

Smjernice za identifikaciju i nazive tvari prema Uredbama REACH i CLP

Verzija 1.3.
veljača 2014.

PRAVNA NAPOMENA

Ovaj dokument sadrži smjernice o Uredbama REACH i CLP koje objašnjavaju obveze definirane tim uredbama te kako ih ispuniti. No, korisnike treba podsjetiti da su tekstovi Uredaba REACH i CLP jedine izvorne pravne reference te da informacije sadržane u ovom dokumentu nisu pravni savjeti. Europska agencija za kemikalije ne prihvaća nikakvu odgovornost u vezi sa sadržajem ovog dokumenta.

Smjernice za identifikaciju i nazive tvari prema Uredbama REACH i CLP

Referenca: ECHA-11-G-10.2-HR
Datum objave: veljača 2014.
Jezik: HR

© Europska agencija za kemikalije, 2014.

Naslovnica © Europska agencija za kemikalije

Umnožavanje je dozvoljeno, pod uvjetom da se izvorni dokument u potpunosti navede u sljedećem obliku: „Izvor: Europska agencija za kemikalije, <http://echa.europa.eu/>” te pod uvjetom da se dostavi pisana obavijest Odjelu za komunikaciju Europske agencije za kemikalije (<mailto:publications@echa.europa.eu>).

Ako imate pitanja ili komentare u vezi s ovim dokumentom, pošaljite ih (s naznakom referentnog broja dokumenta i datuma izdavanja) putem obrasca za traženje informacija. Obrascu za traženje informacija može se pristupiti na internetskoj stranici za kontakte ECHA-e: http://echa.europa.eu/about/contact_en.asp.

EUROPSKA AGENCIJA ZA KEMIKALIJE

Poštanska adresa: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Finska

Adresa za posjete: Annankatu 18, Helsinki, Finska

PREDGOVOR

U ovom je dokumentu opisano kako odrediti naziv i identificirati tvar sukladno Uredbama REACH i CLP. On je jedan u nizu dokumenata osmišljenih kao pomoć pripadnicima interesnih skupina u pripravi za ispunjavanje obveza definiranih Uredbama REACH i CLP. Ti dokumenti sadrže detaljne smjernice o različitim ključnim procesima iz Uredbe REACH i Uredbe CLP, kao i nekim specifičnim znanstvenim i/ili tehničkim metodama koje industrija ili institucije trebaju primjenjivati prema tim uredbama.

Nacrti dokumenata sa smjernicama izrađeni su i raspravljeni u sklopu Projekta za implementaciju Uredbe REACH (RIP) pod vodstvom službi Europske komisije, a u Projektu su sudjelovali pripadnici svih interesnih skupina: države članice, industrija i nevladine organizacije. Dokumentima se može pristupiti na internetskim stranicama Europske agencije za kemikalije (http://echa.europa.eu/reach_en.asp). Ostali dokumenti sa smjernicama bit će objavljeni na toj internetskoj stranici čim se dovrše ili ažuriraju.

Povijest dokumenta

Verzija	Primjedba	Datum
Verzija 1.	Prvo izdanje	lipanj 2007.
Verzija 1.1.	<p>Ispravak</p> <p>Obuhvaćeno je sljedeće: uredničke ispravke, zamjena zastarjelih informacija, ispravljani primjeri i ažurirane referencije (u fusnotama) radi lakšeg praćenja.</p> <p>Te prilagodbe ne mijenjaju zahtjeve za industriju.</p> <p>Glavne promjene navedene su u dodatku III.</p>	studenj 2011. (samo na engleskom)
Verzija 1.2.	<p>Ispravak</p> <p>Definicija „tvari u postupnom uvođenju“ usklađena je s definicijom u Uredbi (EZ) br. 1907/2006 koju je uvela Uredba Vijeća (EZ) br. 1354/2007 i Ispravkom, Službeni list Europske unije br. 36. od 5. veljače 2009. godine, stranica 84. (1907/2006).</p> <p>Promjene u verzijama 1.1. i 1.2. objedinjene su u jednu prevedenu verziju 1.2. za ostale jezike (osim engleskog).</p>	ožujak 2012.
Verzija 1.3.	<p>Ispravak</p> <p>U poglavlju 7.6 dodane su dvije strukturne formule koje su nedostajale.</p>	veljača 2014.

SADRŽAJ

1	OPĆE NAPOMENE	1
1.1	CILJEVI	1
1.2	PODRUČJE PRIMJENE	2
1.3	STRUKTURA OVIH SMJERNICA	2
2	DEFINICIJE I KRATICE	4
2.1	KRATICE	4
2.2	DEFINICIJE	7
3	OKVIR ZA IDENTIFIKACIJU TVARI U UREDBAMA REACH I CLP	10
3.1	DEFINICIJA TVARI	10
3.2	EC INVENTAR	10
3.2.1	Uloga EC inventara pri stupanju na snagu Uredbe REACH	11
3.2.2	Urudžbeni brojevi nakon stupanja na snagu Uredbe REACH	12
3.3	ZAHTJEVI ZA IDENTIFIKACIJU TVARI U UREDBAMA REACH I CLP	13
4	SMJERNICE ZA IDENTIFIKACIJU I NAZIVE TVARI U UREDBAMA REACH I CLP	15
4.1	UVOD	15
4.2	TVARI DOBRO DEFINIRANOG KEMIJSKOG SASTAVA	19
4.2.1	Tvar od jednog sastojka	20
4.2.2	Tvari od više sastojaka	21
4.2.3	Tvari definiranog kemijskog sastava i ostale glavne identifikacijske oznake	25
4.3	UVCB TVARI	26
4.3.1	Opće smjernice za UVCB tvari	27
4.3.2	Specifične vrste UVCB tvari	35
5	KRITERIJI ZA PROVJERU ISTOVJETNOSTI TVARI	43
6	IDENTITET TVARI U POSTUPKU (KASNE) PREDREGISTRACIJE I PROVJERE	48
6.1	(KASNA) PREDREGISTRACIJA	48
6.2	PROVJERA	48
7	PRIMJERI	49
7.1	DIETIL PEROKSIDIKARBONAT	49
7.2	ZOLIMIDIN	50
7.3	SMJESA IZOMERA	50
7.4	MIRIS AH	52
7.5	MINERALI	58
7.6	ETERIČNO ULJE LAVANDINA GROSSO	60
7.7	ULJE KRIZANTEME I IZ NJEGA IZOLIRANI IZOMERI	64
7.8	FENOL, IZOPROPILIRAN, FOSFAT (IZOPROPILIRANI FENOL, FOSFAT)	67
7.9	KVATERNI AMONIJEVI SPOJEVI	68
7.10	NAFTNE TVARI	71
7.10.1	Namješavanje benzina (C ₄ -C ₁₂)	71
7.10.2	Plinska ulja (nafta)	72

7.11 ENZIMI	73
7.11.1 Suptilizin	73
7.11.2 α -amilaza	75
8 OPIS TVARI U PROGRAMU IUCLID 5	76
8.1 OPĆA NAČELA	76
8.1.1 Inventari	77
8.1.2 Podaci o tvari (odjeljci 1.1., 1.2., 1.3. i 1.4. programa IUCLID).....	79
8.2 PRIMJERI UNOŠENJA PODATAKA U PROGRAM IUCLID 5	81
8.2.1 Tvar od jednog sastojka	82
8.2.2 Tvar od više sastojaka.....	83
8.2.3 Tvari definirane kemijskim sastavom i ostalim identifikacijskim oznakama	85
8.2.4 UVCB tvar	86
8.3 NAVOĐENJE ANALITIČKIH PODATAKA	87
DODATAK I. – KORISNI IZVORI PODATAKA	89
DODATAK II. – TEHNIČKE UPUTE ZA IDENTIFIKACIJU TVARI PO POJEDINAČNIM PARAMETRIMA93	
DODATAK III. – PROMJENE U DOKUMENTU	109

Tablice

Tablica 2.1. Kratice	4
Tablica 2.2 Definicije	7
Tablica 3.1. Parametri za identifikaciju tvari iz odjeljka 2. <i>Priloga VI. Uredbe REACH</i>	14
Tablica 4.1 Grupiranje glavnih identifikacijskih oznaka za primjere koji predstavljaju različite vrste dobro definiranih sličnih tvari.....	16
Tablica 4.2 Grupiranje glavnih identifikacijskih oznaka za primjere koji predstavljaju različite vrste UVCB tvari.....	17

1 OPĆE NAPOMENE

Uredbom REACH (Uredba (EZ) br. 1907/2006) uspostavljen je sustav registracije, evaluacije, autorizacije i ograničavanja kemikalija te osnovana Europska agencija za kemikalije (ECHA) sa zadatkom provedbe te Uredbe.¹

Uredba CLP (Uredba (EZ) br. 1272/2008) nova je europska uredba o razvrstavanju, označavanju i pakiranju kemijskih tvari i smjesa.² Tim se propisima u cijeloj Europskoj uniji uvodi novi sustav razvrstavanja i označavanja kemikalija, utemeljen na Globalno usklađenom sustavu Ujedinjenih naroda (UN GHS).

Uredba REACH bavise tvarima. Kako bi se osigurala ispravna provedba postupaka propisanih Uredbom bitna je točna i jednoznačna identifikacija tvari. Ove smjernice za identifikaciju i nazive tvari namijenjene su industriji, državama članicama i Europskoj agenciji za kemikalije.

Dokument je utemeljen na iskustvima s identifikacijom tvari u skladu s ranijim zakonodavstvom u području kemikalija (Direktiva 67/548/EEZ), kao i drugim postojećim zakonodavstvom o kemikalijama Europske unije, primjerice s Direktivom o biocidnim pripravcima (98/8/EEZ). Međutim, trenutačna praksa u identifikaciji tvari sukladno Uredbi REACH i Uredbi o razvrstavanju, označavanju i pakiranju tvari i smjesa (CLP) osnova je pročišćenog teksta ovih smjernica. Osim toga, gdje je to bilo primjereno, uključeni su i pristupi iz drugih kemijskih sustava izvan Europske unije.

Uključene su i posebno pripremljene upute za različite vrste tvari.

Smjernice treba koristiti za identifikaciju i određivanje naziva tvari koje podliježu Uredbama REACH i CLP.

1.1 CILJEVI

Cilj je ovoga dokumenta proizvođačima i uvoznicima dati smjernice za evidentiranje i izvješćivanje o tvari u kontekstu Uredaba REACH i CLP. On daje smjernice za određivanje naziva tvari, važnog ključnog elementa identifikacije tvari. Također pomaže pri odlučivanju mogu li se tvari smatrati istovjetnima u kontekstu Uredaba REACH i CLP. Identifikacija istovjetnih tvari važna je za postupak (kasne) predregistracije tvari u postupnom uvođenju, za provjeru, razmjenu podataka, zajedničku dostavu podataka, prijavu u inventar razvrstavanja, označavanja i obilježavanja, kao i usklađivanje razvrstavanja, označavanja i obilježavanja.

¹ Uredba (EZ) br. 1907/2006 Europskoga parlamenta i Vijeća od 18. prosinca 2006. o registraciji, evaluaciji, autorizaciji i ograničavanju kemikalija (REACH), kojom je osnovana Europska agencija za kemikalije, a kojom se izmjenjuje i dopunjuje Direktiva 1999/45/EZ i ukida Uredba Vijeća (EEZ-a) br. 793/93 i Uredba Komisije (EZ-a) br. 1488/94 kao i Direktiva Vijeća 76/769/EEZ te Direktive Komisije 91/155/EEZ, 93/67/EEZ, 93/105/EZ i 2000/21/EZ (u daljnjem tekstu: „REACH“).

² Uredba (EZ) br. 1272/2008 Europskoga parlamenta i Vijeća od 16. prosinca 2008. o razvrstavanju, označavanju i pakiranju tvari i smjesa, kojom se izmjenjuje i ukidaju Direktive 67/548/EEZ i 1999/45/EZ, te izmjenjuje i dopunjuje Uredba (EZ) br. 1907/2006 (tekst značajan za europski gospodarski prostor) (u daljnjem tekstu: „CLP“).

Po mogućnosti, tvari bi trebali identificirati stručnjaci iz industrije. Za sudionike u industriji koji nemaju puno iskustva u identifikaciji tvari, u dodatku ovim smjernicama navedene su dodatne upute o parametrima identifikacije.

Osim toga, u ovom su dokumentu navedene poveznice na relevantne alate koji mogu pomoći pri opisu svojstava i provjeri kemijskog identiteta tvari.

1.2 PODRUČJE PRIMJENE

Prema *članku 1.* Uredbe REACH, ona se odnosi na proizvodnju, uvoz, stavljanje na tržište i uporabu tvari pojedinačno te u smjesama i proizvodima. Smjese i proizvodi kao takvi ne podliježu odredbama Uredbe REACH.

Sukladno *članku 10.* Uredbe REACH, postupak registracije zahtijeva upisivanje identiteta tvari uz pomoć parametara navedenih u odjeljku 2. *Priloga VI.* Uredbe REACH (vidjeti **tablicu 3.1.**). Slični parametri (navedeni u odjeljcima 2.1. do 2.3.4. *Priloga VI.* Uredbe REACH) propisani su za opis identiteta tvari u svrhu prijave sukladno *članku 40. stavku 1.* Uredbe CLP. Ove su smjernice usredotočene na prikladnu identifikaciju tvari koje su obuhvaćene pravnom definicijom tvari u Uredbama REACH i CLP te pomaže pri određivanju parametara identifikacije tvari iz odjeljka 2. *Priloga VI.* Uredbe REACH. Informacije o identitetu tvari moraju biti dostatne za identifikaciju svake tvari. Jedan ili više parametara identifikacije tvari može se ispustiti ako je tehnički nemoguće ili se čini znanstveno neutemeljenim pružiti traženu informaciju. Razlozi takvih ispuštanja moraju biti jasno navedeni i znanstveno opravdani.

Pristup identifikaciji tvari ovisi o vrsti tvari. Stoga čitatelje ovih smjernica upućujemo na specifična poglavlja za različite vrste tvari.

EC brojevi koji se koriste u okviru Direktive 67/548/EEZ (popisi EINECS, ELINCS i NLP) važni su alati za identifikaciju tvari. Smjernice o ulozi tih popisa prema Uredbi REACH dane su u poglavlju 3.2.

Tvari unutar područja primjene Uredaba REACH i CLP (a time i ovih smjernica) obično su rezultat kemijskih reakcija tijekom njihove proizvodnje i mogu sadržavati više različitih sastojaka. Tvari, kao što su definirane uredbama REACH i CLP, također uključuju tvari dobivene kemijskim postupkom ili izolirane iz prirodnih materijala, koje mogu imati samo jedan element ili molekulu (primjerice, čisti metali ili neki minerali) ili nekoliko sastojaka (primjerice, eterična ulja, bakrenac koji nastaje prilikom taljenja bakra iz sulfidne metalne rude). Međutim, tvari koje podliježu drugim propisima Zajednice u nekim su slučajevima izuzete od obveze registracije sukladno Uredbi REACH (vidjeti *članak 2.* Uredbe). Isto su tako tvari navedene u *Prilogu IV.* Uredbe REACH i tvari koje ispunjavaju neke kriterije navedene u *Prilogu V.* Uredbe REACH izuzete od obveze registracije. Napominjemo da, iako tvar može biti izuzeta od obveze registracije, to ne znači neophodno da je tvar izuzeta od odredaba ostalih glava Uredbe REACH ili zahtjeva propisanih Uredbom CLP.

1.3 STRUKTURA OVIH SMJERNICA

Opće informacije, kao što su ciljevi i područje primjene ovog dokumenta, navedene su u poglavlju 1., a kratice i definicije mogu se naći u poglavlju 2. Relevantne informacije o okviru za identifikaciju tvari u Uredbi REACH, primjerice, definicija tvari i zahtjevi obavješćivanja u pravnom tekstu, nalaze se u poglavlju 3.

Praktične upute za identifikaciju i nazive tvari dane su u poglavlju 4.

- U poglavlju 4.1. opisana je razlika između „dobro definiranih“ i „slabo definiranih“ tvari; unutar tih dviju glavnih skupina može se prepoznati različite vrste tvari sa specifičnim uputama za njihovu identifikaciju. Prikazan je dijagram koji upućuje čitatelja na odgovarajuće poglavlje sa smjernicama za određenu vrstu tvari.
- U narednim poglavljima za svaku su vrstu tvari dane upute u obliku pravila s objašnjenjem i primjerima.

Poglavlje 5. pomaže pri provjeri mogu li se tvari smatrati istovjetnima. Upute o identitetu tvari u sklopu (kasne) predregistracije i o postupcima upućivanja upita radi provjere navedene su u poglavlju 6.

Nadalje, u poglavlju 7. pripremljeno je nekoliko detaljnih primjera uz pomoć praktičnih uputa iz poglavlja 4., koji ilustriraju kako industriji može poslužiti ovaj dokument.

Konačno, u poglavlju 8. nalaze se upute za opisivanje tvari uz pomoć programa IUCLID 5.

U dodatku I. navedene su poveznice na relevantne alate koji mogu pomoći pri opisu svojstava i provjeri kemijskog identiteta tvari.

U dodatku II. ima još općih informacija o pojedinim identifikacijskim parametrima koji se koriste u postupku identifikacije tvari, kao što su pravila koja se tiču nomenklature, brojevi EC i CAS broj, oznake u molekularnim i strukturalnim formulama te analitičke metode.

U dodatku III. navedene su glavne promjene u svakoj novoj verziji smjernica.

2 DEFINICIJE I KRATICE

2.1 KRATICE

Ključne kratice koje se koriste u ovim smjernicama navedene su i objašnjene u **tablici 2.1.**

Tablica 2.1. Kratice

Kratica	Značenje
AAS	Atomska apsorpcijska spektroskopija (engl. <i>Atomic Absorption Spectroscopy</i>)
AISE	Međunarodna udruga proizvođača sapuna, deterdženata i sredstava za održavanje (engl. <i>International Association for Soaps, Detergents and Maintenance Products</i>)
CAS	Služba za sažetke i ostale informacije iz područja kemije (engl. <i>Chemical Abstracts Service</i>)
CLP	Uredba o razvrstavanju, označavanju, obilježavanju i pakiranju tvari i smjesa; Uredba (EZ) br. 1272/2008
EC	Europska komisija
EINECS	Europski popis postojećih trgovačkih (kemijskih) tvari (engl. <i>European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances</i>)
ELINCS	Europska lista prijavljenih kemijskih tvari (engl. <i>European List of Notified Chemical Substances</i>)
ENCS	Postojeće i nove kemijske tvari (engl. <i>Existing and New Chemical Substances</i>) (Japan)
ESIS	Europski informacijski sustav o kemijskim tvarima (engl. <i>European Substances Information System</i>)
EU	Europska unija
GC	Plinska kromatografija (engl. <i>Gas chromatography</i>)
GHS	Globalno usklađen sustav (engl. <i>Globally Harmonized System</i>)
HPLC	Tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti (engl. <i>High performance liquid chromatography</i>)
InChI	Međunarodna (tekstualna) identifikacijska oznaka kemijskih tvari prema IUPAC-u (International Chemical Identifier)
INCI	Međunarodna nomenklatura kozmetičkih sastojaka (engl. <i>International Nomenclature of Cosmetic Ingredients</i>)
IR	Infracrveno
ISO	Međunarodna organizacija za normizaciju (engl. <i>International Organization for Standardization</i>)
IUCLID	Jedinstvena međunarodna baza podataka o kemikalijama (engl. <i>International Uniform Chemical Information Database</i>)
IUBMB	Međunarodna unija za biokemiju i molekularnu biologiju (engl. <i>International Union of Biochemistry and Molecular Biology</i>)
IUPAC	Međunarodna unija za čistu i primijenjenu kemiju (engl. <i>International Union for Pure and Applied Chemistry</i>)
MS	Masena spektroskopija (engl. <i>Mass spectroscopy</i>)
NLP	Tvari koje više nisu polimeri (engl. <i>No Longer Polymer</i>)
NMR	Nuklearna magnetska rezonancija
ppm	Dio na milijun
REACH	Registracija, evaluacija, autorizacija i ograničavanje kemikalija (engl. <i>Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals</i>)
SIEF	Forum za razmjenu podataka o tvarima
SMILES	Sustav oznaka SMILES (pojednostavljena molekulska specifikacija ulaznih linijskih podataka)
TSCA	Zakon o nadzoru otrovnih tvari (USA)
UVCB	Tvari nepoznatog ili promjenjivog sastava, složeni reakcijski produkti i biološki materijali (engl. <i>Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials</i>)
UV/VIS	Ultraljubičasto/vidljivo
w/w	Masenog udjela

Kratica	Značenje
XRD	Rendgenska difrakcija
XRF	Rendgenska fluorescencija

2.2 DEFINICIJE

Ključne definicije koje se koriste u ovim smjernicama navedene su i opisane u **tablici 2.2**.

Te definicije uzimaju u obzir definicije iz Uredbe REACH i Uredbe CLP. Zbog toga su neki izrazi definirani drugačije nego u Direktivi 67/548/EEZ.

Tablica 2.2 Definicije

Definicija	Opis
Dodatak (aditiv)	Tvar koja se namjerno dodaje kako bi stabilizirala određena tvar ³ .
Legura*	Metalni materijal, homogen na makroskopskoj razini, koji se sastoji od najmanje dva elementa spojena na način da ih se ne može lako odvojiti mehaničkim sredstvima. Legure se smatra posebnim smjesama.
Proizvod*	Predmet kojemu se tijekom proizvodnje daje poseban oblik, površina ili obličje koji određuju njegovu funkciju u većoj mjeri nego njegov kemijski sastav.
Tipičan kromatogram (kromatografski 'otisak prsta')	Reprezentacija sastava tvari iz karakteristične distribucije sastojaka na analitičkom kromatogramu.
Komponenta	Tvar namjerno dodana da nastane smjesa.
Sastojak	Svaka pojedinačna vrsta prisutna u tvari koju se može opisati njezinim jedinstvenim kemijskim identitetom.
EC inventar	Iako nije pravno definiran Uredbom REACH, EC inventar je kombinacija triju neovisnih i pravno odobrenih europskih popisa tvari iz prethodnih zakonskih okvira za kemikalije Europske unije: EINECS, ELINCS i NLP („tvari koje nisu više polimeri“). Stavke u EC inventaru sastoje se od kemijskog naziva i broja (EC naziv i EC broj), CAS broja, molekularne formule (ako postoji) i opisa (za neke vrste tvari).
EC broj	EC broj je brojčana identifikacijska oznaka tvari u EC inventaru.
Nečistoća	Nenamjeran sastojak prisutan u tvari koji proizlazi iz proizvodnog postupka. Može nastati iz početnih materijala ili kao rezultat sekundarnih ili nepotpunih reakcija tijekom proizvodnje. Iako je prisutan u konačnoj tvari nije dodan namjerno.

³ U drugim područjima dodatak može imati i druge funkcije, npr. tvar za reguliranje pH ili bojilo. Međutim, u Uredbi REACH i u ovim smjernicama dodatak je stabilizator.

Definicija	Opis
Intermedijer*	<p>Tvar koja se proizvodi kako bi se u kemijskoj preradi utrošila ili upotrijebila za pretvorbu u drugu tvar (dalje u tekstu: <i>sinteza</i>):</p> <p>(a) neizolirani intermedijer jest intermedijer koji se tijekom sinteze ne uklanja namjerno iz opreme u kojoj se odvija sinteza (osim u slučaju uzorkovanja). Ova oprema uključuje reakcijsku posudu i pripadajuću opremu, kao i svu opremu kroz koju tvar(i) prolazi/e tijekom kontinuiranog ili šaržnog postupka, uključujući cijevi koje se koriste za premještanje iz jedne posude u drugu radi podvrgavanja sljedećoj fazi reakcije, isključujući spremnike i druge posude u kojima se tvar(i) čuva(ju) nakon proizvodnje;</p> <p>(b) interni izolirani intermedijer jest intermedijer koji ne ispunjava kriterije neizoliranog intermedijera i čija se proizvodnja, kao i sinteza druge/drugih tvari iz tog intermedijera odvija na istoj lokaciji, a koju koristi jedna ili više pravnih osoba;</p> <p>(c) prevezeni izolirani intermedijer jest intermedijer koji ne ispunjava kriterije neizoliranog intermedijera i koji se prevozi između lokacija ili isporučuje na druge lokacije.</p>
IUCLID	Jedinstvena međunarodna baza podataka o kemikalijama. IUCLID je sustav za baze podataka i upravljanje podacima o kemijskim tvarima.
Uredžbeni broj	Automatski dodijeljen broj iz programa REACH-IT. Primjenjuje se na sve ulazne valjane podneske (primjericice, predregistracije, PPORD (istraživanje i razvoj usmjereni prema procesu), upite, registracije, prijave razvrstavanja i označavanja). Uredžbeni broj nema pravnu vrijednost i koristi se samo kao tehnička identifikacijska oznaka za upravljanje podnescima unutar ECHA-e.
Osnovni sastojak	Sastojak tvari, koji nije dodatak ili nečistoća, a koji čini značajan dio te tvari i stoga se koristi u davanju naziva tvari i u njezinoj detaljnoj identifikaciji.
Proizvodnja*	Proizvodnja ili ekstrakcija tvari u prirodnom stanju.
Smjesa*	Smjesa ili otopina sastavljena od najmanje dvije tvari.
Monomer*	Tvar koje je sposobna tvoriti kovalentne veze s nizom drugih sličnih ili različitih molekula u uvjetima reakcije tvorbe polimera koja se koristi u određenom postupku.
Tvar od jednog sastojka	U pravilu, to je tvar, određena svojim sastavom, u kojoj je jedan osnovni sastojak prisutan u koncentraciji od najmanje 80% (masenog udjela).
Tvar od više sastojaka	U pravilu, to je tvar, određena svojim sastavom, u kojoj je više od jednog osnovnog sastojka prisutno u koncentraciji između $\geq 10\%$ (masenog udjela) i $< 80\%$ (masenog udjela).
Tvar koja nije u postupnom uvođenju	Tvar koja podliježe obvezi registracije tijekom koje se ne može pozvati na prijelazne odredbe koje vrijede za tvari u postupnom uvođenju prema Uredbi REACH.
Tvar koja nije kemijski promijenjena*	Tvar čija kemijska struktura ostaje nepromijenjena i nakon što je podvrgnuta kemijskom postupku ili obradi ili fizikalnoj mineraloškoj pretvorbi, primjericice radi uklanjanja nečistoća.

Definicija	Opis
Prijavljena tvar*	Tvar za koju je podnesena prijava i koja bi se mogla staviti na tržište u skladu s Direktivom 67/548/EEZ.
Tvar u postupnom uvođenju*	Tvar koja ispunjava barem jedan od sljedećih kriterija: <p>(a) nalazi se na Europskom popisu postojećih trgovačkih kemijskih tvari (EINECS);</p> <p>(b) proizvedena je u Zajednici ili u državama koje su pristupile Europskoj uniji 1. siječnja 1995., 1. svibnja 2004. ili 1. siječnja 2007., ali je proizvođač, odnosno uvoznik, nije stavio na tržište najmanje jedanput u 15 godina prije stupanja na snagu ove Uredbe, pod uvjetom da proizvođač, odnosno uvoznik, posjeduje odgovarajuću dokumentaciju kojom to može dokazati;</p> <p>(c) proizvođač ili uvoznik ju je stavio na tržište u Zajednici ili u državama koje su pristupile Europskoj uniji 1. siječnja 1995., 1. svibnja 2004. ili 1. siječnja 2007., prije stupanja na snagu ove Uredbe i smatrala se prijavljenom u skladu s prvom alinejom članka 8. stavka 1. Direktive 67/548/EEZ u verziji članka 8. stavka 1. koja je proizašla iz izmjena i dopuna Direktivom 79/831/EEZ, ali ne zadovoljava definiciju polimera iz ove Uredbe, pod uvjetom da proizvođač, odnosno uvoznik, za to posjeduje odgovarajuću dokumentaciju s dokazima, uključujući dokaz da je tvar stavio na tržište bilo koji proizvođač ili uvoznik između 18. rujna 1981. i zaključno 31. listopada 1993.</p>
Polimer*	Tvar sastavljena od molekula za koje je karakterističan niz jedne ili više vrsta monomernih jedinica. Molekularne mase tih molekula moraju biti raspodijeljene unutar područja u kojem se razlike u molekularnoj masi mogu prije svega pripisati razlikama u broju monomernih jedinica. Polimer sadrži: <p>(a) više od 50% masenog udjela molekula s najmanje tri monomerne jedinice koje su kovalentnom vezom povezane s najmanje jednom drugom monomernom jedinicom ili drugim reaktantom;</p> <p>(b) manje od 50% masenog udjela molekula iste molekularne mase.</p> <p>U tom smislu izraz „monomerna jedinica“ jest izreagirani oblik monomerne tvari u polimeru.</p>
Tvar*	Kemijski element i njegovi spojevi u prirodnom stanju ili dobiveni proizvodnim postupkom, uključujući i dodatke (aditive) koji su nužni za održavanje njegove stabilnosti te nečistoće koje proizlaze iz proizvodnog postupka, ali isključujući otapala koja se mogu izdvojiti bez utjecaja na stabilnost tvari i promjene njezinog sastava.
Tvar koja se pojavljuje u prirodi*	Tvar koja se pojavljuje u prirodi kao takva, neprerađena ili prerađena samo ručno, mehanički ili gravitacijski, otapanjem u vodi, flotacijom, ekstrakcijom vodom, parnom destilacijom ili zagrijavanjem isključivo radi uklanjanja vode, ili koja je na bilo koji način izlučena iz zraka.

