

Ako pripraviť registračnú dokumentáciu týkajúcu sa nanoštruktúr: osvedčené postupy

Verzia 1.0 – máj 2017

ABC

Vyhlasenie o vylúčení zodpovednosti

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

Verzia	Zmeny	Dátum
Verzia 1.0	Prvé vydanie	máj 2017

Ako pripraviť registračnú dokumentáciu týkajúcu sa nanoštruktúr: osvedčené postupy

Referenčné číslo: ECHA-17-G-13-SK

ISBN: 978-92-9495-880-8

Kat. číslo: ED-02-17-415-SK-N

DOI: 10.2823/571170

Dátum vydania: máj 2017

Jazyk: SK

© Európska chemická agentúra 2017

Obálka © Európska chemická agentúra

Povolenie na reprodukciu výňatkov z normy ISO/TS 80004-2:2015 vydalo Fínske združenie pre normy (SFS).

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

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

Odmietnutie zodpovednosti: Toto je pracovné znenie dokumentu, ktorý bol pôvodne uverejnený v angličtine. Dokument v pôvodnom znení je k dispozícii na webovej stránke agentúry ECHA.

Európska chemická agentúra

Poštová adresa: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Fínsko

Adresa pre návštevy: Annankatu 18, Helsinki, Fínsko

PREDHOVOR

Tento dokument bol vypracovaný s cieľom poskytnúť odporúčania registrujúcim, ktorí pripravujú registračnú dokumentáciu týkajúcu sa „nanoštruktúr“.

Odporúčania v tomto dokumente sú určené registrujúcim a predstavujú najlepšie postupy alebo odporúčania. V rámci týchto najlepších postupov sú označené prvky, ktoré sa odporúčajú ako minimum pri registrácii látok, spĺňajúce odporúčanie Komisie o vymedzení pojmu nanomateriál¹. Tieto prvky sa považujú za dôležité pre pochopenie charakteru látky, ktorej sa týka registračná dokumentácia.

Cieľom tohto dokumentu je stanoviť kritériá na rozlišovanie medzi rôznymi nanoštruktúrami a poskytnúť súbor prvkov, ktoré sa odporúča uvádzať pri charakterizovaní nanoštruktúr.

Toxikologické a ekotoxikologické informácie uvedené v registračnej dokumentácii musia zahŕňať riziká, ktoré predstavujú všetky možné formy látky podliehajúcej registrácii vrátane nanoštruktúr.

Uplatňovaním týchto najlepších postupov sa zabezpečí konzistentné uvádzanie údajov v registračných dokumentáciách a registrujúcim sa uľahčí jednoznačné preukazovanie plnenia registračných povinností pre látky, ktoré zodpovedajú pojmu vymedzenému Európskou komisiou (látky, ktoré zodpovedajú vymedzeniu pojmu nanomateriál, sa ďalej v tomto dokumente označujú ako nanomateriály).

Cieľom tohto dokumentu je poskytnúť odporúčania špeciálne k nanomateriálom, pričom sa nevylučuje možnosť uplatnenia všeobecných zásad stanovených v *Usmernení k registrácii* [1].

Cieľom tohto dokumentu nie je odporúčať potenciálnym registrujúcim, ako majú splniť požiadavky na informácie o látkach, ktoré registrujú. Tomu je venovaný iný usmerňujúci materiál (pozri *dotatky týkajúce sa nanomateriálov ku kapitolám R.6, R.7a, R.7b a R.7c v Usmernení k požiadavkám na informácie a k hodnoteniu chemickej bezpečnosti* [2], [3], [4], [5]).

¹ Pozri [Odporúčanie o vymedzení pojmu nanomateriál](#) prijaté Európskou komisiou.

Obsah

1. ÚVOD	5
2. VŠEOBECNÉ ASPEKTY	5
2.1. Registračné povinnosti	6
3. ASPEKTY NANOŠTRUKTÚR	6
3.1. Minimálne prvky odporúčané na uvádzanie pri registrovaní nanoštruktúr	8
(1) Veľkosť	8
(2) Tvar	9
(3) Povrchová chémia	11
4. UVÁDZANIE TECHNICKÝCH ÚDAJOV V REGISTRAČNEJ DOKUMENTÁCI I	13
4.1.1. Záznamy o zložení v oddiele 1.2 databázy IUCLID	13
4.1.2. Uvádzanie technických údajov o nanoštruktúrach.....	14
4.1.3. Praktická ilustrácia uvádzania údajov o nanoštruktúrach v dokumentácii databázy IUCLID	16
SLOVNÍK POJMOV	18
ODKAZY	19

Zoznam obrázkov

Obrázok 1: Schematické znázornenie niektorých tvarov pre kategórie a) guľôčkové, b) s vysokou hodnotou pomeru strán a c) dvojrozmerné. Obrázok prevzatý z normy ISO/TS 80004-2 „Nanotechnológie — Slovník — Časť 2: Nanoobjekty: nanočastice, nanovlákná a nanodoštičky“.	10
Obrázok 2: Idealizované schematické znázornenie častice, ktorej povrchová chémia sa zmenila postupnými povrchovými úpravami.	12
Obrázok 3: schéma organosilánového činidla na povrchovú úpravu XR-Si-(OR') ₃ a chemického zloženia, ktoré dodá povrchu po povrchovej úprave.....	15

1. Úvod

Tento dokument bol vypracovaný s cieľom poskytnúť odporúčania registrujúcim, ktorí pripravujú registračnú dokumentáciu týkajúcu sa „nanoštruktúr“.

Podľa týchto odporúčaní je „nanoštruktúra“ forma látky, ktorá spĺňa požiadavky uvedené v odporúčaní Komisie o vymedzení pojmu nanomateriál^{2,3} (ďalej len „vymedzenie pojmu nanomateriál“) a má príslušný tvar a povrchovú chémiu. To znamená, že nanoštruktúry a iné štruktúry sa môžu registrovať v rámci jednej registrácie.

Tento dokument obsahuje najlepšie postupy, ktoré budú musieť potenciálni registrujúci zvážiť pri uvádzaní údajov o nanoštruktúrach látok v záznamoch o zložení v oddiele 1.2 registračnej dokumentácie.

Rešpektovaním týchto odporúčaní sa zabezpečí konzistentné uvádzanie údajov v registračných dokumentáciách a registrujúcim sa uľahčí jednoznačné preukazovanie plnenia registračných povinností pre látky, ktoré zodpovedajú pojmu vymedzenému Európskou komisiou (látky, ktoré zodpovedajú vymedzeniu pojmu nanomateriál, sa ďalej označujú ako „nanomateriály“).

Slovník pojmov je uvedený na konci tohto dokumentu.

2. Všeobecné aspekty

V usmernení k registrácii sú uvedené kroky, ktoré musia vykonať potenciálni registrujúci, od určenia registračných povinností pri stanovení identity látky cez zváženie prípadného spoločného predloženia s inými stranami a zhromaždenie/vytvorenie relevantných údajov podľa príloh VII – XI až po konečné predloženie týchto informácií v technickej dokumentácii agentúre ECHA. V tomto dokumente sa uvedené informácie neopakujú, keďže pri registráciách týkajúcich sa nanomateriálov sa uplatňujú rovnaké zásady ako pri registráciách týkajúcich sa látok s variabilným zložením a/alebo inými relevantnými parametrami. Podrobnejšie informácie sú dostupné v usmernení agentúry ECHA k identifikácii a pomenovaniu látok podľa nariadení REACH a CLP [6].

Aktualizácia usmernenia k registrácii vydaná v roku 2012 obsahuje odkaz na nanoštruktúry v oddiele 2.2.1 „Prehľad rozsahu registrácie“ a uvádza sa v ňom:

Ak registrujúci vyrába alebo dováža látku v nanoštruktúre, ako aj hromadne, registračná dokumentácia by mala obsahovať informácie o látke v hromadnej forme aj nanoštruktúre⁴.

V tomto dokumente sa poskytujú doplňujúce informácie na pomoc potenciálnym registrujúcim, aby pochopili, čo sú to nanoštruktúry a ako uvádzať údaje o nich konzistentne a prehľadne v oddiele 1.2 registračnej dokumentácie.

² Odporúčanie Komisie z 18. októbra 2011 o vymedzení pojmu nanomateriál (2011/696/EÚ), ktoré je dostupné na adrese: <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2011:275:0038:0040:sk:PDF>.

³ Ďalej sa v tomto dokumente označuje ako „vymedzenie pojmu nanomateriál“.

⁴ Je potrebné pripomenúť, že môže nastať aj situácia, keď sa registrácia látky týka iba nanoštruktúry.

