C (90°F do 430°F). Zawiera względnie wysoką ilość węglowodorów aromatycznych i węglowodorów o łańcuchach rozgałęzionych. Produkt może zawierać 10 % lub więcej benzenu.

#### 2. Informacja dotycząca składu

Znane składniki			
Nazwa IUPAC	Numer CAS	Numer WE	Zakres stężeń (% wag.)
Benzene	71-43-2	200-753-7	1-10
Toluene	108-88-3	203-625-9	20-25
Xylene	1330-20-7	215-353-7	15-20

## 7.10.2 Oleje gazowe (ropa naftowa)

### 1. Nazwa i inne parametry identyfikujące

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

### Źródło

Identyfikacja lub opis pochodzenia produktu	Ropa naftowa
---	--------------

### Proces

Opis procesu rafineryjnego	Destylacja atmosferyczna
Liczba atomów węgla	C7-C35
Temperatura wrzenia lub wartości graniczne	od 121°C do 510°C
Inne właściwości fizyczne, np. lepkość	20 mm <sup>2</sup> /s w 40°C (lepkość)
Numer WE	272-184-2
Numer WE	68783-08-4
Nazwa WE/nazwa CAS	Gas oils (petroleum), heavy atmospheric
Opis WE/opis CAS	Złożona mieszanina węglowodorów otrzymywana w wyniku destylacji ropy naftowej. Składa się z węglowodorów o liczbie atomów węgla od C <sub>7</sub> do C <sub>35</sub> . Jej temperatura wrzenia wynosi od ok. 121°C do 510°C (250°F do 950°F).

### 2. Skład chemiczny

Brak informacji.

## 7.11 ENZYMY

Przedstawiono dwa przykłady koncentratów enzymatycznych w których skorzystano z wytycznych dla określonych substancji UVCB z rozdziału 4.3.2.3: sybtylizyny (identyfikowanej przy użyciu nomenklatury IUBMB + inne składniki) oraz  $\alpha$ -amylazy (identyfikowanej przy użyciu nomenklatury IUBMB + organizm wytwarzający).

### 7.11.1 Subtylizyna

#### Białko enzymatyczne

Subtylizyna

#### Numer IUBMB

3.4.21.62

#### Nazwa nadana przez IUBMB

(nazwa systematyczna, nazwa enzymu, synonimy)

Subtilisin;  
enzyme; bacillopeptidase A; bacillopeptidase B; Bacillus subtilis alkaline proteinase biopraser; biopraser AL 15; biopraser APL 30; colistinase; (see also comments); subtilisin J; subtilisin S41; subtilisin Sendai; subtilisin GX; subtilisin E itd.

**Uwagi podane przez IUBMB**

Subtylizyna jest endopeptydazą serynową, przykładem typowym rodziny S8 peptydaz. Nie zawiera reszt cysteinowych (choć takie występują w enzymach homologicznych). Warianty obejmują subtylizynę BPN' (także subtylizynę B, subtylopeptydazę B, subtylopeptydazę C, proteinazę bakteryjną Novo) oraz subtylizynę Carlsberg (subtylizyna A, subtylopeptydazę A, alkalaza Novo). Poprzednio oznaczona jako WE 3.4.4.16 i ujęta w WE 3.4.21.14. Podobne enzymy wytwarzane są przez różne szczepy *Bacillus subtilis* i inne gatunki *Bacillus* [1,3].

**Reakcja**

Hydroliza białek o szerokiej selektywności w kierunku wiązań peptydowych i z preferencją do dużych reszt bez ładunku w P1. Hydrolizuje amidy peptydowe.

**Typ reakcji**

Hydrolazy;  
Działa na wiązania peptydowe (peptydazy);  
Endopeptydazy serynowe

**Numer WE**

232-752-2

**Nazwa WE**

Subtilisin

**Numer CAS**

9014-01-1

**Nazwa CAS**

Subtilisin

**Stężenie białka enzymatycznego**

26%

**Inne składniki**

Inne białka, peptydyaminokwasy

39%

Węglowodany

11%

Lipidy

1%

Sole nieorganiczne

23%

**Dodatkowe parametry****Substraty i produkty**białka lub oligopeptydy, woda  
peptydy

### 7.11.2 $\alpha$ -Amylaza

#### Białko enzymatyczne

$\alpha$ -Amylaza

#### Numer IUBMB

3.2.1.1

#### Nazwy nadane przez IUBMB

(nazwa systematyczna, nazwa enzymu, synonimy)

1,4- $\alpha$ -D-glucan glucanohydrolase;  
glycogenase;  
 $\alpha$ -amylase;  
alpha-amylase;  
endoamylase;  
Taka-amylase A

#### Uwagi podane przez IUBMB

Działa na skrobię, glikogen i pokrewne polisacharydy i oligosacharydy w sposób losowy; grupy redukujące są uwalniane w konfiguracji  $\alpha$ . Termin „ $\alpha$ ” odnosi się do początkowej konfiguracji uwalnianej wolnej grupy cukrowej a nie do konfiguracji hydrolizowanego wiązania.

#### Reakcja

endohydroliza wiązań 1,4- $\alpha$ -D-glukozydowych w polisacharydach zawierających trzy lub więcej grup D-glukozy połączonych wiązaniami 1,4- $\alpha$

#### Typ reakcji

hydrolazy;  
glikozydazy;  
glikozydazy, tj. enzymy hydrolizujące związki O- i S-glikozyłowe

#### Numer WE

232-565-6

#### Nazwa WE

Amylase,  $\alpha$ -

#### Numer CAS

9000-90-2

#### Powiązane numery CAS

9001-95-1, 9036-05-9, 9077-78-5,  
135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7,  
144133-13-1  
(wszystkie anulowane)

#### Nazwa CAS

Amylase,  $\alpha$ -

#### Stężenie białka enzymatycznego

37%

#### Inne składniki

Inne białka, peptydyaminokwasy

30%

Węglowodany

19%

Sole nieorganiczne

14%

#### Dodatkowe parametry

#### Substraty i produkty

skrobia; glikogen; woda;  
polisacharyd; oligosacharyd;

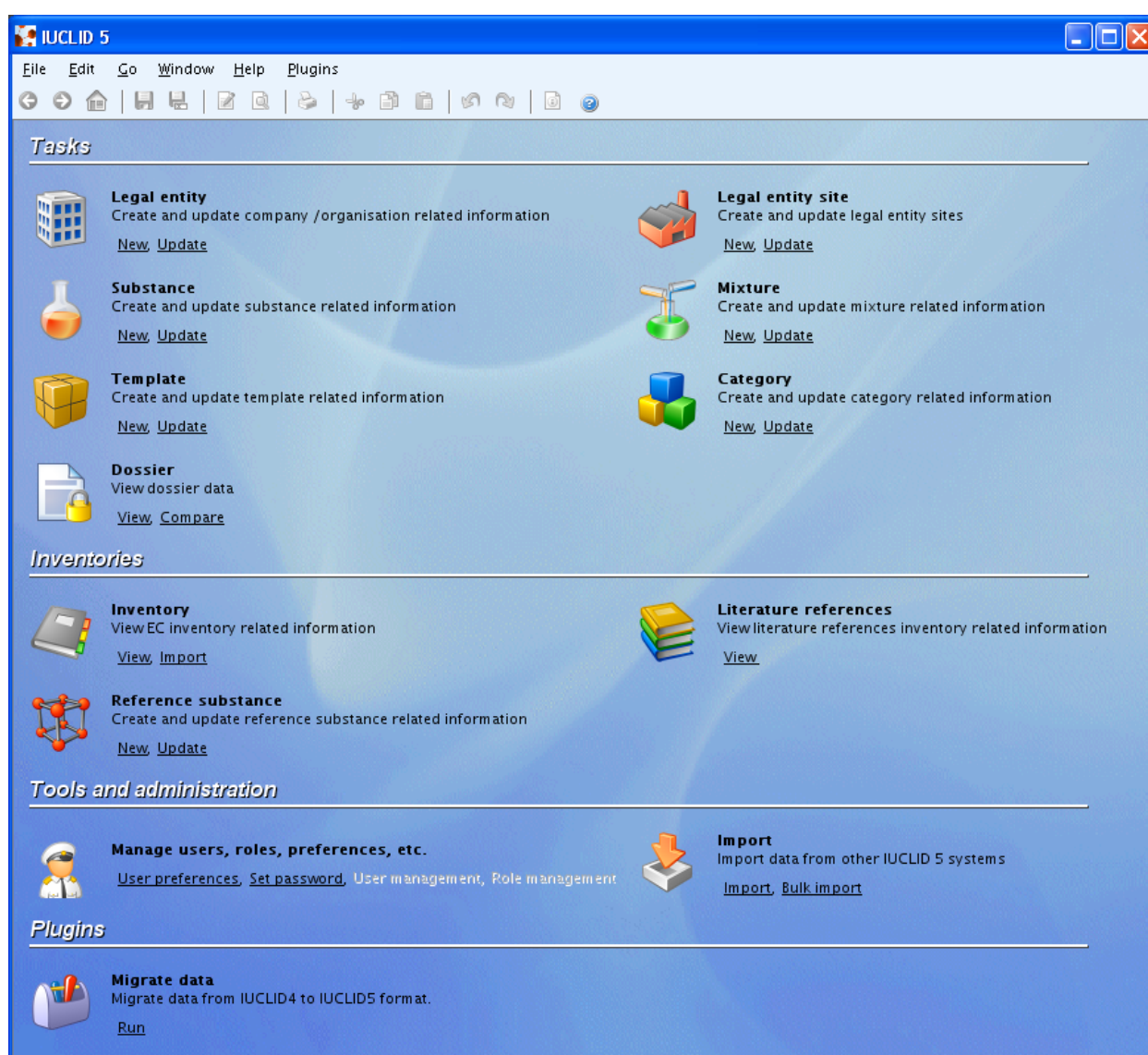


## 8 OPIS SUBSTANCJI W IUCLID 5

Niniejsza część ilustruje, jak można opisywać różne typy substancji – jednoskładnikowe, wieloskładnikowe, substancje określone na podstawie składu chemicznego oraz innych parametrów identyfikujących, a także substancje UVCB – w IUCLID 5.