* Definicije iz članka 3. Uredbe REACH.

3 OKVIR ZA IDENTIFIKACIJU TVARI U UREDBAMA REACH I CLP

Uredbe REACH i CLP definiraju tvari, a u Uredbi REACH navedeni su identifikacijski parametri (*Prilog VI.* odjeljak 2.) koje se mora uključiti prilikom identifikacije tvari radi registracije.

U ovom poglavlju dana je definicija tvari iz Uredbi REACH i CLP (3.1.), navedene su opće smjernice za uporabu EC inventara iz prethodnog zakonodavnog okvira u području kemikalija (3.2.) te su pružene dodatne opće informacije o zahtjevima za identifikaciju tvari koji su propisani u Uredbi REACH (3.3.).

3.1 DEFINICIJA TVARI

Tvar je definirana u Uredbi REACH (*članak 3. stavak 1.*) i Uredbi CLP (*članak 2. stavak 7.*) na sljedeći način:

Tvar je kemijski element i njegovi spojevi u prirodnom stanju ili dobiveni proizvodnim postupkom, uključujući i dodatke (aditive) koji su nužni za održavanje njihove stabilnosti te nečistoće koje proizlaze iz primijenjenog postupka, ali isključujući otapala koja se mogu izdvojiti bez utjecaja na stabilnost tvari i promjene njezinog sastava.

Definicija tvari u Uredbama REACH i CLP identična je definiciji tvari navedenoj u sedmoj izmjeni i dopuni Direktive o opasnim tvarima (Direktiva 92/32/EEZ kojom se dopunjuje i mijenja Direktiva 67/548/EEZ). U oba slučaja, definicija obuhvaća više od čistog kemijskog spoja definiranog jednom molekularnom strukturom. Definicija tvari uključuje različite sastojke, kao što su nečistoće.

3.2 EC INVENTAR

Prethodnim zakonodavnim okvirom za kemikalije ustanovljena su tri odvojena popisa. To su Europski popis postojećih trgovačkih tvari (EINECS), Europska lista prijavljenih kemijskih tvari (ELINCS) i popis „Tvari koje nisu više polimeri“ (NLP).

Tvari koje su bile na europskom tržištu između 1. siječnja 1971. i 18. rujna 1981. godine navedene su na Europskom popisu postojećih trgovačkih tvari (EINECS).^{4, 5, 6}

⁴ EINECS je utemeljen na Europskom osnovnom inventaru (European COre Inventory – ECOIN) u koji industrija može dodatno prijavljivati tvari (prema kriterijima za prijavljivanje tvari u EINECS). ECOIN je nastao spajanjem različitih popisa kemikalija za koje se vjerovalo da su na europskom tržištu (npr. TSCA). EINECS je objavljen 15. lipnja 1990. godine i uključuje više od 100 000 tvari. Tijekom uporabe inventara primijećene su pogreške (tiskarske, npr. pogrešan kemijski naziv, formula ili CAS broj). Zato je 1. ožujka 2002. tiskan ispravak.

⁵ ECB (2005) Priručnik za odlučivanje u sklopu implementacije šeste i sedme dopune Direktive 67/548/EEZ (Direktive 79/831/EEZ and 92/32/EEZ), javno dostupna verzija. EUR 20519 EN. Ažurirana verzija iz lipnja 2005.

⁶ Geiss F, Del Bino G, Blech G, *et al.* (1992) The EINECS Inventory of existing chemical substances on the EC market. *Tox Env Chem* Vol. 37, str. 21-33.

Taj popis sadrži oko 100 000 tvari identificiranih kemijskim nazivom (i opisom za neke vrste tvari), CAS brojem i sedmeroznamenkastim brojem – EINECS brojem. EINECS brojevi uvijek počinju znamenkom 2 ili 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Tvari prijavljene u EINECS prošle su verifikaciju koja opravdava njihovo uvrštenje u popis.

Tvari prijavljene i stavljene na tržište poslije 18. rujna 1981. godine navedene su u Europskoj listi prijavljenih kemijskih tvari (ELINCS).⁵ Ta lista sadrži sve tvari prijavljene do 31. svibnja 2008. godine sukladno Direktivi 67/548/EEZ i njezinim izmjenama i dopunama. To su tako-zvane „nove tvari“, jer nisu bile na tržištu Zajednice prije 18. rujna 1981. godine. ELINCS broj dodjeljuje tvari Europska komisija nakon pregleda nadležnih tijela država članica (MSCA). Za razliku od EINECS, ELINCS ne uključuje CAS broj nego broj prijave koji dodjeljuje nadležno tijelo države članice, trgovački naziv (ako postoji), razvrstavanje i naziv prema IUPAC nomenklaturi. ELINCS brojevi također su uvijek sedmeroznamenkasti i počinju znamenkom 4 (4xx-xxx-x).

Polimeri su bili isključeni iz prijavljivanja u EINECS i podlijegali su posebnim pravilima sukladno Direktivi 67/548/EEZ.^{7, 8} Izraz „polimer“ je dalje definiran u sedmoj dopuni Direktive 67/548/EEZ (Direktiva 92/32/EEZ). Kao posljedica primjene te definicije, neke tvari koje su smatrane polimerima sukladno pravilima prijave u EINECS prema sedmoj dopuni više nisu bili polimeri. Budući da su sve tvari koje nisu navedene u EINECS bile podložne prijavi, teoretski su sve „tvari koje više nisu polimeri“ (NLP) prijavljeni. Međutim, Vijeće ministara dalo je jasno do znanja da te „tvari koje više nisu polimeri“ ne podliježu retrospektivno obvezi prijavljivanja. Komisija je dobila zadaću sastaviti popis „tvari koje više nisu polimeri“ (NLP popis). Tvari koje je trebalo uključiti na taj popis bile su one koje su bile na tržištu Europske unije između 18. prosinca 1981. (datum stupanja na snagu Direktive 79/831/EEZ, šeste dopune Direktive 67/548/EEZ) i 31. listopada 1993. godine (datum stupanja na snagu Direktive 92/32/EEZ, sedme dopune Direktive 67/548/EEZ) i koje su ispunjavale uvjet da su smatrane polimerima sukladno pravilima prijavljivanja u EINECS, no nisu više smatrane polimerima sukladno sedmoj dopuni. Popis NLP nije iscrpan. Tvari na NLP popisu identificirane su kemijskim nazivom, CAS brojem i sedmeroznamenkastim NLP brojem. Svaki NLP broj uvijek počinje znamenkom 5 (5xx-xxx-x).

Ta tri popisa tvari, EINECS, ELINCS i NLP, zajedno se zovu EC inventar. Svaka tvar u tom inventaru ima EC broj koji joj dodjeljuje Europska komisija (za detaljne informacije o EC broju vidjeti dodatak II.).

Informacije o tim tvarima mogu se naći na internetskim stranicama Zajedničkog istraživačkog centra Europske komisije (<http://esis.jrc.ec.europa.eu/>). Uбудuće, inventar registriranih tvari održavat će i objavljivati Europska agencija za kemikalije.

3.2.1 Uloga EC inventara pri stupanju na snagu Uredbe REACH

Proizvođači i uvoznici mogu koristiti EC inventar kao alat prilikom odlučivanja može li se tvar smatrati tvari u postupnom uvođenju ili tvari koja nije u postupnom uvođenju. Dakle, EC inventar pomoći će proizvođačima i uvoznicima pri utvrđivanju *kada* je propisana registracija tvari, no i to je li potrebna (kasna) predregistracija ili provjera.

⁷ ECB (2003) Prijavljivanje novih kemikalija sukladno Direktivi 67/548/EEZ o razvrstavanju, pakiranju i označavanju opasnih tvari. Lista Nisu-više polimeri. EUR 20853 EN.

⁸ Rasmussen K, Christ G and Davis JB (1998) Registration of polymers in accordance with Directive 67/548/EEC. *Tox Env Chem* Vol. 67, str. 251-261.

Uredbom REACH određeni su različiti postupci za registraciju i sukorištenje podataka o „postojećim“ tvarima („u postupnom uvođenju“) (definiranim *člankom 3. stavkom 20.*) i o „novim“ tvarima („koje nisu u postupnom uvođenju“) .⁹

Ako je tvar prethodno prijavljena sukladno Direktivi 67/548/EEZ te je stoga navedena na popisu ELINCS, podnesena prijava smatrat će se registracijom za potrebe Uredbe REACH (*članak 24.*). Smatra se da je tvari već registrirao relevantni proizvođač, odnosno uvoznik, koji je podnio prijavu pa ih taj proizvođač, odnosno uvoznik, ne treba registrirati. Proizvođač, odnosno uvoznik, ipak ima obvezu ažuriranja registracije. Dodatni proizvođači, odnosno uvoznici tvari navedene u ELINCS-u (koji nisu obuhvaćeni prethodnom prijavom, odnosno prethodnim prijavama) podliježu obvezi registracije (kao za tvari koje nisu u postupnom uvođenju) te će se uspostaviti sukorištenje podataka s prethodnim podnositeljem registracije. Više o tome može se naći u Smjernicama za registraciju dostupnima na internetskim stranicama ECHA-e: http://guidance.echa.europa.eu/guidance_en.htm.

3.2.2 Urudžbeni brojevi nakon stupanja na snagu Uredbe REACH

Prilikom uspostavljanja sustava REACH-IT, ECHA je smatrala korisnim automatski dodijeliti broj tvarima u svim pristiglim tehnički potpunim podnescima (predregistracije, istraživanje i razvoj usmjereni prema procesu, upiti, registracije, prijave razvrstavanja i označavanja, itd.) za koje nije bio određen EC broj (vidjeti u nastavku kriterije za dodjeljivanje urudžbenih brojeva). Time je olakšano upravljanje, daljnja obrada i identifikacija tvari u tim podnescima. „Urudžbeni brojevi“ imaju isti format kao EINECS, ELINCS i NLP brojevi, no počinju drugačijim znamenkama.

Za razliku od stavaka na popisima EINECS, ELINCS i NLP, urudžbeni brojevi ne temelje se na pravnim propisima niti su objavljeni u Službenom listu Europske unije. Stoga oni nemaju istu važnost kao EC brojevi, a zajednički im je samo brojčani format. Njihova je svrha isključivo administrativna, a ne propisujuća. Važno je naglasiti da velika većina urudžbenih brojeva i s njima povezanih identifikacija tvari nikada nisu provjereni glede točnosti, valjanosti i poštivanja pravila navedenih u ovim smjernicama.

Zbog toga u početku nije bilo planirano učiniti te brojeve javno dostupnima prije nego li ih provjeri ECHA. Međutim, budući da je tijekom predregistracije za oko 40 000 tvari obavljena predregistracija bez EC broja, ECHA je odlučila objaviti urudžbene brojeve s popisom predregistriranih tvari kako bi se olakšalo uspostavljanje Foruma za razmjenu informacija o tvarima (SIEF).

Valja istaknuti kako je moguće da su različiti urudžbeni brojevi dodijeljeni istoj tvari ako se za nju koriste različite identifikacijske oznake (primjerice, naziv). To je stoga što je dodjeljivanje urudžbenog broja potpuno automatiziran postupak, bez intervencije ljudi. Zbog toga je također moguće da tvar s popisa EINECS, ELINCS ili NLP dobije urudžbeni broj ako se pri podnošenju prijave ECHA-i putem programa REACH-IT koristi naziv tvari različit od onoga u EC inventaru.

Urudžbeni brojevi uvijek počinju znamenkama 6, 7 ili 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 9xx-xxx-x).

Tvar identificirana u registracijskoj dokumentaciji CAS brojem, koji nije povezan s EC brojem ili drugim već dodijeljenim preko ECHA-a, prima urudžbeni broj koji započinje znamenkom 6.

Tvar za koju je u registracijskoj dokumentaciji naveden samo naziv, koji se ne može povezati s nazivom u EC inventaru ili nekim drugim, prima urudžbeni broj koji započinje znamenkom 6.

⁹ Definicije „tvari u postupnom uvođenju“ i „tvari koje nisu u postupnom uvođenju“ dane su u Smjernicama za registraciju.

Urudžbeni brojevi koji počinju znamenkom 7 dodjeljuju se tijekom postupka provjere (*članak 26. Uredbe REACH*) nakon verifikacije identifikacije tvari. Te stavke imaju pouzdan i provjeren identitet tvari.

Napominjemo da je za neke stavke na popisu EINECS, opis tvari prilično širok i mogao bi obuhvatiti identitete više tvari sukladno *članku 3. stavku 1. Uredbe REACH*. U takvim slučajevima podnositelju registracije preporučuje se preciznije opisati tvar o kojoj se radi (primjerice, uz pomoć IUPAC naziva ili drugih identifikacijskih oznaka). Kako bi dokazao da je tvar u postupnom uvođenju, podnositelj registracije treba ipak naznačiti kojoj stavci na popisu EINECS tvar pripada. U takvim slučajevima Europska agencija za kemikalije odlučit će je li primjereno dodijeliti urudžbeni broj konkretnoj tvari.

3.3 ZAHTJEVI ZA IDENTIFIKACIJU TVARI U UREDBAMA REACH I CLP

Prema Uredbi REACH, kad je propisana registracija ona uključuje informacije o identifikaciji tvari određene u odjeljku 2. *Priloga VI*. Te informacije moraju biti odgovarajuće i dostatne za identifikaciju svake tvari. Ako je tehnički nemoguće ili se čini znanstveno neutemeljenim pružiti informacije o jednom ili više parametara identifikacije tvari, razlozi moraju biti jasno obrazloženi, kako je navedeno u *napomeni 1. Prilog VI*.

Slično, prema Uredbi CLP, kad je obvezna prijava (*članak 40. Uredbe CLP*) ona uključuje informacije o identifikaciji tvari određene u odjeljcima 2.1. do 2.3.4. *Priloga VI. Uredbe REACH*. Te informacije moraju biti odgovarajuće za identifikaciju svake tvari. Ako je tehnički nemoguće ili se čini znanstveno neutemeljenim pružiti informacije o jednom ili više parametara identifikacije tvari, razlozi moraju biti jasno obrazloženi, kako je navedeno u *napomeni 1. Prilog VI*.

U **tablici 3.1.** dan je pregled parametara identifikacije tvari iz *Priloga VI. Uredbe REACH*.

Tablica 3.1. Parametri za identifikaciju tvari iz odjeljka 2. Priloga VI. Uredbe REACH

2.	IDENTIFIKACIJA TVARI Informacije moraju biti dostatne za identifikaciju svake tvari. Ako je tehnički nemoguće ili se čini znanstveno neutemeljenim pružiti informacije o jednoj ili više stavaka navedenih u nastavku, razloge se mora jasno obrazložiti.
2.1	Naziv ili druge identifikacijske oznake svake tvari
2.1.1	<i>Naziv(i) prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv(i).</i>
2.1.2	<i>Ostali nazivi (uobičajeni naziv, trgovački naziv, skraćeni naziv)</i>
2.1.3	<i>EINECS ili ELINCS broj (ako je raspoloživ i potreban)</i>
2.1.4	<i>CAS oznaka i CAS broj (ako su raspoloživi)</i>
2.1.5	<i>Ostale identifikacijske oznake (ako su raspoložive)</i>
2.2	Informacije u vezi s molekularnom i strukturnom formulom svake tvari
2.2.1	<i>Molekularna i strukturna formula (uključujući oznaku iz sustava SMILES ako je raspoloživa)</i>
2.2.2	<i>Informacije o optičkoj aktivnosti i tipičnom udjelu (stereo)izomera (ako su raspoložive i potrebne)</i>
2.2.3	<i>Molekularna masa ili područje molekularne mase</i>
2.3.	Sastav svake tvari
2.3.1	<i>Stupanj čistoće (%)</i>
2.3.2	<i>Vrsta nečistoća uključujući izomere i nusproizvode</i>
2.3.3	<i>Postotak (značajnih) glavnih nečistoća</i>
2.3.4	<i>Vrsta i red veličine (...ppm, ...%) svih dodataka (primjerice, stabilizatori ili inhibitori)</i>
2.3.5	<i>Spektri (apsorpcija u ultraljubičastom i infracrvenom spektru, nuklearna magnetska rezonancija ili spektar masa)</i>
2.3.6	<i>Tekućinski kromatogram visoke djelotvornosti, plinski kromatogram</i>
2.3.7	<i>Opis analitičkih metoda ili odgovarajuće bibliografske bilješke za identifikaciju tvari te, prema potrebi, identifikaciju nečistoća i dodataka. Te informacije moraju biti dostatne za reprodukciju metoda.</i>

4 SMJERNICE ZA IDENTIFIKACIJU I NAZIVE TVARI U UREDBAMA REACH I CLP

4.1 UVOD

Pravila za identifikaciju i davanje naziva nisu ista za sve vrste tvari. Iz praktičnih razloga ove su smjernice ustrojene tako da se za svaku vrstu tvari čitatelja upućuje izravno na poglavlje u kojem se nalaze odgovarajuće upute. Zbog toga su u nastavku objašnjene različite vrste tvari i na kraju je dan ključ za pronalaženje odgovarajućeg poglavlja.

Identifikacija tvari treba se temeljiti barem na parametrima za identifikaciju tvari navedenima u odjeljku 2. *Priloga VI.* Uredbe REACH (vidjeti **tablicu 3.1.**). Stoga svaku tvar treba identificirati kombinacijom odgovarajućih parametara:

- naziva prema nomenklaturi IUPAC i/ili drugog naziva i drugih identifikacijskih oznaka, primjerice CAS broj, EC broj (*Prilog VI.*, odjeljak 2.1.);
- informacija u vezi s molekularnom i strukturnom formulom (*Prilog VI.*, odjeljak 2.2.);
- kemijskog sastava (*Prilog VI.*, odjeljak 2.3.).

Tvar je potpuno identificirana kemijskim sastavom, tj. kemijskim identitetom i sadržajem svakog sastojka u tvari. Iako je takva jednostavna identifikacija moguća za većinu tvari, za neke nije izvediva ili odgovarajuća u području primjene Uredaba REACH i CLP. U takvim slučajevima potrebne su druge ili dodatne informacije o identifikaciji tvari.

Prema tome, tvari se mogu podijeliti u dvije glavne skupine:

1. „Dobro definirane tvari“: Tvari definiranog kvalitativnog i kvantitativnog sastava koje se mogu dostatno identificirati na temelju identifikacijskih parametara iz odjeljka 2. *Priloga VI.* Uredbe REACH.
2. „UVCB tvari“: Tvari nepoznatog ili promjenjivog sastava, složeni reakcijski produkti i biološki materijali. Te tvari ne mogu se dostatno identificirati pomoću navedenih parametara.

Promjenjivost sastava dobro definiranih tvari određena je gornjom i donjom granicom područja koncentracije osnovnog sastojka, odnosno osnovnih sastojaka. Za UVCB tvari promjenjivost je razmjerno velika i/ili slabo predvidiva.

Jasno je da ima graničnih slučajeva između dobro definiranih tvari (reakcijski produkti s velikim brojem sastojaka, svaki unutar velikog područja) i UVCB tvari (reakcijski produkti s promjenjivim i slabo predvidivim sastavom). Podnositelj registracije odgovoran je za identifikaciju tvari na najprikladniji način.

Različita se pravila za identifikaciju i davanje naziva primjenjuju na „dobro definirane tvari“ s jednim osnovnim sastojkom i na „dobro definirane tvari“ koje imaju više osnovnih sastojaka. Za različite vrste tvari pod zajedničkim nazivom „UVCB“ opisana su drugačija pravila za identifikaciju i određivanje naziva.

U **tablicama 4.1.** i **4.2.** glavne identifikacijske oznake navedene su za nekoliko primjera različitih vrsta tvari. Ti su primjeri grupirani tako da se lako prepoznaju sličnosti i razlike bitne za identifikaciju tvari.

Tablice 4.1. i 4.2. ne predstavljaju iscrpan popis svih mogućih vrsta tvari. To grupiranje tvari prema pravilima identifikacije i davanja naziva nije službeni sustav kategorizacije tvari, nego praktična pomoć za prikladnu primjenu specifičnih pravila i za bolje snalaženje u ovim smjernicama.

Tablica 4.1 Grupiranje glavnih identifikacijskih oznaka za primjere koji predstavljaju različite vrste dobro definiranih sličnih tvari

Zajednička obilježja	Primjeri ili predstavnici	Glavne identifikacijske oznake
Dobro definirane tvari prema kemijskom sastavu <i>[poglavlje 4.2.]</i>	Tvari od jednog sastojka, primjerice - benzen (95%) - nikal (99%) <i>[poglavlje 4.2.1.]</i>	Kemijski sastav: jedan osnovni sastojak $\geq 80\%$: - kemijski identitet osnovnog sastojka (kemijski naziv, CAS broj, EC broj, itd.); - uobičajena koncentracija s gornjom i donjom graničnom vrijednošću
	Tvari od više sastojaka, primjerice definirani reakcijski produkti, kao što je reakcijska masa 2-, 3-, i 4-klortoluena (po 30% svakog) <i>[poglavlje 4.2.2.]</i>	Kemijski sastav: reakcijska masa osnovnih sastojaka, svaki između $\geq 10\%$ - $< 80\%$: - kemijski sastav svakog osnovnog sastojka - uobičajene koncentracije te gornje i donje granične vrijednosti svakog sastojka i reakcijske mase kao takve
	Tvari definirane i drugim parametrima osim kemijskog sastava, primjerice grafit i dijamant <i>[poglavlje 4.2.3.]</i>	Kemijski sastav kao tvari od najmanje jednog sastojka i drugi fizikalni parametri ili parametri kojima se opisuju svojstva: primjerice, morfologija kristala, (geološki) mineralni sastav, itd.

Tablica 4.2 Grupiranje glavnih identifikacijskih oznaka za primjere koji predstavljaju različite vrste UVCB tvari

Zajednička obilježja		Primjeri ili predstavnici	Glavne identifikacijske oznake		
			Izvor	Postupak	Ostale identifikacijske oznake
UVCB tvari (tvari nepoznatog ili promjenjivog sastava, složeni reakcijski produkti i biološki materijali) <i>[poglavlje 4.3.]</i>	Biološki materijali (B)	Ekstrakti bioloških materijala, npr. prirodni mirisi, prirodna ulja, prirodne boje i pigmenti	<ul style="list-style-type: none"> Biljna ili životinjska vrsta i obitelj Dio biljke/životinje 	<ul style="list-style-type: none"> Ekstrakcija Frakcioniranje, koncentriranje, izolacija, pročišćavanje, itd. <u>Derivacija*</u> 	<ul style="list-style-type: none"> Poznati ili generički sastav Kromatografski i drugi 'otisci prsta' Upućivanje na norme Indeks boje
		Složene biološke makromolekule, primjerice enzimi, proteini, dijelovi DNA ili RNA, hormoni, antibiotici			<ul style="list-style-type: none"> Standardni enzimski indeks Genetička šifra Prostorna konfiguracija Fizikalna svojstva Funkcija/aktivnost Struktura Slijed aminokiselina
		Proizvodi fermentacije: antibiotici, biopolimeri, smjese enzima, vinase (proizvodi fermentacije šećera), itd.	<ul style="list-style-type: none"> Medij Primijenjeni mikroorganizam 	<ul style="list-style-type: none"> Fermentacija Izolacija proizvoda Koraci pri pročišćavanju 	<ul style="list-style-type: none"> Vrsta proizvoda: npr. antibiotici, biopolimeri, proteini itd. Poznati sastav
	Kemijske i mineralne tvari slabo definiranog, složenog ili promjenjivog sastava (UVC)	Reakcijske smjese slabo predvidivog i/ili promjenjivog sastava	<ul style="list-style-type: none"> Početni materijali 	<ul style="list-style-type: none"> <u>Vrsta kemijske reakcije</u>, npr. esterifikacija, alkilacija, hidrogenacija 	<ul style="list-style-type: none"> Poznati sastav Tipičan kromatogram Upućivanje na norme
		<ul style="list-style-type: none"> Fracije ili destilati, npr. naftne tvari Glina, npr. bentonit Katrani 	<ul style="list-style-type: none"> Sirova nafta Ugljen/treset Prirodni plinovi Minerali 	<ul style="list-style-type: none"> Frakcioniranje, destilacija <u>Konverzija frakcija</u> Fizikalna obrada Ostaci 	<ul style="list-style-type: none"> Gornje granične vrijednosti Raspon dužine lanca Odnos aromatski/alifatski Poznati sastav Standardni indeks
		Koncentrati ili taljevine, npr. metalni minerali, ili ostaci različitih talioničkih ili metalurških postupaka, npr. troska	<ul style="list-style-type: none"> Rude 	<ul style="list-style-type: none"> Taljenje Toplinska obrada Različiti metalurški postupci 	<ul style="list-style-type: none"> Poznati ili generički sastav Koncentracija metala

* Podvučeni postupci označavaju sintezu nove molekule.

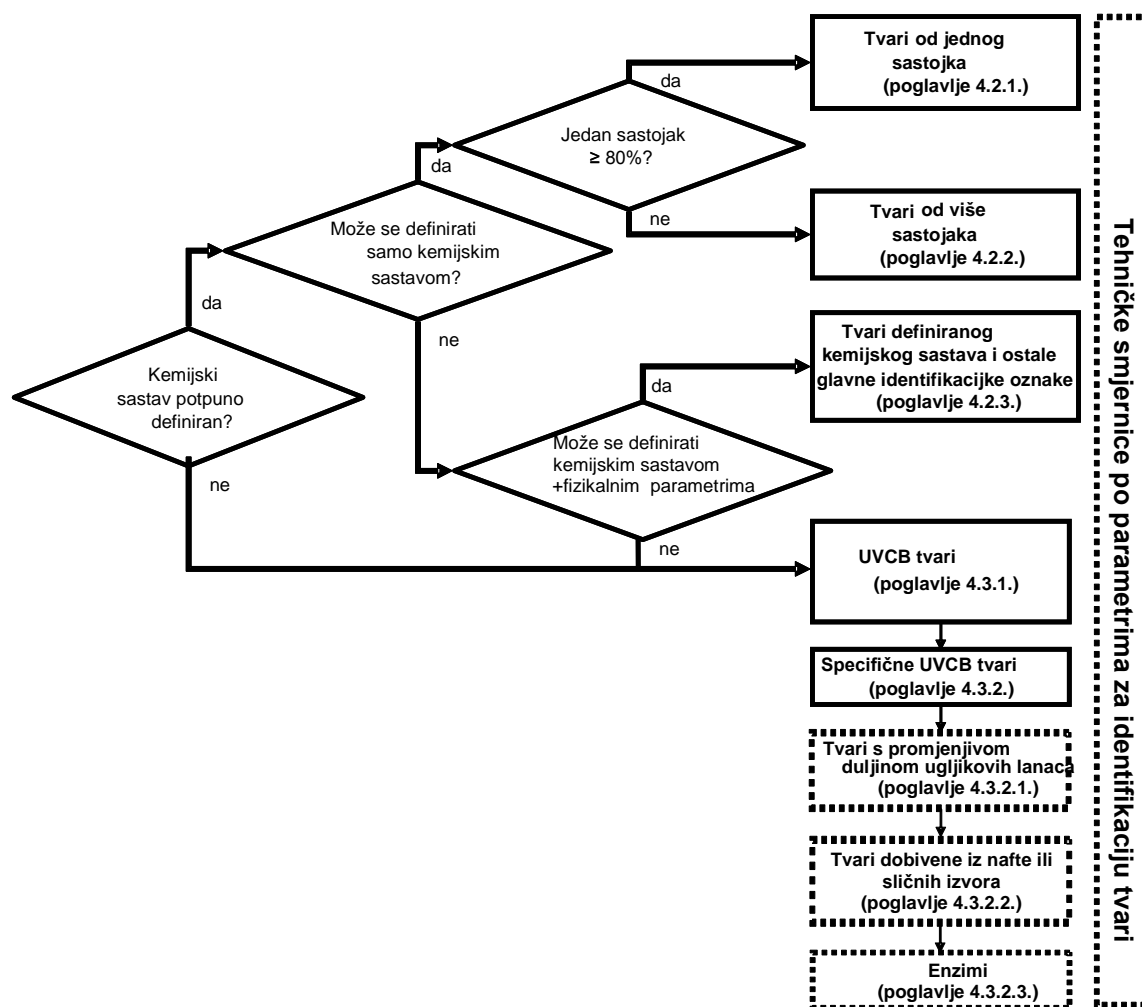
Ovo je poglavlje podijeljeno u potpoglavlja u kojima se nalaze konkretne upute za identifikaciju tvari različitih vrsta. Upute na odgovarajuća poglavlja dane su na **slici 4.1.**

Ključ na **slici 4.1.** utemeljen je na jednostavnim praktičnim kriterijima. Podnositelj registracije odgovoran je za izbor najprikladnijeg poglavlja i upis identiteta tvari sukladno pravilima i kriterijima za tu vrstu tvari.