2.1. Registračné povinnosti

Jedným z predpokladov nariadenia REACH je, že „mali by sa zhromažďovať všetky dostupné a dôležité informácie o látkach ako takých, látkach v zmesiach a vo výrobkoch, ktoré napomôžu identifikovať ich nebezpečné vlastnosti a v dodávateľskom reťazci by sa mali podľa reálnych potrieb systematicky poskytovať odporúčania týkajúce sa opatrení manažmentu rizík na predchádzanie nepriaznivých účinkov na zdravie ľudí a životné prostredie“ (odôvodnenie 17 nariadenia REACH, prvá veta).

Ako je opísané v *Usmernení k identifikácii a pomenovaniu látok podľa nariadení REACH a CLP* [6], v prípade niektorých látok je potrebné posudzovať aj iné parametre než chemické zloženie s cieľom určiť ich vplyv na vlastnosti relevantné pre profil nebezpečnosti. Odporúča sa, aby boli tieto doplnkové parametre zahrnuté v hraničných podmienkach stanovených pre látku, ktorej sa týka registrácia, bežne nazývaných profil identity látky. S cieľom preukázať, že každá variácia týchto osobitných parametrov bola uvedená v údajoch predložených na registráciu v rámci príloh VII – XI, každý registrujúci musí tieto parametre špecifikovať vo svojej dokumentácii. V prípade nanomateriálov by sa teda mali posudzovať variácie morfológických parametrov (napríklad veľkosti, tvaru) a povrchovej chémie, aby sa zaistilo, že údaje v prílohách VII – XI sa dajú uplatniť na registrované látky s nanoštruktúrami. Nanomateriály môžu mať rôzne vlastnosti a teda rôznu(-e) klasifikáciu(-e) pre príslušný sledovaný fyzikálno-chemický parameter alebo parameter týkajúci sa zdravia ľudí alebo životného prostredia v porovnaní s rovnakou látkou bez nanoštruktúry⁵.

Požiadavky na prahové množstvo sa uplatňujú podľa vysvetlenia v Usmerneniach k registrácii. To znamená, že prahové množstvo pre registráciu sa uplatňuje na celkovú hmotnosť látky, ktorú vyrába alebo dováža registrujúci [7]. V prípade registrujúcich, ktorí registrujú látky bez nanoštruktúry a látky s nanoštruktúrou, celkové množstvo určuje potrebu a načasovanie registrácie a požiadavky na informácie pre registrovanú látku. Vlastnosti každej nanoštruktúry je potrebné riadne zohľadniť splnením požiadaviek na informácie v prílohách VII až X.

Konkrétne požiadavky na informácie pre právnickú osobu sú dané súhrnnou hmotnosťou ňou vyrábanej alebo dovážanej látky.

3. Aspekty nanoštruktúr

Európska komisia vydala odporúčanie o vymedzení pojmu nanomateriál. Pojem „nanoštruktúra“ však vymedzený nie je a neobsahuje ho ani nariadenie REACH. Napriek tomu sa pojem „nanoštruktúra“ používa už niekoľko rokov v kontexte nariadenia REACH ([7], [8]).

Na ilustráciu použitia pojmu „nanoštruktúra“ je užitočné preskúmať hypotetický príklad. Látky sa môžu vyrábať ako nanomateriály a ako materiály, ktoré nie sú nanomateriálmi⁶. Okrem toho môžu pre danú látku vyrábanú ako nanomateriál existovať viaceré nanomateriály, ktorých zloženie im dáva rovnakú identitu látky, ale ktoré sa navzájom líšia v rozličných iných parametroch. Na ilustráciu pojmu „nanoštruktúra“ na účely tohto dokumentu si predstavme látku, ktorá je pri registrácii identifikovaná ako X, čo môže predstavovať kombináciu viacerých parametrov s potenciálnym vplyvom na vlastnosti tejto látky:

⁵ V databáze IUCLID 6 sú k dispozícii polia uľahčujúce uvádzanie rozsahov veľkosti, tvaru, povrchovej chémie a rozsahov mernej plochy povrchu pre nanoštruktúry v rámci záznamu „hraničného zloženia látky“ v oddiele 1.2 dokumentácie hlavného registrujúceho. Spôsob uvádzania nanoštruktúr v záznamoch technicky závisí od toho, ako registrujúci splnia požiadavky na informácie v prílohách VII – XI.

⁶ Látka, ktorá nespĺňa podmienky odporúčania Komisie o vymedzení pojmu nanomateriál.

- látka vyrábaná vo veľkostnom rozsahu nezodpovedajúcom nanomateriálu,
- látka vyrábaná ako nanomateriál, s guľovitým tvarom a povrchom upraveným chemickou látkou Y (nanomateriál 1),
- látka vyrábaná ako nanomateriál, s tvarom tyče a povrchom upraveným chemickou látkou Z (nanomateriál 2),
- látka vyrábaná ako nanomateriál, s guľovitým tvarom a bez povrchovej úpravy (nanomateriál 3).

Aby bolo možné rozlišovať medzi týmito štyrmi prípadmi, z ktorých každý zodpovedá látke s identitou X, ale navzájom sa líšia, je potrebné mať pojem, ktorý poskytuje možnosť takého rozlíšenia. Týmto pojmom je „nanoštruktúra“. Cieľom pojmu „nanoštruktúra“ je opísať nanomateriály, ktoré majú rovnakú identitu látky (v tomto prípade látka X), a napriek tomu sa navzájom líšia v základných vlastnostiach, ako je tvar a povrchová chémia.

Cieľom tohto dokumentu nie je odporúčať potenciálnym registrujúcim, ako majú splniť požiadavky na informácie o látkach, ktoré registrujú. Tomu je venovaný iný usmerňujúci materiál (pozri [2], [3], [4], [5]). Cieľom je poskytnúť odporúčanie o spôsobe uvádzania údajov o nanoštruktúrach.

Cieľom tohto dokumentu je následne poskytnúť jednoznačné **odporúčania kritérií** pre uvádzanie údajov o nanoštruktúrach, ktoré by mohli konzistentne uplatňovať rôzne subjekty, ale ktoré by zároveň boli dostatočne pružné, aby sa dali uplatniť v prípade rôznorodých registrovaných látok obsahujúcich nanoštruktúry. Je potrebné pripomenúť, že týmto sa nevylučujú všeobecné zásady uvedené v usmernení k identifikácii látok týkajúce sa uvádzania informácií o zložení v registračnej dokumentácii.

Určiť sa dajú tri prvky spoločné pre každý nanomateriál, a to **veľkosť**, **tvar** a **povrchová chémia** častíc. Potenciálny registrujúci by preto mal posúdiť minimálne⁷ vplyv:

- veľkosti častice (či zodpovedá vymedzeniu pojmu nanomateriál),
- tvaru častice,
- povrchovej chémie (t. j. chemickej povahy povrchu),

na svoje povinnosti týkajúce sa spoločného využívania údajov a spoločného predkladania.

Odporúča sa uvádzať nanoštruktúry a iné štruktúry v rámci samostatných záznamov o zložení bez ohľadu na to, ako registrujúci posúdia konečný vplyv týchto prvkov na profil nebezpečnosti (t. j. aj v prípade, keď sa rozhodne, že profily nebezpečnosti registrovaných nanoštruktúr a iných štruktúr sú rovnocenné). Bez tejto prehľadnosti v záznamoch registrujúci nedokáže preukázať, že primerane splnil svoju povinnosť zhromaždiť/vytvoriť základný súbor relevantných údajov podľa príloh VII – XI a že profil nebezpečnosti je zmysluplný pre všetky látky, ktoré registruje. Tieto prvky sa podrobnejšie rozoberajú v nasledujúcej časti.

Na základe týchto aspektov sa na charakterizáciu nanoštruktúr odporúčajú tri minimálne prvky.

⁷ Ako je ďalej vysvetlené v nasledujúcich častiach tohto dokumentu, ak je to relevantné a vhodné pre danú látku, registrujúci môže určiť, že potrebné sú doplňujúce prvky a/alebo ďalšie podrobnosti každého prvku pri uvádzaní údajov na základe testovania a/alebo pri uvádzaní spôsobov použitia atď.

- 1) Veľkosť^{8, 9}
- 2) Tvar
- 3) Povrchová chémia

Ako už bolo uvedené, toto sú minimálne prvky odporúčané na charakterizáciu registrovaných nanoštruktúr v registračnej dokumentácii. V závislosti od registrovanej látky môže byť potrebné uvádzať doplňujúce prvky a/alebo doplňujúce podrobnosti týchto prvkov (t. j. rozsahy mernej veľkosti, špecifické tvary atď.), na základe ich vplyvu na vlastnosti, ako sa určí podľa zhromaždených/vytvorených údajov pre splnenie požiadaviek na informácie.