### 8.1 ZASADY OGÓLNE

System IUCLID 5 składa się z trzech ważnych części dotyczących identyfikacji substancji: wykazu WE<sup>19</sup> w części „**Inventories**” (wykazy); wykazu „**Reference Substance**” (substancja wzorcowa) w części „Inventories”; części 1.1 oraz 1.2 zbioru danych pod nazwą „**Substance**” (substancja).



<sup>19</sup> Obecnie wdrożony jest jedynie wykaz WE. Na późniejszym etapie mogą zostać dodane w tej części inne wykazy, np. TSCA.

### 8.1.1 Wykazy

Część „Inventories” zawiera wykaz WE (patrz: rozdział 3.3) koordynowany centralnie i udostępniany przez Komisję Europejską / Europejską Agencję Chemikaliów, a także wykaz substancji wzorcowych koordynowany lokalnie i w stosownych przypadkach uaktualniany przez użytkowników w miejscu użytkowania.

Wybierając zakładkę wykazu WE (ang. EC inventory), użytkownik może wyszukiwać i wyświetlać dane figurujące w wykazie (tj. numer WE, numer CAS, nazwy WE itd.). Informacje te są dostępne tylko do odczytu.

Za pośrednictwem zakładki „Reference Substance” użytkownik zyskuje dostęp do swojego lokalnego wykazu składników stosowanych w celu identyfikacji wyprodukowanej przez siebie substancji, tj. wraz z zanieczyszczeniami i dodatkami.

Innymi słowy, elementy składowe substancji są tworzone i koordynowane centralnie w wykazie substancji wzorcowych. Substancje wzorcowe można wykorzystywać stosownie dla różnych substancji.

#### Przykład

Jeśli substancja składa się w 91% z 1,2-dimetylobenzenu, a zawartość zanieczyszczenia w postaci 1,3-dimetylobenzenu wynosi 5%, wówczas oba składniki - 1,2-dimetylobenzen i 1,3-dimetylobenzen należy określić w wykazie substancji wzorcowych. Wprowadzona informacja jest następnie zapisywana i przechowywana w wykazie. W przypadku gdy te same składniki występują w odmiennych proporcjach w innej substancji, można je odszukać w wykazie lokalnym i bez trudu wykorzystać powtórnie.

Poniższe ilustracje pokazują część systemu IUCLID 5 poświęconą substancjom wzorcowym. Podzielono je na trzy oddzielne obrazy, ale w systemie IUCLID pojawiają się one na ekranie komputera wszystkie razem.

#### Substancja wzorcowa – część I

Reference substance: 95-47-6 / o-xylene

**General information**

Reference substance name: 95-47-6 / o-xylene

**EC inventory**

EC number: 202-422-2      CAS number: 95-47-6

EC name: o-xylene

Molecular formula: C8H10

Description:

**No EC information available**

Justification:

Okno „Reference Substance - Part I” zawiera pola:

- Reference substance name (*nazwa substancji wzorcowej*)  
Taką nazwę można wybrać w sposób dowolny (w tym przypadku jest to 95-47-6 / 1,2-dimetylobenzene).
- EC inventory (*wykaz WE*)  
Link do wykazu WE (tylko do odczytu) wraz z zamieszczonymi informacjami takimi jak numer WE (ang. EC number).

- No EC information available (brak informacji WE)  
Lista rozwijalna, za pomocą której można podać uzasadnienie nieprzekazania informacji WE (np. nie dotyczy, nie został przepisany).

## Substancja wzorcowa – część II

The screenshot shows a web-based form for entering substance information. It is divided into several sections:

- CAS information:** Contains input fields for 'CAS number' (with value 95-47-6) and 'CAS name' (with value o-Xylene).
- IUPAC name:** A text field containing '1,2-dimethylbenzene'.
- Description:** An empty text area.
- Synonyms:** A table with a 'Name' column listing: o-xylol, orthoxylene, o-dimethylbenzene, o-methyltoluene, and ortho-xylene (highlighted). Below the table are 'Add...', 'Edit...', and 'Delete' buttons.
- Related CAS information:** A table with columns: CAS name, CAS number, and Justification. It lists:
 

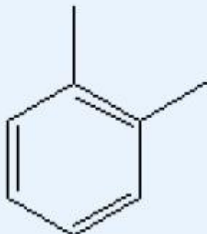
CAS name	CAS number	Justification
m-xylene	108-38-3	isomer
p-xylene	106-42-3	isomer
mixture of xylenes	1330-20-7	mixture of isomers

 Below the table are 'Add...', 'Edit...', and 'Delete' buttons.

Okno „Reference Substance - Part II” zawiera pola:

- „CAS Information” (*dane CAS*) - numer i nazwa CAS (ang. CAS number, CAS name) oraz inne powiązane informacje CAS  
Należy podać numer CAS powiązany z numerem WE. Jeśli istnieje więcej niż jeden numer CAS (np. anulowane numery CAS lub numery CAS tej samej substancji użyte w innych systemach legislacyjnych w celu opisanie substancji zgodnie z wymogami tych systemów), to należy podać inny numer lub inne numery CAS jako powiązane numery CAS;
- IUPAC name (*nazwa IUPAC*);  
W polu „IUPAC name” należy określić nazwę (chemiczną) substancji w języku angielskim. Pole to należy również wypełnić dla substancji UVCB, które są opisywane na podstawie źródła pochodzenia i zastosowanego procesu;
- Pole „Description” (*opis*) dla dodatkowych informacji  
W tym polu należy podać wszelkie informacje istotne dla opisanie substancji, np. w przypadku substancji UVCB lub minerałów;
- Synonyms (*synonimy*);  
W tym polu można wpisać również nazwy IUPAC w innych językach.

### Substancja wzorcowa – część III

Molecular formula	C8H10
Molecular weight range	▼ 106.165 ▼
SMILES notation	Cc1ccccc1C
InChI	InChI=1/C8H10/c1-7-5-3-4-6-8(7)2/h3-6H,1-2H3
Structural formula	
Remarks	<input type="button" value="Load..."/> <input type="button" value="Zoom..."/> <input type="button" value="Delete"/>

Okno „Reference Substance - Part III” zawiera pola:

- Molecular formula (*wzór cząsteczkowy*);  
Wzór cząsteczkowy należy podać w postaci zapisu metodą Hilla.
- Molecular weight range (*masa cząsteczkowa i jej zakres*);
- SMILES notation (*zapis SMILES*);
- Kod InChI ;
- Structural formula - *wzór strukturalny* w formie obrazka.

#### 8.1.2 Zbiór danych o substancji (części 1.1, 1.2, 1.3 oraz 1.4 systemu IUCLID)

Zbiór danych o substancji w IUCLID 5 zawiera wszystkie dane o substancji takie jak końcowe wyniki badań, informacje dotyczące klasyfikacji, oznaczenia oraz tożsamości chemicznej, włącznie ze składem chemicznym. Dane te podzielone są na 11 części.

Dane dotyczące substancji można tworzyć, wyszukiwać, przeglądać oraz uaktualniać na zakładce „Substance”.

W zbiorze danych o substancji szczegóły dotyczące identyfikacji i składu substancji podane są w częściach 1.1 oraz 1.2.

## Identyfikacja substancji – część I

Navigation

Query results Section tree

Complete

0 Related Information

1 General Information

1.1 Identification

1.2 Composition

1.3 Identifiers

1.4 Analytical information

1.5 Joint submission

1.6 Sponsors

1.7 Suppliers

1.8 Recipients

1.9 Product and process oriented research

2 Classification and Labelling

3 Manufacture, use and exposure

4 Physical and chemical properties

5 Environmental fate and pathways

6 Ecotoxicological Information

7 Toxicological information

8 Analytical methods

9 Residues in food and feedingstuffs

10 Effectiveness against target organisms

11 Guidance on safe use

12 Literature search

13 Assessment Reports

Substance: O-XYLENE / EUROPEAN COMMISSION - European Chemicals Bureau / Isp

Third party flags

Third party

Role in the supply chain

Role flags

Role:  Manufacturer  Importer  Only representative  Down

Reference substance

o-xylene / o-xylene / 95-47-6

EC number	EC name
202-422-2	o-xylene
CAS number	CAS name
95-47-6	
IUPAC name	
o-xylene	