Osnovno je pravilo da se tvari definiraju u najvećoj mogućoj mjeri kemijskim sastavom i identifikacijom sastojaka. Samo ako je to tehnički neizvedivo treba koristiti ostale identifikacijske oznake, kao što je navedeno za različite vrste UVCB tvari.

Ako podnositelj registracije odstupa od pravila za identifikaciju tvari i kriterija ovih smjernica, treba to obrazložiti. Identifikacija tvari treba biti transparentna, objašnjiva i dosljedna.

Slika 4.1. Upute na poglavlja i dodatke ovoga dokumenta koji se odnose na odgovarajuće smjernice ovisno o tipu tvari



Treba navesti opis analitičkih metoda i/ili odgovarajuće bibliografske bilješke za identifikaciju tvari te, prema potrebi, identifikaciju nečistoća i dodatka (Uredba REACH Prilog VI., odjeljci 2.3.5., 2.3.6. i 2.3.7.). Te informacije moraju biti dostatne za reprodukciju metoda. Treba navesti i uobičajene rezultate dobivene primjenom analitičkih tehnika.

4.2 TVARI DOBRO DEFINIRANOG KEMIJSKOG SASTAVA

Tvari dobro definiranog kemijskog sastava primaju naziv prema osnovnom sastojku, odnosno osnovnim sastojcima. Kod nekih tvari, sam kemijski sastav nije dovoljan za opis. U takvim slučajevima identifikaciji tvari treba dodati neke druge fizikalne parametre koji se odnose na kemijsku strukturu.

U pravilu, cilj bi trebao biti obuhvatiti do 100% sastava, a svaki sastojak treba potpuno kemijski odrediti, uključujući strukturne informacije. Kod tvari definiranih kemijskim sastavom razlikuju se:

- Osnovni sastojak: Sastojak koji čini značajan dio te tvari i stoga se koristi u davanju naziva tvari i u njezinoj detaljnoj identifikaciji, a nije dodatak ili nečistoća.
- Nečistoća: Nenamjeren sastojak prisutan u tvari koji proizlazi iz proizvodnog postupka. Može nastati iz početnih materijala ili kao rezultat sekundarnih ili nepotpunih reakcija tijekom proizvodnje. Iako prisutne u konačnoj tvari, nečistoće nisu dodane namjerno.
- Dodatak (aditiv): Tvar koja se dodaje namjerno radi stabilizacije tvari.

Sve sastojke (osim dodataka) koji nisu osnovni sastojak (odnosno sastojci) u tvari od jednog ili više sastojaka, smatra se nečistoćama. Iako je u nekim sektorima uobičajeno koristiti izraz „tragovi“, u ovim se smjernicama koristi samo izraz „nečistoće“.

Na različite sastojke primjenjuju se različiti zahtjevi za identifikaciju:

- osnovni sastojci dio su naziva tvari i svaki osnovni sastojak mora biti potpuno određen svim relevantnim identifikacijskim oznakama;
- nečistoće nisu dio naziva tvari i za njih treba navesti samo naziv, CAS broj i EC broj i/ili molekularnu formulu;
- dodaci pridonose sastavu tvari (ali nisu dio naziva) i treba ih uvijek u potpunosti identificirati.

Sljedeća se opća valjana pravila koriste za razlikovanje između tvari od jednog i više sastojaka:

- Tvar od jednog sastojka jest tvar u kojoj je jedan sastojak prisutan u koncentraciji od najmanje 80% masenog udjela i koja sadrži do 20% masenog udjela nečistoća.

Tvar od jednog sastojka prima naziv prema tom jednom sastojku.

- Tvar od više sastojaka jest tvar koju čini više sastojaka obično prisutnih u koncentracijama između $\geq 10\%$ i $< 80\%$ masenog udjela.

Tvar od više sastojaka naziva se reakcijskom masom najmanje jednog osnovnog sastojka.

Navedena pravila zamišljena su kao smjernica. Odstupanje je prihvatljivo ako se može jasno opravdati.

Obično treba navesti nečistoće prisutne u koncentraciji $\geq 1\%$. Međutim, nečistoće relevantne za razvrstavanje i/ili PBT ocjenu¹⁰ treba uvijek navesti, bez obzira na koncentraciju. U pravilu, informacije o sastavu trebaju biti potpune do 100%.

¹⁰ Više informacija o PBT ocjeni i relevantnim kriterijima može se naći u Smjernicama o zahtjevima obavješćivanja i ocjeni kemijske sigurnosti, poglavlje R11.: PBT ocjena.

Dodaci u smislu Uredbe REACH i Uredbe CLP u ovim su smjernicama sredstva potrebna za održavanje stabilnosti tvari. Dakle, dodaci su bitan sastojak tvari i uzimaju se u obzir prilikom računanja bilance mase. Međutim, izvan definicije iz Uredbe REACH i ovih smjernica izraz 'dodatak' koristi se i za namjerno dodane tvari drugih funkcija, primjerice tvari za reguliranje pH ili bojila. Te namjerno dodane tvari nisu dio same tvari i stoga se ne uzimaju u obzir prilikom računanja bilance mase.

Prema definicijama u Uredbama REACH i CLP, smjese su namjerne mješavine tvari i zbog toga se ne mogu smatrati tvarima od više sastojaka.

Upute koje se odnose na tvari od jednog sastojka nalaze se u poglavlju 4.2.1., a upute specifične za tvari od više sastojaka u poglavlju 4.2.2. Upute koje se odnose na tvari koje zahtijevaju dodatne informacije (primjerice, neki minerali) nalaze se u poglavlju 4.2.3.

4.2.1 Tvar od jednog sastojka

Tvar od jednog sastojka određuje njezin kvantitativni sastav, u kojem je jedan osnovni sastojak prisutan u koncentraciji od najmanje 80% (masenog udjela).

4.2.1.1 Opća valjana pravila nazivlja

Tvar od jednog sastojka prima naziv prema tom jednom sastojku. U načelu, naziv treba biti na hrvatskom jeziku sukladno pravilima nomenklature IUPAC (vidjeti dodatak I.). Ostale međunarodno prihvaćene oznake mogu se dodatno navesti.

4.2.1.2 Identifikacijske oznake

Tvar od jednog sastojka definirana je kemijskim nazivom i drugim identifikacijskim oznakama (uključujući molekularnu i strukturnu formulu) osnovnog sastojka te kemijskim identitetom nečistoća i/ili dodataka, i njihovim uobičajenim područjem, odnosno područjima koncentracije, što se dokazuje spektroskopskim i analitičkim informacijama.

Osnovni sastojak	Sadržaj (%)	Nečistoća	Sadržaj (%)	Identitet tvari
m-ksilen	91	o-ksilen	5	m-ksilen
o-ksilen	87	m-ksilen	10	o-ksilen

Obično, osnovni sastojak prisutan je u $\geq 80\%$ i treba biti potpuno opisan po svim prethodno spomenutim parametrima. Nečistoće prisutne u koncentraciji $\geq 1\%$ treba opisati barem jednom od sljedećih identifikacijskih oznaka: kemijskim nazivom (IUPAC i/ili CAS naziv), CAS brojem i EC brojem i/ili molekularnom formulom. Nečistoće relevantne za razvrstavanje i/ili ocjenu PBT¹¹ treba uvijek opisivati istim identifikacijskim oznakama, bez obzira na koncentraciju.

Radi ispravne primjene pravila o 80%, dodatne tvari, kao što su tvari za reguliranje pH ili bojila ne smiju se uključiti u bilancu mase.

„Pravilo o 80%“ primjenjuje se na prijavljivanje novih tvari (Direktiva 67/548/EEZ). Može se smatrati jednostavnim praktičnim pravilom. Međutim, odstupanja od tog pravila o 80% treba obrazložiti. Mogući primjeri opravdanog odstupanja jesu sljedeći:

¹¹ Više informacija o PBT ocjeni i relevantnim kriterijima može se naći u Smjernicama o zahtjevima obavješćivanja i ocjeni kemijske sigurnosti, poglavlje R11.: PBT ocjena.

- osnovnog sastojka ima < 80%, no može se dokazati da tvar ima slična fizikalno-kemijska svojstva i isti profil opasnosti kao ostale tvari od jednog sastojka istog identiteta koje zadovoljavaju pravilo o 80%;
- područje koncentracija osnovnog sastojka i nečistoća preklapaju se s kriterijem od 80% i koncentracija osnovnog sastojka samo je povremeno \leq 80%.

Primjeri									
Tvar	Osnovni sastojak	Najveći sadržaj (%)	Uobičajeni sadržaj (%)	Najmanji sadržaj (%)	Nečistoća	Najveći sadržaj (%)	Uobičajeni sadržaj (%)	Najmanji sadržaj (%)	Identitet tvari
1	o-ksilen	90	85	65	m-ksilen	35	15	10	o-ksilen
2	o-ksilen m-ksilen	90 35	85 15	65 10	p-ksilen	5	4	1	o-ksilen

Zbog koncentracijskih područja osnovnog sastojka i nečistoće, tvari 1. i 2. mogu se smatrati tvarima od više sastojaka s dva osnovna sastojka, o-ksilenom i m-ksilenom, ili tvarima od jednog sastojka. U takvom slučaju odluka je da se obje smatraju tvari od jednog sastojka, potaknuta činjenicom da je o-ksilen obično prisutan u koncentraciji > 80%.

Upute za opisivanje tvari od jednog sastojka uz pomoć programa IUCLID 5 navedene su u poglavlju 8.2.1. Dodatne informacije mogu se naći i u Priručniku za podnošenje podataka, dio 18. – „Kako opisati identitet tvari u programu IUCLID 5 za registraciju sukladno Uredbi REACH“.

4.2.1.3 Analitičke informacije

Potrebni su dostatni spektralni podaci kako bi se potvrdila struktura tvari od jednog sastojka. Postoji nekoliko prikladnih spektroskopskih metoda, naročito apsorpcija u ultraljubičastom i vidljivom spektru (UV/Vis) te u infracrvenom spektru (IR), nuklearna magnetska rezonancija (NMR) ili masena spektroskopija (MS). Za anorganske tvari mogu biti prikladnije rendgenska difrakcija (XRD), rendgenska fluorescencija (XRF) ili atomska apsorpcijska spektroskopija (AAS).

Kromatografske metode, kao što su plinska kromatografija (GC) ili tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti (HPLC) potrebne su za potvrdu sastava tvari. Po potrebi, mogu se koristiti i druge valjane tehnike odvajanja sastojaka.

Spektroskopske i analitičke metode stalno se mijenjaju. Stoga je podnositelj registracije odgovoran za iznošenje odgovarajućih spektralnih i analitičkih podataka.

4.2.2 Tvari od više sastojaka

Tvar od više sastojaka jest tvar definirana kvantitativnim sastavom, u kojem je više od jednog osnovnog sastojka prisutno u koncentraciji između $\geq 10\%$ i < 80% masenog udjela. Tvar od više sastojaka rezultat je proizvodnog procesa¹².

REACH propisuje registraciju tvari kako je proizvedena. Ako je proizvedena tvar od više sastojaka, treba je kao takvu registrirati^{13 14}. Odluka o tome u kojoj su mjeri različiti koraci u

¹² Razlika između smjese i tvari od više sastojaka jest u tome da se smjesa dobije spajanjem najmanje dviju tvari bez kemijske reakcije, dok je tvar od više sastojaka rezultat kemijske reakcije.

¹³ Neke su tvari izuzete od obveza registracije sukladno Uredbi REACH (npr. tvari navedene u Prilogu IV.).

¹⁴ Taj pristup ne primjenjuje se na neke specifične tvari, kao što su minerali (više detalja nalazi se u poglavlju 7.5.).

proizvodnji tvari obuhvaćeni definicijom 'proizvodnje' donosi se od slučaja do slučaja. Sve tvari prethodno obuhvaćene EINECS-om (primjerice, tvari od više sastojaka bile su obuhvaćene ako su svi pojedinačni sastojci bili navedeni na popisu EINECS) mogle bi se smatrati tvarima u postupnom uvođenju. Nema potrebe ispitivati tvar kao takvu ako se profil opasnosti tvari može dostatno opisati informacijama o pojedinačnim sastojcima.

4.2.2.1 Opće valjano pravilo nazivlja

Tvar od više sastojaka prima naziv reakcijske mase osnovnih sastojaka tvari kao takve, tj. ne početnih materijala potrebnih za proizvodnju tvari. Opći je oblik sljedeći: „Reakcijska masa [nazivi osnovnih sastojaka]“. Preporučuje se navoditi nazive sastojaka abecednim redom i odvajati veznikom „i“. Samo osnovni sastojci koncentracije obično $\geq 10\%$ dio su naziva. U načelu, nazivi trebaju biti na hrvatskom jeziku sukladno pravilima nomenklature IUPAC. Ostale međunarodno prihvaćene oznake mogu se dodatno navesti.

4.2.2.2 Identifikacijske oznake

Tvar od više sastojaka definirana je kemijskim nazivom i drugim identifikacijskim oznakama tvari kao takve, te kvantitativnim i kvalitativnim kemijskim sastavom (kemijski identitet, uključujući molekularnu i strukturnu formulu) sastojaka, a dokazuje se analitičkim informacijama.

Primjer				
Osnovni sastojci	Sadržaj (%)	Nečistoća	Sadržaj (%)	Identitet tvari
m-ksilen	50	p-ksilen	5	reakcijska masa m-ksilena i o-ksilena
o-ksilen	45			

Kod tvari od više sastojaka poznat je kemijski sastav i više od jednog osnovnog sastojka relevantno je za identifikaciju tvari. Nadalje, kemijski je sastav tvari predvidiv, kao uobičajene vrijednosti i područja. Osnovni sastojci opisuju se u potpunosti svim relevantnim parametrima. Zbroj uobičajenih koncentracija osnovnih sastojaka ($\geq 10\%$) i nečistoća ($< 10\%$) mora biti 100%.

Radi ispravne primjene pravila o 80%, dodatne tvari, kao što su tvari za reguliranje pH ili bojila ne smiju se uključiti u bilancu mase.

Nečistoće prisutne u koncentraciji $\geq 1\%$ treba opisati barem jednom od sljedećih identifikacijskih oznaka: kemijskim nazivom, CAS brojem i EC brojem i/ili molekularnom formulom. Nečistoće relevantne za razvrstavanje i/ili PBT ocjenu treba uvijek opisati istim identifikacijskim oznakama, neovisno o njihovoj koncentraciji.

Primjer								
Osnovni sastojak	Najveći sadržaj (%)	Uobičajeni sadržaj (%)	Najmanji sadržaj (%)	Nečistoća	Najveći sadržaj (%)	Uobičajeni sadržaj (%)	Najmanji sadržaj (%)	Identitet tvari
anilin	90	75	65	fenantren	5	4	1	reakcijska masa anilina i naftalena
naftalen	35	20	10					

Prema pravilima iznesenim u ovim smjernicama, to je tvar od više sastojaka. Iako je područje jednog sastojka $> 80\%$, to se događa samo povremeno, a uobičajeni sastav je $< 80\%$.

Ponekad je prikladno tvar smatrati tvarima od više sastojaka čak i kad je jedan sastojak prisutan u koncentraciji $\geq 80\%$. Primjerice, tvar čine dva sastojka, jedan u koncentraciji 85%, drugi 10%, a

ostatak su nečistoće. Oba sastojka pridonose i bitni su za željeni tehnički učinak tvari. U ovom slučaju, unatoč tome što jednog sastojka ima više od 80%, tvar se može opisati kao tvar od više sastojaka.

Upute za opisivanje tvari od više sastojaka uz pomoć programa IUCLID 5 navedene su u poglavlju 8.2.2. Dodatne informacije mogu se naći i u Priručniku za podnošenje podataka, dio 18. – „Kako opisati identitet tvari u programu IUCLID 5 za registraciju sukladno Uredbi REACH“.

4.2.2.3 Analitičke informacije

Ako spektralni podaci daju informacije o sastavu tvari od više sastojaka te informacije treba navesti. Postoji nekoliko prikladnih spektroskopskih metoda, naročito apsorpcija svjetlosti u ultraljubičastom i vidljivom spektru (UV/Vis) te u infracrvenom spektru (IR), nuklearna magnetska rezonancija (NMR) ili masena spektroskopija (MS). Za anorganske tvari mogu biti prikladnije rendgenska difrakcija (XRD), rendgenska fluorescencija (XRF) ili atomska apsorpcijska spektroskopija (AAS).

Kromatografske metode, kao što su plinska kromatografija (GC) i/ili tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti (HPLC) potrebne su za potvrdu sastava tvari. Po potrebi, mogu se koristiti i druge valjane tehnike odvajanja sastojaka.

Spektroskopske i analitičke metode stalno se mijenjaju. Stoga je podnositelj registracije odgovoran za iznošenje odgovarajućih spektralnih i analitičkih podataka.

4.2.2.4 Registracija pojedinačnih sastojaka tvari od više sastojaka

Općenito, opisivanje identiteta tvari radi (pred-)registracije trebalo bi se provoditi kao da se radi o tvari s više sastojaka (tj. o registraciji tvari od više sastojaka). Kao odstupanje od tog pristupa, ako je opravdano, mogu se registrirati pojedinačni sastojci. Odstupanja od standardnog slučaja kako bi se tvari identificirale (i možda registrirale) prema njihovim pojedinačnim sastojcima moguća su pod sljedećim uvjetima:

- nema smanjenja zahtjeva obavješćivanja;
- postojeći su podaci dostatni za opravdanje registracije pojedinačnih sastojaka, tj. pristup ne bi smio potaknuti dodatna istraživanja (na kralješnjacima) u usporedbi sa standardnim pristupom;
- registracija pojedinačnih sastojaka daje veću učinkovitost (izbjegavanjem brojnih registracija tvari sačinjenih od istih sastojaka);
- dane su informacije o sastavu pojedinačnih reakcijskih masa.

Ta se fleksibilnost ne smije zlorabiti kako bi se izbjegli zahtjevi za pružanjem podataka. Primjerice, u slučaju tvari od više sastojaka „(C + D)“ u količini 1200 tona godišnje (tpa), sastava 50% C i 50% D, taj bi pristup značio dvije registracije sa sljedećim informacijama:

Tvar C

- tonaža 600;
- zahtjevi za podacima koje treba ispuniti za > 1000 tona (*Prilog X*).

Tvar D

- tonaža 600;

- zahtjevi za podacima koje treba ispuniti za > 1000 tona (*Prilog X.*).

Taj pristup treba kombinirati s obvezom zbrajanja količina iste tvari po pravnoj osobi propisanom u Uredbi REACH. Predlaže se na sljedeći način ustvrditi zahtjeve za podacima:

- zbrojiti sve količine pojedinačnih sastojaka (prema količinama u tvari);
- uputiti na najveću količinu tvari koja ima taj sastojak.

Zahtjeve obavješćivanja treba odrediti na temelju najvišeg rezultata. Kod navođenja tonaže treba uzeti zbroj tonaža svih pojedinačnih sastojaka. Nekoliko pojednostavljenih primjera u nastavku ilustrira praktičnu primjenu ovoga pristupa:

Primjer 1.

Tvar od više sastojaka „C + D + E“ rezultat je postupka provedenog kod jedne pravne osobe, iz kojeg su proizašle različite tvari:

Tvar 1.: 50% C i 25% D i 25% E, 1100 tpa

Tvar 2.: 50% C i 50% D, 500 tpa

U ovom slučaju reakcijski produkt je i početna točka: te dvije tvari treba registrirati kao tvari od više sastojaka. Ako bi se primijenio pristup registracije pojedinačnih sastojaka¹⁵, vrijedilo bi sljedeće:

Opisivanje tvari D u tom bi slučaju značilo sljedeće:

- tonaža: $(25\% * 1100) + (50\% * 500) = 525$ tpa;

- zahtjeve obavješćivanja određuje se na temelju najstrožeg zahtjeva. U tom slučaju: >1000 tpa, kao ukupna tonaža tvari od više sastojaka „C + D + E“ prekoračuje 1000 tpa.

Napomena: u ovom primjeru, tvari C i E treba registrirati sukladno tome.

Primjer 2.

Tvar od više sastojaka „G + H + I“ rezultat je postupka provedenog kod jedne pravne osobe, iz kojeg su proizašle različite tvari:

Tvar 3.: 65% G i 15% H i 20% I, 90 tpa

Tvar 4.: 60% G i 40% H, 90 tpa

Opis tvari G:

- tonaža: $(65\% * 90) + (60\% * 90) = 112,5$ tpa;

- zahtjeve obavješćivanja određuje se na temelju najstrožeg zahtjeva. U tom slučaju: >100 tpa, kao ukupna tonaža sastojka G prekoračuje 100 tpa.

Napomena: u ovom primjeru, tvari H i I treba registrirati sukladno tome.

Osim određivanja spomenutih zahtjeva obavješćivanja, treba razmotriti i broj novih istraživanja (na kralješnjacima) koje treba provesti. Prije odluke o strategiji, potencijalni podnositelji

¹⁵ Ovaj primjer samo ilustrira uspostavljanje zahtjeva obavješćivanja i prijavljivanja količina. Ne govori ništa o opravdanosti pristupa.

registracije moraju provjeriti postoje li dostatna istraživanja (na kralješnjacima) i hoće li predložena fleksibilnost zahtijevati manje ili više novih ispitivanja (na kralješnjacima). Treba izabrati strategiju koja izbjegava nova ispitivanja (na kralješnjacima).

U slučaju dvojbe, standardni put opisivanja identiteta tvari u svrhu registracije treba uvijek biti identifikacija tvari kako je proizvedena.

4.2.3 Tvari definiranog kemijskog sastava i ostale glavne identifikacijske oznake

Neke tvari (npr. anorganske minerale) koje se može identificirati njihovim kemijskim sastavom treba još opisati i dodatnim identifikacijskim oznakama kako bi dobile vlastitu identifikaciju. To mogu biti tvari od jednog ili sastojaka, no potrebne su, osim parametara identifikacije tvari opisanih u prethodnim poglavljima, ostale glavne identifikacijske oznake kako bi se identitet tvari opisao jednoznačno.

Primjeri
Neki nemetalni minerali (iz prirodnih izvora ili umjetni) jedinstvene strukture trebaju i morfologiju i mineralni sastav kako bi se tvar jasno identificirala. Kao primjer navodimo kaolin (CAS broj 1332-58-7) sastavljen od kaolinita, kalijeva aluminij silikata, glinenca i kremena.

Sadašnja dostignuća u tehnologiji nanočestica i uvidi u s njima povezane opasne učinke mogu ubuduće nametnuti potrebu za dodatnim informacijama o veličini tvari. Trenutačni stupanj razvoja još nije na razini koja bi dopustila uključenje smjernica o identifikaciji tvari u obliku nanočestica u ovaj dokument.

4.2.3.1 Opće valjano pravilo nazivlja

U načelu, treba se pridržavati istih pravila kao kod tvari od jednog (poglavlje 4.2.1.) ili više sastojaka (poglavlje 4.2.2.).

Kod anorganskih minerala za sastojke se mogu koristiti mineraloški nazivi. Primjerice, apatit je tvar od više sastojaka, a čini ga skupina fosfatnih minerala koji se obično nazivaju hidroksiapatit, fluorapatit i klorapatit zbog visokih koncentracija OH^- , F^- , odnosno Cl^- iona u kristalu. Formula smjese triju najčešćih vrsta jest $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$. Još je jedan primjer aragonit, jedna od posebnih kristalnih struktura kalcijeva karbonata.

4.2.3.2 Identifikacijske oznake

Ove se tvari identificiraju i nazivaju prema pravilima koja vrijede za tvari od jednog (poglavlje 4.2.1.) ili više sastojaka (poglavlje 4.2.2.). Ostali specifični glavni parametri identifikacije dodaju se ovisno o tvari. Primjeri ostalih glavnih identifikacijskih oznaka mogu biti elementni sastav sa spektralnim podacima, kristalna struktura prikazana rendgenskom difrakcijom, apsorpcijski vrhovi u infracrvenoj spektroskopiji, indeks buprenja, kapacitet izmjene kationa ili ostala fizikalna i kemijska svojstva.

Kod minerala važno je kombinirati rezultate elementnog sastava sa spektralnim podacima kako bi se identificirao mineraloški sastav i kristalna struktura. Potvrda za to nalazi se u karakterističnim fizikalno-kemijskim svojstvima, kao što su kristalna struktura (prikazana rendgenskom difrakcijom), oblik, tvrdoća, kapacitet buprenja, gustoća i/ili veličina površine.

Primjeri specifičnih dodatnih glavnih identifikacijskih oznaka mogu se dati za pojedine minerale, budući da minerali imaju karakteristična fizikalno-kemijska svojstva koja omogućuju njihovu potpunu identifikaciju, primjerice: vrlo niska tvrdoća za milovku, kapacitet buprenja za bentonit, oblici diatomita, vrlo visoka gustoća barita i veličina površine (adsorpcija dušika).

Upute za opisivanje tvari definiranog kemijskog sastava i ostalih glavnih identifikacijskih oznaka uz pomoć programa IUCLID 5 navedene su u poglavlju 8.2.3.

4.2.3.3 Analitičke informacije

Treba navesti iste analitičke informacije kao za tvari od jednog (poglavljje 4.2.1.) ili više sastojaka (poglavljje 4.2.2.). Za tvari kod kojih spektralni podaci, GC- ili HPLC-kromatogrami nisu dostatni za identifikaciju treba dati informacije pribavljene drugim analitičkim tehnikama, kao što su rendgenska difrakcija za minerale, elementna analiza itd. Pri tome je kriterij da informacije trebaju biti dostatne za potvrdu strukture tvari.

4.3 UVCB TVARI

Tvari nepoznatog ili promjenjivog sastava, složeni reakcijski produkti i biološki materijali,¹⁶ ¹⁷ ¹⁸ (UVCB tvari), ne mogu se dostatno identificirati pomoću njihovog kemijskog sastava iz sljedećih razloga:

- broj sastojaka razmjerno je velik i/ili
- sastav je, u značajnoj mjeri, nepoznat i/ili
- promjenjivost sastava razmjerno je velika ili slabo predvidiva.

Zbog toga su za identifikaciju UVCB tvari potrebne i druge vrste informacija uz podatke o njihovom kemijskom sastavu.

Iz **tablice 4.2.** može se vidjeti da su glavne identifikacijske oznake različitih vrsta UVCB tvari povezane s podrijetlom (izvorom) tvari i korištenim postupkom; ili pripadaju skupini „ostalih glavnih identifikacijskih oznaka“ (npr. „kromatografski ili drugom metodom dobiveni 'otisci prsta'“). Broj i vrsta identifikacijskih oznaka u **tablici 4.2.** ilustriraju promjenjivost vrsta i nisu iscrpan pregled. Kada je poznat kemijski sastav, npr. složenog reakcijskog produkta ili tvari biološkog podrijetla, tvar treba identificirati kao tvar od jednog, odnosno više sastojaka. Posljedica definiranja tvari kao UVCB jest da će svaka značajna promjena izvora ili postupka vjerojatno dati drugačiju tvar koju će trebati ponovno registrirati. Ako se reakcijsku smjesu identificira kao „tvar od više sastojaka“, tvar se može dobiti i iz drugih izvora i/ili drugačijim postupcima sve dok je sastav konačne tvari unutar navedenog područja. Prema tome, nova registracija ne bi bila potrebna.

Opće smjernice za UVCB tvari nalaze se u poglavlju 4.3.1., a specifične upute za tvari s promjenjivom duljinom ugljikovog lanca, tvari dobivene iz nafte ili sličnih izvora i enzima, kao posebne vrste UVCB tvari, u poglavlju 4.3.2.

¹⁶ Rasmussen K, Pettauer D, Vollmer G *et al.* (1999) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for UVCB substances. *Tox Env Chem* Vol. 69, str. 403-416.

¹⁷ US EPA (2005-B) Registracija kombinacija najmanje dviju tvari: složeni reakcijski produkti, sukladno Zakonu o nadzoru nad otrovnim tvarima (SAD).

¹⁸ US EPA (2005-D) Registracija kemijskih tvari nepoznatog ili promjenjivog sastava, složenih reakcijskih produkata i bioloških materijala: UVCB tvari, sukladno Zakonu o nadzoru nad otrovnim tvarima (SAD).