Je potrebné pripomenúť, že z hľadiska plnenia požiadaviek na informácie môžu byť potrebné osobitné úpravy niektorých štúdií vykonávaných s testovanými materiálmi, ktoré sú nanomateriálmi, a je pravdepodobné, že budúce revízie usmernení OECD na vykonávanie testov zavedú určité zmeny testovacích metód, aby boli lepšie prispôsobené štúdiám o nanomateriáloch. Niektoré metódy navyše nemusia byť vedecky primerané pre nanomateriály. Okrem toho môže byť užitočné zoskupovanie rôznych nanoštruktúr a používanie prevzatých údajov (tzv. „read-across“) a pri používaní zoskupovania a prevzatých údajov rôznych nanoštruktúr môžu existovať niektoré aspekty špecifické pre nanomateriály. Podrobnejšie informácie sú k dispozícii v dodatkoch ku kapitolám R. 7a, R. 7b, R. 7c a R. 6 v *Usmernení k požiadavkám na informácie a k hodnoteniu chemickej bezpečnosti* [3], [4], [5] a [2] (v súčasnosti sa aktualizuje).

3.1. Minimálne prvky odporúčané na uvádzanie pri registrovaní nanoštruktúr

V registračnej dokumentácii sa v oddiele 1.2 uvádzajú profily zloženia pre látku ako záznamy o zložení. Daný profil zloženia môže byť osobitný pre každú právnickú osobu, alebo sa môže uplatňovať iba na určité právnické osoby, alebo môže byť rovnaký pre všetky právnické osoby. V tomto oddiele sa opisujú odporúčané minimálne prvky pre nanoštruktúry na uvádzanie v záznamoch o zložení v databáze IUCLID (ďalej sa označujú ako „záznamy o zložení nanoštruktúry“¹⁰).

(1) Veľkosť

Veľkosť zohráva základnú úlohu pri vymedzovaní pojmu nanomateriál, ako je uvedené v odporúčaní Komisie o vymedzení pojmu nanomateriál. Preto sa veľkosť (alebo konkrétnejšie, či látka je nanomateriál) odporúča ako minimálny prvok na uvádzanie v dokumentáciách pre nanoštruktúry. Základným minimálnym uvádzaním údajov je prípad, keď sa registrácia týka nanoštruktúr, ktoré sú uvedené v zázname o zložení nanoštruktúry. Pri poskytovaní údajov o nanoštruktúre registrujúci môžu navyše uviesť rozsah hodnôt stredného priemeru

⁸ Toto kritérium sa konkrétne týka skutočnosti, či látka spĺňa požiadavky stanovené v odporúčaní Európskej komisie o vymedzení pojmu nanomateriál. Určenie metód použitých pri rozhodovaní, či látka zodpovedá danému vymedzeniu pojmu, je vecou registrujúceho.

⁹ Pokiaľ ide o veľkosť častice, registrujúci môže pri rozhodovaní, či látka zodpovedá odporúčaniam Európskej komisie o vymedzení pojmu nanomateriál, použiť iné metódy. Napríklad v aktuálnom vymedzení pojmu sa pri určovaní, či látka zodpovedá danému vymedzeniu pojmu, počíta s použitím mernej plochy povrchu na jednotku objemu. V prípade, že registrujúci pri určovaní, či je látka nanomateriál, použije mernú plochu povrchu na jednotku objemu alebo iné vedecky platné metódy, meranie veľkosti alebo rozloženia veľkosti nie je na účely tohto dokumentu potrebné. Informácie o veľkosti častice/rozložení veľkosti však môžu byť potrebné pre iné časti registračnej dokumentácie.

¹⁰ Pojmy „záznam o zložení“ a „záznam o zložení nanoštruktúry“ sa podrobnejšie rozoberajú v slovníku pojmov.

(hodnoty D50) základných častíc danej nanoštruktúry (napríklad D50 priemerov 5 – 90 nm, pričom ďalšie podrobnosti o uvádzaní údajov v správach a o potenciálnych obmedzeniach sú k dispozícii v oddiele 4).

Registrujúci môžu potrebovať ďalšie spresnenie rozsahov veľkosti na základe zhromaždených/vytvorených údajov o registrovanej látke a vlastností látky. Niektoré látky budú napríklad vykazovať zmenené vlastnosti, keď veľkosť častice klesne pod hraničnú hodnotu. Hraničná hodnota veľkosti závisí od látky a vplyv na niektoré vlastnosti môže byť v každom jednotlivom prípade silnejší alebo slabší (napríklad na katalytickú aktivitu, vodivosť, optické a elektronické vlastnosti atď.). V iných prípadoch môže byť zmena vlastností postupná a nemusí existovať žiadna konkrétna hraničná hodnota veľkosti. Ako v prípade každej látky, potenciálni registrujúci budú musieť zvážiť všetky dostupné informácie a určiť vplyv veľkosti na vlastnosti relevantné pre profil(-y) nebezpečnosti.

Je potrebné pripustiť, že existujú určité vedecké a technické problémy pri určovaní, či je daná látka nanomateriál. Tieto problémy boli zdôraznené v niektorých publikáciách [9]. Okrem toho je potrebné pripomenúť, že sa vykonáva preskúmanie vymedzenia pojmu nanomateriál a toto preskúmanie zvýraznilo niektoré problémy súvisiace s vymedzením [10]. Cieľom tohto dokumentu však nie je riešenie uvedených vedeckých a technických problémov, ani riešenie problémov týkajúcich sa vymedzenia, ktoré boli zdôraznené v iných dokumentoch. V tomto dokumente sa skôr predpokladá, že registrujúci sám určí, ktoré látky sú nanomateriály, a rozhodne, či a ako uvedie vo svojej dokumentácii príslušné rozsahy veľkosti v závislosti od zhromaždených/vytvorených informácií.

(2) Tvar

Druhým odporúčaným minimálnym prvkom na rozlišovanie medzi rôznymi nanoštruktúrami je tvar základných častíc. Tvar sa považuje za jedno z odporúčaných minimálnych kritérií uvádzania údajov s odôvodnením, že tvar častice môže ovplyvniť jej správanie a teda môže ovplyvniť toxicitu látky [11]. Tvar častice môže ovplyvniť mechanizmus interakcie nanoštruktúry s bunkou (napríklad tvar je dôležitým faktorom, ktorý určuje internalizáciu nanočastíc, a teda toxicitu) [12] a môže ovplyvniť kinetiku ukladania a absorpcie v tele [13]. Tvar častice tiež môže ovplyvniť ukladanie nanomateriálov v pľúcach pri vdychovaní [13].

Odporúča sa, aby registrujúci osobitne uvádzali vo svojich dokumentáciách nanoštruktúry patriace do týchto štyroch kategórií tvarov:

- **Gulôčkové** častice s tromi podobnými vonkajšími rozmermi v každej projekcii (t. j. približne rovnoakoosé štruktúry). To zahŕňa viaceré rôzne tvary, ktoré sa dajú približne označiť za guľky, kocky, hranolčeky atď. Do tejto kategórie nepatria tvary s vysokými hodnotami pomeru strán (pomer strán 5 : 1 alebo vyšší, pozri ďalej).
- **S vysokou hodnotou pomeru strán:** častice s dvomi podobnými vonkajšími rozmermi a výrazne väčším tretím rozmerom (pomer strán 5 : 1 alebo vyšší) [14], [15], [16], [17]¹¹ a v podstate rovnobežnými stranami [15]. Patria sem častice s vysokou hodnotou pomeru strán s dutými štruktúrami (nanorúrky), ako aj pevné, nie duté častice s vysokou hodnotou pomeru strán (nanotyčinky).¹²

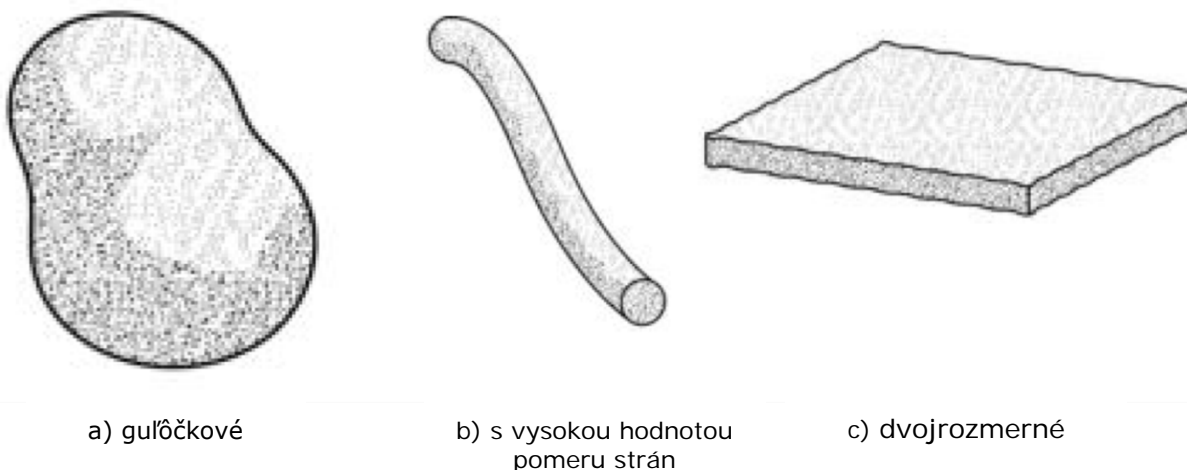
¹¹ (Pozri pravidlá počítania „B“) v dodatku C.