Type of substance

Composition

Origin

Trade names

Trade names flag

Name
TG OX
Ortho-X
TG OX2

Add... Edit... Delete

**Część 1.1 (identyfikacja substancji)** zawiera pola:

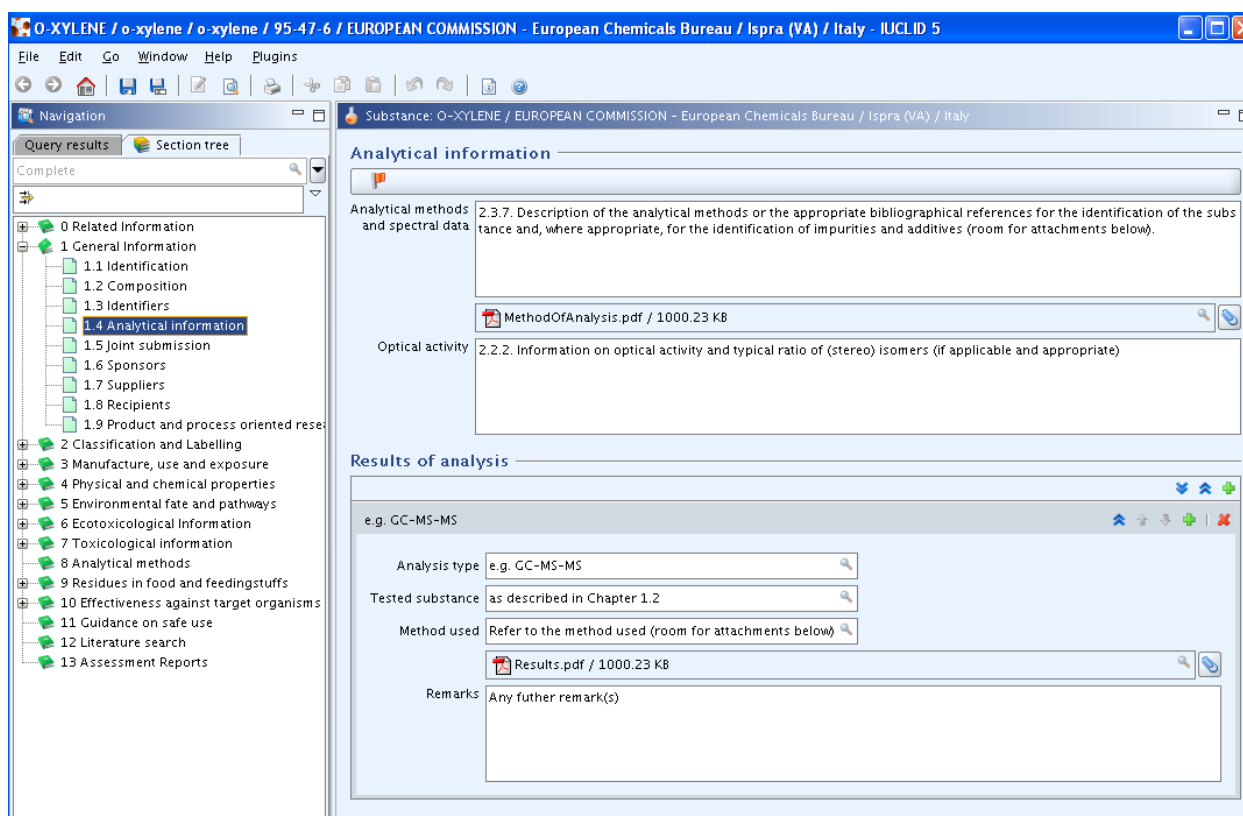
- Reference substance (*substancja wzorcowa*)  
W tym polu należy umieścić link do substancji wzorcowej, do której dana substancja się odnosi. Substancji nadawana jest odpowiednia nazwa.
- Type of substance (*rodzaj substancji*)  
Rodzaj substancji można wybrać z listy rozwijalnej (np. substancja jednoskładnikowa).
- Trade names (*nazwy handlowe*)  
W tym polu można wymienić wszystkie nazwy stosowane wewnątrz i na zewnątrz firmy.

**Część 1.2 (skład substancji)** zawiera opis składu substancji, wraz z linkami do odpowiednich substancji wzorcowych jako elementów składowych danej substancji. W tym polu podaje się wszystkie składniki (np. główne składniki, zanieczyszczenia) rejestrowanych substancji i dodatki. Przykłady wraz ze szczegółowymi wytycznymi, jak wypełnić część 1.2 IUCLID 5 znajdują się w rozdziale 8.2.

**Część 1.3 (parametry identyfikujące)** zawiera informacje służące do zidentyfikowania substancji w ramach systemu informatycznego. Użytkownik może na przykład określić wykorzystywany parametr identyfikujący daną substancję w innym systemie informatycznym, takim jak system SDS. Usprawnia to wymianę informacji pomiędzy IUCLID 5 oraz innymi systemami. Nie stanowi to jednakże części procesu identyfikacji substancji opisanego w niniejszym dokumencie.

Część 1.3 umożliwia również przechowywanie numerów identyfikacyjnych, które są nadawane w ramach różnych programów (np. numer rejestracyjny REACH). Taka informacja również nie stanowi części procesu identyfikacji substancji opisanego w niniejszym dokumencie.

## Identyfikacja substancji – część II



**Część 1.4 (informacje analityczne)** zawiera informacje analityczne o substancji<sup>20</sup> włącznie z informacjami o jej aktywności optycznej.

## 8.2. JAK WYPEŁNIAĆ IUCLID 5 - PRZYKŁADY

Przykład zapisu informacji w IUCLID 5 dla substancji jednoskładnikowej znajduje się w rozdziale 8.2.1, przykład dla substancji wieloskładnikowej – w rozdziale 8.2.2, przykład dla substancji określonej na podstawie składu chemicznego i innych parametrów – w rozdziale 8.2.4, a dla substancji UVCB – w rozdziale 8.2.4.

<sup>20</sup> Ta część może zostać zmieniona po teście beta IUCLID 5.

## 8.2.1 Substancja jednoskładnikowa

Przykład: Substancja jednoskładnikowa			
Nazwa	1,2-dimethylbenzene		
Główny składnik	Typowa zawartość [% wag.]	Dolna granica [% wag.]	Górna granica [% wag.]
1,2-dimethylbenzene	91	88	93
Zanieczyszczenia			
1,3-dimethylbenzene	5	2	7
1,4-dimethylbenzene	2	0,5	3
woda	2	0,5	3

W części 1.1 podano nazwę substancji. Zgodnie z niniejszym dokumentem substancja ta jest substancją jednoskładnikową o nazwie „1,2-dimethylbenzene” (1,2-dimetylobenzen). Oznacza to, iż zbiór danych o substancji powinien zawierać link do substancji wzorcowej „1,2-dimethylbenzene” w części 1.1 IUCLID 5.

The screenshot displays the IUCLID 5 interface for a substance entry. The main panel is titled 'Substance identification' and contains several sections:
 

- Chemical name:** o-Xylene
- Legal entity flags:** (indicated by a flag icon)
- Legal entity:** European Chemicals Bureau / Ispra / Italy
- Role in the supply chain:** Role flags (indicated by a flag icon); Role:  Manufacturer  Importer  Sole representative  Downstream user
- Reference substance:** o-xylene / 1,2-methylbenzene / o-xylene / 95-47-6 (this field is circled in red in the image)
- Type of substance:** Composition: mono constituent substance; Origin: (empty field)

 The left sidebar shows a navigation tree with categories 0 through 5. Category 1, 'General Substance Information', is expanded, and sub-category 1.1, 'Substance Identification', is selected and highlighted.

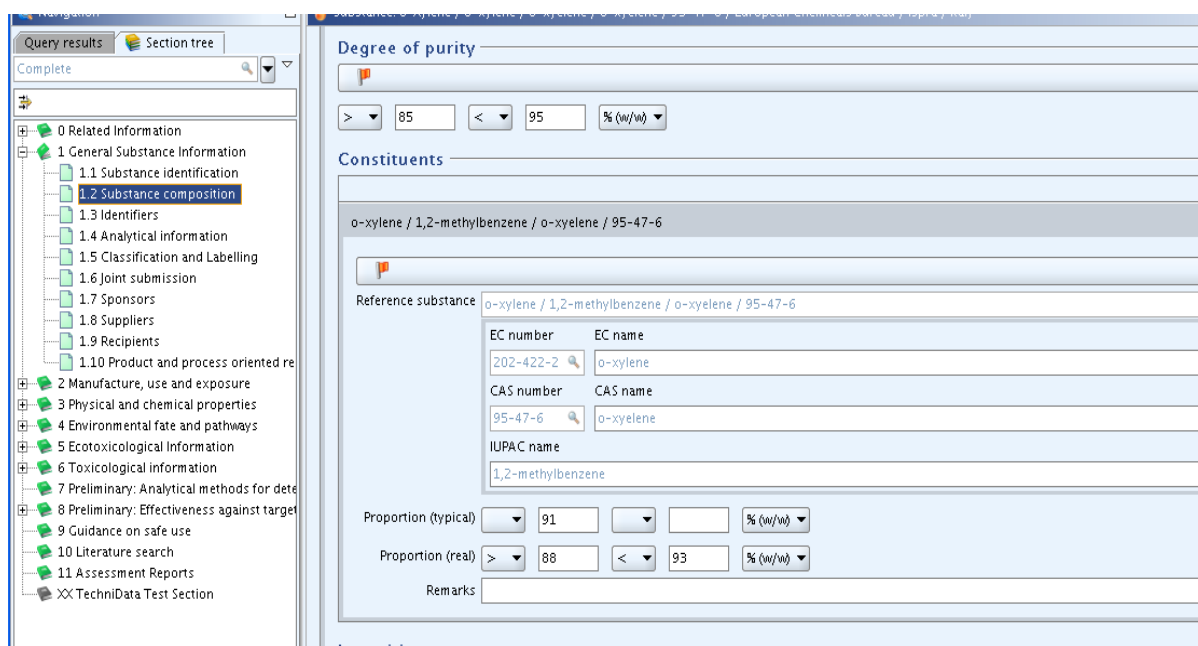
W rozdziale 1.2 skład substancji jest określany na podstawie:

- stopnia czystości (ang. degree of purity)
 

W przypadku substancji jednoskładnikowej w tym polu należy podać stopień czystości (dolna i górna granica) głównego składnika (na ogół  $\geq 80\%$ ).
- składników (ang. constituents)
 

W przypadku substancji jednoskładnikowej w tym polu podawane są parametry identyfikacji chemicznej (numer i nazwa WE, numer i nazwa CAS, nazwa IUPAC). Tożsamość chemiczna jest określona za pomocą linka do substancji wzorcowej.

W polu „Remarks” (uwagi) można wpisać wszelkie informacje. Należy je wykorzystać do uzasadnienia odstępstwa od reguły 80% (rozdział 4.2.2).



– Zanieczyszczenia (Impurities)

Zanieczyszczenia obecne w stężeniu  $\geq 1\%$  (lub powyżej jakiegokolwiek niższej granicy stężenia, jeśli jest to istotne dla klasyfikacji substancji) powinny być określone za pomocą co najmniej jednego parametru identyfikacji chemicznej (numer i nazwa WE, numer i nazwa CAS, nazwa IUPAC). Tożsamość chemiczną określa się za pomocą linka do substancji wzorcowej. Stężenie każdego zanieczyszczenia (stężenie typowe i jego zakres) należy podać w % wagowych.