4.3.1 Opće smjernice za UVCB tvari

Ovo poglavlje pruža opće smjernice za uporabu nekih glavnih identifikacijskih oznaka, osim parametara identifikacije tvari u odjeljku 2. *Priloga VI. Uredbe REACH*, za identifikaciju UVCB tvari.

4.3.1.1 Informacije o kemijskom sastavu

UVCB tvari ne može se jednoznačno odrediti nazivom sastojaka prema IUPAC-nomenklaturi, budući da se ne mogu identificirati svi sastojci; ili ih se može odrediti generički, no bez specifičnih podataka zbog promjenjivosti sastava. Zbog nemogućnosti razlikovanja između sastojaka i nečistoća, izrazi „osnovni sastojci“ i „nečistoće“ nisu relevantni za UVCB tvari.

Međutim, kemijski sastav i identitet sastojaka treba dati ukoliko su poznati. Opis sastava često može biti generički, primjerice „ravnolančane masne kiseline C8-C16“ ili „etoksilati alkohola s alkoholima C10-C14 s 4-10 etoksilatnih skupina“. Uz to, informacije o kemijskom sastavu može se dati na temelju dobro poznatih referentnih uzoraka ili normi; u mnogo slučajeva mogu se također koristiti indeksi i postojeće šifre. Ostale generičke informacije o sastavu mogu činiti tzv. „otisci prsta“, tj. primjerice kromatografske ili spektrofotometrijske slike koje pokazuju karakteristični raspored vrhova.

Kod UVCB tvari, za sve poznate sastojke i sve sastojke koncentracije $\geq 10\%$ treba navesti barem naziv na hrvatskom prema IUPAC-nomenklaturi i po mogućnosti CAS broj; uobičajene koncentracije i područja koncentracija poznatih sastojaka treba također navesti. Sastojke relevantne za razvrstavanje i/ili PBT ocjenu tvari¹⁹ uvijek treba opisati istim identifikacijskim oznakama, neovisno o njihovoj koncentraciji.

Nepoznate sastojke treba koliko je to moguće identificirati generičkim opisom njihove kemijske prirode. Dodatke treba potpuno opisati na sličan način, kao što je navedeno za dobro definirane tvari.

4.3.1.2 Glavni identifikacijski parametri – naziv, podrijetlo i postupak

Budući da sam kemijski sastav nije dostatan za identifikaciju tvari, tvar se mora u pravilu identificirati uz pomoć naziva, podrijetla ili izvora i najrelevantnijih koraka poduzetih tijekom obrade. Ostala svojstva tvari mogu također biti važne identifikacijske oznake, bilo kao relevantne generičke identifikacijske oznake (npr. vrelište) ili ključne identifikacijske oznake za specifične skupine tvari (npr. katalitička aktivnost kod enzima).

1. Opće valjano pravilo nazivlja

Općenito, naziv UVCB tvari kombinacija je izvora i postupka sljedećeg općeg oblika: najprije izvor zatim postupak, odnosno postupci.

- Tvar dobivena iz bioloških izvora identificira se pomoću naziva vrste.
- Tvar dobivena iz nebioloških izvora identificira pomoću početnih materijala.

¹⁹ Više informacija o PBT ocjeni i relevantnim kriterijima može se naći u Smjernicama o zahtjevima obavješćivanja i ocjeni kemijske sigurnosti, poglavlje R11.: PBT ocjena.

- Postupci se identificiraju pomoću vrste kemijske reakcije ako se radi o sintezi novih molekula, ili kao vrsta pročišćavanja, npr. ekstrakcija, frakcioniranje, koncentriranje, ili kao ostatak.

Primjeri	
EC broj	EC naziv
296-358-2	Lavanda, ekstrakt Lavandula hybrida, acetiliran
307-507-9	Lavanda, ekstrakt Lavandula latifolia, sumporiran, paladijeva sol

Kod reakcijskih produkata u EC inventaru koriste se različiti formati, npr.:

- EINECS: Osnovni početni materijal, reakcijski produkt(i) drugog početnog materijala, odnosno drugih početnih materijala;
- ELINCS: Reakcijski produkt(i) početnog materijala, odnosno početnih materijala.

Primjeri	
EC broj	EC naziv
232-341-8	Dušičasta kiselina, reakcijski produkti s 4-metil-1,3-benzendiamin hidrokloridom
263-151-3	Masne kiseline, koko, reakcijski produkti s dietilentriaminom
400-160-5	Reakcijski produkti masnih kiselina sulfatnog ulja (Tall-ulja), dietanolamina i borne kiseline
428-190-4	Reakcijski produkt 2,4-diamino-6-[2-(2-metil-1H-imidazol-1-il)etil]-1,3,5-triazina i cijanurične kiseline

U ovim smjernicama, generički oblik naziva reakcijskih produkata jest „Reakcijski produkt [nazivi početnih materijala]“. U načelu, nazivi trebaju biti na hrvatskom jeziku sukladno pravilima nomenklature IUPAC. Ostale međunarodno prihvaćene oznake mogu se dodatno navesti. Preporučuje se u nazivu zamijeniti riječ „reakcija“ specifičnom vrstom reakcije opisanom generički, npr. esterifikacija ili stvaranje soli itd. (vidjeti upute za četiri specifična UVCB podrazreda, u nastavku).

2. Izvor

Izvori se mogu podijeliti u dvije skupine:

2.1. Biološki izvori

Tvari biološkog podrijetla treba definirati navođenjem roda, vrste i obitelji, primjerice *Pinus cembra*, *Pinaceae* znači *Pinus* (rod), *cembra* (vrsta), *Pinaceae* (obitelj), i soja ili genotipa, ako su relevantni. Ako je prikladno, treba navesti i tkivo ili dio organizma iz kojeg je tvar ekstrahirana, npr. koštana srž, gušterača; ili stabljika, sjemenke, odnosno korijen.

Primjeri	
EC broj	EC naziv
283-294-5	Ekstrakt <i>Saccharomyces cerevisiae</i>
	EC opis
	Ekstrakti i njihovi fizički promijenjeni derivati, kao što su tinkture, konkretni, apsoluti, eterična ulja, oleorezini, terpeni, frakcije bez terpena, destilati, ostaci i sl., dobiveni iz <i>Saccharomyces cerevisiae</i> , Saccharomycelaceae.
296-350-9	Ekstrakt <i>Arnica mexicana</i>
	EC opis
	Ekstrakti i njihovi fizički promijenjeni derivati, kao što su tinkture, konkretni, apsoluti, eterična ulja, oleorezini, terpeni, frakcije bez terpena, destilati, ostaci i sl., dobiveni iz <i>Arnica mexicana</i> , Compositae.

2.2. Kemijski ili mineralni izvori

Kod reakcijskih produkata kemijskih reakcija, početne materijale treba opisati njihovim nazivom prema IUPAC-nomenklaturi na hrvatskom jeziku. Mineralne izvore treba opisati generičkim izrazima, primjerice izrazima fosfatne rude, boksit, kaolin, prirodni plin, ugljen, treset.

3. Postupak

Postupci se identificiraju pomoću vrste kemijske reakcije ako se radi o sintezi novih molekula, ili kao vrsta pročišćavanja, npr. ekstrakcija, fracioniranje, koncentriranje, ili kao ostatak pročišćavanja.

Kod nekih tvari, npr. kemijskih derivata, postupak se mora opisati ako je kombinacija pročišćavanja i sinteze.

– Sinteza

Između početnih materijala dolazi do kemijske ili biokemijske reakcije iz koje nastaje tvar. Primjerice, Grignardova reakcija, sulfonacija, enzimsko cijepanje proteazom ili lipazom itd. Mnoge derivacijske reakcije pripadaju ovoj vrsti.

Kod novo sintetiziranih tvari, za koje se ne može dati kemijski sastav, početni su materijali glavna identifikacijska oznaka zajedno s navođenjem reakcije, tj. vrste kemijske reakcije. Vrsta kemijske reakcije otkriva koje bi molekule mogle biti prisutne u tvari. Postoji nekoliko vrsta konačnih kemijskih reakcija: hidroliza, esterifikacija, alkilacija, klorinacija itd. Budući da se tako daju samo generičke informacije o mogućim proizvedenim tvarima, u mnogim slučajevima za potpuni opis svojstava i identifikaciju tvari bit će potreban i tipični kromatogram.

Primjeri	
EC broj	EC naziv
294-801-4	Laneno ulje, epoksidirano, reakcijski produkti s tetraetilenpentaminom
401-530-9	Reakcijski produkt (2-hidroksi-4-(3-propenoksi)benzofenona i trietoksisilana) s (produktom hidrolize silike i metiltrimetoksisilana)

– Pročišćavanje

Pročišćavanje se može primijeniti na mnogo različitih načina na tvari prirodnog ili mineralnog podrijetla, kada se kemijski identitet sastojaka ne mijenja, no promijenjena je njihova koncentracija, npr. hladna obrada biljnog tkiva, potom ekstrakcija alkoholom.

Pročišćavanje se može dalje definirati u postupcima, kao što je ekstrakcija. Identifikacija tvari ovisi o vrsti postupka:

- kod tvari dobivenih fizikalnim metodama, npr. pročišćavanjem ili frakcioniranjem, treba navesti područje gornjih graničnih vrijednosti i frakcijski parametar (npr. veličina molekula, duljina lanca, vrelište, područje hlapljivosti itd.);
- kod tvari dobivenih koncentriranjem, kao što su produkti metalurških postupaka, precipitati centrifugiranja, ostaci na filtru itd., koncentriranje se mora opisati zajedno s generičkim sastavom dobivene tvari u usporedbi s početnim materijalom.

Primjeri	
EC broj	EC naziv
408-250-6	Koncentrat organovolframova spoja (reakcijski produkti volframova heksaklorida s 2-metilpropan-2-ol, nonilfenol i pentan-2,4-diona)

- kod ostataka specifičnih reakcija, kao što su troske, katrani i teški ostaci, postupak se mora opisati zajedno s generičkim sastavom dobivene tvari;

Primjeri	
EC broj	EC naziv
283-659-9	Kositar, ostaci taljenja
	EC opis Tvar dobivena uporabom i proizvodnjom kositra i njegovih legura dobivenih iz primarnih i sekundarnih izvora uključujući reciklirane biljne intermedijere. Sastoji se prvenstveno od spojeva kositra i može sadržavati druge rezidualne neželjne metale i njihove spojeve.
293-693-6	Sojina sačma, proteinska ekstrakcija, ostatak
	EC-opis Nusproizvod, koji sadrži prvenstveno ugljikohidrate, proizveden etanolnom ekstrakcijom odmašćene soje.

- kod ekstrakata treba navesti metodu ekstrakcije, otapalo korišteno pri ekstrakciji i druge relevantne uvjete (kao što je temperatura, odnosno temperaturna područja);
- kod kombiniranih postupaka treba opisati svaki korak (generički) uz informacije o izvoru. Ti kombinirani postupci naročito su relevantni kod kemijskih derivatizacija.

Primjeri:

- Biljka se najprije ekstrahira, ekstrakt se destilira, a destilirana frakcija biljnog ekstrakta koristi se za kemijsku derivatizaciju. Dobivena tvar može se dalje pročišćavati. Pročišćeni produkt može u konačnici biti dobro definiran svojim kemijskim sastavom pa nema potrebe identificirati tvar kao UVCB. Ako se produkt i dalje smatra UVCB tvari, kombinirani postupak može se opisati kao „pročišćeni kemijski derivat destilirane frakcije biljnog ekstrakta“.

Ako daljnja obrada ekstrakta uključuje samo fizikalnu izmjenu, sastav će se promijeniti bez namjerne sinteze novih molekula. Ipak, promjena sastava daje drugačiju tvar, npr. destilat ili precipitat biljnog ekstrakta.

- U proizvodnji naftnih proizvoda često se kombiniraju kemijska derivatizacija i frakcioniranje. Na primjer, destilacija nafte i krekiranje stvaraju frakciju početnog materijala, no i nove molekule. U tom slučaju, obje vrste postupka treba identificirati ili destilat treba navesti kao početni materijal krekiranja. To se naročito odnosi na naftne derivate koji često nastaju kao rezultat kombinacije postupaka. Međutim, može se koristiti poseban specifičan sustav za identifikaciju naftnih tvari (vidjeti poglavlje 4.3.2.2.).

Budući da kemijski derivat ekstrakta ne sadrži iste sastojke kao ekstrakt-roditelj, treba smatrati različitom tvari. Posljedica ovoga pravila može biti odstupanje identifikacije pomoću naziva i opisa od prethodnog EINECS naziva i opisa. Kada se uspostavlja EINECS popis, ekstrakti iz različitih postupaka, različita otapala pa čak i fizikalni ili kemijski derivati često su bili obuhvaćeni zajedno u jednoj stavci. Međutim, sukladno Uredbi REACH te tvari treba registrirati odvojeno.

4. Ostali parametri za identifikaciju tvari

Osim kemijskog naziva, izvora i opisa postupka, UVCB tvar treba uključiti sve ostale relevantne informacije, kako je propisano u odjeljku 2. *Priloga VI.* Uredbe REACH.

Posebice za specifične vrste UVCB tvari mogu biti relevantni ostali identifikacijski parametri. Ostale dodatne identifikacijske oznake mogu biti:

- generički opis kemijskog sastava,
- kromatografski i drugi 'otisci prsta',
- referentni materijal (npr. ISO),
- fizikalno-kemijski parametri (npr. vrelište),
- indeks boje,
- AISE broj.

Specifične upute o pravilima i kriterijima za uporabu informacija o nazivu, izvoru i postupku pri identifikaciji UVCB tvari navedene su u nastavku za različite vrste izvora i postupaka. U sljedećim ulomcima četiri podvrste UVCB tvari opisane su kao kombinacija bioloških ili kemijskih/mineralnih izvora i postupaka (sinteza ili pročišćavanje).

Upute o opisivanju UVCB tvari uz pomoć programa IUCLID 5 navedene su u poglavlju 8.2.4.

UVCB podvrsta 1.: izvor je biološki, a postupak je sinteza

Biološke tvari mogu se mijenjati u (bio)kemijskom postupku kako bi nastali sastojci koji nisu bili prisutni u početnom materijalu, kao što su kemijski derivati biljnih ekstrakata ili produkti enzimske obrade ekstrakata. Primjerice, bjelančevine se može hidrolizirati uz pomoć proteaza kako bi nastali oligopeptidi ili se celulozu iz drveta može karboksilirati kako bi dala karboksi metil celulozu (CMC).

Produkti fermentacije mogu također pripadati ovoj UVCB podvrsti. Primjerice, vinasa je produkt fermentacije šećera koji, u usporedbi sa šećerom, sadrži mnogo različitih sastojaka. Kada se produkti fermentacije dalje pročišćavaju, tvari mogu u konačnici postati takve da ih se može potpuno identificirati njihovim kemijskim sastavom pa ih ne treba više identificirati kao UVCB tvari.

Enzimi su posebna skupina tvari koje se mogu dobiti ekstrakcijom i daljnjim pročišćavanjem iz izvora biološkog podrijetla. Unatoč tome što se izvor i postupak mogu potanko opisati, to ne stvara specifične informacije o enzimu. Za te tvari treba koristiti specifičan sustav razvrstavanja, naziva i identifikacije (vidjeti poglavlje 4.3.2.3.).

Pri identifikaciji tvari treba navesti krajnji postupak i/ili sve ostale postupke relevantne za identitet tvari.

Opis kemijskog postupka mora biti generički opis vrste postupka (esterifikacija, alkalna hidroliza, alkilacija, klorinacija, supstitucija itd.), zajedno s relevantnim okolnostima postupka.

Opis biokemijskog postupka može biti generički opis katalizirane reakcije, zajedno s nazivom enzima koji se koristi kao katalizator u reakciji.

Kod tvari koje nastaju fermentacijom ili iz kultura (tkiva) raznih vrsta, treba navesti vrstu koja sudjeluje u fermentaciji, vrstu i opće uvjete fermentacije (šaržna ili kontinuirana, aerobna, anaerobna, anoksična, temperaturu, pH itd.), zajedno sa svim daljnjim postupcima koji su primijenjeni kako bi se izolirali produkti fermentacije, kao što su centrifugiranje, precipitacija, ekstrakcija, itd. Ako se te tvari dalje pročišćavaju, rezultat može biti frakcija, koncentrat ili ostatak. Tvari koje prolaze daljnju obradu identificiraju se dodatnim opisom daljnjih postupaka.

UVCB podvrsta 2.: izvor je kemijski ili mineralni, a postupak je sinteza

UVCB tvari dobivene iz kemijskih ili mineralnih izvora, izvedene uz pomoć procesa u kojem se sintetiziraju nove molekule, jesu „reakcijski produkti“. Primjeri kemijskih reakcijskih produkata jesu produkti esterifikacije, alkilacije ili klorinacije. Biokemijske reakcije primjenom izoliranih enzima posebne su vrste kemijskih reakcija. Međutim, ako se složeni biokemijski put sinteze primijeni uporabom cijelih mikroorganizama, bolje je dobivenu tvar smatrati produktom fermentacije i identificirati je uz pomoć fermentacijskog postupka i vrste koja sudjeluje u fermentaciji nego na temelju početnih materijala (vidjeti UVCB podvrstu 4.).

Ne treba svaki reakcijski produkt automatski opisati kao UVCB. Ako se reakcijski produkt može dostatno definirati kemijskim sastavom (uključujući izvjesnu promjenjivost), preporučuje se identifikacija kao tvari od više sastojaka (vidjeti poglavlje 4.2.2.). Samo ako je sastav reakcijskog produkta nedostatan poznat ili slabo predvidiv tvar treba identificirati kao UVCB tvar („reakcijski produkt“). Identifikacija reakcijskog produkta temelji se na početnim materijalima za reakciju i na (bio)kemijskoj reakciji u kojoj nastaje tvar.

Primjeri		
EC broj	EINECS naziv	CAS broj
294-006-2	Nonandioična kiselina, reakcijski produkti s 2-amino-2-metil-1-propanolom	91672-02-5
294-148-5	Formaldehid, reakcijski produkti s dietilen glikolom i fenolom	91673-32-4

Glavna identifikacijska oznaka za reakcijske produkte jest opis proizvodnog procesa. Pri identifikaciji tvari treba navesti krajnja ili najrelevantnija faza postupka. Opis kemijskog postupka mora biti generički opis vrste postupka (npr. esterifikacija, alkalna hidroliza, alkilacija, klorinacija,

supstitucija itd.), zajedno s relevantnim okolnostima postupka. Biokemijski postupak treba opisati vrstom reakcije, zajedno s nazivom enzima koji se koristi kao katalizator u reakciji.

UVCB podvrsta 3.: izvor je biološki, a postupak je pročišćavanje

UVCB tvari biološkog podrijetla, nastale postupkom pročišćavanja u kojem nisu namjerno stvorene nove molekule mogu biti npr. ekstrakti, frakcije ekstrakta, koncentracije ekstrakta, pročišćeni ekstrakt ili ostaci tvari biološkog podrijetla.

Čim se ekstrakt dalje obrađuje, tvar više nije identična ekstraktu, nego je nova tvar koja pripada drugoj UVCB podvrsti, npr. frakcija ili ostatak ekstrakta. Te se tvari mora opisati dodatnim parametrima (daljnje) obrade. Ako se ekstrakt mijenja u kemijskim ili biokemijskim reakcijama, stvarajući nove molekule (derivate), identifikacija tvari obuhvaćena je uputama za UVCB tvari podvrste 2. ili tekstem u poglavlju 4.2. koji se odnosi na dobro definiranu tvar.

Razlikovanje ekstrakata koji prolaze daljnju obradu može za posljedicu imati neusklađenost novog naziva i opisa s onima na EINECS popisu. Kada se uspostavlja taj inventar, takvo razlikovanje nije se radilo pa je moguće da su sve vrste ekstrakata s različitim otapalima i ekstrakti iz različitih postupaka, obuhvaćeni zajedno u jednoj stavci.

Prva glavna identifikacijska oznaka ove podvrste UVCB tvari jest obitelj, rod i vrsta organizma iz kojeg tvar potječe. Ako je prikladno, treba navesti i tkivo ili dio organizma iz kojeg je tvar ekstrahirana, npr. koštana srž, gušterača; ili stabljika, sjemenke, odnosno korijen. Kod tvari mikrobiološkog podrijetla treba definirati soj i genotip vrste.

Ako se UVCB tvar dobiva iz različite vrste, smatrat će se drugačijom tvari, čak i ako je sličan kemijski sastav.

Primjeri	
EC broj	EINECS naziv
290-977-1	Ekstrakt oksidiranog kampeče-drveta (<i>Haematoxylon campechianum</i>)
	EC opis Ova je tvar identificirana u indeksu boja kao C. I. 75290 oksidirana.
282-014-9	Ekstrakti gušterače, deproteinizirani

Druga glavna identifikacijska oznaka jest obrada tvari, npr. ekstrakcija, frakcioniranje, pročišćavanje ili koncentracija, odnosno postupak koji utječe na sastav ostatka. Dakle, pročišćavanje ekstrakata dobivenih različitim postupcima, npr. korištenjem različitih otapala ili koraka pročišćavanja, dat će različite tvari.

Što je više koraka pročišćavanja, to je vjerojatnija identifikacija tvari na temelju njezinog kemijskog sastava. U tom slučaju, različite vrste izvora ili različite modifikacije postupka ne daju automatski drugačiju tvar.

Glavni identifikacijski parametar za tvari biološkog podrijetla jest opis relevantnih postupaka. Kod ekstrakata, detaljnost opisa postupka ekstrakcije mora biti na razini relevantnoj za identitet tvari. Najmanje se mora navesti korišteno otapalo.

Kada se za proizvodnju tvari koriste daljnji postupci, kao što je frakcioniranje ili koncentriranje, treba opisati kombinaciju relevantnih koraka, npr. kombinaciju ekstrakcije i frakcioniranja, uključujući i područje graničnih vrijednosti.

UVCB podvrsta 4.: izvor je kemijski ili mineralni, a postupak je pročišćavanje

Tvari nebiološkog podrijetla, tj. one koje same jesu ili potječu iz minerala, ruda, ugljena, prirodnog plina i sirove nafte, ili jesu, odnosno potječu iz drugih sirovina za kemijsku industriju, a

nastale obradom bez namjernih kemijskih reakcija mogu biti (pročišćene) frakcije, koncentracije ili ostaci tih postupaka.

Ugljen i sirova nafta koriste se u postupcima destilacije ili otplinjavanja i tako proizvode raznovrsne tvari, npr. naftne tvari i plinove itd., kao i ostatke, kao što su katrani i troske. Vrlo često, destilirani ili na drugi način frakcionirani produkti odmah se dalje obrađuju, a obrada može uključivati i kemijske reakcije. U takvim slučajevima, identifikaciju tvari treba provesti prema uputama navedenim za UVCB tvari podvrste 2., budući da je postupak relevantniji od izvora.

Za naftne tvari koristi se poseban identifikacijski sustav (vidjeti poglavlje 4.3.2.2.). Tvari obuhvaćene tim sustavom uključuju frakcije i produkte kemijskih reakcija.

Ostale tvari UVCB podvrste 4. mogu uključivati rude, rudne koncentrate i troske koje sadrže različite količine metala koji se mogu ekstrahirati metalurškom obradom.

Minerale, kao što su bentonit ili kalcijev karbonat može se obraditi, npr. otapanjem u kiselini i/ili kemijskom precipitacijom ili u kolonama s ionskim izmjenjivačima. Kada je kemijski sastav potpuno definiran, minerale treba identificirati prema uputama u odgovarajućem dijelu poglavlja 4.2. Ako se minerali obrađuju samo mehaničkim metodama, npr. mljevenjem, sisanjem, centrifugiranjem, flotacijom itd. smatra ih se istima kao minerali koji su iskopani. Minerale proizvedene u proizvodnom procesu može se – u svrhu identifikacije²⁰ – smatrati istima kao što su njihovi prirodni ekvivalenti, pod uvjetom da im je sastav sličan, a profil toksičnosti identičan.

Glavni identifikacijski parametar za tvari nebiološkog podrijetla jest opis relevantnih postupaka.

Kod frakcija treba opisati postupak frakcioniranja s parametrima i područjem graničnih vrijednosti za izoliranu frakciju, zajedno s opisom prethodnih postupaka, kad je to relevantno.

Kod koncentriranja treba navesti vrstu postupka, npr. isparavanje, precipitaciju itd. kao i odnos početne i završne koncentracije osnovnih sastojaka, uz informacije o prethodnim postupcima, odnosno koracima.

Glavni identifikacijski parametar za ostatke nebiološkog podrijetla jest opis postupka iz kojeg je nastao ostatak. Postupak može biti bilo koja fizikalna reakcija koja stvara ostatke, npr. pročišćavanje, frakcioniranje, koncentriranje.

4.3.1.3 Analitičke informacije

Ako spektroskopski podaci daju informacije o sastavu UVCB tvari, te informacije treba navesti. Za pribavljanje spektroskopskih podataka koriste se različite spektroskopske metode (apsorpcija svjetlosti u ultraljubičastom i infracrvenom spektru, nuklearna magnetska rezonancija ili masena spektroskopija). Metode, njihove namjene i načini uporabe stalno se mijenjaju. Stoga je podnositelj registracije odgovoran za iznošenje odgovarajućih spektralnih i analitičkih podataka.

Tipični kromatogram može se priložiti radi opisa sastava tvari. Po potrebi, mogu se koristiti i druge valjane tehnike odvajanja sastojaka.

²⁰ Isti pristup identifikaciji minerala koji se pojavljuju u prirodi i onih kemijski proizvedenih ne znači neophodno da su i pravni zahtjevi isti (npr. izuzeća od obveze registracije).

4.3.2 Specifične vrste UVCB tvari

U ovom se odjeljku nalaze smjernice za specifične skupine UVCB tvari: tvari s promjenjivom duljinom ugljikova lanca (4.3.2.1.); tvari dobivene iz nafte ili sličnih izvora (4.3.2.2.); i enzime (4.3.2.3.).

4.3.2.1 Tvari promjenjive duljine ugljikova lanca

U ovoj skupini UVCB tvari jesu dugolančani alkini s promjenjivom duljinom ugljikova lanca, npr. parafini (alkani) i olefini (alkeni). Te se tvari dobivaju derivacijom prirodnih masti ili ulja ili se umjetno proizvode. Prirodne su masti biljnog ili životinjskog podrijetla. Dugolančani ugljikovi spojevi dobiveni iz biljaka obično imaju duljine ugljikovih lanaca s parnim brojem atoma, dok dugolančane tvari dobivene iz životinjskih izvora uključuju i (neke) tvari s duljinom lanca s neparnim brojem ugljikovih atoma. Umjetno proizvedene dugolančane tvari mogu se sastojati od raznovrsnih duljina ugljikovih lanaca, s parnim ili neparnim brojem atoma.

Identifikacijske oznake i opća valjana pravila nazivlja

U ovoj su skupini tvari čiji pojedinačni sastojci imaju zajedničko strukturalno obilježje: jednu ili više alkilnih skupina u dugom lancu često s pridruženom funkcionalnom skupinom. Sastojci se međusobno razlikuju po jednoj ili više sljedećih osobina skupine alkilnog lanca:

- duljini ugljikova lanca (broju atoma ugljika),
- zasićenosti,
- strukturi (ravnolančana ili razgranana), i
- položaju funkcionalne skupine.

Kemijski identitet sastojaka može se dostatno opisati i sustavno odrediti uz pomoć sljedećih triju opisnika (deskriptora):

- **alkilni opisnik** opisuje broj atoma ugljika u lancu alkilne skupine, odnosno skupina;
- **opisnik funkcionalnosti** identificira funkcionalnu skupinu tvari, npr. amin, amonijev ion, karboksilnu kiselinu;
- **opisnik soli** opisuje katione, odnosno anione svih soli, npr. natrij (Na^+), karbonat (CO_3^{2-}), klorid (Cl^-).

Alkilni opisnik

- Općenito, alkilni opisnik C_{x-y} odnosi se na zasićene, ravnolančane alkilne lance koji sadrže sve duljine od x do y, npr. C_{8-12} odgovara C_8 , C_9 , C_{10} , C_{11} i C_{12} .
- Treba navesti ako se alkilni opisnik odnosi samo na parne ili neparne alkilne lance, npr. C_{8-12} (parni) •
- Treba navesti ako se alkilni opisnik odnosi (i) na razgranane alkilne lance, npr. C_{8-12} (razgranani) ili C_{8-12} (ravnolančani i razgranani) •
- Treba navesti ako se alkilni opisnik odnosi (i) na nezasićene alkilne lance, npr. C_{12-22} (C_{18} nezasićeni) •

- Uska raspodjela duljina alkilnog lanca ne obuhvaća široku ni obrnuto, npr. C₁₀₋₁₄ ne odgovara C₈₋₁₈.
- Alkilni opisnik može upućivati i na izvor alkilnih lanaca, npr. koko, loj. Međutim, raspored u ugljikovu lancu mora odgovarati izvornome.