¹² Nanorúrky, vlákna a nanotyčinky sa podľa normy ISO všetky považujú za „nanovláčna“.

- **Dvojrozmerné:** častice s jedným vonkajším rozmerom výrazne menším než ďalšie dva vonkajšie rozmery. Menší vonkajší rozmer je hrúbka častice (napríklad vločky alebo doštičky).
- **Iné:** častice s akýmkoľvek iným nepravidelným tvarom. Táto štvrtá kategória by sa mala používať aj v situáciách, keď sa vyrábajú zmesi častíc s rôznymi tvarmi (napríklad guľky a tyčinky), a teda žiadna z predchádzajúcich uvedených možností nie je vhodná.

Je potrebné poznamenať, že vymedzenia kategórií tvarov sú značne podobné používaným pojmom, najmä nanočastice, nanovlákná a nanodoštičky, ako sú vymedzené v norme ISO TS 80004-2, a tiež pojmom, ktoré používa organizácia ISO a ktoré slúžili ako základ pre kategórie tvarov používané v tomto dokumente. Existujú však drobné rozdiely medzi pojmami, ako sú vymedzené v norme ISO TS 80004-2, a pojmami používanými v tomto dokumente. Tu používané pojmy sú preto zámerne odlišné, aby sa predišlo zmatkom. Konkrétnejšie, vo vymedzení pojmu nanomateriál sa požaduje, aby častica mala iba jeden rozmer v rozsahu 1 – 100 nm, zatiaľ čo podľa terminológie ISO pre nanočastice sa požaduje, aby **všetky tri rozmery** boli v rozsahu nano a podľa terminológie ISO pre nanovlákná sa požaduje, aby **dva rozmery** boli v rozsahu nano. Preto je prinajmenšom teoreticky možné, že nanomateriál by zodpovedal vymedzeniu kategórie guľôčkové podľa terminológie použitej v tomto usmernení, ale nezodpovedal by vymedzeniu pojmu nanočastica podľa terminológie ISO. Registrujúci by si mali byť vedomí tohto možného rozdielu.

Tieto kategórie sú znázornené na obrázku Obrázok 1.



Obrázok 1: Schematické znázornenie niektorých tvarov pre kategórie a) guľôčkové, b) s vysokou hodnotou pomeru strán a c) dvojrozmerné. Obrázok prevzatý z normy ISO/TS 80004-2 „Nanotechnológie — Slovník — Časť 2: Nanoobjekty: nanočastice, nanovlákná a nanodoštičky“.

Po určení, či potenciálny registrujúci vyrába alebo dováža nanomateriály, musí zvážiť, do ktorej z uvedených kategórií tvarov tieto nanomateriály patria. V prípade, že sa v rozsahu registrovanej látky vyskytujú častice patriace do rôznych kategórií tvarov, odporúča sa minimálne v oddiele 1.2 databázy IUCLID uviesť rozdielne záznamy o zložení.

Je potrebné poznamenať, že niektoré nanomateriály môžu obsahovať zmes častíc s rôznymi tvarmi, čo je výsledkom výrobného procesu. V takom prípade by sa pri určovaní, do ktorej kategórie tvarov častice patria, mal použiť tvar väčšiny častíc. To znamená, že ak 50 % alebo viac častíc patrí do jednej kategórie tvarov, mali by sa do tejto kategórie tvarov zaradiť všetky častice. Ak žiadny tvar častíc nedosahuje väčšinu (napr. 30 % častíc je guľôčkových, 30 % častíc má vysokú hodnotu pomeru strán a 40 % častíc je doštičkových), odporúča sa uvádzať takéto častice v kategórii tvarov „iné“. V prípadoch, keď existuje zmes tvarov, odporúča sa,

aby registrujúci uviedol aj ďalšie podrobnosti o tvaroch (napr. 60 % častíc je guľôčkových a 40 % častíc je dvojrozmerných).

Ak registrujúci ovláda tvar častíc (napríklad riadením výrobného procesu), rozdielne výsledné kategórie tvarov by sa nemali uvádzať ako jedna kategória tvarov. To znamená, že ak registrujúci vyrába jedným výrobným procesom guľôčkové častice a po zmene výrobného procesu alebo ovládania tvaru častíc vyrába častice s vysokou hodnotou pomeru strán, odporúča sa uvádzať tieto častice ako súčasť dvoch rozdielnych kategórií tvarov.

Potenciálny registrujúci by mal zvážiť uvádzanie podrobnejšieho opisu tvarov v závislosti od látky a od vplyvu tvaru častíc na vlastnosti relevantné pre požiadavky na informácie podľa príloh VII – XI.

Opisované kategórie tvarov sa odporúčajú ako základné kategórie pre uvádzanie údajov o nanoštruktúrach. Potenciálny registrujúci však môže zistiť, že je pre konkrétne látky relevantné uvádzať rozdelenie na ďalšie kategórie tvarov na základe zhromaždených/vytvorených údajov. Napríklad, ak registrujúci určí, že prítomné sú guľovité aj štvorstenné častice, môže byť potrebné uvádzať ich samostatne, ak testy ukazujú, že rozdiel v tvare vedie k rozdielu v toxikologickom profile.

V prípade častíc s vysokou hodnotou pomeru strán registrujúci môže zistiť, že je dôležité častice ďalej rozdeliť, napríklad na základe dĺžky, tvrdosti, drobivosti, rozpustnosti v biologických roztokoch atď. Je známe, že tieto parametre, spolu s pomerom strán, ovplyvňujú toxicitu nanočastíc s vysokou hodnotou pomeru strán [16] (napríklad ihlovité častice v porovnaní s chumáčovitými časticami).

(3) Povrchová chémia

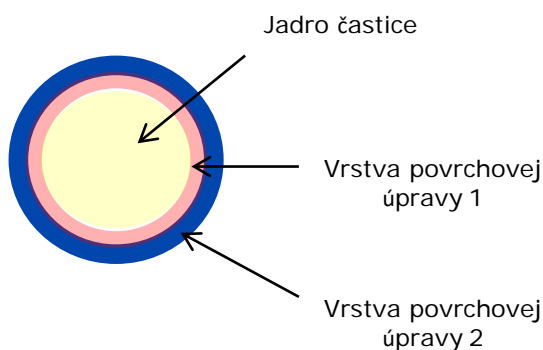
Tretím odporúčaným minimálnym prvkom na uvádzanie v dokumentáciách pre nanoštruktúry je povrchová chémia (t. j. chemická povaha povrchu častice). Vzhľadom na veľkú mernú plochu povrchu nanomateriálov môže mať povrchová chémia častice značný vplyv na jej vlastnosti ([18], [19], [20]). Povrchová chémia závisí od výrobných podmienok uplatňovaných pri vytváraní štruktúr a chemických funkcií povrchu pôsobením činidiel na povrchovú úpravu. Častice s približne rovnakým základným zložením môžu mať veľmi rozdielnu povrchovú chémiu v dôsledku použitia rozdielnych metód syntézy (napríklad pyrolýza pri vysokej teplote v porovnaní s mokrou chemickou syntézou), uplatňovania iných činidiel na ich povrchy (napríklad anorganická úprava, organická úprava) alebo zmenou funkcií ich povrchov (oxidačnou úpravou, redukčnou úpravou). Napríklad častice syntetického amorfného kremíka môžu mať veľmi rozdielnu povrchovú chémiu (napr. oxid hlinitý, trichlórometylsilán, skupina silanolu s nízkou hustotou, skupina silanolu s vysokou hustotou atď.).

Povrchová chémia sa zámerne mení s cieľom upravovať vlastnosti častíc, ako je napríklad disperzia v konkrétnych rozpúšťadlách (voda, organické látky, polyméry atď.), reaktivita (napríklad posilnenie katalytickej aktivity alebo jej úplné potlačenie), rozpustnosť (napr. pôsobením uhličitanu vápenatého, striebra, ZnO atď.) atď.