O ile takie dane są znane, należy podać liczbę i całkowite stężenie nieokreślonych zanieczyszczeń tak by uzupełnić stężenie do 100%.

– Dodatki (Additives)

Wszystkie obecne dodatki należy określić za pomocą parametrów identyfikacji chemicznej (numer i nazwa WE, numer i nazwa CAS, nazwa IUPAC). Tożsamość chemiczną określa się za pomocą linka do substancji wzorcowej. Stężenie (typowe i jego zakres) każdego dodatku należy podać w % wagowych.

### 8.2.2 Substancja wieloskładnikowa

Przykład: Substancja wieloskładnikowa			
Nazwa	Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene		
Główny składnik	Typowa zawartość [% wag.]	Dolna granica [% wag.]	Górna granica [% wag.]
1,4-dimethylbenzene	35	30	40
1,2-dimethylbenzene	30	25	35
1,3-dimethylbenzene	25	20	30
Zanieczyszczenia			
woda	10	5	12



Zgodnie z niniejszym dokumentem substancja ta jest substancją wieloskładnikową składającą się z trzech głównych składników o nazwie „Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene” (masa reakcyjna 1,4-dimetylobenzenu, 1,2-dimetylobenzenu i 1,3-dimetylobenzenu). Woda jest resztkowym rozpuszczalnikiem, którego nie można odseparować od substancji i który należy uznać za zanieczyszczenie, a nie główny składnik.

Oznacza to, iż w IUCLID 5 zbiór danych o substancji powinien zawierać link do substancji wzorcowej „Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene” (patrz część 1.1).

The screenshot displays the IUCLID 5 software interface. The main window title is "Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene / Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and...". The interface includes a menu bar (File, Edit, Go, Window, Help, Plugins), a toolbar, and a navigation pane on the left. The navigation pane shows a tree structure with sections 0 through 10, with "1.1 Identification" selected. The main content area is divided into several sections:

- Substance identification**:
  - Chemical name: Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene
  - Legal entity flags: [Flag]
  - Legal entity: EUROPEAN COMMISSION - European Chemicals Bureau / Ispra (VA) / Italy
  - Third party flags: [Flag]
  - Third party: [Empty field]
- Role in the supply chain**:
  - Role flags: [Flag]
  - Role:  Manufacturer  Importer  Only representative  Downstream user
- Reference substance**:
  - Reaction mass of 1,4-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,3-dimethylbenzene / 1330-20-7
  - EC number: 215-535-7 | EC name: xylene
  - CAS number: 1330-20-7 | CAS name: [Empty field]

Tożsamość chemiczna, typowe stężenie oraz zakres stężenia każdego składnika, dodatku oraz zanieczyszczenia są podane w rozdziale 1.2. Tożsamość chemiczną definiuje się za pomocą linka do substancji wzorcowej.

### 8.2.3 Substancje określone na podstawie składu chemicznego oraz innych parametrów identyfikujących

W celu jednoznacznej identyfikacji niektórych substancji potrzebne są inne podstawowe parametrów identyfikujące (patrz: rozdział 4.2.4). Takie dodatkowe parametry są różne dla każdego typu substancji w tej grupie. Dodatkowy parametr identyfikujący jest jednakże kluczowy dla identyfikacji danej substancji. Na przykład w przypadku minerałów należy zestawić wyniki analizy składu pierwiastkowego z danymi spektralnymi aby zidentyfikować skład mineralogiczny oraz strukturę krystaliczną minerału, co następnie potwierdza się jego charakterystycznymi właściwościami fizykochemicznymi (patrz również: przykład w rozdziale 7.3).

Właściwości fizykochemiczne, takie jak:

- struktura krystaliczna (ukazana za pomocą dyfrakcji promieni rentgenowskich)
- pokrój
- twardość
- zdolność pęcznienia
- gęstość
- powierzchnia właściwa
- itd.

**Przykład:** Substancja określana na podstawie składu chemicznego oraz innych parametrów identyfikujących

Ściśle określone, dodatkowe parametry identyfikujące można podać dla określonych minerałów, ponieważ minerały mają charakterystyczne właściwości fizykochemiczne umożliwiające ich pełną identyfikację, np.:

- bardzo niska twardość talku
- zdolność pęcznienia bentonitu
- pokrój diatomitu (mikroskop optyczny)
- bardzo wysoka gęstość barytu
- powierzchnia właściwa (adsorpcja azotu)

Tego rodzaju informacje należy wpisać w pole opisu substancji wzorcowej, z którym powiązany jest zbiór danych o substancji (część 1.1 IUCLID 5).

<b>IUPAC name</b>	IUPAC name of the mono or multiple constituent substance
<b>Description</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• very low hardness for talc</li> <li>• swelling capacity of bentonite</li> <li>• shapes of diatomite (optical microscope)</li> <li>• very high density of barite</li> <li>• surface area (nitrogen adsorption)</li> </ul>

#### 8.2.4 Substancja UVCB

Substancji UVCB nie można jednoznacznie określić za pomocą nazwy IUPAC składników, ponieważ identyfikacja wszystkich składników nie jest możliwa, bądź też substancje te mogą być określone w sposób ogólny z powodu zmienności składu. Podstawowe parametry identyfikujące substancję UVCB opisują źródło pochodzenia substancji oraz zastosowany proces. Z powodu braku rozróżnienia pomiędzy składnikami i zanieczyszczeniami w odniesieniu do substancji UVCB nie należy stosować określeń „główne składniki” i „zanieczyszczenia”.

Mimo to, należy podać skład chemiczny oraz tożsamość składników, na tyle na ile są one znane. Opis składu można często przedstawić w sposób bardziej ogólny, na przykład: „liniowe kwasy tłuszczowe C8-C16” lub „etoksylany alkoholi C10-14 z 4-10 jednostkami oksyetylenowymi”.

W celu określenia substancji UVCB stosuje się zasady opisane dla substancji jedno- i wieloskładnikowych. Sama substancja jest określana na podstawie substancji wzorcowej oraz znanych składników.

Należy zauważyć, iż definiując substancję jako substancję wzorcową należy podać nazwę (chemiczną) substancji UVCB w polu „IUPAC name” (mimo iż substancja UVCB rzadko ma „klasyczną” nazwę IUPAC). W polu „description” (opis) należy wpisać informacje dodatkowe (np. warunki reakcji).

<b>Przykład:</b> Substancja UVCB	
<b>Nazwa</b>	destylaty (z węgla kamiennego), wysokotemperaturowe, frakcja benzolowa
<b>Opis</b>	Destylat z destylacji frakcyjnej węgla o przybliżonym zakresie temperatur destylacji od 30°C do 180°C (86 °F do 356 °F). Składa się głównie z węglowodorów C4 do C6 alifatycznych i aromatycznych, a także z dwusiarczku węgla, cyklopentadienu, pewnej ilości siarkowodoru.

**EC inventory**

EC number: 310-300-6    CAS number: 185323-42-6

EC name: distillates (coal), high-temperature, benzole fraction

Molecular formula:

Description: The distillate from the fractional distillation of high-temperature coal having an approximate distillation range of 30°C to 180°C (86°F to 356°F). Composed primarily of C4 to C6 alifatic and aromatic hydrocarbons with carbon disulfide, cyclopentadiene and some hydrogen sulfide.

---

**No EC information available**

Justification:

---

**Reference substance information**

Reference substance:

---

**CAS information**

CAS number: 185323-42-6

CAS name: distillates (coal), high-temperature, benzole fraction

---

**IUPAC name**

The name of the UVCB should be reported in this field. In this case "distillates (coal), high-temperature, benzole fraction".

Also when no IUPAC name can be derived, the name of the substance should be reported in this field

---

**Description**

The description of any additional information should go into this field, in this case:

The distillate from the fractional distillation of high-temperature coal having an approximate distillation range of 30°C to 138°C (86°F to 356°F). Composed primarily of C4 to C6 alifatic and aromatic hydrocarbons with carbon disulfide, cyclopentadiene and some hydrogen sulfide.

W przypadku zbioru danych o substancji obowiązują zasady opisane dla substancji jedno- i wieloskładnikowych. Dane te zawierają link do substancji wzorcowej definiującej substancję w części 1.1.

**1 General Substance Information**

- 1.1 Substance identification
- 1.2 Substance composition
- 1.3 Identifiers
- 1.4 Analytical information
- 1.5 Classification and Labelling
- 1.6 Joint submission
- 1.7 Sponsors
- 1.8 Suppliers
- 1.9 Recipients

Legal entity: European Chemicals Bureau / Ispra / Italy

**Role in the supply chain**

Role flags:

Role:  Manufacturer  Importer  Sole representative

**Reference substance**

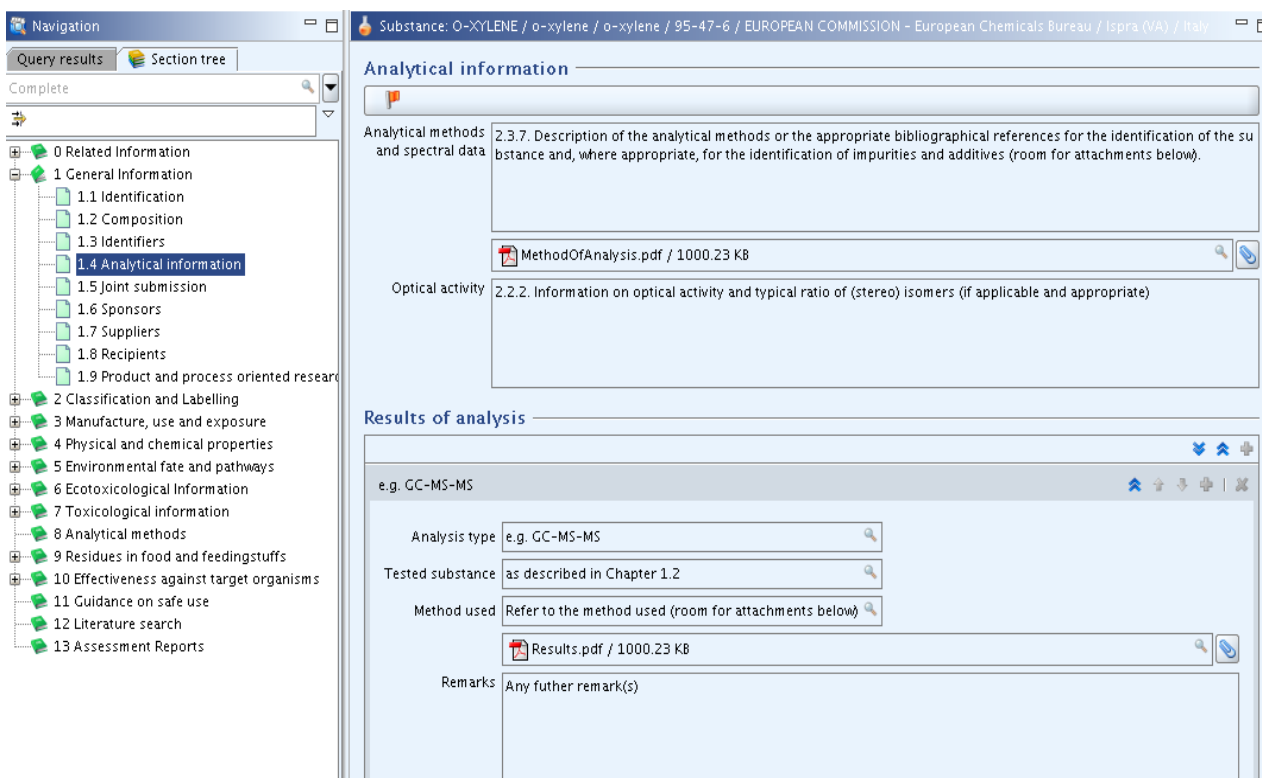
Example for UVCB / The name of the UVCB should be reported in this field.

Znane składniki definiowane są na podstawie stosownych substancji wzorcowych, tak jak w przypadku substancji jedno- i wieloskładnikowych.

### 8.3 RAPORTOWANIE INFORMACJI ANALITYCZNYCH

Informacje analityczne raportowane są w rozdziale 1.4. Rozdział ten składa się z dwóch części:

- Analytical information (*informacje analityczne*)
- Analysis results (*wyniki analizy*)



Ten podział wynika bezpośrednio z wymagań rozporządzenia REACH (załącznik VI):

Informacje analityczne:

- Analytical methods (*metody analityczne*): w tym polu należy podać opis metod analitycznych (REACH, załącznik VI, 2.3.7). W przypadku długich tekstów istnieje możliwość załączenia dokumentów
- Optical activity (*aktywność optyczna*): w tym polu należy podać informacje dotyczące aktywności optycznej i typowych proporcjach (stereo)izomerów, o ile jest to stosowne (REACH, załącznik VI, 2.2.2).

Wyniki analizy:

Blok wyników analiz ma umożliwić użytkownikowi zamieszczenie informacji o wynikach analiz odnoszących się do identyfikacji i dołączenie elementów takich jak chromatogramy. Można go wykorzystać do zamieszczenia danych spektralnych (REACH, załącznik VI, 2.3.5) lub danych chromatograficznych (REACH, załącznik VI, 2.3.6).

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

Rada Unii Europejskiej (2006) Wniosek w sprawie rozporządzenia Parlamentu Europejskiego i Rady w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH), utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów i zmiany dyrektywy 1999/45/WE oraz rozporządzenia (WE) dotyczącego trwałych zanieczyszczeń organicznych. 12 czerwca 2006 r. 7524/06

Rada Unii Europejskiej (2005) Wniosek w sprawie rozporządzenia Parlamentu Europejskiego i Rady w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH), utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów i zmiany dyrektywy 1999/45/WE oraz rozporządzenia (WE) dotyczącego trwałych zanieczyszczeń organicznych. 19 grudnia 2005 r. 15921/05

KE (2003-A) Wniosek w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH), utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów i zmiany dyrektywy 1999/45/WE oraz rozporządzenia (WE) dotyczącego trwałych zanieczyszczeń organicznych. 29 października 2003 r. COM (2003) 644 wersja ostateczna: tom I

KE (2003-B) Wniosek w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH), utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów i zmiany dyrektywy 1999/45/WE oraz rozporządzenia (WE) dotyczącego trwałych zanieczyszczeń organicznych. 29 października 2003 r. COM (2003) 644 wersja ostateczna: tom II – załączniki od I do IX do propozycji rozporządzenia

KE (2003-C) Wniosek w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH), utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów i zmiany dyrektywy 1999/45/WE oraz rozporządzenia (WE) dotyczącego trwałych zanieczyszczeń organicznych. 29 października 2003 r. COM (2003) 644 wersja wstępna: tom III – załącznik X, część A do propozycji rozporządzenia

KE (2003-D) Wniosek w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH), utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów i zmiany dyrektywy 1999/45/WE oraz rozporządzenia (WE) dotyczącego trwałych zanieczyszczeń organicznych. 29 października 2003 r. COM (2003) 644 wersja wstępna: tom IV – załącznik X, część B do propozycji rozporządzenia

KE (2003-E) Wniosek w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH), utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów i zmiany dyrektywy 1999/45/WE oraz rozporządzenia (WE) dotyczącego trwałych zanieczyszczeń organicznych. 29 października 2003 r. COM (2003) 644 wersja wstępna: tom V – załącznik X, część C do propozycji rozporządzenia

KE (2003-F) Wniosek w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH), utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów i zmiany dyrektywy 1999/45/WE oraz rozporządzenia (WE) dotyczącego trwałych zanieczyszczeń organicznych. 29 października 2003 r. COM (2003) 644 wersja wstępna: tom VI – załączniki XI-XVII do propozycji rozporządzenia (zawiera poprawione sprawozdanie finansowe na str. 247 i nast.)

Europejskie Biuro Chemiczne (ECB) (2003) Notification of new chemical substances in accordance with Directive 67/548/EEC on the classification, packaging and labeling of dangerous substances. No Longer Polymer List. EUR 20853 EN (dostępna na pośrednictwem strony internetowej ECB)

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

Parlament Europejski (2005) Rezolucja legislacyjna Parlamentu Europejskiego w sprawie wniosku dotyczącego rozporządzenia Parlamentu Europejskiego i Rady w sprawie rejestracji, oceny, udzielania zezwoleń i stosowanych ograniczeń w zakresie chemikaliów (REACH), utworzenia Europejskiej Agencji Chemikaliów i zmiany dyrektywy 1999/45/WE oraz rozporządzenia (WE) dotyczącego trwałych zanieczyszczeń organicznych. 17 listopada 2005 r. P6\_TA-PROV (2005)11-17

- Geiss F, Del Bino G, Blech G, et al. (1992) The EINECS Inventory of existing chemical substances on the EC market. *Tox Env Chem*, tom 37, str 21-33
- Rasmussen K, Christ G and Davis JB (1998) Registration of polymers in accordance with Directive 67/548/EEC. *Tox Env Chem*, tom 67, str. 251-261
- Rasmussen K, Pettauer D, Vollmer G et al. (1999) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for UVCB substances. *Tox Env Chem*, tom 69, str. 403-416
- Amerykańska Agencja Ochrony Środowiska (US EPA) (1978) TSCA PL 94-469 Candidate list of chemical substances. Addendum I. Generic terms covering petroleum refinery process streams. US EPA, Office of Toxic Substances, Waszyngton 20460
- US EPA (2005-A) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Products containing two or more substances: formulated and statutory mixtures. <http://ww.epa.gov/opptintr/newchems/mixtures.txt>
- US EPA (2005-B) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Products containing two or more substances: complex reaction products. <http://ww.epa.gov/opptintr/newchems/rxnprods.txt>
- US EPA (2005-C) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Certain Chemical Substances containing varying Carbon Chain Lengths(alkyl ranges using the CX-Y notation) substances: complex reaction products. <http://ww.epa.gov/opptintr/newchems/alkyl-rg.txt>
- 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. <http://ww.epa.gov/opptintr/newchems/uvcb.txt>
- UBA (2001) Umweltbundesamt Austria. Collection of Information on Enzymes. Final report. Cooperation between Federal Environment Agency Austria and Inter-University Research Center for Technology, Work and Culture (IFF/IFZ). Numer kontaktu B4-3040/2000/278245/MAR/E2
- Vollmer et al. (1998) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. *Tox Env Chem*, tom 65, str. 113-122
- Weininger (1988) SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules; *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*; 1988; 28(1); 31-36.

## ZAŁĄCZNIK I MATERIAŁY POMOCNICZE

Niniejszy załącznik zawiera spis stron internetowych, baz danych oraz podręczników, które mogą być przydatne w celu odnalezienia stosownych nazw IUPAC, CAS oraz WE, numerów CAS i WE, wzorów cząsteczkowych oraz strukturalnych, zapisu SMILES oraz innych parametrów wymaganych na potrzeby identyfikacji substancji. Nie uwzględnia on baz danych oraz materiałów komercyjnych.