Opisani sustav treba koristiti za opis tvari s promjenjivim duljinama ugljikova lanca. Nije prikladan za dobro definirane tvari koje se može identificirati točno određenom kemijskom strukturom.

Informacije o alkilnom opisniku, opisniku funkcionalnosti i opisniku soli osnova su određivanja naziva ove vrste UVCB tvari. Osim navedenoga, informacije o izvoru i postupku mogu poslužiti za precizniju identifikaciju tvari.

Primjeri		
Opisnici		Naziv
Alkilni opisnik	alkilni lanci C ₁₀₋₁₈	masne kiseline (C10-18) kadmijeve soli
Opisnik funkcionalnosti	masne kiseline (karboksilna kiselina)	
Opisnik soli	kadmijeve soli	
Alkilni opisnik	di-C ₁₀₋₁₈ -alkil-dimetil	di-C10-18-alkil-dimetilamonijev klorid
Opisnik funkcionalnosti	amonij	
Opisnik soli	klorid	
Alkilni opisnik	trimetil-lojev alkil	trimetil-lojev alkil-amonijev klorid
Opisnik funkcionalnosti	amonij	
Opisnik soli	klorid	

4.3.2.2 Tvari dobivene iz nafte ili sličnih izvora

Tvari dobivene iz nafte (naftne tvari) ili sličnih izvora (npr. ugljen) jesu tvari vrlo složenog i promjenjivog ili djelomično nedefiniranog sastava. U ovom poglavlju naftne tvari služe kao primjer identifikacije te posebne vrste UVCB tvari. Međutim, isti se pristup može primijeniti na ostale tvari dobivene iz sličnih izvora, kao što je ugljen.

Početni materijali koji se koriste u naftno-prerađivačkoj industriji mogu biti sirova nafta ili bilo koji rafinerijski tok dobiven uz pomoć jednog ili više postupaka. Sastav krajnjih proizvoda ovisi o sirovoj nafti korištenoj u proizvodnji (budući da sastav sirove nafte ovisi o mjestu odakle se crpi) i o primijenjenim rafinerijskim postupcima. Stoga u sastavu naftnih tvari postoje prirodne, o postupku neovisne, razlike.¹⁶

1. Opća valjana pravila nazivlja

Kod identifikacije naftnih tvari preporučuje se dati naziv prema priznatoj nomenklaturi.²¹ Naziv se obično sastoji od rafinerijskog postupka, izvora i općeg sastava ili svojstava. Ako tvar sadrži više od 5% masenog udjela aromatskih ugljikovodika s kondenziranim četvero- do šestočlanim prstenima, taj se podatak mora uključiti u opis. Za naftne tvari koje imaju EINECS broj treba koristiti naziv iz EC inventara.

²¹ US EPA (1978) TSCA PL 94-469 Lista kandidata kemijskih tvari, Dodatak 1. Generički izrazi koji se odnose na rafinerijske procesne tokove. US EPA, Ured za toksikologiju, Washington DC 20460.

2. Identifikacijske oznake

Izrazi i definicije za identifikaciju naftnih tvari obično uključuju izvor, rafinerijski postupak, opći sastav, ugljikov broj, područje vrenja ili ostala prikladna fizikalna svojstva, te prevladavajuću vrstu ugljikovodika.²¹

Treba navesti identifikacijske parametre iz odjeljka 2. *Priloga VI.* Uredbe REACH. Razumije se da se naftne tvari proizvode prema specifikacijama koje se odnose na uporabu, a ne na sastav. Stoga, obilježja, kao što su naziv, područje duljine ugljikova lanca, vrelište, viskozitet, granične vrijednosti i ostala fizikalna svojstva obično su korisnija za jasno identificiranje naftne tvari nego informacije o sastavu.

Iako kemijski sastav nije primarna identifikacijska oznaka za UVCB tvari treba navesti poznate osnovne tvari ($\geq 10\%$) i sastav treba opisati generičkim izrazima, npr. izrazima područje molekulske mase, alifatski i aromatski spojevi, stupanj hidrogenacije i ostale osnovne informacije. Dapače, svaki sastojak niže koncentracije koji ima utjecaj na razvrstavanje opasnosti treba identificirati nazivom i uobičajenom koncentracijom.

4.3.2.3 Enzimi

Enzimi se najčešće proizvode fermentacijom mikroorganizama, no ponekad su i biljnog ili životinjskog podrijetla. Koncentrirana otopina enzima, dobivena fermentacijom ili ekstrakcijom, a potom pročišćavanjem, osim vode sadrži aktivni protein (enzim) i ostale sastojke koje čine ostaci fermentacije, npr. proteine, peptide, aminokiseline, ugljikohidrate, lipide i anorganske soli.

Za potrebe identifikacije, protein (enzim), zajedno s ostalim sastojcima dobivenim fermentacijom ili ekstrakcijom, no isključujući vodu, koja može biti odvojena bez utjecaja na stabilnost proteina ili mijenjanja njegova sastava, treba smatrati tvarima.

Enzim obično sadrži 10-80% (masenog udjela) proteina. Ostali sastojci prisutni su u različitim postocima i ovise o organizmu koji se koristio u proizvodnji, fermentacijskom mediju, i uvjetima provođenja fermentacije, kao i o daljnjem pročišćavanju, no sastav će obično biti u području navedenom u sljedećoj tablici.

Aktivni enzim (protein)	10 - 80%
Ostali proteini + peptidi i aminokiseline	5 - 55%
Ugljikohidrati	3 - 40%
Lipidi	0 - 5%
Anorganske soli	1 - 45%
Ukupno	100%

Enzim treba smatrati UVCB tvari zbog njegove promjenjivosti i djelomice nepoznata sastava. Protein (enzim) treba smatrati sastojkom UVCB tvari. Enzimi visoke čistoće mogu se identificirati kao tvari dobro definiranog sastava (od jednog sastojka ili od više sastojaka) te ih sukladno tome treba identificirati.

Glavna identifikacijska oznaka enzima na popisu EINECS jest katalitička aktivnost. Enzimi se navode kao generičke stavke bez daljnjih odrednica ili sa specifičnim stavkama ukazujući na izvorni organizam ili supstrat.

Primjeri		
EC broj	EINECS naziv	CAS broj
278-547-1	Proteinaza, <i>Bacillus neutral</i>	76774-43-1
278-588-5	Proteinaza, <i>Aspergillus neutral</i>	77000-13-6
254-453-6	Elastaza (svinjska gušterača)	39445-21-1
262-402-4	Mananaza	60748-69-8

Studija o enzimima načinjena za Europsku komisiju preporučila je identifikaciju enzima sukladno međunarodnom sustavu za nomenklaturu enzima, IUBMB (Međunarodna unija za biokemiju i molekularnu biologiju).²² Taj je pristup usvojen u ovim smjernicama i omogućava sustavniju, detaljniju i sveobuhvatniju identifikaciju enzima od EINECS-a.

1. Opća valjana pravila nazivlja

Enzimima se daju nazivi prema općim valjanim pravilima IUBMB-nomenklature.

IUBMB-ov sustav klasifikacije predviđa jedinstveni četveroznamenasti broj za svaku vrstu enzima i katalitičku funkciju (npr. 3.2.1.1. za α -amilazu)²³. Svaki broj može sadržavati enzime promjenjive aminokiselinske sekvencije i podrijetla, no funkcionalnost enzima je identična. Za identifikaciju tvari treba koristiti naziv i broj iz IUBMB-nomenklature. IUBMB-nomenklatura obuhvaća šest glavnih skupina enzima:

1. oksidoreduktaze,
2. transferaze,
3. hidrolaze,
4. liaze,
5. izomeraze,
6. ligaze.

Slijedi primjer stavke u IUBMB nomenklaturi:

EC 3.4.22.33

Prihvaćeni naziv: bromelain iz voća

Reakcija: Hidrolizira proteine i nema veliku specifičnost za određene peptidne veze. Bz-Phe-Val-ArgNHMeC dobar je sintetski supstrat, a loš supstrat je Z-Arg-Arg-NHMeC jer ga enzim ne raskida (*c.f.* bromelain stabljike).

Ostali nazivi: bromelain iz soka; ananaza; bromelaza; bromelin; ekstranaza; bromelain iz soka; pinaza; enzim ananasa; traumanaza; bromelain iz voća FA2

²² UBA (2000) Umweltbundesamt Austria. Zbirka informacija o enzimima. Završno izvješće. Suradnja između Savezne agencije za okoliš i Međusveučilišnog istraživačkog centra za tehnologiju, rad i kulturu (IFF/IFZ). Ugovor br. B4-3040/2000/278245/MAR/E2.

²³ Izrazi „EC broj” (\equiv Enzyme Commission) i „IUBMB broj” često se koriste kao sinonimi. Kako bi se izbjegle nejasnoće, preporučuje se uporaba izraza „IUBMB broj” za šifru od 4 broja IUBMB-a.

Primjedbe: Enzim iz biljke ananasa, *Ananas comosus*; ne inhibira pileći cistatin. Druga cisteinska endopeptidaza, male molekulske mase i slične aktivnosti prema supstratu, pingvinain (prethodno EC 3.4.99.18), dobiva se iz srodne biljke, *Bromelia pinguin*, no pingvinain se razlikuje od bromelaina iz voća po tome što ga inhibira pileći cistatin [4].²⁴ U [porodici peptidaza C1](#) (obitelj papaina). Ranije EC 3.4.22.5 i uključen u EC 3.4.22.4, CAS broj: 9001-00-7.

Poveznice na druge baze podataka: [BRENDA](#), [EXPASY](#), [MEROPS](#),

Opće referencije:

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

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](#)]

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](#)]

²⁴ 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]

Primjeri razvrstavanja enzima prema sustavu IUBMB(<http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/enzyme/index.html>)**Proteaze se numeriraju prema sljedećim kriterijima:**3. **Hidrolaze**3.4 **Djeluju na peptidne veze (peptidaze), s podrazredima:**

- 3.4.1 α -amino-acil-peptid hidrolaze (sada u EC 3.4.11)
- 3.4.2 peptidil-aminokiselinske hidrolaze (sada u EC 3.4.17)
- 3.4.3 dipeptid hidrolaze (sada u EC 3.4.13)
- 3.4.4 peptidil peptid hidrolaze (sada u EC 3.4)
- 3.4.11 aminopeptidaze
- 3.4.12 peptidil-aminokiselinske hidrolaze ili acil-aminokiselinske hidrolaze (sada u EC 3.4)
- 3.4.13 dipeptidaze
- 3.4.14 dipeptidil-peptidaze i tripeptidil-peptidaze
- 3.4.15 peptidil-dipeptidaze
- 3.4.16 karboksipeptidaze serinskog tipa
- 3.4.17 metalokarboksipeptidaze
- 3.4.18 karboksipeptidaze cisteinskog tipa
- 3.4.19 omega peptidaze
- 3.4.21 serinske endopeptidaze

A dalje, specifični enzimi identificiraju se na sljedeći način:

- 3.4.21.1 kimotripsin
- 3.4.21.2 kimotripsin C
- 3.4.21.3 metridin
- 3.4.21.4 tripsin
- 3.4.21.5 trombin
- 3.4.21.6 koagulacijski faktor Xy
- 3.4.21.7 plazmin
- 3.4.21.8 sada u EC 3.4.21.34 i EC 3.4.21.35
- 3.4.21.9 enteropeptidaza
- 3.4.21.10 akrozin
- 3.4.21.11 sada u EC 3.4.21.36 i EC 3.4.21.37
- 3.4.21.12 12 a-litična endopeptidaza

...

3.4.21.105

3.4.99 endopeptidaze nepoznatog katalitičkog mehanizma

Primjeri iz EINECS-a s dodanim IUBMB brojem

EC broj	EINECS naziv	CAS broj	IUBMB broj
278-547-1	Proteinaza, <i>Bacillus neutral</i>	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Suptilizin	9014-01-1	3.4.21.62
232-734-4	Cululaza	9012-54-8	3.2.1.4

2. Identifikacijske oznake

Enzimi se identificiraju na temelju proteina koji sadrže (IUBMB nomenklatura) i ostalih sastojaka iz fermentacije. Osim proteina, svaki specifičan sastojak obično je prisutan u koncentraciji do 1%. Ako identitet tih specifičnih sastojaka nije poznat, može ih se naznačiti u skupinama (tj. proteini, peptidi, aminokiseline, ugljikohidrati, lipidi i anorganske soli). Međutim, sastojke se mora naznačiti ako su njihovi identiteti poznati i mora ih se identificirati ako njihova koncentracija prekoračuje 10% ili su relevantni za razvrstavanje i označavanje i/ili PBT ocjenu²⁵.

Enzimski protein

Identifikacija enzima u koncentratu treba uključiti:

- IUBMB broj,
- nazive prema IUBMB (sustavni naziv, nazivi enzima, sinonimi),
- komentare IUBMB-a,
- reakciju i vrstu reakcije,
- EC broj i naziv, po potrebi,
- CAS broj i naziv, ako su raspoloživi.

Treba navesti reakciju koju je enzim izazvao. Reakciju je definirala IUBMB.

Primjer
α -amilaza: polisaharid koji sadrži α -(1-4)-povezane jedinice glukoza + H ₂ O = maltooligosaharid; endohidroliza 1,4- α -D-glukozidne veze u polisaharidima koji sadrže najmanje tri povezane 1,4- α -D-glukozne jedinice.

Vrstu reakcije treba odrediti prema vrsti enzima. To može biti oksidacija, redukcija, eliminacija, adicija ili naziv reakcije.

Primjer
α -amilaza: hidroliza O-glikozilnih veza (endohidroliza).

Ostali sastojci

Treba identificirati sve sastojke kojih ima $\geq 10\%$ (masenog udjela) ili su relevantni za razvrstavanje i označavanje i/ili PBT ocjenu²⁶. Identitet sastojaka kojih je manje od 10% može se naznačiti po skupinama. Treba navesti njihovu uobičajenu koncentraciju ili područje koncentracije, tj.:

- (gliko)proteini,

²⁵ Više informacija o PBT ocjeni i relevantnim kriterijima može se naći u Smjernicama o zahtjevima obavješćivanja i ocjeni kemijske sigurnosti, poglavlje R11.: PBT ocjena.

²⁶ Više informacija o PBT ocjeni i relevantnim graničnim koncentracijama može se naći u Smjernicama o ocjeni kemijske sigurnosti, dijelu koji se odnosi na ocjenu PBT.

- peptidi i aminokiseline,
- ugljikohidrati,
- lipidi,
- anorganske tvari (npr. natrijev klorid ili ostale anorganske soli).

Ako je neizvedivo dostatno identificirati ostale sastojke enzima, treba navesti organizam (rod i soj ili genotip, ako su relevantni) koji je korišten u proizvodnji kao kod ostalih UVCB tvari biološkog podrijetla.

Ako su raspoloživi, može se navesti dodatne parametre, npr. funkcionalne parametre (tj. optimalni pH ili temperaturu, odnosno njihova područja), kinetičke parametre (tj. specifičnu aktivnost ili obrtni broj), ligande, supstrate i produkte te kofaktore.

5 KRITERIJI ZA PROVJERU ISTOVJETNOSTI TVARI

Prilikom provjere mogu li se tvari različitih proizvođača/uvoznika smatrati istima treba se pridržavati određenih pravila. Pravila primijenjena prilikom ustanovljavanja popisa EINECS trebaju biti zajednička osnova za identificiranje i davanje naziva tvari pa tako i za nalaženje mogućeg supodnositelja prijave za konkretnu tvar.^{5, 6, 16, 27, 28} Međutim, tvari koje se ne smatraju istima mogu se, na temelju stručne procjene, smatrati strukturno povezanim. U svakom slučaju, sukorištenje podataka o tim tvarima moguće je ako je znanstveno opravdano. To, međutim, nije predmet ovih smjernica, nego se razmatra u Smjernicama za sukorištenje podataka.

- Treba primijeniti „pravilo o $\geq 80\%$ ” za tvari od jednog sastojka i „pravilo o $< 80\%/\geq 10\%$ ” za tvari od više sastojaka.

Ne razlikuju se stupnjevi čistoće tvari (tehnički, purum ili analitički). To znači da „ista” tvar može imati različit profil čistoće/nečistoće, ovisno o njegovu stupnju. Međutim, dobro definirane tvari trebaju imati isti osnovni sastojak, odnosno iste osnovne sastojke i jedine dozvoljene nečistoće jesu one dobivene proizvodnim postupkom (vidjeti pojedinosti u poglavlju 4.2.) te dodaci potrebni radi stabiliziranja tvari.

- Za potrebe registracije, hidratizirane i anhidrirane oblike spojeva smatra se istom tvari.

Primjeri			
Naziv i formula	CAS broj	EC broj	Pravilo
Bakrov sulfat ($\text{Cu} \cdot \text{H}_2\text{O}_4\text{S}$)	7758-98-7	231-847-6	
Bakrova(2+) sol sumporne kiseline (1:1), pentahidrat ($\text{Cu} \cdot \text{H}_2\text{O}_4 \text{S} \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$)	7758-99-8		Tvar obuhvaćena registracijom njezina anhidriranog oblika (EC broj: 231-847-6)

Hidrirani i anhidrirani oblici imaju različite kemijske nazive i drugačije CAS brojeve. Detaljne informacije o korištenju posebnih odredaba za registraciju hidratiziranih oblika tvari u *Prilogu V.* stavku 6. Uredbe REACH, navedene su u Priručniku za podnošenje podataka, dio 18. – „Kako opisati identitet tvari u programu IUCLID 5 za registraciju sukladno Uredbi REACH“.

27 Vollmer et al. (1998) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. *Tox Env Chem* Vol. 65, str. 113-122.

28 Priručnik za odlučivanje, Kriteriji za prijavljivanje tvari u EINECS, ECB internetske stranice; Geiss et al. 1992, Vollmer et al. 1998, Rasmussen et al. 1999.

- Kiseline ili baze i njihove soli smatra se različitim tvarima.

Primjeri		
EC broj	Naziv	Pravilo
201-186-8	peroctena kiselina $C_2H_4O_3$	To nije ista tvar kao, npr. njezina natrijeva sol (EINECS 220-624-9)
220-624-9	natrijev glikolat $C_2H_4O_3 \cdot Na$	To nije ista tvar kao, npr. njoj odgovarajuća kiselina (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-kloroanilin C_6H_6ClN	To nije ista tvar kao, npr. 2-kloroanilin hidrobromid ($C_6H_6ClN \cdot HBr$)

- Pojedinačne soli (primjerice, natrijeva ili kalijeva) smatra se različitim tvarima.

Primjeri		
EC broj	Naziv	Pravilo
208-534-8	natrijev benzoat $C_7H_5O_2 \cdot Na$	To nije ista tvar kao, npr. kalijeva sol (EINECS 209-481-3)
209-481-3	kalijev benzoat $C_7H_5O_2 \cdot K$	To nije ista tvar kao, npr. natrijeva sol (EINECS 208-534-8)

- Razgranane i ravnolančane alkilne lance smatra se različitim tvarima.

Primjeri		
EC broj	Naziv	Pravilo
295-083-5	fosfati dipentil estera, razgranani i ravnolančani	To nije ista tvar kao pojedinačne tvari fosfat razgrananog dipentil estera ili fosfat ravnolančanog dipentil estera

- Razgranane skupine spominju se kao takve u nazivu. Tvari koje sadrže alkilne skupine bez daljnjih informacija obuhvaćaju samo nerazgranane linearne lance ako nije drugačije navedeno.

Primjeri		
EC broj	Naziv	Pravilo
306-791-1	masne kiseline, C12-16	Samo tvari s linearnim i nerazgrananim alkilnim skupinama smatra se istom tvari.
279-420-3	alkoholi, C12-14	
288-454-8	amini, C12-18-alkilmetil	

- Tvari s alkilnim skupinama i dodatnim izrazima kao izo, neo, razgranani itd. nisu iste tvari kao one bez tih odrednica.

Primjeri		
EC broj	Naziv	Pravilo
266-944-2	gliceridi, C ₁₂₋₁₈ Ova se tvar identificira uz pomoć naziva tvari prema SDA ((američkom) zakonu o sapunima i deterdžentima): C12-C18 trialkil glicerid i ima SDA broj: 16-001-00	To nije ista tvar kao C _{12-18-iso} tvar sa zasićenim alkilnim lancima koja se grana na bilo kojem mjestu

- Ako nije izričito navedeno, smatra se da alkilni lanci u kiselinama ili alkoholima itd. predstavljaju samo zasićene lance. Nezasićene lance navodi se kao takve i smatra ih se različitim tvarima.

Primjeri		
EC broj	Naziv	Pravilo
200-313-4	stearinska kiselina, čista C ₁₈ H ₃₆ O ₂	To nije ista tvar kao oleinska kiselina, čista, C ₁₈ H ₃₄ O ₂ (EINECS 204-007-1)

- Tvari s kiralnim središtima

Tvar s jednim kiralnim središtem može postajati u lijevo- i desno-zakrećućem obliku (enantiomeri). Ako nije drugačije određeno, pretpostavlja se da su ta dva oblika u tvari u omjeru 1 : 1 (racemat).

Primjeri		
EC broj	Naziv	Pravilo
201-154-3	2-kloropropan-1-ol	Pojedinačni enantiomeri (R)-2-kloropropan-1-ol i (S)-2-kloropropan-1-ol ne smatra se istim tvarima.

Kada je tvar obogaćena jednim enantiometrijskim oblikom, primjenjuju se pravila za tvar od više sastojaka. Slično tome, racemati se smatraju tvarima od više sastojaka.

Tvari s više kiralnih središta mogu postojati u 2ⁿ oblika (gdje je n broj kiralnih središta). Ti se oblici mogu razlikovati po fizikalno-kemijskim, toksikološkim i/ili ekotoksikološkim svojstvima. Treba ih smatrati različitim tvarima

- Anorganski katalizatori

Anorganske katalizatore smatra se smjesama. Za potrebe identifikacije, komponente od metala ili metalne sastojke treba smatrati pojedinačnim tvarima (bez navođenja uporabe).

Primjeri		
	Naziv	Pravilo
	katalizator kobaltovog oksida i aluminijeva oksida	Treba identificirati odvojeno kao: - kobaltov(II) oksid - kobaltov(III) oksid - aluminijev oksid - aluminijev kobalt oksid

- Enzimi istoga IUBMB broja mogu se smatrati istom tvari, unatoč uporabi različitih proizvodnih organizama, pod uvjetom da se opasna svojstva ne razlikuju značajno i da osiguravaju isto razvrstavanje.

Tvari od više sastojaka

Direktivom 67/548/EEZ regulirano je stavljanje tvari na tržište. Za odredbe te Direktive način proizvodnje tvari nije bitan. Zbog toga je tvar od više sastojaka koja je stavljena na tržište obuhvaćena EINECS popisom ako su svi pojedinačni sastojci navedeni u popisu; npr. izomerna smjesa difluorbenzena obuhvaćena je stavkama 1,2-difluorobenzen (206-680-7), 1,3-difluorobenzen (206-746-5) i 1,4-difluorobenzen (208-742-9), iako sama izomerna smjesa nije na popisu EINECS.

Za razliku od toga, REACH propisuje registraciju tvari kako je proizvedena. Odluka o tome u kojoj su mjeri različiti koraci u proizvodnji tvari obuhvaćeni definicijom 'proizvodnje' donosi se od slučaja do slučaja (npr. pročišćavanje ili destilacija). Tvar proizvedenu od više sastojaka treba registrirati (osim ako je obuhvaćena registracijom pojedinačnih sastojaka, vidjeti poglavlje 4.2.2.4.); primjerice, proizvedena je izomerna smjesa difluorbenzena, pa se „difluorobenzen“, kao izomerna smjesa, mora registrirati. Međutim, nema potrebe ispitivati tvar od više sastojaka kao takvu ako se profil opasnosti tvari može dostatno opisati informacijama o pojedinačnim sastojcima. Ako se pojedinačni izomeri 1,2-difluorobenzen, 1,3-difluorobenzen i 1,4-difluorobenzen proizvedu i umiješaju kasnije pojedinačne izomere treba registrirati, a izomernu smjesu smatra se smjesom.

Tvar od više sastojaka koju čine osnovni sastojci A, B i C nije ista kao tvar od više sastojaka koju čine sastojci A i B ili kao reakcijska masa A, B, C i D.

- Tvar od više sastojaka nije identična tvari koju čini samo podskup pojedinačnih sastojaka.

Primjeri		
EC broj	Naziv	Pravilo
207-205-6	2,5-difluorotoluen	Ove dvije tvari nisu iste kao smjesa izomera difluorotoluena jer su one samo podskup svih mogućih izomera.
207-211-9	2,4-difluorotoluen	

- Registracija tvari od više sastojaka ne obuhvaća pojedinačne sastojke.

Primjeri		
EC broj	Naziv	Pravilo
208-747-6	1,2-dibromoeten	Ova tvar opisuje smjesu cis- i trans-izomera. Pojedinačne tvari (1Z)-1,2-dibromoeten i (1E)-1,2-dibromoeten nisu pokrivene registracijom izomerne smjese.

UVCB tvari

- UVCB tvar s uskom raspodjelom sastojaka nije identična UVCB tvari sa širim sastavom i obrnuto.

Primjeri		
EC broj	Naziv	Pravilo
288-450-6	amini, C ₁₂₋₁₈ -alkil, acetati	Tvari „amini, C ₁₂₋₁₄ -alkil, acetati“ ili „amini, C ₁₂₋₂₀ -alkil, acetati“ ili „amini, dodecil (C ₁₂ -alkil), acetati“ ili tvari sa samo parnim brojem atoma u alkilnom lancu nisu identični ovoj tvari.

- Tvar čije svojstvo određuje vrsta/rod nije ista kao tvar izolirana iz druge vrste/roda.

Primjeri		
EC broj	Naziv	Pravilo
296-286-1	gliceridi, ulje suncokreta di-	To nije ista tvar kao: gliceridi, sojin di- (EINECS: 271-386-8), ni ista kao: gliceridi, lojev di- (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	laneno ulje, epoksidirano	To nije ista tvar kao laneno ulje, oksidirano (EINECS: 272-038-8), ni ista kao laneno ulje, maleizirano (EINECS: 268-897-3), ni ista kao ricinusovo ulje, epoksidirano (nije na popisu EINECS).

- Pročišćeni ekstrakt ili koncentrat smatra se tvari različitom od sirovog (nepročišćenog) ekstrakta.

Primjeri		
EC broj	Naziv	Pravilo
232-299-0	Ulje iz uljane repice Ekstrakti i njihovi fizikalno promijenjeni derivati. Sastoji se prvenstveno od glicerida masnih kiselina: eruka, linolne i oleinske (Brassica napus, Cruciferae)	Tvar „(Z)-doko-13-enska kiselina (eruka kiselina)” sastojak je tvari „ulje uljane repice”. Eruka kiselina nije isto što i ulje uljane repice budući da je izolirana kao čista tvar iz ulja uljane repice; eruka kiselina ima vlastiti broj na EINECS popisu (204-011-3). Izolirana smjesa palmitinske, oleinske, linolne, linolenske, eruka i eikozenske kiseline nije isto što i ulje uljane repice budući da ti sastojci ne predstavljaju cijelo ulje.

6 IDENTITET TVARI U POSTUPKU (KASNE) PREDREGISTRACIJE I PROVJERE

Smjernice za identifikaciju i davanje naziva tvarima nalaze se u poglavlju 4. ovoga dokumenta. Tih se smjernica treba pridržavati pri odlučivanju mogu li se tvari smatrati istima za potrebe Uredaba REACH i CLP. U tekstu koji slijedi nalaze se detaljnije upute za (kasnu) predregistraciju tvari u postupnom uvođenju i provjeru tvari koje nisu u postupnom uvođenju.

Prema *članku 4.*, svaki proizvođač ili uvoznik može, zadržavajući punu odgovornost za ispunjavanje obveza na temelju Uredbe REACH, imenovati treću osobu kao zastupnika u svim postupcima iz glave III. koji uključuju komunikaciju s drugim proizvođačima ili uvoznicima.

6.1 (KASNA) PREDREGISTRACIJA

Cilj postupka (kasne) predregistracije jest okupiti potencijalne podnositelje registracije iste tvari radi izbjegavanja ponavljanja istraživanja, naročito ispitivanja na kralješnjacima. (Kasna) predregistracija primjenjuje se samo na tvari u postupnom uvođenju.

Više o (kasnoj) predregistraciji može se naći u Smjernicama za sukorištenje podataka dostupnima na http://guidance.echa.europa.eu/guidance_en.htm.