Zmenou povrchovej chémie častice sa v podstate zavádza „divoká karta“, pretože variabilita povrchovej chémie môže byť taká široká, ako je vymedzenie samotnej látky, keďže v zásade sa k povrchu častice môže pridať akákoľvek látka. Napríklad, zmena povrchovej chémie sa môže týkať organickej povrchovej úpravy (napríklad povrch častíc kremíka upravený alkylsilánom), anorganickej povrchovej úpravy (napríklad povrch častíc TiO₂ upravený oxidom hlinitým, oxidom zirkoničitým, kremíkom atď.) alebo postupnej anorganickej a organickej úpravy jadra danej častice (napríklad povrch častíc TiO₂ upravený postupne oxidom zirkoničitým, oxidom hlinitým, kremíkom a alkylsilánom, pričom postupne sa pridávajú vrstvičky rôznych chemických látok s alkylsilánom ako poslednou/vrchnou vrstvou). Idealizované schematické znázornenie zmeny povrchovej chémie jadra častice povrchovou

úpravou je uvedené na obrázku Obrázok 2. Je potrebné pripomenúť, že jadrá častíc tiež môžu mať rôzne zloženie a/alebo rôzne veľkosti a/alebo rôzne tvary.

Je potrebné tiež pripomenúť, že kumulatívny hmotnostný zlomok príspevku vrstiev nanosených na povrch predstavuje < 20 % profilu zloženia častice. V týchto prípadoch je identita látky založená na identite látky jadra častice podľa všeobecných zásad *Usmernenia k identifikácii a pomenovaniu látok podľa nariadení REACH a CLP* [6]. Ak je hmotnostný zlomok príspevku > 20 %, spravidla to znamená vznik osobitných registračných povinností pre tieto látky.



Obrázok 2: Idealizované schematické znázornenie častice, ktorej povrchová chémia sa zmenila postupnými povrchovými úpravami.

V tomto príklade sa predpokladá, že hmotnostný zlomok príspevku jadra častice je > 80 % vo vzťahu k nanoseným vrstvám, v súlade so zásadami pomenovania podľa usmernenia o identifikácii látok (SID). Je potrebné pripomenúť, že schéma na obrázku sa v žiadnom prípade nemôže považovať za mierku. Relatívna zmena priemeru častice po úprave jadra častice závisí od látky, ktorá sa pridáva a od pridávaného množstva. V jednom extrémnom prípade sa môže zmeniť o hrúbku monovrstvy pridaných molekúl (napríklad monovrstvy alkylsilánov), kým v druhom extrémnom prípade sa pridajú hrubé vrstvy anorganického látky (napríklad úprava oxidom hliníťm).

V praxi môže byť variabilita obmedzená na skupiny chemických činidiel na povrchovú úpravu, ktoré sa bežne používajú na tie isté jadrá častíc, napríklad alkylsilán, alkylsiloxany na častice kremíka. V iných prípadoch bude variabilita závislá od sektora použitia (napr. katalýza, kozmetika, farby).

Vzhľadom na to, aký vplyv má povrchová chémia na vlastnosti častíc, potenciálny registrujúci bude musieť vždy vziať do úvahy variabilitu povrchovej chémie pri plnení svojej povinnosti určiť riziká, ktoré predstavujú všetky možné formy látky podliehajúcej registrácii [21]. Keď chce registrujúci preukázať, ako zohľadnil variabilitu povrchovej chémie pri určovaní rizík, ktoré predstavujú povrchovo upravené nanoštruktúry látky, musí vo svojej zodpovedajúcej registračnej dokumentácii uviesť prinajmenšom **chemickú identitu** činidla(-iel) na povrchovú úpravu.

Chemická identita činidla na úpravu je minimálny prvok, ktorý sa odporúča uviesť, pokiaľ ide o povrchovú chémiu nanoštruktúr, napríklad chemickú identitu činidiel na povrchovú úpravu, identifikátory funkcií, ktoré povrchu dodala chemická úprava, ako napríklad prepieranie kyselinou, oxidačná úprava atď.

Pokiaľ ide o uvádzanie údajov v registračnej dokumentácii v prípade, že sa registrácia týka nanoštruktúr s povrchovou úpravou aj bez povrchovej úpravy, odporúča sa uviesť v oddiele 1.2 dokumentácie najmenej dva záznamy o zložení nanoštruktúry, jeden pre nanoštruktúru bez povrchovej úpravy a jeden pre nanoštruktúru s povrchovou úpravou (za predpokladu, že majú rovnaký tvar).

V prípade nanoštruktúr s povrchovou úpravou bude východným bodom aspekt chemickej identity použitých činidiel (alebo alternatívne aspekt chemického zloženia, ktoré povrch dostane). Obrázok 3 na strane 15 ilustruje, že chemické zloženie môže byť rôzne. Potenciálny registrujúci sa môže pri vytváraní/zhromažďovaní údajov pre splnenie požiadaviek na informácie rozhodnúť, že zoskupí činnidlá s podobným chemickým zložením (napríklad chemické kategórie). Skupiny, ktoré sa napokon uvedú v záznamoch o zložení nanoštruktúry v dokumentácii, budú závisieť od výsledku zhromažďovania údajov, ale odporúča sa zahrnúť prinajmenšom chemickú skupinu a identitu posudzovaných činidiel, ktorých sa daný záznam týka. Potenciálny registrujúci môže pri rozhodovaní, ako splní požiadavky na informácie o registrovaných nanoštruktúrach, vziať do úvahy dodatok R.6-1: *Odporúčania pre nanomateriály uplatniteľné na usmernenie o kvantitatívnom vzťahu štruktúry a aktivity (QSAR) a zoskupovaní chemických látok* [2].

Ak sa napríklad zoskupia všetky alkylsilány, odporúča sa uviesť identitu každého alkylsilánu, ktorý patrí do tejto skupiny. V rámci tohto scenára sa odporúča uviesť aspoň jeden záznam pre nanoštruktúru upravené alkylsilánom (kde sa ako minimálne odporúčané prvky môžu uviesť aj veľkosť a tvar). Odporúča sa, aby sa rôzne chemické skupiny (napr. alkylamíny a alkylsilány) pre prehľadnosť uvádzali v rôznych záznamoch o zložení nanoštruktúry. Ak sa v dokumentácii rôzne skupiny uvádzajú v jednom zázname o zložení nanoštruktúry, odporúča sa poskytnúť odôvodnenie a uviesť identitu každého činidla.

Ide o odporúčané minimálne prvky pri uvádzaní registrovanej povrchovej chémie nanoštruktúr v dokumentácii. Registrujúci môže určiť, že je potrebné samostatne uvádzať špecifické povrchové úpravy alebo podskupiny v rámci chemickej skupiny [napríklad činidlo na povrchovú úpravu vedie ku klasifikácii a označovaniu a/alebo k posudzovaniu, či látka patrí do skupiny perzistentné, bioakumulatívne a toxické (ďalej len „posudzovanie PBT“)] a vytvoria sa k tomu doplnujúce záznamy o zložení nanoštruktúry.

4. Uvádzanie technických údajov v registračnej dokumentácii

4.1.1. Záznamy o zložení v oddiele 1.2 databázy IUCLID

Pokiaľ ide o uvádzanie technických údajov v registračnej dokumentácii, v oddiele 1.2 dokumentácie sa ako záznam(-y) o zložení uvádza(-jú) pre látku profil(-y) zloženia [t. j. identifikácia a rozsahy koncentrácie (hlavných) zložiek/nečistôt/prísad]. Pre danú registráciu sa môžu v prípade potreby vytvoriť viaceré záznamy o zložení, ak sa napríklad, ako už bolo uvedené, registrujú rôzne morfológie, ako je vláknitá a nevláknitá morfológia. V tomto prípade sa vláknitá a nevláknitá látka môžu uvádzať v oddiele 1.2 databázy IUCLID ako samostatné záznamy o zložení. Každý záznam o zložení obsahuje pole „opis zloženia“, v ktorom sa môžu uvádzať podrobné údaje napríklad o výrobnom(-ých) procese(-och), ktorých sa týka daný záznam.

Ďalším príkladom uvádzania viacerých záznamov o zložení by bolo, keby registrovaná látka jednoducho zahŕňala rôzne profily čistoty, pričom niektoré by obsahovali zložky vedúce ku klasifikácii a/alebo k posudzovaniu PBT: registrujúci uvedie v oddiele 1.2 samostatné záznamy o zložení pre profily zloženia s týmito zložkami. Uvádzanie samostatných záznamov o zložení v oddiele 1.2 je pre registrujúcich potrebné, aby mali v technickej dokumentácii uvedené jednoznačné informácie. Registrujúci môže tiež priložiť v oddiele 1.2 doplnujúce dokumenty a tým poskytnúť ďalšie charakterizujúce informácie, o ktorých sa domnieva, že pre ne nie sú k dispozícii žiadne polia v databáze IUCLID. V závislosti od identity látky sa odporúča uvádzať doplnujúce prvky a/alebo doplnujúce podrobnosti týchto prvkov (t. j. rozsahy mernej veľkosti, špecifické tvary atď.), na základe ich vplyvu na vlastnosti, ako sa určí podľa zhromaždených/vytvorených údajov pre splnenie požiadaviek na informácie.