Informacje ogólne		
Parametr identyfikujący substancję	Źródło	Opis źródła
Informacje ogólne	<a href="http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html">http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html</a>	Zbiór baz danych oraz narzędzi ułatwiających użytkownikom wyszukiwanie informacji chemicznych
	<a href="http://chemfinder.cambridgesoft.com/">http://chemfinder.cambridgesoft.com/</a>	Nieodpłatna baza danych zawierająca struktury chemiczne, właściwości fizyczne oraz hiperłącza do stosownych informacji
	<a href="http://www.accelrys.com/accord/productlisting.html">http://www.accelrys.com/accord/productlisting.html</a>	Program chemiczny; Accord Alphabetical Product Listing
	<a href="http://www.syrres.com/esc/free_demos.htm">http://www.syrres.com/esc/free_demos.htm</a>	Nieodpłatne przeszukiwanie baz danych: Environmental fate database ; KOW (online Log P) ; PHYSPROP (właściwości fizyczne)

Nazwa oraz inne parametry identyfikujące		
Parametr identyfikujący substancję	Źródło	Opis źródła
Nazwa IUPAC	<a href="http://www.iupac.org">http://www.iupac.org</a> albo dokładniej: <a href="http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html#inorganic">http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html#inorganic</a> (nieorganiczne) <a href="http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html">http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html</a> (ogólne)	Oficjalna strona internetowa IUPAC
	<a href="http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac">http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac</a>	Nazewnictwo chemiczne oraz zalecenia IUPAC (pod patronatem IUPAC)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Najważniejsze publikacje IUPAC poświęcone nazewnictwu
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Najważniejsze publikacje IUPAC poświęcone nazewnictwu
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Najważniejsze publikacje IUPAC poświęcone nazewnictwu



Nazwa oraz inne parametry identyfikujące		
Parametr identyfikujący substancję	Źródło	Opis źródła
Nazwa IUPAC	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Najważniejsze publikacje IUPAC poświęcone nazewnictwu
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Tom wprowadzający poświęcony związkom chemicznym wszelkiego rodzaju
Nazwa IUPAC	<a href="http://www.acdlabs.com/products/name_lab">http://www.acdlabs.com/products/name_lab</a>	Komercyjny program komputerowy służący do nazywania substancji, który może być bardzo pomocny w nazywaniu umiarkowanie złożonych struktur. Dostępny bezpłatny program dla małych cząsteczek (rekomendowany przez IUPAC).
	<a href="http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature">http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature</a>	Nomenklatura IUPAC chemii organicznej (rekomendowane przez IUPAC)
	<a href="http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm">http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm</a>	Kompletny wykaz akceptowanych zwyczajowych i półsystematycznych nazw źródłowych związków organicznych
	<a href="http://www.chemexper.com/">http://www.chemexper.com/</a>	Celem ChemExper Chemical Directory jest stworzenie wspólnej i dostępnej przez internet nieodpłatnej bazy substancji chemicznych. W bazie tej mieści się spis substancji chemicznych wraz z właściwościami fizycznymi. Informacje o substancji chemicznej można przedkładać oraz wyszukać za pomocą przeglądarki internetowej
Nomenklatura IUBMB	<a href="http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/">http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/</a> lub <a href="http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb">http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb</a>	Baza nomenklatury biochemicznej IUBMB (pod patronatem IUBMB)
Inne nazwy	<a href="http://www.colour-index.org">http://www.colour-index.org</a>	Colour Index Generic Names, Colour Index International, Fourth Edition Online
	<a href="http://pharmacos.eudra.org/F3/cosmetic/cosm_inci_index.htm">http://pharmacos.eudra.org/F3/cosmetic/cosm_inci_index.htm</a>	INCI (Międzynarodowe Nazewnictwo Składników Kosmetycznych), oficjalna strona internetowa INCI
Inne parametry identyfikujące	<a href="http://www.cenorm.be">http://www.cenorm.be</a>	Normy CE, oficjalna strona Europejskiego Komitetu Normalizacyjnego
Numer WE	<a href="http://ecb.jrc.it/">http://ecb.jrc.it/</a>	Oficjalna strona internetowa Europejskiego Biura Chemikaliów: system ESIS: wykazy EINECS, ELINCS, NLP oraz załącznik I dyrektywy 67/548/EWG
Numer CAS	<a href="http://www.cas.org">http://www.cas.org</a>	Oficjalna strona internetowa serwisu rejestracyjnego CAS
	<a href="http://www.chemistry.org">http://www.chemistry.org</a>	Oficjalna strona internetowa Amerykańskiego Towarzystwa Chemicznego

<b>Nazwa oraz inne parametry identyfikujące</b>		
<b>Parametr identyfikujący substancję</b>	<b>Źródło</b>	<b>Opis źródła</b>
SMILES	<a href="http://cactus.nci.nih.gov/services/translate/">http://cactus.nci.nih.gov/services/translate/</a>	Bezpłatny generator SMILES
	<a href="http://www.daylight.com/smiles/f_smiles.html">http://www.daylight.com/smiles/f_smiles.html</a>	Informacje oraz nieodpłatny generator SMILES
Masa cząsteczkowa oraz SMILES	<a href="http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html">http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html</a>	Nieodpłatny program ACDChemsketch (dostępny również w wersji komercyjnej)
Niektóre parametry fizyko-chemiczne	<a href="http://www.epa.gov/opptintr/exposure/docs/episuite.htm">http://www.epa.gov/opptintr/exposure/docs/episuite.htm</a>	Pakiet EPI Suite™ jest pakietem działającym w środowisku Windows®, który zawiera modele oceny właściwości fizycznych/ chemicznych oraz losu środowiskowego opracowane przez EPA Office of Pollution Prevention and Toxics oraz Syracuse Research Corporation (SRC)

## ZAŁĄCZNIK II WYTYCZNE TECHNICZNE DOTYCZĄCE PARAMETRÓW IDENTYFIKUJĄCYCH SUBSTANCJE

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

Załącznik ten wprowadza w zagadnienie streszczając podstawowe zasady i kieruje użytkownika tekstu do źródeł pełnej informacji.

Niniejsze omówienie przedstawione zostało w sposób uproszczony, niepełny i niewyczerpujący, nie dość szczegółowy dla profesjonalisty. W żadnym przypadku nie należy uznawać niniejszego załącznika za równoważny oficjalnemu tekstowi źródłowemu.

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

Rejestracja substancji wymaga podania nazwy IUPAC w języku angielskim lub innej jednoznacznej, uznawanej na świecie nazwy substancji.

Nazwa IUPAC jest tworzona w oparciu o międzynarodową standardową nomenklaturę chemiczną ustaloną przez międzynarodową organizację IUPAC - Międzynarodową Unię Chemii Czystej i Stosowanej (International Union of Pure and Applied Chemistry) (patrz: załącznik I). Nomenklatura IUPAC to usystematyzowany system nazywania substancji chemicznych, zarówno organicznych jak i nieorganicznych. W terminologii stosowanej przez IUPAC do opisywania rodzaju i pozycji grup funkcyjnych w substancji służą przedrostki, przyrostki oraz wrostki.

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

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

wrostkiem jest **-di**,

a przyrostkiem **-ol**

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

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

Poniżej znajdują się ogólne wytyczne dotyczące struktury nazwy IUPAC. Szczegółowe wskazówki przedstawione są w rozdziale 4 niniejszego dokumentu.

#### 1.1 Substancja organiczna

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

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

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

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

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

**Penten z 2 podwójnymi wiązaniami to pentadiene**

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

Uwaga: W rdzeniu można również posługiwać się uznawanymi przez IUPAC nazwami zwyczajowymi:

**Benzene, toluene, itd.**

Krok 4 Posłużyć się następującą tabelką:

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

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

## 1.2 Substancja nieorganiczna

### 1.2.1 Nadawanie nazw prostym substancjom nieorganicznym

Poniżej przedstawione zostały podstawowe zasady tworzenia nazw substancji nieorganicznych (patrz również: rozdział 7.1, IUPAC Red Book):

1. Nazwę anionów jednoatomowych tworzy się za pomocą przyrostku ‘-ide’:

**O<sup>2-</sup> to „oxide”**

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

**Cu<sup>2+</sup> to „copper(II)”**

3. Nazwę wodzianów tworzy się tak jak nazwę związku jonowego oraz poprzez dodanie przedrostka wskazującego na liczbę atomów węgla (mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, octa-, nona-, deca-) i cząstki „-hydrate”:

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

Uwaga: wodziany oraz, w stosownych przypadkach, forma bezwodna określonego rodzaju soli metalu są uznawane za „substancje tożsame”.

4. Nazwę nieorganicznych związków cząsteczkowych tworzy się poprzez umieszczenie przedrostka (patrz: wodziany) przed każdym pierwiastkiem. Pierwiastek bardziej elektroujemny jest umieszczany na końcu z przyrostkiem ‘-ide’:

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

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

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

**„hydrochloric acid” tworzy anion „chloride”**

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

**„chloric acid” dysocjuje w wodzie na aniony „chlorate”**

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

**„chlorous acid” dysocjuje na aniony „chlorite”.**

### 1.2.2 Nadawanie nazw fazom mineralnym

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

### 1.3 Produkty naturalne oraz składniki pokrewne

Dla produktów naturalnych IUPAC opracował szereg zasad nadawania nazw systematycznych. Krótko mówiąc oznacza to, iż nazwy substancji pozyskiwanych ze źródeł naturalnych tworzone są na podstawie nazwy rodziny, rodzaju lub gatunku organizmu, z którego pozyskano te substancje:

**Nazwę hipotetycznego białka *Hypothecalia Exemplare* tworzy się w oparciu o „hypothecalia” oraz/ lub „exemplare” przykładowo „Horse Exemplare”**

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

**„Condensation product of Horse exemplare, Valarine added to the N-terminus”**

Wiele substancji występujących w przyrodzie to substancje należące do dobrze określonych klas strukturalnych, które można scharakteryzować za pomocą zbioru ściśle powiązanych ze sobą struktur macierzystych, tzn. że każdą z nich może wyprowadzić ze struktury podstawowej. Nazwę systematyczną dla tych występujących w przyrodzie substancji oraz ich pochodnych można tworzyć na podstawie stosownej nazwy podstawowej struktury macierzystej:

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

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

- modyfikacje struktury szkieletowej
- zmianę atomu struktury szkieletowej
- zamiany w stanie uwodornienia, na które wskazuje nazwa struktury macierzystej

- atomy lub grupy zastępujące atomy wodoru struktury macierzystej
- konfiguracje, które nie zostały uwzględnione w nazwie struktury macierzystej lub jeśli nazwa wskazująca na ich istnienie została zmieniona

**Substancja „Thiamin chloride” jest znana również pod nazwą „vitamin B<sub>1</sub>”**

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

#### **1.4 Nazwa według zasad IUPAC niemożliwa do utworzenia**

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

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

## **2 Inne nazwy**

W ramach rejestracji prowadzonej w systemie REACH warto przedłożyć wszystkie stosowne nazwy i/lub powszechnie obowiązujące parametry identyfikujące we wszystkich językach pod którymi dana substancja jest lub będzie wprowadzana na rynek UE (np. nazwy handlowe). Dotyczy to nazw handlowych, synonimów, skrótów, itd.