6.2 PROVJERA

Potencijalni podnositelj registracije tvari koje nisu u postupnom uvođenju ili tvari u postupnom uvođenju za koje nije obavljena predregistracija, mora Agenciji [ECHA] uputiti upit kojim će provjeriti je li za tu tvar već podnesena registracija (*članak 26.* Uredbe REACH). Uz upit Agenciji se dostavljaju sljedeći podaci:

- identitet potencijalnog podnositelja registracije, kako je predviđeno u odjeljku 1. *Priloga VI.* Uredbe REACH, osim lokacija uporabe;
- identitet tvari, kako je predviđeno u odjeljku 2. *Priloga VI.* Uredbe REACH;
- koje zahtjeve obavješćivanja ne može ispuniti bez provođenja novih istraživanja na kralješnjacima;
- koje zahtjeve obavješćivanja ne može ispuniti bez provođenja drugih novih istraživanja.

Potencijalni podnositelj registracije treba dati informacije o identitetu i nazivu tvari sukladno pravilima opisanim u poglavlju 4. ovih smjernica.

Agencija će ustanoviti je li tvar već registrirana. I taj je postupak sukladan pravilima navedenim u poglavlju 4. ovoga dokumenta. Odluka se dostavlja potencijalnom podnositelju registracije, a informacije o tome svim prethodnim ili drugim potencijalnim podnositeljima registracije.

Više informacija o postupku provjere nalazi se u Smjernicama za sukorištenje podataka na http://guidance.echa.europa.eu/guidance_en.htm i na odgovarajućoj internetskim stranicama ECHA-e http://echa.europa.eu/reachit/inquiry_en.asp.

7 PRIMJERI

Primjeri na sljedećim stranicama navedeni su radi ilustracije primjene ovih smjernica. Oni nisu presedani za obveze propisane Uredbom REACH.

Opisani su sljedeći primjeri:

- „dietil peroksidikarbonat“ je primjer tvari od jednog sastojka s otapalom koje djeluje i kao stabilizator (poglavlje 7.1.);
- „zolimidin“ je primjer tvari koja može biti tvar od najmanje jednog sastojka (poglavlje 7.2.);
- „smjesa izomera“ nastala tijekom reakcije u proizvodnji uključena je kao primjer tvari od više sastojaka (poglavlje 7.3.). Ta je tvar prethodno bila obuhvaćena pojedinačnim izomerima na popisu EINECS;
- „miris AH“ primjer je tvari proizvedene u različitim verzijama, koje se mogu opisati kao reakcijska masa pet sastojaka različitih područja koncentracije (poglavlje 7.4.). To je također primjer opravdanog odstupanja od pravila o 80% i pravila o 10%;
- nemetalni „minerali“, uključujući montmorilonit kao primjer dobro definirane tvari, koja zahtijeva dodatno fizikalno određivanje svojstava, uključeni su u poglavlju 7.5.;
- „eterično ulje lavande“ primjer je UVCB tvari dobivene iz biljaka (poglavlje 7.6.);
- „ulje krizantema i iz njega izolirani izomeri“ primjer je UVCB tvari biološkog podrijetla, koja se dalje obrađuje (poglavlje 7.7.);
- „fenol, izopropilirani, fosfat“ primjer je promjenjive UVCB tvari koju se ne može potpuno definirati (poglavlje 7.8.);
- „kvaterni amonijevi spojevi“ primjeri su tvari s promjenjivom duljinom ugljikova lanca (poglavlje 7.9.);
- dva primjera „naftnih tvari“, namješavanje benzina i plinska ulja, nalaze se u poglavlju 7.10.;
- na primjerima lakaze i amilaze ilustrirana je identifikacija enzima (poglavlje 7.11.).

7.1 DIETIL PEROKSIDIKARBONAT

Tvar „dietil peroksidikarbonat“ (EC 238-707-3, CAS 14666-78-5, $C_6H_{10}O_6$) proizvodi se kao 18%-tna otopina u izododekanu (EC 250-816-8, CAS 31807-55-3). Izododekan djeluje i kao stabilizator protiv eksplozivnih svojstava. Najveća moguća koncentracija koja jamči sigurno rukovanje tvari jest 27%-tna otopina.

Kako opisanu tvar identificirati i nazvati za potrebe registracije?

Prema definiciji tvari u Uredbi REACH, otapala koja se mogu izdvojiti bez utjecaja na stabilnost tvari ili promjene njezina sastava treba isključiti. Budući da u navedenom slučaju izododekan djeluje i kao stabilizator te se ne može posve izdvojiti zbog eksplozivnih svojstava tvari, mora ga

se smatrati dodatkom, a ne samo otapalom. Međutim, još uvijek se radi o tvari od jednog sastojka. Stoga, tvar treba registrirati kao otopinu s najnižom koncentracijom izododekana koja jamči sigurno rukovanje:

Dietil peroksidikarbonat (gornja granična koncentracija: 27%). Izododekan treba navesti pod „Dodaci“ i treba navesti njegovu funkciju stabilizatora.

7.2 ZOLIMIDIN

Proizvedena metanolna otopina sadrži 'zolimidin' (EC 214-947-4; CAS 1222-57-7, C₁₄H₁₂N₂O₂S) i 'imidazol' (EC 206-019-2; CAS 288-32-4, C₃H₄N₂). Nakon uklanjanja otapala „metanola“ i optimiziranja proizvodnog procesa tvar ima područje čistoće od 74 – 86% zolimidina i 4 – 12% imidazola.

Kako opisanu tvar identificirati i nazvati za potrebe registracije?

Prema definiciji tvari u Uredbi REACH, otapala koja se mogu izdvojiti bez utjecaja na stabilnost tvari ili promjene njezina sastava treba isključiti. Budući da se u ovom slučaju metanol može izdvojiti bez poteškoća, treba registrirati tvar bez otapala.

U pravilu, radi se o tvari od jednog sastojka ako jednog osnovnog sastojka ima $\geq 80\%$. Radi se o tvari od više sastojaka ako više od jednog osnovnog sastojka ima između $\geq 10\%$ i $< 80\%$. Opisani primjer je granični slučaj jer se granične vrijednosti preklapaju. Stoga se tvar može smatrati tvari od jednog sastojka, „zolimidinom“, ili tvari od više sastojaka, reakcijskom smjesom „zolimidina“ i „imidazola“.

U takvom graničnom slučaju, na temelju uobičajene koncentracije osnovnih sastojaka tvari može se izabrati najbolji opis tvari na sljedeći način:

(1) ako je uobičajena koncentracija zolimidina 77%, a imidazola 11%, preporučuje se smatrati tvar reakcijskom masom zolimidina i imidazola;

(2) ako je uobičajena koncentracija zolimidina 85%, a imidazola 5%, preporučuje se smatrati tvar tvari od jednog sastojka, „zolimidinom“.

7.3 SMJESA IZOMERA

Tvar je smjesa (reakcijska masa) dvaju izomera nastala tijekom proizvodne reakcije. Pojedinačni izomeri nalaze se na popisu EINECS. Direktivom 67/548/EEZ regulirano je stavljanje tvari na tržište. Budući da način proizvodnje tvari nije bio važan, smjesa je bila obuhvaćena pojedinačnim izomerima na popisu EINECS. Uredba REACH propisuje registraciju proizvedenih tvari. Odluka o tome u kojoj su mjeri različiti koraci u proizvodnji tvari obuhvaćeni definicijom 'proizvodnje' donosi se od slučaja do slučaja. Ako je smjesa izomera registrirana kao tvar od više sastojaka (prema smjernicama navedenim u poglavlju 4.2.2.) nema potrebe ispitivati tvar kao takvu, ako se profil opasnosti tvari može dostatno opisati informacijama o pojedinačnim sastojcima. Međutim, kako bi se dokazalo da je tvar u postupnom uvođenju, treba ipak uputiti na podatke o pojedinačnim izomerima na popisu EINECS.

1. Naziv i ostale identifikacijske oznake

Naziv prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv (tvari)	reakcijska masa 2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanola i 2,2'-[[[(5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanola
---	---

Ostali nazivi (tvori)	2,2'-[[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis]etanol reakcijska masa etanola, 2,2'-[[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- i vode etanol, 2,2'-[[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- (9CI) izomerni spoj
EC broj (tvori) EC naziv EC opis	Ne postoji EC broj za smjesu, jer nije navedena u popisu EINECS. Međutim, tvar je bila obuhvaćena informacijama o pojedinačnim sastojcima na popisu EINECS (279-502-9, 279-501-3). Stoga se smjesa treba smatrati tvori u postupnom uvođenju.
CAS broj (tvori) CAS naziv	nije dostupno nije dostupno
EC broj (sastojak A) EC naziv EC opis	279-502-9 2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis]etanol /
EC broj (sastojak B) EC naziv EC opis	279-501-3 2,2'-[[[(5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis]etanol /
CAS broj (sastojak A) CAS naziv	80584-89-0 etanol, 2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-
CAS broj (sastojak B) CAS naziv	80584-88-9 etanol, 2,2'-[[[(5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-
Ostale identifikacijske šifre (ako su raspoložive) Referenca	ENCS broj 5-5917

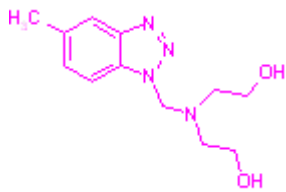
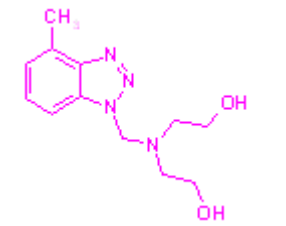
2. Informacije o sastavu – osnovni sastojci

Osnovni sastojci						
	IUPAC naziv	CAS broj	EC broj	Mol. formula Hillova metoda	Uobičajena koncentracija (% masenog udjela)	Područje koncentracije (% masenog udjela)
A	etanol, 2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	60	50-70
B	etanol, 2,2'-[[[(5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-88-9	279-501-3	C ₁₂ H ₁₈ N ₄ O ₂	40	30-50

Osnovni sastojci	
	Ostali nazivi:
A	2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis]etanol
B	2,2'-[[[(5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis]etanol

Osnovni sastojci		
	EC naziv	EC opis
A	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol	/
B	2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanol	/

Osnovni sastojci		
	CAS naziv	CAS brojevi
A	etanol, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-89-0
B	etanol, 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-	80584-88-9

Osnovni sastojci			
	Molekularna formula CAS metoda	Strukturna formula	SMILES oznaka
A	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
B	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Osnovni sastojci		
	Molekularna masa [g mol ⁻¹]	Područje molekularne mase
A	250	/
B	250	/

7.4 MIRIS AH

Miris AH sadrži gama (izo-alfa) metil ionon i njegove izomere. Proizvodi se u tri različite verzije (A, B i C), koje se razlikuju po udjelu izomera.

U sljedećoj tablici dan je pregled sastava različitih verzija.

Sastav različitih verzija mirisa AH

Područje koncentracije [%]	Verzija A	Verzija B	Verzija C	Sva područja koncentracije
gama (izo-alfa) metil ionon	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta (izo-beta) metil ionon	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
alfa n-metil ionon	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gama n-metil ionon	0,5 - 1,5	2 - 4	2 - 4	0,5 - 4
beta n-metil ionon	0,5 - 1,5	4 - 6	5 - 15	0,5 - 15
pseudo metil iononi	0,5 - 1,5	1 - 3	1 - 3	0,5 - 3

Postoji nekoliko opcija za identifikaciju tvari:

- Verzija A sadrži najmanje 80% izomera gama (izo-alfa) metil ionona i može se stoga smatrati tvari od jednog sastojka koja se temelji na izomeru gama (izo-alfa) metil ionona; ostali se izomeri smatraju nečistoćama.
- Verzije B i C sadrže manje od 80% izomera gama (izo-alfa) metil ionona i $\geq 10\%$ drugih izomera. Stoga se mogu smatrati tvarima od više sastojaka:
 - verzija B: kao reakcijska masa gama (izo-alfa) metil ionona (65–75%) i alfa-n-metil ionona (10-20%); ostale izomere smatra se nečistoćama;
 - verzija C: kao reakcijska masa gama (izo-alfa) metil ionona (50–60%) i alfa-n-metil ionona (20-30%); ostale izomere smatra se nečistoćama.

Sastav je promjenjiv: ponekad je koncentracija izomera $\geq 10\%$ (u tom se slučaju obično naziva osnovnim sastojkom), a ponekad $< 10\%$ (u tom se slučaju naziva nečistoćom).

Različite verzije moglo bi se odvojeno registrirati. To bi zahtijevalo tri postupka registracije. Međutim, možda bi bilo opravdano grupirati i analizirati podatke na temelju sličnosti (analogijski pristup).

Mogao bi se primijeniti i jedan od sljedećih postupaka:

- jedna registracija tvari od više sastojaka s dvije verzije. U tom slučaju verzije odstupaju od pravila o 80% (vidjeti poglavlje 4.2.1.);
- jedna registracija definirane reakcijske mase od 5 izomera (tvar od više sastojaka). U tom slučaju neki izomeri (osnovni sastojci) odstupaju od pravila o 10% kojim se razlikuju osnovni sastojci od nečistoća (vidjeti poglavlje 4.2.2.).
- jedna registracija definirane reakcijske mase u kojoj je promjenjivost sastava obuhvaćena potpunim koncentracijskim područjem svakoga izomera.

Može biti važno uzeti u obzir sljedeće:

- tri verzije imaju ista ili vrlo slična fizikalno-kemijska svojstva;
- tri verzije imaju sličnu uporabu i scenarije izloženosti;
- sve verzije jednako se razvrstavaju i označavaju s obzirom na opasnost, a sadržaj sigurnosno-tehničkih listova i izvješća o sigurnosti identični su;
- dostupni podaci ispitivanja (i buduća ispitivanja) obuhvaćaju promjenjivost triju verzija.

U ovom primjeru opisana je identifikacija tvari kao definirane reakcijske mase 5 izomera (tvar od više sastojaka). Potrebno je obrazloženje zbog odstupanja od pravila o 80% (vidjeti poglavlje 4.2.1.) i pravila o 10% (vidjeti poglavlje 4.2.2.). Budući da se svaka verzija proizvodi kao takva, u registracijskoj dokumentaciji treba navesti sastav svake od triju verzija. Međutim, formalno bi mogle biti potrebne najmanje dvije registracije: (1) gama (izo-alfa) metil ionon i (2) reakcijska masa gama (izo-alfa) metil ionona i alfa-n-metil ionona.

Identifikacija tvari

Miris AH proizvodi se u tri različite verzije (A, B i C) istoga kvalitativnog, no različitog kvantitativnog sastava. Sve tri verzije opisane su u jednoj registracijskoj dokumentaciji za tvar od više sastojaka. Iako to znači da pravila o 80% i 10% nisu strogo primijenjena, opravdana je registracija jedne tvari od više sastojaka, budući da (1) dostupni rezultati ispitivanja obuhvaćaju promjenjivost triju verzija; (2) tri verzije imaju vrlo slična fizikalno-kemijska svojstva; (3) sve tri verzije jednako se razvrstavaju i označavaju s obzirom na opasnost (dakle, sigurnosno-tehnički listovi identični su); i (4) tri verzije imaju sličnu uporabu i scenarije izloženosti (dakle, slična izvješća o kemijskoj sigurnosti).

1. Naziv i ostale identifikacijske oznake

Naziv prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv	reakcijska masa 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)but-3-en-2-on; 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)but-3-en-2-on; [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on; 1-(6,6-metil-2-metilenecikloheks-1-il)pent-1-en-3-on; 1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on
Ostali nazivi	metil ionon gama verzija A metil ionon gama verzija B metil ionon gama verzija C
EC broj	nije dostupno
EC naziv	/
EC opis	/
CAS broj	nije dostupno
CAS naziv	/

2. Informacije o sastavu – osnovni sastojci

Teoretski, mogući su dodatni enantiomeri. Međutim, analizirani su sljedeći izomeri:

Osnovni sastojci						
	IUPAC naziv	CAS broj	EC broj	Mol. formula Hillova metoda	Min. konc. (% masenog udjela)	Maks. konc. (% masenog udjela)
A	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)but-3-en-2-on	127-51-5	204-846-3	C ₁₄ H ₂₂ O	50	85
B	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)but-3-en-2-on	79-89-0	201-231-1	C ₁₄ H ₂₂ O	3	10

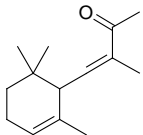
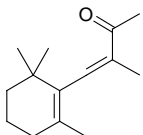
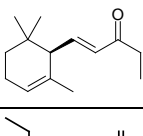
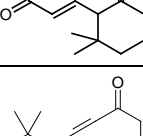
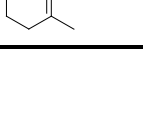
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on	127-42-4	204-842-1	C14H22O	3	30
D	1-(6,6-metil-2-metilenecikloheks-1-il)pent-1-en-3-on	nije dostupno	nije dostupno	C14H22O	0.5	4
E	1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on	127-43-5	204-843-7	C14H22O	0.5	15

Osnovni sastojci	
	Ostali nazivi:
A	alfa-izo-metil ionon; gama metil ionon
B	beta-izo-metil ionon; delta metil ionon
C	alfa-n-metil ionon
D	gama-n-metil ionon
E	beta-n-metil ionon

Osnovni sastojci		
	EC naziv	EC opis
A	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)-3-buten-2-on	/
B	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)-3-buten-2-on	/
C	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on	/
D	1-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on	/
E	1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-on	/

Osnovni sastojci		
	CAS naziv	CAS broj
A	3-buten-2-on, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)-	127-51-5
B	3-buten-2-on, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)-	79-89-0
C	1-penten-3-on, 1-[(1R)-2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il]-, (1E)-	127-42-4
D	nije dostupno	nije dostupno
E	1-penten-3-on, 1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)-	127-43-5

Osnovni sastojci		
	Ostale identifikacijske šifre	Referenca
A	2714 07.036	FEMA Registar aromatičnih tvari EU
B	07.041	Registar aromatičnih tvari EU
C	2711 07.009	FEMA Registar aromatičnih tvari EU
D	nije dostupno	nije dostupno
E	2712 07.010	FEMA Registar aromatičnih tvari EU

Osnovni sastojci			
	Molekularna formula CAS metoda	Strukturna formula	SMILES oznaka
A	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C
B	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C
C	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC
D	C ₁₄ H ₂₂ O		C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC
E	C ₁₄ H ₂₂ O		O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC

Osnovni sastojci		
	Molekularna masa/g mol ⁻¹	Područje molekularne mase
A	206,33	/
B	206,33	/
C	206,33	/
D	206,33	/
E	206,33	/

3. Informacije o sastavu – nečistoće i dodaci

Nečistoće						
	IUPAC naziv	CAS broj	EC broj	Mol. formula	Uobičajena koncentracija (% masenog udjela)	Područje koncentracije (% masenog udjela)
F						
broj nespecifičnih nečistoća:				11 (pseudo metil iononi)		
ukupna koncentracija nespecifičnih nečistoća:				0,5 – 3% masenog udjela		
Dodaci						
	IUPAC naziv	CAS broj	EC broj	Mol. formula	Uobičajena koncentracija (% masenog udjela)	Područje koncentracije (% masenog udjela)
G	butilirani hidroksitoluen (BHT)	128-37-0	204-881-4	C ₁₅ H ₂₄ O	0,1	0,05 – 0,15

4. Informacije o različitim verzijama

U nastavku su navedena područja pet osnovnih sastojaka u tri različite verzije:

Područje koncentracije [%]	Verzija A	Verzija B	Verzija C
gama (izo-alfa) metil ionon	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (izo-beta) metil ionon	6 - 10	3 - 7	3 - 7
alfa-n-metil ionon	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gama-n-metil ionon	0,5 – 1,5	2 - 4	2 - 4
beta-n-metil ionon	0,5 – 1,5	4 - 6	5 - 15
pseudo metil iononi	0,5 – 1,5	1 - 3	1 - 3

7.5 MINERALI

Mineral je kombinacija anorganskih sastojaka u obliku u kojem se nalazi u zemljinoj kori, karakterističnog skupa kemijskih sastava, kristaličnih oblika (od visoko kristaličnog do amorfno) i fizikalno-kemijskih svojstava.

Minerali su izuzeti od obveze registracije ako odgovaraju definiciji tvari koja se pojavljuje u prirodi (*članak 3. stavak 39. Uredbe REACH*) i ako nisu kemijski promijenjeni (*članak 3. stavak 40. Uredbe REACH*). To se odnosi na minerale čija kemijska struktura ostaje nepromijenjena i nakon što je podvrgnut kemijskom postupku ili obradi, ili fizikalnoj mineraloškoj pretvorbi, primjerice radi uklanjanja nečistoća.

Dok se neke minerale može opisati jednoznačno uz pomoć njihova kemijskog sastava (vidjeti poglavlje 4.2.1. i 4.2.2. o tvarima od jednog i više sastojaka), za druge sam kemijski sastav nije dostatan kako bi ih se jednoznačno identificiralo (vidjeti poglavlje 4.2.3.).

Za razliku od mnogih tvari od najmanje jednog sastojka, identifikacija mnogih minerala treba se temeljiti na kemijskom sastavu i unutarnjoj strukturi (npr. koju otkriva rendgenska difrakcija), jer ti podaci zajedno predstavljaju bit minerala i određuju njegova fizikalno-kemijska svojstva.

Kod drugih tvari od više sastojaka, CAS broj za minerale koristi se kao dio identifikacije (kombinacija anorganskih sastojaka). CAS brojevi anorganskih sastojaka (prema definiciji sistematske mineralogije) koriste se za opis različitih sastojaka. Ako bi se proizveo pojedinačni anorganski sastojak (tvar od jednog sastojka), pri identifikaciji te tvari treba koristiti njezin CAS broj. Na primjer:

- Mineral kaolin (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) u osnovi se sastoji od primarnih i sekundarnih kaolinita (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7) i zapravo je hidratizirani aluminijev silikat (glina).

Ako se kaolin podvrgne postupku pročišćavanja kako bi se proizveo pojedinačni sastojak, npr. kaolinit, tada će tvar imati sljedeći CAS, odnosno EINECS broj: EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- Mineral bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) koji se u popis EINECS opisan kao „Kolidna glina. Sastoji se prvenstveno od montmorilonita“ sadrži visoki udjel anorganskog sastojka montmorilonita (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0), no ne samo njega.

Ako se proizvede čisti montmorilonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) pri identifikaciji tvari koristi se CAS broj montmorilonita.

Treba naglasiti da bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) i montmorilonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) nisu ista tvar.

Zaključno, mineral obično prima naziv prema svom anorganskom sastojku, odnosno sastojcima u kombinaciji. Minerali mogu biti tvari od najmanje jednog sastojka (opće smjernice potražite u poglavljima 4.2.1. i 4.2.2.). Neke se minerale ne može jednoznačno opisati njihovim kemijskim sastavom i dostatna identifikacija zahtijeva dodatno opisivanje njihovih fizikalnih svojstava ili parametara obrade (vidjeti poglavlje 4.2.3.). Neki su primjeri navedeni u sljedećoj tablici.

Primjeri minerala

Naziv	CAS	EINECS	Dodatni opis ²⁹
Kristobalit	14464-46-1	238-455-4	O ₂ Si (kristalna struktura: tetragonska)
Kremen (kvarc)	14808-60-7	238-878-4	O ₂ Si (kristalna struktura: romboedarska)
Kieselguhr	61790-53-2	-	Poznat i kao dijatomit, dijatomejska zemlja, kieselgur i celit Opis: Mekani silikatni čvrsti materijal koji nastaje nakupljanjem ljuštura algi kremenjašica tijekom milijuna godina. Prvenstveno sadrži silicijev dioksid.
Dolomit	16389-88-1	240-440-2	CH ₂ O ₃ .1/2Ca.1/2Mg
Minerali iz skupine feldspata	68476-25-5	270-666-7	Anorganska tvar, reakcijski produkt kristalizacije pri visokoj temperaturi u kojoj su aluminijev oksid, barijev oksid, kalcijev oksid, magnezijev oksid, silicijev oksid i stroncijev oksid u različitim omjerima homogeno i ionski prožeti i tvore kristal.
Milovka (talk)	14807-96-6	238-877-9	Mg ₃ H ₂ (SiO ₃) ₄
Vermikulit	1318-00-9	-	(Mg _{0,33} [Mg _{2,3} (Al _{0,1} Fe _{0,1}) _{0,1}](Si _{2,33-3,33} Al _{0,67-1,67})(OH) ₂ O ₁₀ .4H ₂ O)

Analitički podaci koje je potrebno navesti o mineralima

Elementni sastav	Kemijski sastav pruža opći pregled sastava minerala bez obzira na broj sastojaka i njihove udjele u mineralu. Opće je prihvaćeno kemijski sastav izraziti za okside.
Podaci o spektru (XRD ili odgovarajući)	Uz pomoć XRD ili drugih tehnika može se identificirati minerale na temelju njihove kristalne strukture. Treba navesti karakteristične XRD ili IR vrhove uz pomoć kojih se mineral identificira, zajedno s kratkim opisom analitičke metode ili bibliografskom bilješkom.
Tipična fizikalno-kemijska svojstva	Minerali imaju karakteristična fizikalno-kemijska svojstva koja omogućavaju potpunu identifikaciju, npr. - vrlo mala tvrdoća - sposobnost bubrenja - oblici dijatomita (vidljivi uz pomoć optičkog mikroskopa) - vrlo visoka gustoća - veličina površine (adsorpcija dušika)

²⁹ Definicija iz Direktive 2001/30/EZ (Službeni list Europske unije br. 146., od 31. svibnja 2001. godine, str. 1.)

7.6 ETERIČNO ULJE LAVANDINA GROSSO

Eterična ulja jesu tvari dobivene iz biljaka. Stoga se eterična ulja mogu također opisati kao tvari biljnog podrijetla.

Općenito uzevši, tvari biljnoga podrijetla jesu složene prirodne tvari dobivene obradom biljke ili njezinih dijelova postupcima ekstrakcije, destilacije, prešanja, frakcioniranja, pročišćavanja, koncentriranja ili fermentacije. Sastav tih tvari promjenjiv je i ovisi o rodu, vrsti, uvjetima uzgoja i vremenu žetve izvora, kao i o primijenjenoj tehnici obrade.

Eterična ulja može se definirati uz pomoć njihovih osnovnih sastojaka, kao što je uobičajeno za tvari od više sastojaka. Međutim, eterična ulja može činiti nekoliko stotina sastojaka, koji mogu biti vrlo promjenjivi, ovisno o mnogim čimbenicima (kao što su rod, vrsta, uvjeti uzgoja, vrijeme žetve, primijenjena obrada). Stoga opis osnovnih sastojaka često nije dostatan za opisivanje ovih UVCB tvari. Eterična ulja treba opisati na temelju biljnog izvora i postupka obrade, kao što je opisano u poglavlju 4.3.1. (u dijelu koji se odnosi na UVCB tvari podvrste 3.).

U mnogo slučajeva za eterična ulja dostupne su industrijske norme (za mnoga eterična ulja i ISO norme). Informacije o normama može se dodatno navesti. Međutim, identifikaciju tvari treba temeljiti na tvari kako je proizvedena.

Sljedeći primjer opisuje „eterično ulje lavandina Grosso“, za koji postoji ISO norma (ISO 8902-1999).

1. Nazivi i ostale identifikacijske oznake

Izvor

Vrsta	<i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
-------	---

Postupak

Opis (bio)kemijskih reakcijskih procesa korištenih u proizvodnji tvari:
Vodeno-parna destilacija cvjetova <i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae), zatim odjeljivanje vode od ulja. Odjeljivanje je spontan, fizikalni proces, koji se odvija u separatoru (tzv. firentinska boca) i time omogućava laku izolaciju odijeljenog ulja. Temperatura na ovoj etapi destilacijskog postupka iznosi oko 40 °C.

Naziv

Naziv prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv	Eterično ulje biljke <i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae)
EC broj	297-385-2
EC naziv	Lavanda, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ekstrakt
EC opis	Ekstrakti i njihovi fizički promijenjeni derivati, kao što su tinkture, konkreći, apsoluti, eterična ulja, oleorezini, terpeni, frakcije bez terpena, destilati, ostaci i sl., dobiveni iz <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae ³⁰ .
CAS broj	93455-97-1
CAS naziv	Lavanda, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ekstrakt

³⁰ „Labiatae“ i „Lamiaceae“ su sinonimi.