Dôležité je to pre vykonávanie klasifikácie a označovania (C&L) podľa nariadenia CLP, keďže každý záznam o zložení je prepojený s najmenej jedným záznamom o klasifikácii a označovaní vytvoreným v oddieloch 2.1 a 2.2 technickej dokumentácie. Klasifikácia, ku ktorej patrí uvedený záznam o zložení, by preto mala byť jednoznačná v dokumentáciách každého účastníka spoločného predkladania. S tým istým záznamom o klasifikácii a označovaní je možné prepojiť viaceré zloženia, ak majú rovnakú klasifikáciu. Potenciálni registrujúci budú musieť podobne prepojiť záznamy o zložení so zodpovedajúcimi informáciami o použití.

Podrobnejšie informácie, ako uvádzať údaje o zložení v oddiele 1.2 databázy IUCLID a ako prepájať záznamy o zložení so záznamami o klasifikácii a označovaní a o použití, sú dostupné v príručke agentúry ECHA: *Ako pripraviť registračnú dokumentáciu a dokumentáciu k PPORD* [22]. Technické pokyny, ako uvádzať záznam o hraničnom zložení s cieľom špecifikovať profil identity látky, sú dostupné v dodatku 3 k *Usmerneniu k identifikácii a pomenovaniu látok podľa nariadení REACH a CLP* [6].

Okrem toho uľahčuje nástroj subjektu posudzovania v databáze IUCLID 6 priame prepojenie rôznych záznamov o zložení vytvorených v oddiele 1.2 s ich fyzikálno-chemickým profilom/profilom osudu/profilom nebezpečnosti [22]. Zatiaľ čo viaceré záznamy o zložení môžu byť prepojené s tým istým profilom nebezpečnosti, daný záznam o zložení nesmie byť prepojený s viacerými profilmi nebezpečnosti pre konkrétny sledovaný parameter. Keďže záznamy o zložení v oddiele 1.2 sú prepojené s uvádzaním informácií o klasifikácii a označovaní pre danú látku a s jej profilom nebezpečnosti, je zrejmé, že záznamy o zložení v oddiele 1.2 databázy IUCLID sa musia vytvárať s ohľadom na výsledky posudzovania nebezpečnosti vykonaného na danej látke.

4.1.2. Uvádzanie technických údajov o nanoštruktúrach

Nasledujúce technické pokyny opisujú, ako môžu potenciálni registrujúci technicky vyplniť polia dostupné v oddiele 1 databázy IUCLID.

Technické pokyny týkajúce sa polí dostupných v oddiele 1 databázy IUCLID 6 a postupu, ako ich vyplniť, sú uvedené v oddiele 9.4.2 príručky k databáze IUCLID. Potenciálni registrujúci budú tiež musieť uvádzať záznamy o hraničnom zložení, ktoré sú relevantné, keď na danú registrovanú látku pripadajú viacerí registrujúci (pozri *Usmernenie k identifikácii a pomenovaniu látok podľa nariadení REACH a CLP* [6]). V prípade, že sa v rozsahu registrovanej látky vyskytujú nanoštruktúry a dodržiavajú sa odporúčania uvedené v tomto dokumente, musí sa v oddiele 1.2 zodpovedajúcej registračnej dokumentácie uviesť najmenej jeden záznam o zložení nanoštruktúry. Takýto záznam o zložení nanoštruktúry obsahuje tieto dopĺňujúce prvky spolu s profilom zloženia:

(1) Veľkosť

Pre každý jednotlivý záznam o zložení nanoštruktúry (ako sa ďalej špecifikuje tvarom a povrchovou úpravou) potenciálny registrujúci vyberie „*tuhé: nanomateriál*“ zo zoznamu možností pre „fyzikálne skupenstvo/formu látky“. Tým sa otvorí pododdiel venovaný charakterizácii nanomateriálov, kde sa môžu uviesť dopĺňujúce informácie.

Odporúča sa, aby potenciálny registrujúci pre každý jednotlivý vytvorený záznam o zložení nanoštruktúry poskytol informácie o rozsahoch veľkosti týkajúce sa tohto záznamu o zložení nanoštruktúry a konkrétnejšie o rozsahu hodnôt D50 základnej častice tejto konkrétnej nanoštruktúry. Ak je to relevantné pre identifikáciu, môžu byť potrebné ďalšie informácie o veľkosti (pozri nasledujúcu časť venovanú tvaru).

Je potrebné pripomenúť, že platné odporúčanie Európskej komisie o vymedzení pojmu nanomateriál umožňuje za určitých podmienok použitie informácií o mernej ploche povrchu na jednotku objemu ako alternatívy k údajom o rozložení veľkosti častíc s cieľom určiť, či látka

patrí do rozsahu vymedzenia daného pojmu. V prípade, ak sa registrujúci rozhodli použiť na určenie, že látka je nanomateriálom, mernú plochu povrchu na jednotku objemu alebo iné vedecky odôvodnené metódy, môžu uviesť mernú plochu povrchu na jednotku objemu (alebo iné informácie) a môžu poskytnúť vysvetlenie, prečo informácie o veľkosti častíc nie sú potrebné.

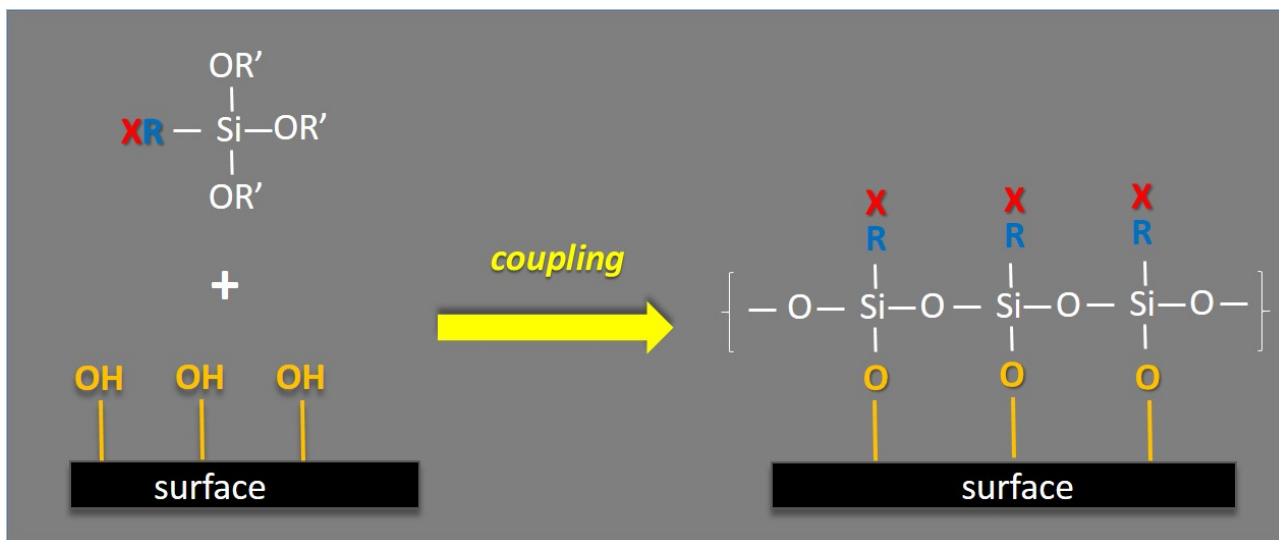
(2) Tvar

Ak si registrujúci v danom zázname o zložení vybral zo zoznamu možností fyzikálneho skupenstva/formy možnosť „tuhé: nanomateriál“, bude musieť vybrať *tvar* nanoštruktúry zo zoznamu dostupných možností (jednu zo štyroch kategórií: guľôčkové, s vysokou hodnotou pomeru strán, dvojrozmerné, iné).

Ak daná nanoštruktúra patrí do kategórie s vysokou hodnotou pomeru strán, registrujúci by mal okrem rozsahu minimálnej veľkosti, ako je opísané v bode 1, uviesť príslušný rozsah hodnôt pomeru strán, ako aj rozsah dĺžok (najdlhší rozmer častice). Tieto informácie sa týkajú konkrétne nanoštruktúr s vysokou hodnotou pomeru strán. Aspekt pomeru a dĺžky takých nanoštruktúr môže mať výrazný vplyv na ich profil nebezpečnosti a môže si vyžadovať osobitné posúdenie.

(3) Povrchová chémia

Pre daný záznam o zložení nanoštruktúry v oddiele 1.2 môže registrujúci v databáze IUCLID vybrať možnosť „žiadna“ alebo „povlak“¹³ zo zoznamu možností pre povrchovú úpravu v zázname o zložení, pri uvádzaní údajov o povrchovej chémii registrovaných nanoštruktúr. Ak registrujúci vyberie možnosť „povlak“, bude musieť v príslušných poliach uviesť názov skupiny číndiel na povrchovú úpravu alebo chemického zloženia, ktoré povrchu dodajú. Vo všeobecnosti môže byť jednoduchšie opísať chemické zloženie číndla v príslušných poliach a voľné textové polia použiť na opísanie chemického zloženia, ktoré číndlá dodajú povrchu. Napríklad organosilány sú dôležité spojovacie číndlá, ktoré sa používajú na úpravu povrchovej chémie [23]. Samotný organosilán neprilne k povrchu, ale reaguje so skupinami na povrchu a vytvorí kovalentnú väzbu s funkčnými siloxánmi. Ilustratívny príklad spojovacej chémie organosilánu je uvedený na obrázku 3.