3. <http://www.colour-index.org>, Colour Index International, Fourth Edition Online

4. <http://dg3.eudra.org/F3/inci/index.htm>, oficjalna strona internetowa INCI

5. <http://www.cleaning101.com>, oficjalna strona internetowa SDA.

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

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

Numer WE składa się z 7 cyfr występujących w następującej konfiguracji: 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>. Pierwsza cyfra określa wykaz, w którym dana substancja figuruje.

Wykaz	Pierwsza cyfra w numerWE EC
EINECS	2 lub 3
ELINCS	4
NLP	5

## 4 Nazwa i numer CAS

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

### 4.1 Nazwa CAS

Nazwa CAS to nazwa nadana przez Chemical Abstract Service (ASC) różniąca się od nazwy IUPAC. Nomenklatura CAS jest tworzona w oparciu o ograniczony zbiór kryteriów, które nie zawsze są wystarczające, aby utworzyć nazwę substancji. W celu uzyskania właściwej nazwy CAS zalecany jest zatem kontakt z Chemical Abstract Service.

Podstawowe zasady nomenklatury są w skrócie następujące:

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

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

### 4.2 Numer CAS

Numery CAS dostępne są za pośrednictwem Chemical Abstract Service.

Numer CAS składa się z minimum 5 cyfr występujących w trzech modułach oddzielonych myślnikami. Drugi moduł zawsze składa się z 2 cyfr, trzeci z 1 cyfry:

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

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

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

Numer CAS musi być zgodny z sumą kontrolną.

### 4.3 Rejestracja substancji w CAS

Serwis rejestracyjny CAS nadaje numery CAS następującym rodzajom substancji chemicznych:

- substancje jednoskładnikowe reprezentowane przez:
  - Substancje o w pełni określonej budowie cząsteczkowej (tj. znane są wszystkie atomy i wiązania chemiczne pomiędzy nimi). Pod uwagę brane są również różne izomery pozycyjne, izomery stereochemiczne oraz formy soli;
  - nazwy, która w wyraźny sposób wskazuje na skład chemiczny danej substancji; określone proporcje dla soli i produktów kondensacji;
- minerały występujące w przyrodzie;



- określone stopy, jony, izotopy i cząstki elementarne;
- substancje złożone, takie jak:
  - chemicznie zmodyfikowane materiały biologiczne;
  - złożone produkty reakcji;
  - produkty procesu przemysłowego.

Aby zarejestrować substancję w rejestrze CAS należy wypełnić stosowny formularz dostępny na stronie [www.cas.org](http://www.cas.org). W formularzu należy podać następujące informacje we wskazanej kolejności ważności:

- dobrze określone związki chemiczne:
  - schemat struktury chemicznej;
  - systematyczna nazwa chemiczna;
  - nazwa(y) zwyczajowa(e);
  - wzór cząsteczkowy;
- złożone produkty reakcji:
  - lista substratów reakcji oraz charakter reakcji;
  - schemat reakcji
  - typowy skład produktu;
- produkty pochodzenia roślinnego i zwierzęcego:
  - rodzaj/gatunek oraz inne jednoznaczne, zwyczajowe nazwy źródła pochodzenia;
  - metoda ekstrakcji;
  - opis dalszej obróbki chemicznej;
- produkty procesów przemysłowych:
  - prekursory i metody przygotowania;
  - schemat przedstawiający proces przemysłowy oraz punkt wyodrębnienia substancji;
  - opis procesu:

#### **Kraking katalityczny, odparafinowany**

- zakres liczby atomów węgla (alkilowych):

#### **C4 do C12**

- właściwości fizyczne:

#### **Zakres temperatury wrzenia, lepkość, ciało stałe, żużel**

- podstawowy skład chemiczny;
- źródło:

#### **Ropa naftowa, węgiel**

- produkty biotechnologiczne:
  - dane sekwencyjne;
  - informacje dotyczące biologicznego źródła pochodzenia, włącznie z rodzajem/gatunkiem;
  - aktywność enzymatyczna.

## 5 Inne kody identyfikacji

Można również podać inne uznawane kody identyfikacji, takie jak:

- numer UN (ONZ);
- numer wg Colour Index;
- numer barwnika;
- itd.

## 6 Wzór cząsteczkowy, wzór strukturalny oraz SMILES

### 6.1 Wzór cząsteczkowy

Wzór cząsteczkowy identyfikuje każdy rodzaj pierwiastka za pomocą jego symbolu chemicznego oraz określa liczbę atomów każdego takiego pierwiastka w pojedynczej cząsteczce substancji.

Wzory cząsteczkowe należy podawać zgodnie z (tradycyjnym) systemem Hilla oraz, dodatkowo, zgodnie z systemem CAS, gdy ten różni się od wzoru Hilla.

Wzór Hilla można utworzyć w sposób następujący:

1. Zidentyfikować pierwiastki i spisać ich symbole chemiczne;
2. Ustawić pierwiastki we właściwej kolejności:
  - a. Substancje zawierające węgiel:
 

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

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

**Pentan: C5H12**

**Penten: C5H10**

**Pentanol C5H12O**
  - b. Substancje nie zawierające węgla:
 

Pierwiastki podawane są w kolejności alfabetycznej:

**Kwas chlorowodorowy: ClH**
3. Dla każdego pierwiastka, którego liczba atomów wynosi  $> 1$ , podać liczbę atomów w indeksie dolnym przy symbolu chemicznym;
4. Informacje, które nie dotyczą głównej struktury, należy podać na końcu wzoru cząsteczkowego po kropce lub przecinku:

## Benzoesan sodu to $C_7H_6O_2$ , sól sodowa

## Dihydrat siarczanu miedzi to $CuO_4S \cdot 2H_2O$

Jeśli określenie wzoru Hilla dla danej substancji nie jest możliwe, wówczas wzór cząsteczkowy substancji należy wyrazić inaczej, na przykład w postaci wzoru empirycznego, uproszczonego opisu atomów i proporcji występujących atomów lub wzoru podanego przez Chemical Abstract Service (patrz: rozdział 4 niniejszego dokumentu).

### 6.2 Wzór strukturalny

Wzór strukturalny pokazuje rozmieszczenie cząsteczek w substancji i związków pomiędzy nimi. Wzór strukturalny powinien wskazywać na umiejscowienie atomów, jonów lub grup oraz rodzaj łączących je wiązań. Dotyczy to również izomerii, tj. cis/trans, chiralności, enancjomerów itd.

Wzór strukturalny można podać w różnych formach: w postaci wzoru cząsteczkowego i/lub w formie schematu strukturalnego.

- Wzór strukturalny w postaci wzoru cząsteczkowego

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

**n-pentan:  $CH_3CH_2CH_2CH_2CH_3$**

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

**2-metylobutan:  $CH_3CH(CH_2)CH_2CH_3$**

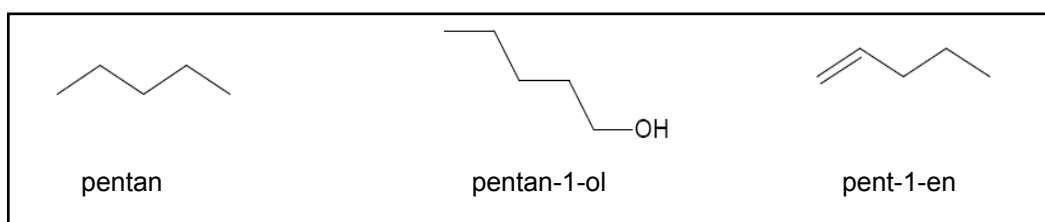
3. W przypadku wiązań podwójnych lub potrójnych wskazać ich umiejscowienie pomiędzy powiązаныmi grupami pierwiastków:

**pent-1-en:  $CH_2=CHCH_2CH_2CH_3$**

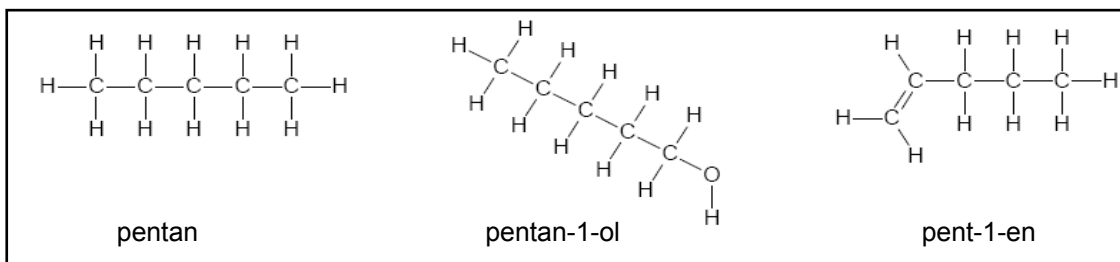
- Wzór strukturalny w postaci schematu strukturalnego

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

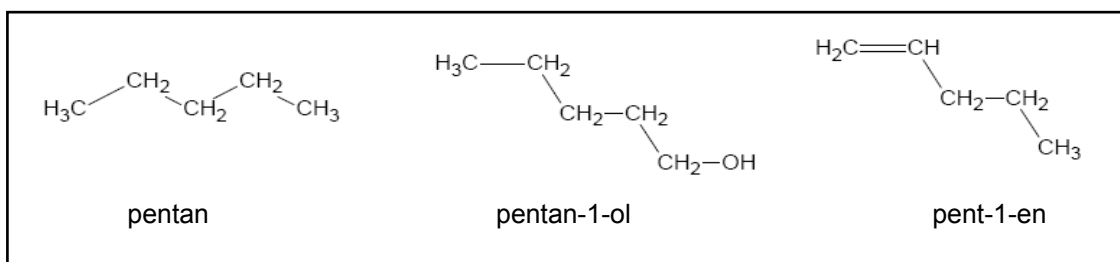
1. Przedstawienie wszystkie pierwiastków innych niż węgiel i wodór przyłączonych do pierwiastków innych niż węgiel:



2. Przedstawienie wszystkich pierwiastków za pomocą nazwy:



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



### 6.3 Zapis SMILES

SMILES to akronim od „Simplified Molecular Input Line Entry Specification” (*uproszczony zapis struktury cząsteczek w postaci liniowej informacji tekstowej*) (Weininger, 1988). Jest to system zapisu chemicznego stosowany do przedstawiania struktury cząsteczkowej poprzez liniowy ciąg symboli. W przypadku standardowego systemu SMILES nazwa cząsteczki jest synonimiczna z jej strukturą: pokazuje w sposób pośredni dwuwymiarowy rysunek struktury cząsteczkowej. Ponieważ dwuwymiarową strukturę chemiczną można narysować na różne sposoby, dla jednej cząsteczki istnieje kilka poprawnych zapisów SMILES. Podstawą SMILES jest przedstawienie modelu wartościowości cząsteczki, przez co system ten nie jest odpowiedni do opisu cząsteczek, których nie można wyrazić za pomocą modelu wartościowości.