2. Informacije o sastavu – poznati sastojci

Poznati sastojci					
	Kemijski naziv EC CAS IUPAC ostalo	Broj EC CAS	Mol. Formula Hilova metoda	Uobičajena koncentracija % (masenog udjela)	Područje koncentra- cije % (masenog udjela)
A	EC CAS 1,6-oktadien-3-ol, 3,7-dimetil-, acetat IUPAC 3,7-dimetilokta-1,6-dien-3-il acetat	EC 204-116-4 CAS 115-95-7	$C_{12}H_{20}O_2$	33	28 – 38
B	EC linalool CAS 1,6-oktadien-3-ol, 3,7-dimetil- IUPAC 3,7-dimetilokta-1,6-dien-3-ol	EC 201-134-4 CAS 78-70-6	$C_{10}H_{18}O$	29,5	24 – 35
C	EC bornan-2-on CAS biciklo[2.2.1] heptan-2-on, 1,7,7- trimetil- IUPAC 1,7,7-trimetilbiciklo[2.2.1]-2- heptanon Ostalo kamfor	EC 200-945-0 CAS 76-22-2	$C_{10}H_{16}O$	7	6 – 8
D	EC cineol CAS 2-oksabiciklo [2.2.2]oktan, 1,3,3- trimetil- IUPAC 1,3,3-trimetil-2- oksabiciklo[2.2.2]oktan Ostalo	EC 207-431-5 CAS 470-82-6	$C_{10}H_{18}O$	5,5	4 – 7
E	EC p-ment-1-en-4-ol CAS 3-cikloheksen-1-ol, 4-metil-1-(1- metiletil)- IUPAC 1-(1-metiletil)-4-metil-3- cikloheksen-1-ol Ostali terpinen-4-ol	EC 209-235-5 CAS 562-74-3	$C_{10}H_{18}O$	3,25	1,5 – 5

F	<p>EC 2-izopropenil-5-metilheks-4-enil acetat</p> <p>CAS 4-heksen-1-ol, 5-metil-2-(1-metiletenil)-, acetat</p> <p>IUPAC 2-(1-metiletenil)-5-metilheks-4-en-1-ol</p> <p>Ostalo (±)-lavandulol acetat</p>	<p>EC 247-327-7</p> <p>CAS 25905-14-0</p>	$C_{12}H_{20}O_2$	2,25	1,5 – 3
G	<p>dl-borneol</p> <p>CAS biciklo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimetil-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p>IUPAC (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimetil biciklo[2.2.1]heptan-2-ol</p> <p>Ostali borneol</p>	<p>EC 208-080-0</p> <p>CAS 507-70-0</p>	$C_{10}H_{18}O$	2,25	1,5 – 3
H	<p>EC kariofilen</p> <p>CAS biciklo[7.2.0]undec-4-en, 4,11,11-trimetil-8-metilen-, (1R,4E,9S)-</p> <p>IUPAC (1R,4E,9S)-4,11,11-trimetil-8-metilen biciklo[7.2.0]undek-4-en</p> <p>Ostali trans-beta-kariofilen</p>	<p>EC 201-746-1</p> <p>CAS 87-44-5</p>	$C_{15}H_{24}$	1,75	1 – 2,5
I	<p>EC (E)-7,11-dimetil-3-metilendodeka-1,6,10-trien</p> <p>CAS 1,6,10-dodekatrien, 7,11-dimetil-3-metilen-, (6E)-</p> <p>IUPAC (E)-7,11-dimetil-3-metilen-1,6,10-dodekatrien</p> <p>Ostali trans-beta-farnezen</p>	<p>EC 242-582-0</p> <p>CAS 18794-84-8</p>	$C_{15}H_{24}$	1,1	0,2 – 2
J	<p>EC (R)-p-menta-1,8-dien</p> <p>CAS cikloheksen, 1-metil-4-(1-metiletenil)-, (4R)-</p> <p>IUPAC (4R)-1-metil-4-(1-metiletenil)cikloheksen</p> <p>Ostali limonen</p>	<p>EC 227-813-5</p> <p>CAS 5989-27-5</p>	$C_{10}H_{16}$	1	0,5 – 1,5

K	EC 3,7-dimetilokta-1,3,6-trien CAS 1,3,6-oktatrien, 3,7-dimetil- IUPAC 3,7-dimetilokta-1,3,6-trien Ostali cis-beta-ocimen	EC 237-641-2 CAS 13877-91-3	$C_{10}H_{16}$	1	0,5 – 1,5
----------	--	--	----------------	---	-----------

Poznati sastojci ≥ 10%

Poznati sastojci		
	EC naziv	EC opis
A	linalil acetat $C_{12}H_{20}O_2$	
B	linalool $C_{10}H_{18}O$	

Poznati sastojci		
	CAS naziv	Povezani CAS brojevi
A	linalil acetat $C_{12}H_{20}O_2$	115-95-7
B	linalool $C_{10}H_{18}O$	78-70-6

Poznati sastojci			
	Molekularna formula CAS metoda	Strukturna formula	SMILES oznaka
A	$C_{12}H_{20}O_2$		
B	$C_{10}H_{18}O$		

Poznati sastojci		
	Molekularna masa	Područje molekularne mase
A	196.2888	/
B	154.2516	/

7.7 ULJE KRIZANTEME I IZ NJEGA IZOLIRANI IZOMERI

Tvrtka proizvodi ulje krizanteme koje se ekstrahira nakon drobljenja cvjetova i lišća biljke *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae, s otapalom koje čini smjesa vode i etanola u omjeru 1:10. Nakon ekstrakcije otapalo se uklanja i „čisti“ ekstrakt pročišćava se u daljnjim koracima koji daju konačno ulje krizanteme.

Osim toga, iz ekstrakta se izoliraju dva izomera kao reakcijska masa:

jasmolin I

(ciklopropankarboksilna kiselina, 2,2-dimetil-3-(2-metil-1-propenil)-, (1S)-2-metil-4-okso-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciklopenten-1-il ester, (1R,3R)-; CAS broj 4466-14-2), i

jasmolin II

(ciklopropankarboksilna kiselina, 3-[(1E)-3-metoksi-2-metil-3-okso-1-propenil]-2,2-dimetil-, (1S)-2-metil-4-okso-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciklopenten-1-il ester, (1R,3R)-; CAS broj 1172-63-0

Nadalje, tvrtka je odlučila sintetizirati izomernu reakcijsku masu jasmolina I i II.

Tvrtka postavlja sljedeća pitanja:

1. Kako identificirati ulje krizanteme za potrebe registracije?
2. Je li reakcijska masa izoliranih izomera jasmolina I i II obuhvaćena registracijom ulja?
3. Može li se sintetizirana smjesa dvaju izomera smatrati istom kao smjesa izomera izoliranih iz ulja krizanteme?

1. Kako identificirati ulje krizanteme za potrebe registracije?

Ulje krizanteme je UVCB tvar koja se ne može dostatno identificirati kemijskim sastavom (za detalje vidjeti poglavlje 4.3.). Bitni su drugi identifikacijski parametri, kao što su izvor i postupak. Ulje krizanteme biljnog je podrijetla i treba ga identificirati uz pomoć vrste i dijela organizma iz kojeg se dobiva, te procesa pročišćavanja (ekstrakcija s otapalom). Međutim, kemijski sastav i identitet sastojaka treba navesti ukoliko su poznati.

Sljedeće su informacije neophodne za dostatnu identifikaciju tvari:

Naziv tvari	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae; ulje dobiveno iz zdrobljenih cvjetova i lišća ekstrakcijom u otopini vode i etanola u omjeru 1:10			
Izvor				
Rod, vrsta, podvrsta	<i>Chrysanthemum, cinerariaefolium</i> , Compositae			
Dio biljke iz kojeg se dobiva ulje	Cvjetovi i listovi			
Postupak				
Proizvodna metoda	Drobljenje, zatim ekstrakcija			
Otapalo koje se koristi pri ekstrakciji	voda:etanol (1:10)			
Informacije o sastavu – poznati sastojci u % (masenog udjela)				
Naziv sastojka	EC broj	CAS broj	Min. %	Maks. %

piretrin I: 2-metil-4-okso-3-(penta-2,4-dienil) ciklopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-krizantemat	204-455-8	121-21-1	30	38
piretrin II: 2-metil-4-okso-3-(penta-2,4-dienil) ciklopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)-2,2-dimetilciklopropan karboksilat	204-462-6	121-29-9	27	35
cinerin I: 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oksociklopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropan karboksilat	246-948-0	25402-06-6	5	10
cinerin II: 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oksociklopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)ciklopropan karboksilat	204-454-2	121-20-0	8	15
jasmolin I: 2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropan karboksilat	nema	4466-14-2	4	10
jasmolin II: 2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)ciklopropan karboksilat	nema	1172-63-0	4	10
Tvar sadrži još najviše 40 sastojaka u koncentracijama manjim od 1%.				

Tvar bi se moglo identificirati i kao dobro definiranu tvar od više sastojaka sa šest osnovnih sastojaka (reakcijska masa piretrina I, piretrina II, cinerina I, cinerina II, jasmolina I i jasmolina II).

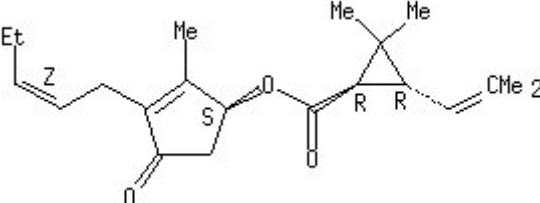
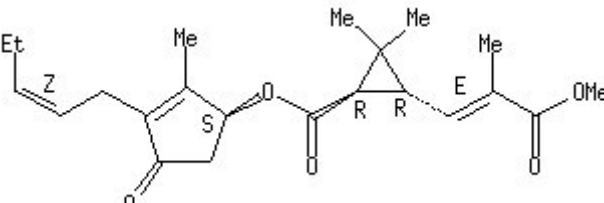
Da je proizvodni proces samo „drobljenje“ tvar bi se smatrala „tvari koja se pojavljuje u prirodi“ i bila bi izuzeta od obveze registracije osim ako ispunjava kriterije razvrstavanja kao opasna tvar sukladno Direktivi 67/548/EEZ.

2. Je li reakcijska masa izoliranih izomera jasmolina I i II obuhvaćena registracijom ulja?

Reakcijska masa izoliranih izomera jasmolina I i II nije obuhvaćena registracijom „ulja biljke *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae“ budući da pojedinačni sastojci nisu obuhvaćeni cijelom UVCB tvari i obrnuto. Reakcijska masa jasmolina I i II smatra se drugačijom tvari.

Reakcijsku masu jasmolina I i II može se smatrati tvari od više sastojaka (za detaljnije upute vidjeti poglavlje 4.2.3.) s dva osnovna sastojka.

Sljedeće su informacije neophodne za dostatnu identifikaciju tvari:

Naziv tvari prema nomenklaturi IUPAC	reakcijska masa (2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropan karboksilata) i (2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-en-1-il [1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)ciklopropan karboksilata)				
Drugi naziv	reakcijska masa jasmolina I i jasmolina II				
Čistoća tvari	95 – 98% (masenog udjela)				
Informacije o sastavu – osnovni sastojci u % (masenog udjela)					
Naziv sastojka	EC broj	CAS broj	Min . %	Mak s. %	
jasmolin I: 2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1 α [S*(Z)],3 β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropan karboksilat	nema	4466-14-2	40	60	
Molekularna formula					
Strukturna formula	C ₂₂ H ₃₀ O ₅				
Molekularna masa	M = 374 g/mol				
jasmolin II: 2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-en-1-il [1R-[1 α [S*(Z)],3 β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)ciklopropan karboksilat	nema	1172-63-0	35	65	
Molekularna formula					
Strukturna formula	C ₂₁ H ₃₀ O ₃				
Molekularna masa	M = 330 g/mol				

3. Može li se sintetizirana smjesa (reakcijska masa) dvaju izomera smatrati istom kao smjesa izomera izoliranih iz ulja krizanteme?

Za kemijski dobro definirane tvari, koje se mogu dostatno opisati njihovim kemijskim sastojcima, nije bitno je li tvar izolirana iz ekstrakta ili sintetizirana u kemijskom procesu. Stoga, sintetizirana reakcijska masa jasmolina I i jasmolina II može se smatrati istovjetnom izomernoj smjesi izoliranoj iz biljke *Chrysanthemum*, iako su dobiveni različitim proizvodnim postupcima, pod uvjetom da su čistoća smjese i područje koncentracije osnovnih sastojaka isti.

4. Zaključak

Identificirane su dvije tvari:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae; ulje dobiveno iz zdrobljenih cvjetova i lišća ekstrakcijom u otopini vode i etanola u omjeru 1:10, i
2. reakcijska masa izomera jasmolina I i II, neovisno o proizvodnom procesu tvari.

Ako bi se prethodno opisane tvari koristile samo u zaštiti bilja i u biocidnim pripravcima smatrale bi se registriranima sukladno Uredbi REACH (članak 15.).

7.8 FENOL, IZOPROPILIRAN, FOSFAT (IZOPROPILIRANI FENOL, FOSFAT)

Izopropilirani fenol, fosfat (3:1) jest UVCB tvar kod koje se promjenjivost izopropiliranog fenola ne može potpuno definirati.

1. Naziv i ostale identifikacijske oznake

Naziv prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv	fenol, izopropiliran, fosfat (3:1)
Ostali nazivi	fenol, izopropiliran, fosfat fenol, izopropiliran, fosfat (3:1) (na temelju omjera propilen : fenol = 1 mol : 1 mol)
EC broj	273-066-3
EC naziv	fenol, izopropiliran, fosfat (3:1)
EC opis	/
CAS broj	68937-41-7
CAS naziv	fenol, izopropiliran, fosfat (3:1)

2. Informacije o sastavu – osnovni sastojci

Osnovni sastojci					
IUPAC naziv	CAS broj	EC broj	Mol. formula Hillova metoda	Uobičajena koncentracija (% masenog udjela)	Područje koncentracije (% masenog udjela)
fenol, izopropiliran, fosfat (3:1)	68937-41-7	273-066-3	nije navedena		

Osnovni sastojci	
EC naziv	EC opis
fenol, izopropiliran, fosfat (3:1)	/
CAS naziv	CAS broj
fenol, izopropiliran, fosfat (3:1)	68937-41-7

7.9 KVATERNI AMONIJEVI SPOJEVI

Tvrtka sintetizira sljedeće tvari:

Tvar A

kvatarni amonijevi spojevi, di-C₁₀₋₁₈-alkildimetil, kloridi

EC broj 294-392-2

CAS broj 91721-91-4

Raspodjela duljina ugljikova lanca:

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

Tvar B

kvatarni amonijevi spojevi, dikoko alkildimetil, kloridi

EC broj 263-087-6

CAS broj 61789-77-3

Tvrtki nije poznat precizan sastav ove tvari.

Tvar C

didodecildimetil amonijev bromid

Tvar D

didodecildimetil amonijev klorid

Tvar E

Tvar E proizvodi se kao reakcijska masa didodecildimetil amonijeva bromida i didodecildimetil amonijeva klorida (reakcijska masa tvari C i D).

Tvar F

kvatarni amonijevi spojevi, di-C₁₄₋₁₈-alkildimetil amonij, kloridi

EC broj 268-072-8

CAS broj 68002-59-5

Raspodjela duljina ugljikova lanca:

C ₁₄	20%
C ₁₅	10%
C ₁₆	40%
C ₁₇	10%
C ₁₈	20%

Tvar G

kvatarni amonijevi spojevi, di-C₄₋₂₂-alkildimetil, kloridi

Raspodjela duljina ugljikova lanca (crtano označava jednu dvostruku vezu, dvocrtano označava jednu trostruku vezu):

C4	0,5%
C6	3,0%
C8	6,0%
C10	10,0%
C12	12,0%
C14	24,0%
C16	20,0%
C18	16,0%
C18'	2,0%
C18''	0,5%
C20	4,0%
C22	2,0%

Trenutačno za određivanje naziva tvrtka koristi samo tvar B (kvatarni amonijevi spojevi, dikoko alkildimetil kloridi, EC broj 263-087-6, CAS broj 61789-77-3) jer najbolje odgovara svim tvarima (A do G). Tvrtku zanima je li moguće obuhvatiti sve tvare (A do G) jednom registracijom tvare B.

1. Opće napomene

Ugljikovodike (parafine, olefine) dobivene iz masti i ulja ili sintetske nadomjeske identificira se uz pomoć raspodjele njihovih ugljikovih lanaca ili njihova podrijetla (alkilni opisnik), uz pomoć funkcionalne skupine (opisnik funkcionalnosti), npr. amonij, te aniona, odnosno kationa (opisnik soli), npr. klorid. Raspodjela duljina lanca, npr. C₈₋₁₈, odnosi se na:

- zasićene,
- ravnolančane (nerazgranane),
- sve uključene brojeve ugljika (C₈, C₉, C₁₀, C₁₁,..., C₁₈) dok uska raspodjela ne obuhvaća široku ni obrnuto.

Inače treba naznačiti na sljedeći način:

- nezasićene (C₁₆ nezasićena),

- razgranani (C₁₀ razgranani),
- parni (C₁₂₋₁₈ parni).

Ugljikovi lanci koje se opisuje uz pomoć izvora moraju imati raspodjelu koja se javlja kod izvora, npr. lojevi alkil amini.

Lojevi alkil amini su 99% primarni ravnolančani alkil amini sa sljedećom raspodjelom duljina ugljikova lanca (Ullman, 1985) [crtano označava jednu dvostruku vezu, dvocrtano označava jednu trostruku vezu]:

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

2. Kako identificirati tvari za potrebe registracije?

Svaka se tvar uspoređuje s tvari B (koja se do sada koristila za određivanje naziva) kako bi se odlučilo mogu li se dvije tvari smatrati istovjetnima.

Usporedba tvari A i B

Sljedeća raspodjela duljina ugljikova lanca može se naći za „koko“ tvari B (Ullman, 1985) [crtano označava jednu dvostruku vezu, dvocrtano označava jednu trostruku vezu]:

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

Dakle, raspodjela duljina lanaca tvari A odstupa od raspodjele duljina ugljikovih lanaca „koko“ tvari B. Budući da se kvalitativni i kvantitativni sastavi dviju tvari značajno razlikuju, ne mogu se smatrati istovjetnima.

Usporedba tvari B i C

Tvar B „kватerni amonijevi spojevi, dikoko, alkildimetil, kloridi“ opisuje smjesu sastojaka različitih duljina ugljikovih lanaca (C₆ do C₁₈ parni, ravnolančani, zasićeni i nezasićeni), dok tvar C opisuje samo jedan sastojak s jednom definiranom i zasićenom duljinom lanca (C₁₂) s drugačijim anionom (bromid). Stoga se tvar C ne može smatrati istovjetnom tvari B.

Usporedba tvari B i D

Tvar B „kvaterni amonijevi spojevi, dikoko, alkildimetil, kloridi“ opisuje smjesu sastojaka različitih duljina ugljikovih lanaca (C₆ do C₁₈ parni, ravnolančani, zasićeni i nezasićeni), dok tvar D

opisuje jedan sastojak s definiranom i zasićenom duljinom lanca (C_{12}) i s istim anionom (klorid). Tvari B i D imaju različite nazive i ne mogu se smatrati istom tvari, budući da pojedinačni sastojak nije obuhvaćen smjesom koja sadrži određeni sastojak i obrnuto.

Usporedba tvari B i E

Tvar E je smjesa tvari C i D. Obje imaju zasićene lance C_{12} , no različite anione (bromid i klorid). Tvar B „kvaterni amonijevi spojevi, dikoko, alkildimetil, kloridi“ opisuje smjesu sastojaka različitih duljina ugljikovih lanaca (C_6 do C_{18} parni, ravnolančani, zasićeni i nezasićeni) i s kloridom kao anionom. Međutim, tvar E opisana je samo duljinom ugljikova lanca C_{12} s bromidom kao dodatnim anionom. Stoga se tvari B i E ne mogu smatrati istovjetnima. Zbog toga je potrebna odvojena registracija tvari E.

Usporedba tvari B i F

Tvar F „kvaterni amonijevi spojevi, di-C14-18-alkildimetil amonijevi kloridi“ jest smjesa sastojaka različitih duljina ugljikovih lanaca (C_{14} do C_{18} parni i neparni, ravnolančani i zasićeni). Tvar F razlikuje se u sastavu i području raspodjele ugljikovih lanaca od tvari B. Tvar F ima usku raspodjelu duljine ugljikovih lanaca i uz to C_{15} - i C_{17} - lance ugljika. Stoga se tvari B i F ne mogu smatrati istovjetnima.

Usporedba tvari B i G

Tvari B i G izgledaju vrlo slično, jer je raspodjela ugljikovih lanaca gotovo u istom području. Međutim, tvar G uključuje i duljine ugljikovih lanaca C_4 , C_{20} i C_{22} . Raspodjela duljina ugljikovih lanaca tvari G sadrži šire područje od tvari B. Stoga se tvari B i G ne mogu smatrati istovjetnima.

3. Zaključak

Ugljikohidrati (parafini, olefini) mogu se smatrati istom tvari kad su sva tri opisnika (alkilni, opisnik funkcionalnosti i opisnik soli) identična.

U prethodno navedenom primjeru opisnici su uvijek različiti. Stoga se tvari ne mogu obuhvatiti jednom registracijom tvari B.

7.10 NAFTNE TVARI

Navodimo dva primjera na temelju smjernica za specifične UVCB tvari opisanih u poglavlju 4.3.3.2.

7.10.1 Namješavanje benzina (C_4 - C_{12})

1. Naziv i ostale identifikacijske oznake

Naziv

Naziv prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv	Nafta (benzin), katalitički izmijenjeni
---	---

Izvor

Identifikacija ili opis izvora proizvodnog toka	Sirova nafta
---	--------------

Postupak

Opis rafinerijskog postupka	Postupak katalitičke izmjene
Područje ugljikovih atoma	C4-C12
Područje vrenja ili vrelište	30 °C do 220 °C
Ostala fizikalna svojstva, npr. viskoznost	ispod 7 mm ² /s pri 40 °C (viskoznost)
EC broj	273-271-8
CAS broj	68955-35-1
EC naziv/CAS naziv	Nafta (benzin), katalitički izmijenjeni
EC opis/CAS opis	Složeni sastav ugljikovodika proizveden destilacijom proizvoda iz postupka katalitičke izmjene. Sastoji se od ugljikovodika koji imaju broj ugljikovih atoma pretežito u području od C ₄ do C ₁₂ i vriju u području približno od 30 °C do 220 °C (90 °F do 430 °F). Sadrži razmjerno velik udio aromatskih i razgrananih ugljikovodika. Ovaj tok može sadržavati 10% ili više volumnog udjela benzena.

2. Informacije o sastavu

Poznati sastojci			
IUPAC naziv	CAS broj	EC broj	Područje koncentracije (%masenog udjela)
benzen	71-43-2	200-753-7	1-10
toluen	108-88-3	203-625-9	20-25
ksilen	1330-20-7	215-535-7	15-20

7.10.2 Plinska ulja (nafta)**1. Naziv i ostale identifikacijske oznake**

Naziv prema nomenklaturi IUPAC ili drugi međunarodni kemijski naziv	Plinska ulja (nafta), teška atmosferska
---	---

Izvor

Identifikacija ili opis izvora proizvodnog toka	Sirova nafta
---	--------------

Postupak

Opis rafinerijskog postupka	Atmosferska destilacija
Područje ugljikovih atoma	C7 - C35
Područje vrenja ili vrelište	121 °C do 510 °C
Ostala fizikalna svojstva, npr. viskoznost	20 mm ² /s pri 40 °C (viskoznost)
EC broj	272-184-2
CAS broj	68783-08-4
EC naziv/CAS naziv	Plinska ulja (nafta), teška atmosferska
EC opis/CAS opis	Složeni sastav ugljikovodika dobiven destilacijom sirove nafte. Sastoji se od ugljikovodika koji imaju broj ugljikovih atoma pretežito u području od C ₇ do C ₃₅ i vriju u području približno od 121 °C do 510 °C (250 °F do 950 °F).

2. Kemijski sastav

Nema dostupnih informacija.

7.11 ENZIMI

Navodimo dva primjera za enzimске koncentrate na temelju smjernica za specifične UVCB tvari opisanih u poglavlju 4.3.2.3.: suptilizin (identificiran IUBMB nomenklaturom i drugim sastojcima) i α-amilaza (identificirana IUBMB nomenklaturom i organizmom u kojem se sintetizira).

7.11.1 Suptilizin

Enzimski protein

suptilizin

IUBMB broj

3.4.21.62

Nazivi prema IUBMB

(sustavno ime, naziv enzima, sinonimi)

suptilizin;
alkalaza; alkalaza 0,6L; alkalaza 2,5L; ALK-enzim; bacilopeptidaza A; bacilopeptidaza B; alkalna proteinaza *Bacillus Subtilisa*, biopraza; biopraza AL 15; biopraza APL 30; kolistinaza; (vidjeti i komentare); suptilizin J; suptilizin S41; suptilizin Sendai; suptilizin GX; suptilizin E; itd.

Komentari IUBMB-a

Suptilizin je serinska endopeptidaza, tipičan primjer peptidaze iz [porodice peptidaza S8](#). Ne sadrži cisteinske ostatke (iako su cisteini nađeni u homolognim enzimima). Verzije suptilizina u različitim vrstama uključuju suptilizin BPN' (također suptilizin B, suptilopeptidazu B, suptilopeptidazu C, nagarazu, proteinazu nagaraze, suptilizin Novo, bakterijsku proteinazu Novo) i suptilizin Carlsberg (suptilizin A, suptilopeptidaza A, alkalaza Novo). Ranije EC 3.4.4.16 i uključen u EC 3.4.21.14. Slične enzime sintetiziraju različiti sojevi *Bacillus subtilisa* i

	druge vrste <i>Bacillus</i> [1,3.
Reakcija	Hidroliza proteina pri čemu se kidaju različite peptidne veze, no preferira velike nenabijene ostatke u P1. Hidrolizira peptidne amide.
Vrsta reakcije	hidrolaze Djeluju na peptidne veze (peptidaze); Serinske endopeptidaze
EC broj	232-752-2
EC naziv	suptilizin
CAS broj	9014-01-1
CAS naziv	suptilizin
Koncentracija proteina u enzimu	26%
<u>Ostali sastojci</u>	
Ostali proteini, peptidi i aminokiseline	39%
Ugljikohidrati	11%
Lipidi	1%
Anorganske soli	23%
<u>Dodatni parametri</u>	
Supstrati i produkti	proteini ili oligopeptidi, peptidi topljivi u vodi

7.11.2 α -amilaza

<u>Enzimski protein</u>	α -amilaza
IUBMB broj	3.2.1.1
Nazivi prema IUBMB (sustavno ime, naziv enzima, sinonimi)	1,4- α -D-glukan glukanohidrolaza; glikogenaza; α -amilaza; alfa-amilaza; endoamilaza; Taka-amilaza A
Komentari IUBMB-a	Nasumično hidrolizira škrob, glikogen i srodne polisaharide i oligosaharide; hidrolizirane (raskidane) skupine oslobađaju se u α -konfiguraciji. Izraz „ α “ odnosi se na početnu anomernu konfiguraciju šećera koji se otpušta, a ne na konfiguraciju veze koja se hidrolizira.
Reakcija	endohidroliza 1,4- α -D-glukozidnih veza polisaharida koji sadrže tri ili više D-glukoza međusobno povezanih 1,4- α vezama.
Vrsta reakcije	hidrolaze; glikozidaze; glikozidaze, tj. enzimi koji hidroliziraju O- i S-glikozilne spojeve
EC broj	232-565-6
EC naziv	amilaza, α -
CAS broj	9000-90-2
Povezani CAS brojevi	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (svi izbrisani)
CAS naziv	amilaza, α -
Koncentracija proteina u enzimu	37%
<u>Ostali sastojci</u>	
Ostali proteini, peptidi i aminokiseline	30%
Ugljikohidrati	19%
Anorganske soli	14%
<u>Dodatni parametri</u>	
Supstrati i produkti	škrob; glikogen; voda; polisaharidi; oligosaharidi

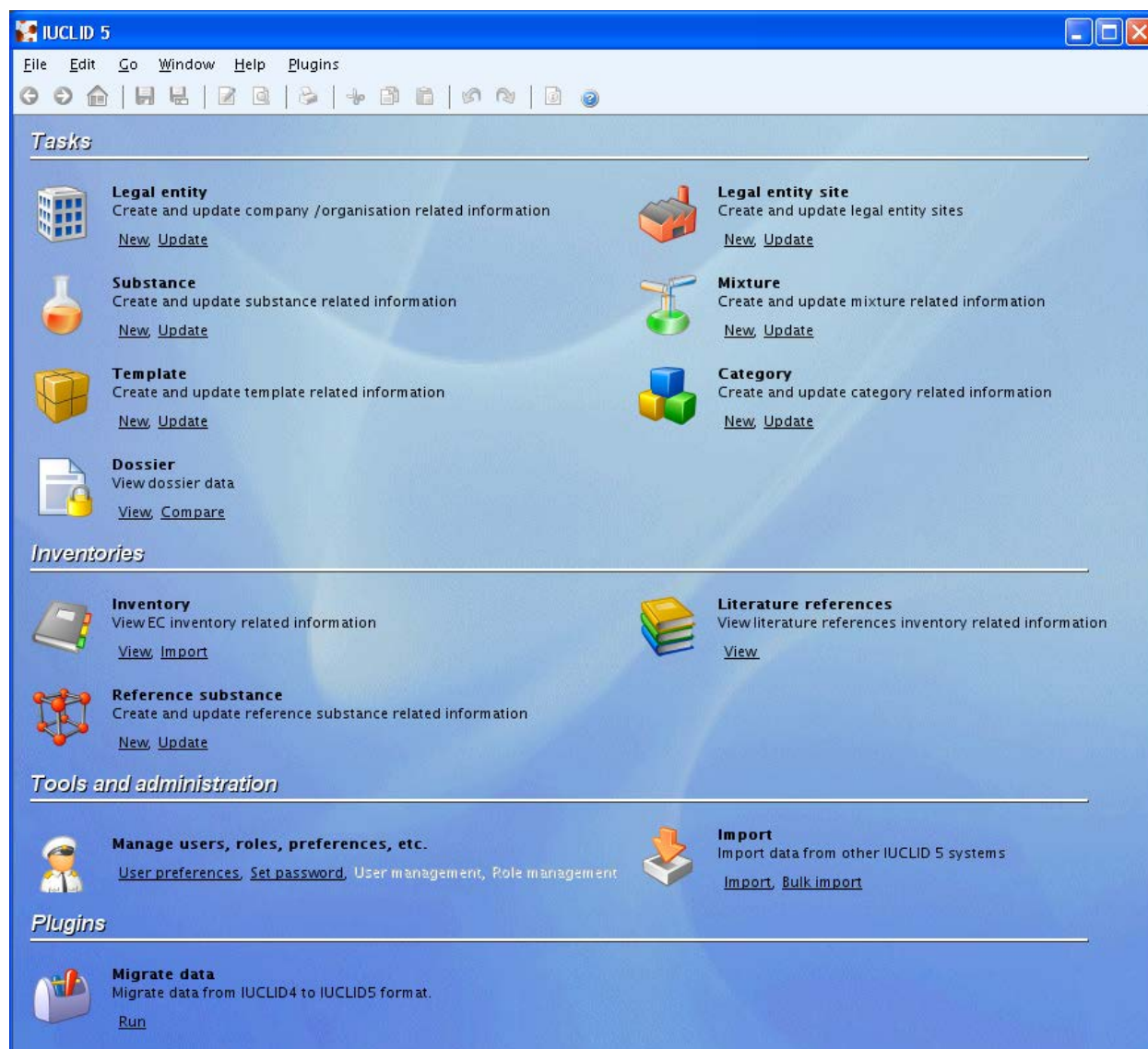
8 OPIS TVARI U PROGRAMU IUCLID 5

Ovo poglavlje ilustrira kako se različite vrste tvari – tvari od jednog sastojka, tvari od više sastojaka, tvari definirane kemijskim sastavom i ostalim identifikacijskim oznakama, te UVCB tvari – može opisati u programu IUCLID 5. Detaljne informacije o opisivanju različitih vrsta tvari u programu IUCLID 5 nalaze se u Priručniku za podnošenje podataka, dio 18. – „Kako opisati identitet tvari u programu IUCLID 5 za registraciju sukladno Uredbi REACH“.