Obrázok 3: schéma organosilánového číndla na povrchovú úpravu $\text{XR}-\text{Si}-(\text{OR}')_3$ a chemického zloženia, ktoré dodá povrchu po povrchovej úprave.

¹³ Pojem „povlak“ sa týka možnosti výberu zo zoznamu pri uvádzaní údajov o povrchovej chémii v zázname o zložení. Nemá žiadny iný význam a slúži výlučne na uvádzanie údajov v zázname.

Alkoksyilánové skupiny $-Si-(OR')_3$ reagujú hydrolyzou a kondenzáciou s povrchovými hydroxylovými skupinami a vytvoria kovalentnú väzbu medzi funkčnými polysiloxánmi a povrchom. Je potrebné pripomenúť, že chemické zloženie činidla a upravovaného povrchu je rozdielne. $X-R-Si(OR')_3$ je organosilánová molekula, kde X = organická časť (organická zložka, ktorá sa nedá hydrolyzovať, napr. amino, vinyl, alkyl...), OR' = skupina, ktorá sa dá hydrolyzovať ako alkoxy skupina, napríklad metoxy, etoxy atď., ktorá môže reagovať s rôznymi formami hydroxylových skupín. Tieto skupiny môžu vytvoriť prepojenie s anorganickými a organickými látkami a R je oddeľovací prvok, ktorým môže byť arylový alebo alkylový reťazec.

Ako vizuálny opis povrchovej chémie sa môže priložiť schéma povrchovej chémie častice. Identita každého činidla použitého na úpravu povrchu sa môže uviesť v dostupných poliach v poradí, v akom bol povrch upravovaný, pričom vrchná vrstva bude uvedená ako posledná. Aj lipofilita poslednej/vrchnej pridanej vrstvy sa môže uviesť v dostupných poliach. Ak sa povrchové úpravy týkajú viacerých chemických skupín, môže sa v rámci daného záznamu o zložení nanoštruktúry vytvoriť záznam pre každú chemickú skupinu použitú na povrchovú úpravu.

Povrchová chémia vnáša variabilitu a teda zložitosť do uvádzania údajov o plnení požiadaviek na informácie v databáze IUCLID. Registrujúcim sa odporúča, aby na uľahčenie uvádzania príslušných údajov využívali nástroje databázy IUCLID, ako napríklad nástroj subjektu posudzovania.

Je potrebné pripomenúť, že keď sa v oddiele 1.2 databázy IUCLID uvádzajú samostatné záznamy o zložení nanoštruktúry, záznamy by sa mali líšiť v jednom z troch uvádzaných hlavných prvkov, ktoré boli opísané v predchádzajúcej časti, alebo v profile zloženia. Je tiež potrebné pripomenúť, že tieto prvky dopĺňajú profil zloženia a rôzne profily môžu vykazovať rovnaké prvky (veľkosť, tvar a povrchovú chémiu), ale môžu sa líšiť v zložení jadra častice.

Ďalšie oddiely dokumentácie

Keď potenciálny registrujúci uvádza v zázname nanoštruktúry údaje týkajúce sa klasifikácie a označovania, v oddiele 2.1 databázy IUCLID „Klasifikácia a označovanie podľa GHS (Globálny harmonizovaný systém klasifikácie a označovania chemikálií)“ si v zozname „Skupenstvo/forma látky“ vyberie možnosť „nanomateriál“. Napokon, v oddiele 4.1 databázy IUCLID „Vzhľad/fyzikálne skupenstvo/farba“ si potenciálny registrujúci vyberie možnosť „nanomateriál“ ako „formu“, ak sa záznam štúdie sledovaného parametra týka nanoštruktúry látky.

4.1.3. Praktická ilustrácia uvádzania údajov o nanoštruktúrach v dokumentácii databázy IUCLID

V tejto časti sa uvádza hypotetický príklad minimálnych prvkov, ktoré sa odporúčajú pri uvádzaní údajov o nanoštruktúre. Opätovne pripomíname, že ide o odporúčané minimálne prvky. Ak je to relevantné a vhodné pre danú látku, registrujúci mohol určiť, že sú potrebné doplnujúce prvky a/alebo ďalšie podrobnosti každého prvku pri uvádzaní údajov na základe testovania a/alebo pri uvádzaní spôsobov použitia atď.

V ilustratívnom príklade sa nehodnotí, ako si registrujúci splnil povinnosť vytvoriť/zhromaždiť údaje, ale zameriava sa výlučne na uvádzanie technických údajov z týchto zhromaždených/vytvorených informácií v dokumentácii databázy IUCLID.

Hypotetický prípad

Registrovanou látkou je amorfný oxid kovu. Profil zloženia predstavuje 80 – 100 % základnej zložky oxidu kovu a neboli zistené žiadne nečistoty, ktoré by viedli ku klasifikácii a označovaniu a/alebo k posudzovaniu PBT.

Časť vyrábaného alebo dovážaného materiálu má rozloženie veľkosti častíc také, že spĺňa odporúčanie Komisie o vymedzení pojmu nanomateriál. Typický tvar najmenších základných častíc je guľovitý a základné častice sa spájajú do reťazcov v tvare struny, čo vytvára veľkú mernú plochu povrchu. Veľkosť zhlukov je regulovaná drvením. Povrchová chémia sa reguluje buď prostredníctvom podmienok výrobného procesu, alebo chemickou úpravou povrchu častice (napríklad chemickou oxidáciou/redukciou povrchových skupín alebo pomocou činidiel na povrchovú úpravu, ktoré spôsobujú nové chemické zloženie povrchu častice).

Potenciálny registrujúci určil, že všetky nanomateriály amorfného oxidu kovu sa dajú považovať za skupinu a že majú jeden spoločný tvar. V prípade, že všetky častice majú rovnakú povrchovú chémiu (nedošlo k žiadnej zámernej úprave povrchu a použité výrobné procesy poskytli časticiam podobnú povrchovú chémiu), odporúča sa, aby potenciálny registrujúci uviedol v oddiele 1.2 databázy IUCLID najmenej jeden záznam o zložení nanoštruktúry.

V prípade, že častice majú rozličnú povrchovú chémiu, či už v dôsledku použitých výrobných procesov, alebo zámernej úpravy povrchu častíc, odporúča sa uviesť doplňujúce záznamy o zložení nanoštruktúry. Toto odporúčanie znamená, že ak sa registrujú nanoštruktúry s povrchovou úpravou aj bez povrchovej úpravy, v oddiele 1.2 databázy IUCLID by sa uviedli najmenej dva záznamy o zložení nanoštruktúry: najmenej jeden pre nanoštruktúru bez povrchovej úpravy a najmenej jeden pre nanoštruktúru s povrchovou úpravou. V prípade, že sa činidlá považujú za skupinu (napríklad v rovnakej chemickej kategórii), odporúča sa uviesť najmenej jeden záznam o zložení nanoštruktúry pre nanoštruktúru s povrchovou úpravou, pričom by sa tam poskytli informácie o chemickej identite použitých činidiel, ktoré sa považujú za skupinu. V závislosti od údajov zhromaždených pre splnenie požiadaviek na informácie môže byť potrebné vytvoriť doplňujúce záznamy o zložení nanoštruktúry pre príslušnú chemickú skupinu. V prípade, že sa v jednom zázname o zložení nanoštruktúry uvádzajú rôzne chemické skupiny, odporúča sa uvádzať každú chemickú skupinu samostatne, spolu s identitami/hraničným zložením.

Slovník pojmov

Nanoštruktúra: forma látky, ktorá spĺňa požiadavky uvedené v odporúčaní Komisie o vymedzení pojmu nanomateriál¹⁴ a má tvar a povrchovú chémiu.

Povrchová chémia: chemická povaha povrchu častice.

Záznam o zložení: záznam vytvorený v oddiele 1.2 databázy IUCLID, v ktorom sa uvádza profil zloženia (zoznam zložiek a ich príslušné rozsahy koncentrácie) a prípadne aj dopĺňujúce prvky.

Profil zloženia jadra častice: zoznam zložiek a ich príslušných rozsahov koncentrácie, ktoré prispievajú k zloženiu jadra častice.