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

Zapis SMILES tworzony jest w oparciu o kilka podstawowych zasad:

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

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

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

**kation amonowy to NH<sub>4</sub><sup>+</sup>**

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

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

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

4. Wodór zapisuje się tylko w następujących przypadkach:

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

5. Cztery podstawowe wiązania przedstawia się w sposób następujący:

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

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

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

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

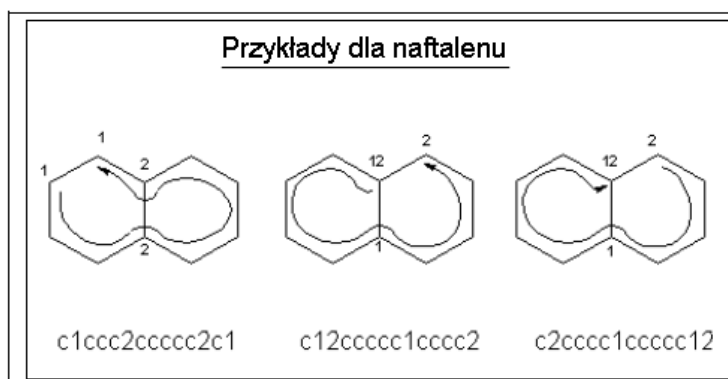
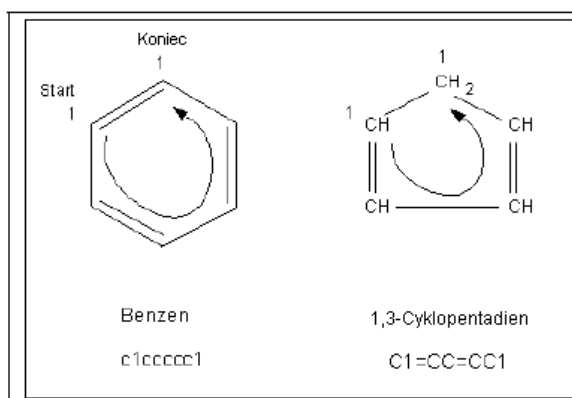
**Kwas pentanowy to CCCCC(=O)O**

b Dozwolone jest umieszczanie podstawników w obrębie podstawników:

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

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

- Ta sama cyfra służy do wskazania początkowego i końcowego atomu dla każdego pierścienia. Atom początkowy i końcowy muszą być ze sobą połączone.
- Cyfry zapisuje się zaraz za atomami wskazującymi pozycje początkowe i końcowe.
- Atomowi początkowemu lub końcowemu mogą być przypisane dwie kolejne cyfry.



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

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

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

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

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

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

**Kwas 2-chloro-2-hydroksypropanowy z określoną chiralnością to C[C@](Cl)(O)C(=O)(O)**

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

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

Zapis SMILES można ustalić za pomocą narzędzi – generatorów SMILES (patrz: załącznik 1).

## 7 Informacje dotyczące aktywności optycznej

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

Skręcalność enancjomerów jest zawsze przeciwna: polaryzują światło w takim samym stopniu, ale w przeciwnych kierunkach. Aktywność optyczna mieszaniny enancjomerów wskazuje zatem na proporcję między dwoma enancjomerami. Mieszanina enancjomerów w proporcji 50:50 posiada aktywność optyczną równą 0.

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

Aktywność optyczna jest zatem parametrem definiującym, który służy do identyfikacji substancji asymetrycznej. Jest ona również jedynym parametrem służącym do rozróżnienia substancji od jej lustrzanego odbicia. W stosownych przypadkach należy zatem podać aktywność optyczną danej substancji.

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

Aktywność optyczną można mierzyć za pomocą kilku różnych metod. Do najczęściej stosowanych należą:

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

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

## 8 Masa cząsteczkowa i zakres masy cząsteczkowej

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

Masę cząsteczkową substancji można określić za pomocą następujących metod:

- W celu określenia mas cząsteczkowych substancji lotnych można zastosować prawo Avogadry, które mówi, iż w danej temperaturze i przy danym ciśnieniu określona objętość dowolnego gazu zawiera określoną liczbę cząsteczek gazu.

$$PV = nRT = NkT$$

n = liczba moli

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

N = liczba cząsteczek

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

k = R/NA

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

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

## 9. Skład substancji

W przypadku każdej substancji należy podać skład substancji jako mieszaniny głównych składników, dodatków, zanieczyszczeń, zgodnie z zasadami i kryteriami opisanymi w rozdziale 4 niniejszego dokumentu.

Każdy składnik, dodatek lub zanieczyszczenie należy we właściwy sposób zidentyfikować za pomocą:

- nazwy (IUPAC lub innej akceptowanej nazwy międzynarodowej);
- numeru CAS (jeśli jest);
- numeru WE (jeśli jest).



Dla każdego składnika, dodatku lub zanieczyszczenia należy podać jego zawartość procentową (najlepiej procenty wagowe, albo objętościowe) oraz, jeśli to możliwe, zakres stężenia w substancji obecnej w obrocie.

Dla każdego składnika(ów) należy podać typową czystość wyrażoną w procentach wraz z jej górną i dolną granicą dla typowych serii obecnych w obrocie. W przypadku dodatków i zanieczyszczeń należy podać typową czystość wyrażoną w procentach lub jej górną i dolną wartość. Suma podanych wartości powinna wynieść 100%.

## 10 Dane spektralne

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

Stosując niektóre dobrze znane metody, na samym widmie lub w załącznikach należy podać następujące informacje:

### *Widmo UV-VIS*

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

### *Widmo IR*

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

### *Widmo NMR*

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

### *Widmo spektroskopii mas (MS)*

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

Można również stosować inne powszechnie uznane metody, jeśli dane spektralne potwierdzą identyfikację substancji np. jej strukturę wewnętrzną. Przykładem takich metod to XRD służąca do identyfikacji składników złożonych tlenków mineralnych oraz XRF służąca do analizy ich składu chemicznego.

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

- zapisywać istotne długości fal lub inne dane;
- przedstawić dodatkowe informacje, np. widma materiałów wyjściowych;
- zgodnie z powyższymi wytycznymi podać nazwę zastosowanego rozpuszczalnika i/lub inne informacje istotne w przypadku określonych metod;
- przedłożyć czytelne kopie widma (zamiast oryginałów) z zaznaczoną poprawnie skalą;
- podać informacje dotyczące zastosowanego stężenia substancji;
- zapewnić, by najwyższe piki odpowiadające substancjom osiągały poziom zbliżony do pełnego zakresu.

### **11 Wysokosprawna chromatografia cieczowa, chromatografia gazowa**

Identyfikacja niektórych substancji wymaga przedstawienia chromatogramu w celu potwierdzenia składu danej substancji. Właściwy chromatograf potwierdzi na przykład obecność zanieczyszczeń, dodatków oraz składników mieszaniny reakcyjnej. Dwie najpowszechniejsze metody stosowane w celu separacji oraz identyfikacji mieszaniny to chromatografia gazowa (GC) oraz wysokosprawna chromatografia cieczowa (HPLC). Te dwie metody oparte są na wzajemnym oddziaływaniu fazy ruchomej z fazą nieruchomą, które prowadzi do oddzielenia składników mieszaniny.

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

- *HPLC*
  - tożsamość substancji
  - właściwości kolumny takie jak średnica, wypełnienie, długość;
  - temperatura, a także zakres temperatur, jeśli taki stosowano;
  - skład fazy ruchomej i zakres, jeśli taki stosowano;

- zakres stężenia substancji;
- metoda wizualizacji, np. UV-VIS;
- wyniki (wskazać główne piki istotne dla identyfikacji substancji);
  
- *GC*
  - tożsamość substancji;
  - parametry kolumny, takie jak średnica, wypełnienie, długość;
  - temperatura, a także zakres temperatur, jeśli taki stosowano;
  - temperaturę wstrzyknięcia;
  - gaz nośny oraz ciśnienie gazu nośnego;
  - zakres stężenia substancji;
  - metoda wizualizacji, np. MS;
  - identyfikacja pików;
  - wyniki (wskazać główne piki istotne dla identyfikacji substancji).

## **12 Opis metod analitycznych**

Załącznik IV REACH wymaga od rejestrujących przedłożenia opisu metod analitycznych oraz/lub przedstawienia odnośników bibliograficznych dotyczących metod wykorzystywanych w celu identyfikacji substancji oraz, w stosownych przypadkach, identyfikacji zanieczyszczeń oraz dodatków. Informacje te powinny pozwolić na odtworzenie zastosowanych metod.