Profil zloženia častice: zoznam zložiek a ich príslušných rozsahov koncentrácie, ktoré prispievajú k zloženiu jadra, a zoznam zložiek a ich príslušných rozsahov koncentrácie, ktoré prispievajú k zloženiu povrchovej vrstvy v dôsledku zmeny povrchovej chémie.

Záznam o zložení nanoštruktúry: záznam o zložení v oddiele 1.2 databázy IUCLID, kde sa zo zoznamu možností pre „fyzikálne skupenstvo/formu látky“ vybrala možnosť „tuhé: nanomateriál“, a v ktorom sa uvádzajú informácie o rozsahoch veľkosti, kategóriách tvarov a povrchovej chémii častíc.

¹⁴ ODPORÚČANIE KOMISIE z 18. októbra 2011 o vymedzení pojmu nanomateriál (2011/696/EÚ), dostupné na adrese:

<http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2011:275:0038:0040:sk:PDF>.

Je potrebné pripomenúť, že v súčasnosti prebieha revízia odporúčania Európskej komisie o vymedzení pojmu nanomateriál a po jeho aktualizácii ho agentúra ECHA posúdi a v prípade potreby aktualizuje odkazy na toto odporúčanie vo svojom usmernení.

ODKAZY

- [1] ECHA, „Usmernenie k registrácii“, (online). Dostupné na adrese: <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.
- [2] ECHA, „Dodatok R.6-1 pre nanomateriály uplatniteľný na Usmernenie o QSAR (kvantitatívnom vzťahu štruktúry a aktivity) a zoskupovaní chemických látok“, (online). Dostupné na adrese: <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-information-requirements-and-chemical-safety-assessment>.
- [3] ECHA, „Dodatok R7-1 pre nanomateriály uplatniteľný na kapitolu R7a Usmernenia ku konkrétnemu sledovanému parametru“, (online). Dostupné na adrese: <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-information-requirements-and-chemical-safety-assessment>.
- [4] ECHA, „Dodatok R7-1 pre nanomateriály uplatniteľný na kapitolu R7b Usmernenia ku konkrétnemu sledovanému parametru“, (online). Dostupné na adrese: <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-information-requirements-and-chemical-safety-assessment>.
- [5] ECHA, „Dodatok R7-2 pre nanomateriály uplatniteľný na kapitolu R7c Usmernenia ku konkrétnemu sledovanému parametru“, (online). Dostupné na adrese: <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-information-requirements-and-chemical-safety-assessment>.
- [6] ECHA, „Usmernenie k identifikácii a pomenovaniu látok podľa nariadení REACH a CLP“, (online). Dostupné na adrese: <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.
- [7] „CA/59/2008: Nanomateriál v nariadení REACH“, 2008.
- [8] „OZNÁMENIE KOMISIE EURÓPSKEMU PARLAMENTU, RADE A HOSPODÁRSKEMU A SOCIÁLNEMU VÝBORU: Druhý prieskum regulačného rámca pre nanomateriály“, 2012. (online). Dostupné na adrese: <http://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX%3A52012DC0572>.
- [9] T. LINSINGER, G. ROEBBEN, D. GILLILAND, L. CALZOLAI, F. ROSSI, P. GIBSON a K. C, „Requirements on measurements for the implementation of the European Commission definition of the term „nanomaterial“. JRC73260“, 2012. (online). Dostupné na adrese: <http://publications.jrc.ec.europa.eu/repository/handle/JRC73260>.
- [10] H. RAUSCHER, G. ROEBBEN, A. BOIX SANFELIU, H. EMONS, P. GIBSON, R. KOEBER, T. LINSINGER, K. RASMUSSEN, J. RIEGO SINTES, B. SOKULL-KLUETTGEN a H. STAMM, „Towards a review of the EC Recommendation for a definition of the term „nanomaterial“: Part 3: Scientific-technical evaluation of options to clarify the definition and to facilitate its implementation“, 2015. (online). Dostupné na adrese: <https://ec.europa.eu/jrc/en/publication/eur-scientific-and-technical-research-reports/towards-review-ec-recommendation-definition-term-nanomaterial-part-3-scientific-technical>.
- [11] K. Sellers, N. Deleebeeck, M. Messiean, M. Jackson, E. Bleeker, D. Sijm a F. van Broekhuizen, „Grouping nanomaterials: A strategy towards grouping and read-across. RIVM Report 2015-0061“, 2015. (online). Dostupné na adrese: http://rivm.openrepository.com/rivm/handle/10029/557058http://www.rivm.nl/en/Documents_and_publications/Scientific/Reports/2015/juni/Grouping_nanomaterials_A_strategy_towards_grouping_and_read_across.
- [12] K. Kettler, K. Veltman, D. v. d. Meent, A. v. Wezel a A. Hendriks, „Cellular uptake of nanoparticles as determined by particle properties, experimental conditions, and cell type“, *Environmental Toxicology and Chemistry*, zväzok 33, č. 3, s. 481 – 492, 2014.

- [13] G. Oberdörster, A. Maynard, K. Donaldson, V. Castranova, J. Fitzpatrick, K. Ausman, J. Carter, B. Karn, W. Kreyling, D. Lai, S. Olin, N. Monteiro-Riviere, D. Warheit a H. Yang, „Principles for characterizing the potential human health effects from exposure to nanomaterials: elements of a screening strategy“, *Particle and Fibre Toxicology*, zväzok 2, č. 8, 2005.
- [14] A. G. Wylie, „Fiber length and aspect ratio of some selected asbestos samples“, (online). Dostupné na adrese: <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1749-6632.1979.tb18766.x/pdf>.
- [15] US-EPA, (online). Dostupné na adrese: <https://www.gpo.gov/fdsys/pkg/CFR-2012-title40-vol32/pdf/CFR-2012-title40-vol32-part763-subpartE-appA.pdf>.
- [16] C. Tran, S. Hankin, B. Ross, R. Aitken a A. Jones, „An outline scoping study to determine whether high aspect ratio nanoparticles (HARN) should raise the same concerns as do asbestos fibres. IOM“, 2008. (online). Dostupné na adrese: [http://nanotech.law.asu.edu/Documents/2009/07/Michael%20Vincent%20IOM%20\(2008\),%20An%20outline%20scoping%20study_182_2184.pdf](http://nanotech.law.asu.edu/Documents/2009/07/Michael%20Vincent%20IOM%20(2008),%20An%20outline%20scoping%20study_182_2184.pdf).
- [17] „Národný inštitút pre bezpečnosť a ochranu zdravia pri práci (NIOSH), metóda 7400. Príručka analytických metód NIOSH“, (online). Dostupné na adrese: <http://www.cdc.gov/niosh/docs/2003-154/pdfs/7400.pdf>.
- [18] Európske centrum pre ekotoxikológiu a toxikológiu chemikálií (ECETOC), „Syntetický amorfný kremík. ECETOC JACC REPORT č. 51“, (online). Dostupné na adrese: <http://www.ecetoc.org/publication/jacc-report-51-synthetic-amorphous-silica>.
- [19] US-EPA, „Informačný list: Materiály na nanoúrovni“, (online). Dostupné na adrese: <https://www.epa.gov/reviewing-new-chemicals-under-toxic-substances-control-act-tsca/fact-sheet-nanoscale-materials>.
- [20] ECHA, „Posudzovanie nebezpečnosti nanomateriálov pre zdravie ľudí a životné prostredie – Najlepšie postupy pre registrujúcich podľa nariadenia REACH – Druhé zasadnutie skupiny pre posudzovanie už registrovaných nanomateriálov (GAARN)“, 2013. (online). Dostupné na adrese: http://echa.europa.eu/documents/10162/5399565/best_practices_human_health_environment_nano_en.pdf.
- [21] A. Oomen, E. Bleeker, P. Bos, F. van Broekhuizen, S. Gottardo, M. Groenewold, D. Hristozov, K. Hund-Rinke, M. Irfan, A. Marcomini, W. Peijnenburg, K. Rasmussen, A. Sánchez Jiménez, J. Scott-Fordsmand, M. van Tongeren, K. Wiench, W. Wohlleben a R. Landsiedel, „Grouping and Read-Across Approaches for Risk Assessment of Nanomaterials“, *International Journal of Environmental Research and Public Health*, zväzok 12, č. 10, s. 13415 – 13434, 2015.
- [22] ECHA, „Ako pripraviť registračnú dokumentáciu a dokumentáciu k technologicky orientovanému výskumu a vývoju (PPORD)“, 2016. (online). Dostupné na adrese: http://echa.europa.eu/documents/10162/22308542/manual_regis_and_ppord_en.pdf.
- [23] L. Rösch, P. John a R. Reitmeier, Silicon Compounds, Organic. Ullmannova encyklopédia priemyselnej chémie, 2000.

EURÓPSKA CHEMICKÁ AGENTÚRA
ANNANKATU 18, P.O. BOX 400,
FI-00121 HELSINKI, FÍNSKO
ECHA.EUROPA.EU