8.1 OPĆA NAČELA

U programu IUCLID 5 postoje tri važna dijela koja se tiču identifikacije tvari:

- EC inventar u „**Inventories**“;
- popis referentnih tvari („**Reference Substance**“) koje se nalaze u „**Inventories**“;
- odjeljci 1.1. i 1.2. podataka koji se odnose na tvar (u „**Substance**“).



8.1.1 Inventari

Odjeljak **Inventories** sadrži EC inventar (**Inventory**) (objašnjenja potražiti u poglavlju 3.3.), kojim upravlja i koji održava Europska komisija/Europska agencija za kemikalije, te **Reference substance** inventar, lokalni inventar referentnih tvari kojim upravljaju i koji po potrebi dograđuju korisnici u svojim instaliranim programima.

Kad izabere EC inventory korisnik može pretraživati i prikazivati podatke inventara (tj. EC broj, CAS broj, EC nazive itd.). Te se informacije mogu samo čitati (*read-only*).

Izborom **Reference substance** korisnik dobiva pristup svom lokalnom inventaru sastojaka koje će koristiti za identifikaciju tvari u obliku u kojem je proizvedena, tj. uključujući nečistoće i dodatke.

Drugim riječima, ključni elementi tvari stvaraju se i centralno održavaju u **Reference substance** inventaru. Taj se inventar može po potrebi ponovno koristiti za različite tvari.

Primjer

Ako tvar sadrži: 91% 1,2-dimetilbenzena i kao nečistoću 5% 1,3-dimetilbenzena, u inventar referentnih tvari (**Reference Substance** inventory) treba upisati sadržaj 1,2-dimetilbenzena, kao i 1,3-dimetilbenzena. Unesene informacije pohranjuju se i čuvaju u inventaru. Ako se isti sastojci pojave u drugoj tvari u drugačijim postocima, zahvaljujući tome što su već prisutni u lokalnom inventaru informacije će se lako moći ponovno iskoristiti.

Na slikama u nastavku prikazan je odjeljak **Reference substance** programa IUCLID 5. U stvarnom programu ove tri odvojene slike pojavljuju se zajedno na jednom zaslonu.

Reference substance (referentna tvar) – dio I.

The screenshot shows the 'Reference substance: 95-47-6 / o-xylene' entry form in IUCLID 5. The form is divided into several sections:

- 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: (empty field)
- No EC information available:** Justification: (empty field)

Na slici „Reference substance (referentna tvar) – dio I.“ nalaze se sljedeće pojedinosti:

- *Reference substance name* (naziv referentne tvari)

Izbor naziva je slobodan (u ovom primjeru 95-47-6/1,2-dimetilbenzen).

- *EC inventory* (EC inventar)

Poveznica na *read-only* EC inventar, uključujući ugrađene informacije, kao što je EC broj.

- *No EC information available* (Nema dostupnih EC informacija)

Popis mogućih razloga (obrazloženja) za nepostojanje informacija o EC inventaru (npr. nije primjenjivo, nije još dodijeljen).

Reference substance (referentna tvar) – dio II.

CAS information

CAS number

CAS name

IUPAC name

Description

Synonyms

Name
o-xylol
ortho-xylene
o-dimethylbenzene
o-methyltoluene
ortho-xylene

Related CAS information

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

Na slici „Reference substance (referentna tvar) – dio II.“ nalaze se sljedeće pojedinosti:

- *CAS information* (CAS informacije, kao što su CAS broj i CAS naziv, i ostale informacije povezane s CAS-om)

U pravilu, treba dati CAS broj povezan s EC brojem. Ako postoji više od jednog CAS broja (npr. izbrisani CAS brojevi ili CAS brojevi iste tvari korišteni u različitim zakonodavnim sustavima kako bi se tvar opisala u skladu s njima), navedite ostale CAS brojeve kao povezane CAS brojeve (*Related CAS information*).

- *IUPAC name* (IUPAC naziv);

Napominjemo da u polju *IUPAC name* treba navesti (kemijski) naziv tvari na engleskom jeziku. To polje treba koristiti i za UVCB tvari koje se opisuju uz pomoć izvora i postupka.

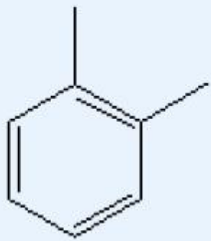
- *Description* (polje za opis dodatnih informacija)

U ovom polju treba navesti sve dodatne informacije relevantne za opis tvari, npr. za UVCB tvari i minerale.

- *Synonyms* (sinonimi)

Ovdje se može navesti IUPAC nazive na drugim jezicima.

Reference substance (referentna tvar) – dio III.

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

Buttons: Load... Zoom... Delete

Na slici „Reference substance (referentna tvar) – dio III.“ nalaze se sljedeće pojedinosti:

- *Molecular formula* (molekularna formula)

Navodi se molekularna formula prema Hillovoj metodi.

- *Molecular weight range* (molekularna masa, uključujući područje)
- *SMILES notation* (SMILES oznaka)
- InChI
- *Structural formula* (strukturna formula kao slika)

8.1.2 Podaci o tvari (odjeljci 1.1., 1.2., 1.3. i 1.4. programa IUCLID)

Skup podataka u programu IUCLID 5 sadrži sve podatke o tvari, kao što su zapisi o završnim ispitivanjima, informacije o razvrstavanju i označavanju te kemijski identitet uključujući sastav tvari. Podaci su grupirani u 11 odjeljaka.

Skup podataka o tvari može se kreirati, pretraživati, pregledavati i ažurirati izborom **Substance** unutar izbornika **Tasks**.

U sklopu skupa podataka o tvari, pojediniosti o identifikaciji i sastavu tvari nalaze se u odjeljku 1.1., odnosno 1.2.

Substance identification (identifikacija tvari) – dio I.

The screenshot shows the 'Substance identification' interface. On the left, a navigation tree lists sections from 0 to 13, with '1.1 Identification' highlighted. The main area displays the following information:

- Third party flags:** A flag icon.
- Third party:** An empty text field.
- Role in the supply chain:**
 - Role flags:** A flag icon.
 - Role:** Radio buttons for Manufacturer, Importer, Only representative, and Down.
- Reference substance:**
 - EC number: 202-422-2
 - EC name: o-xylene
 - CAS number: 95-47-6
 - CAS name: (empty)
 - IUPAC name: o-xylene
- Type of substance:**
 - Composition:** A dropdown menu.
 - Origin:** A dropdown menu.
- Trade names:**
 - Trade names flag:** A flag icon.
 - Name table:**

Name
TG OX
Ortho-X
TG OX2

Buttons at the bottom include 'Add...', 'Edit...', and 'Delete'.

Odjeljak 1.1. *Identification* (identifikacija tvari) uključuje

- *Reference substance* (referentnu tvar)

Ovdje treba kreirati poveznicu na referentnu tvar s kojom se tvar povezuje. Tvari se daje odgovarajući naziv.

- *Type of substance* (vrsta tvari)

Iz ponuđenog popisa može se izabrati vrsta tvari, npr. tvar od jednog sastojka.

- *Trade names* (trgovački nazivi)

Ovdje se može navesti sve interne i vanjske tvorničke nazive.

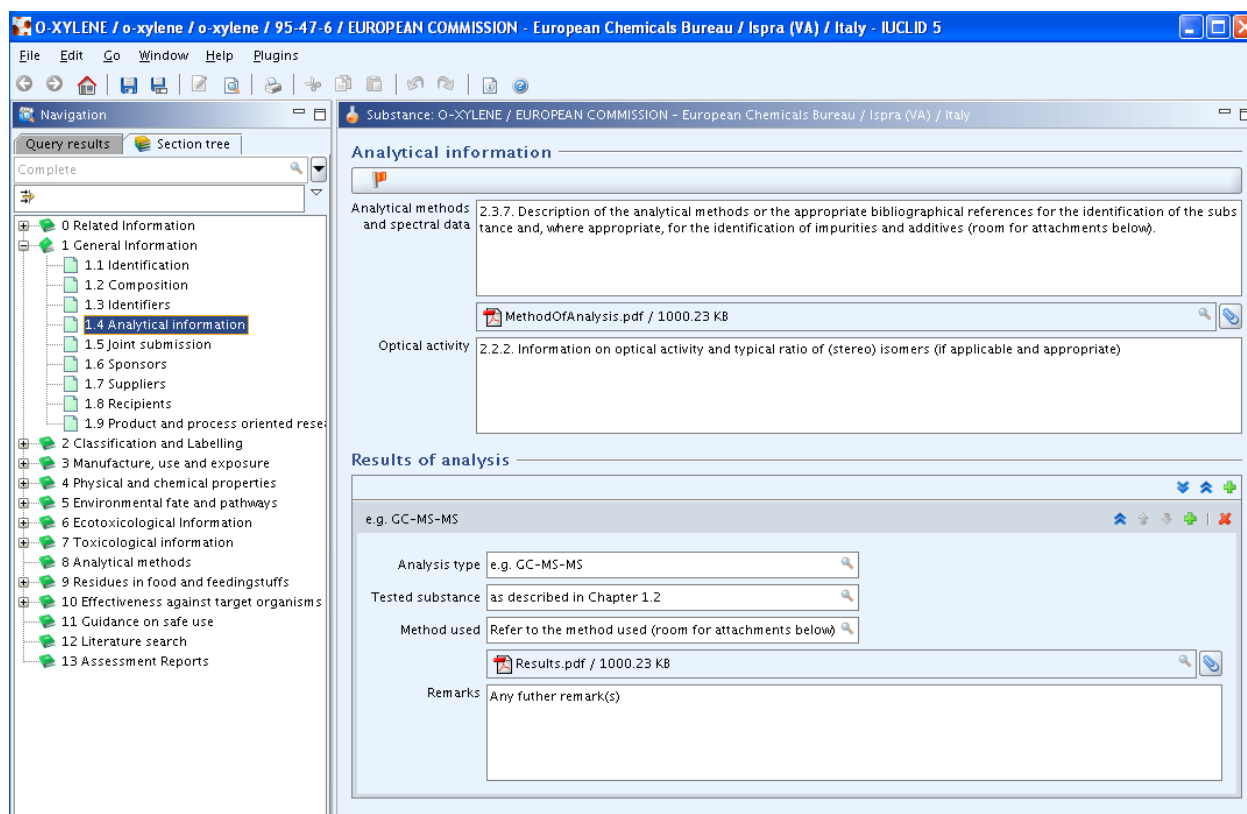
Odjeljak 1.2. *Composition* (sastav tvari) uključuje opis sastava tvari, uključujući poveznice na relevantne referentne tvari kao sastavne dijelove. Ovdje se navode svi sastojci (npr. osnovni

sastojci, nečistoće) proizvedene tvari i dodaci. Primjeri i detaljne upute za ispunjavanje odjeljka 1.2. programa IUCLID 5 nalaze se u poglavlju 8.2.

Odjeljak 1.3. Identifiers (identifikacijske oznake) sadrži informacije potrebne za identifikaciju tvari s gledišta informacijske tehnologije, npr. korisnik može navesti identifikacijsku oznaku koju koristi za istu tvar u nekom drugom informacijskom sustavu, kao što je sustav sigurnosno-tehničkih listova. Time se poboljšava razmjena podataka između programa IUCLID 5 i drugih sustava. To nije dio identifikacije tvari kako je opisana u ovim smjernicama.

Odjeljak 1.3. također pruža mogućnost pohranjivanja identifikacijskih brojeva koje dodjeljuju različiti zakonodavni programi (npr. broj registracije u sklopu Uredbe REACH). Ni te informacije nisu dio identifikacije tvari kako je opisana u ovim smjernicama.

Substance identification (identifikacija tvari) – dio II.



Odjeljak 1.4. Analytical information (analitički podaci) sadrži analitičke podatke o tvari, uključujući njezinu optičku aktivnost.

8.2 PRIMJERI UNOŠENJA PODATAKA U PROGRAM IUCLID 5

Primjeri unošenja podataka u IUCLID 5 dani su za tvar od jednog sastojka (poglavlje 8.2.1.), tvar od više sastojaka (poglavlje 8.2.2.), tvar definiranu kemijskim sastavom i drugim identifikacijskim oznakama (poglavlje 8.2.3.), te UVCB tvar (poglavlje 8.2.4.).

8.2.1 Tvar od jednog sastojka

Primjer: Tvar od jednog sastojka			
Naziv	1,2-dimetilbenzen		
Osnovni sastojak	Uobičajeni sadržaj % (masenog udjela)	Niži sadržaj % (masenog udjela)	Viši sadržaj % (masenog udjela)
1,2-dimetilbenzen	91	88	93
Nečistoće			
1,3-dimetilbenzen	5	2	7
1,4-dimetilbenzen	2	0,5	3
voda	2	0,5	3

U odjeljku 1.1. naveden je naziv tvari. Prema ovim smjernicama to je tvar od jednog sastojka naziva „1,2-dimetilbenzen“. U programu IUCLID 5, to znači da se skup podataka o tvari treba povezati s referentnom tvari 1,2-dimetilbenzenom u odjeljku 1.1.

The screenshot displays the IUCLID 5 interface for substance identification. The main panel shows the 'Substance identification' section with fields for 'Chemical name' (o-Xylene), 'Legal entity flags', 'Legal entity' (European Chemicals Bureau / Ispra / Italy), 'Role in the supply chain' (Role flags), and 'Reference substance' (o-xylene / 1,2-methylbenzene / o-xyelene / 95-47-6). The 'Reference substance' field is circled in red. The left sidebar shows a tree view with '1.1 Substance identification' selected.

U odjeljku 1.2. definiran je sastav tvari:

- *Degree of purity* (stupanj čistoće)

Za tvar od jednog sastojka ovdje treba navesti stupanj čistoće (donju i gornju graničnu vrijednost) osnovnog sastojka (obično $\geq 80\%$).

- *Constituents* (sastojci)

Kod tvari od jednog sastojka ovdje se navode kemijske identifikacijske oznake (EC broj i EC naziv, CAS broj i CAS naziv, IUPAC naziv). Kemijski se identitet definira poveznicom na referentnu tvar.

Polje *Remarks* (napomene) namijenjeno je različitim informacijama. Ovdje treba unijeti obrazloženje u slučaju odstupanja od pravila o 80% (vidjeti poglavlje 4.2.2.).

The screenshot shows a software interface with a 'Section tree' on the left and a main data entry area on the right. The 'Section tree' includes categories like 'General Substance Information', 'Physical and chemical properties', and 'Toxicological information'. The main area is titled 'Degree of purity' and contains a 'Constituents' section. It shows a reference substance 'o-xylene / 1,2-methylbenzene / o-xyelene / 95-47-6' with associated EC and CAS numbers. Below this, there are input fields for 'Proportion (typical)' and 'Proportion (real)', both set to 91% and 88% respectively. A 'Remarks' field is also present.

- *Impurities* (nečistoće)

Ako su nečistoće prisutne u koncentraciji $\geq 1\%$ (ili iznad bilo koje donje granične vrijednosti koncentracije, ako je to relevantno za razvrstavanje tvari) treba navesti barem jednu od kemijskih identifikacijskih oznaka (EC broj i EC naziv, CAS broj i CAS naziv, IUPAC naziv). Kemijski se identitet definira poveznicom na referentnu tvar. Za svaku nečistoću navodi se koncentracija (uobičajena i područje) u % (masenog udjela).

Ako su poznati, treba navesti broj i ukupnu koncentraciju nespecificiranih nečistoća, kako bi ukupna koncentracija iznosila 100%.

- *Additives* (dodaci)

Sve dodatke (potrebne kako bi se tvar stabilizirala) treba odrediti odgovarajućim kemijskim identifikacijskim oznakama (EC broj i EC naziv, CAS broj i CAS naziv, IUPAC naziv). Kemijski se identitet definira poveznicom na referentnu tvar. Za svaki dodatak navodi se koncentracija (uobičajena i područje) u % (masenog udjela). Treba navesti stabilizacijsku funkciju aditiva.

8.2.2 Tvar od više sastojaka

Primjer: Tvar od više sastojaka			
Naziv	reakcijska masa 1,4-dimetilbenzena, 1,2-dimetilbenzena i 1,3-dimetilbenzena		
Osnovni sastojci	Uobičajeni sadržaj % (masenog udjela)	Niži sadržaj % (masenog udjela)	Viši sadržaj % (masenog udjela)
1,4-dimetilbenzen	35	30	40
1,2-dimetilbenzen	30	25	35
1,3-dimetilbenzen	25	20	30
Nečistoće			
voda	10	5	12

Prema ovim smjernicama, to je tvar od više sastojaka s tri osnovna sastojka, naziva „reakcijska masa 1,4-dimetilbenzena, 1,2-dimetilbenzena i 1,3-dimetilbenzena“. Voda je zaostalo otapalo koje se ne može odvojiti od tvari te se smatra nečistoćom, a ne jedim od osnovnih sastojaka.

U programu IUCLID 5, to znači da se skup podataka o tvari treba povezati s referentnom tvari „reakcijska masa 1,4-dimetilbenzena, 1,2-dimetilbenzena i 1,3-dimetilbenzena“ (vidjeti odjeljak 1.1.).

The screenshot displays the IUCLID 5 interface. On the left is a navigation tree with sections 0 through 10. Section 1, 'General Information', is expanded to show '1.1 Identification'. The main panel is titled 'Substance identification' and contains the following fields:

- 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]

Below this is the 'Role in the supply chain' section:

- Role flags:** [Flag]
- Role:** Manufacturer Importer Only representative Downstream user

The 'Reference substance' section is also visible:

EC number	EC name
215-535-7	xylene
CAS number	CAS name
1330-20-7	

Za svaki sastojak, dodatak i nečistoću, kemijski identitet, uobičajena koncentracija i područje koncentracije navedeni su u odjeljku 1.2. Stupanj čistoće, također naveden u odjeljku 1.2., mora odgovarati ukupnom području koncentracije osnovnih sastojaka. Kemijski se identitet definira poveznicom na referentnu tvar.

The screenshot displays a software interface for chemical identification. On the left, a 'Section tree' is visible with '1.2 Composition' highlighted. The main area, titled 'Constituents', shows two entries:

- 30% (w/w) o-xylene / o-xylene / 95-47-6**: Reference substance 'o-xylene / o-xylene / 95-47-6'. EC number: 202-422-2, EC name: o-xylene. CAS number: 95-47-6, CAS name: [blank]. IUPAC name: o-xylene. Typical concentration: 30 % (w/w). Concentration range: > 25, < 35 % (w/w).
- p-xylene / p-xylene / 106-42-3**: Reference substance 'p-xylene / p-xylene / 106-42-3'. EC number: 203-396-5, EC name: p-xylene.

8.2.3 Tvari definirane kemijskim sastavom i ostalim identifikacijskim oznakama

U nekim slučajevima potrebne su i druge glavne identifikacijske oznake kako bi se osigurala jednoznačna identifikacija tvari (vidjeti poglavlje 4.2.4.). Ti se dodatni parametri razlikuju s obzirom na vrstu tvari, a mogu biti različiti i za tvari unutar jedne vrste. Međutim, dodatni parametar ključan je za identifikaciju tvari. Primjerice, kod minerala je važno kombinirati rezultate elementnog sastava sa spektrofotometrijskim podacima kako bi se odredio mineraloški sastav i struktura kristala, koji se potom potvrđuju karakterističnim fizikalnim i kemijskim svojstvima (vidjeti i primjer u poglavlju 7.3.).

Fizikalno-kemijska svojstva jesu:

- struktura kristala (vidljiva uz pomoć rendgenske difrakcije),
- oblik,
- tvrdoća,
- sposobnost bubrenja,
- gustoća,
- veličina površine,
- itd.

Primjer: Tvar definirana kemijskim sastavom i ostalim identifikacijskim oznakama

Za minerale se može navesti specifične dodatne glavne identifikacijske oznake, budući da minerali imaju karakteristična fizikalno-kemijska svojstva koja omogućuju njihovu potpunu identifikaciju, primjerice:

- vrlo mala tvrdoća za milovku (talk),
- sposobnost bubrenja bentonita,
- oblici diatomita (vidljivi uz pomoć optičkog mikroskopa),

- | | |
|---|---------------------------------------|
| – | vrlo visoka gustoća barita, |
| – | veličina površine (adsorpcija dušika) |

Te informacije treba navesti u opisnom polju (*Description*) referentne tvari na koje upućuje poveznica iz skupa podataka (odjeljak 1.1. programa IUCLID 5).

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

8.2.4 UVCB tvar

UVCB tvari ne može se jednoznačno odrediti nazivom prema IUPAC-nomenklaturi sastojaka, budući da se ne mogu identificirati svi sastojci; ili ih se može odrediti generički, no bez specifičnih podataka zbog promjenjivosti sastava. Glavne identifikacijske oznake UVCB tvari povezane su s izvorom tvari i primijenjenim postupkom. Zbog nemogućnosti razlikovanja između sastojaka i nečistoća, izraze „osnovni sastojci“ i „nečistoće“ ne bi trebalo koristiti kod UVCB tvari.

Međutim, kemijski sastav i identitet sastojaka treba dati ukoliko su poznati. Opis sastava često može biti generički, primjerice „ravnolančane masne kiseline C8-C16“ ili „etoksilati alkohola s alkoholima C10-C14 sa 4-10 etoksilatnih skupina“.

Na postupak određivanja UVCB tvari primjenjuje se isti sustav koji je opisan za tvari od jednog i tvari od više sastojaka. Sama tvar određena je referentnom tvari kao i poznatim sastojcima.

Važno je napomenuti, kad se tvar definira kao referentna tvar, u polje „IUPAC naziv“ treba navesti (kemijski) naziv UVCB tvari (mada UVCB tvari rijetko kad imaju „klasičan“ IUPAC naziv). U polje *Description* (opis) treba unijeti dodatne informacije (npr. uvjete reakcije, početne materijale).

Primjer: UVCB tvar	
Naziv	destilati (ugljen), visoka temperatura, benzenska frakcija
Opis	Destilat iz frakcijske destilacije visokotemperaturnog ugljena s približnim područjem destilacije od 30 °C do 180 °C (86 °F do 356 °F). Sastoji se pretežito od C4 do C6 alifatskih i aromatskih ugljikovodika, te sadrži ugljik disulfid, ciklopentadien i ponešto vodikovog sulfida.

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

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.

Na skup podataka o tvari primjenjuju se isti koraci koji su opisani za tvari od jednog i tvari od više sastojaka. Iz skupa podataka poveznica upućuje na referentnu tvar kojom se definira tvar u odjeljku 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.

Poznati sastojci definirani su odgovarajućom referentnom tvari, kao što je opisano za tvari od jednog i tvari od više sastojaka. Ni jedan se sastojak u odjeljku 1.2. ne smije navesti pod naslovom *Impurity* (nečistoća).

8.3 NAVOĐENJE ANALITIČKIH PODATAKA

Analitički podaci navode se u poglavlju 1.4. Dva su glavna dijela poglavlja:

- Analitički podaci
- Rezultati analize

Navigation

Substance: O-XYLENE / o-xylene / o-xylene / 95-47-6 / EUROPEAN COMMISSION - European Chemicals Bureau / Ispra (VA) / Italy

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

Analytical information

Analytical methods and spectral data 2.3.7. Description of the analytical methods or the appropriate bibliographical references for the identification of the substance and, where appropriate, for the identification of impurities and additives (room for attachments below).

MethodOfAnalysis.pdf / 1000.23 KB

Optical activity 2.2.2. Information on optical activity and typical ratio of (stereo) isomers (if applicable and appropriate)

Results of analysis

e.g. GC-MS-MS

Analysis type e.g. GC-MS-MS

Tested substance as described in Chapter 1.2

Method used Refer to the method used (room for attachments below)

Results.pdf / 1000.23 KB

Remarks Any futher remark(s)

Ova je podjela izravno povezana sa zahtjevima Uredbe REACH (*Prilog VI.*):

Analytical information (analitički podaci):

- *Analytical methods* (analitičke metode: u ovom polju treba navesti opis analitičkih metoda (REACH, *Prilog VI.*, točka 2.3.7.). Dulje tekstove moguće je priložiti.
- *Optical activity* (optička aktivnost: u ovom se polju navodi informacije o optičkoj aktivnosti i tipičnom udjelu (stereo)izomera (ako su raspoložive i potrebne) (REACH, *Prilog VI.*, točka 2.2.2.).

Results of analysis (rezultati analize):

Namjena cjeline koja sadrži rezultate analize jest omogućiti korisniku pružanje informacija o rezultatima analize povezane s identifikacijom i prilaganje materijala, kao što su npr. kromatogrami. Isto tako mogu se priložiti i podaci o spektrima (REACH, *Prilog VI.*, točka 2.3.5.) kao i kromatografski podaci (REACH, *Prilog VI.*, točka 2.3.6.).

DODATAK I. – KORISNI IZVORI PODATAKA

U ovom su dodatku navedene internetske stranice, baze podataka i priručnici koji mogu pomoći pri pronalaženju odgovarajućih IUPAC, CAS i EC naziva, CAS i EC brojeva, molekularnih i strukturnih formula, uključujući i SMILES oznake, te drugih parametara potrebnih za identifikaciju tvari. Komercijalne baze podataka i slični izvori nisu uključeni.

Općenito		
Vlasnik adrese	Izvor	Opis izvora
U.S. Department of Health and Human Services (Ministarstvo zdravstva i socijalne skrbi SAD-a)	http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html	Skupina baza podataka i alata pomoću kojih korisnici mogu tražiti informacije o kemikalijama
Cambridgesoft	http://chemfinder.cambridgesoft.com/	Besplatna baza podataka o kemijskim strukturama, fizikalnim svojstvima, s poveznicama na relevantne informacije
Accelrys	http://accelrys.com/products/informatics/	Programska podrška za kemikalije; abecedni popis proizvoda pretraživ uz pomoć programa Accord
Syrres	http://www.syrres.com/what-we-do/products-services.aspx	Besplatno <i>online</i> pretraživanje sljedećih baza podataka: Sudbina u okolišu; KOW (<i>online</i> LogPow); PHYSPROP (fizikalna svojstva)

Naziv i ostale identifikacijske oznake		
Parametar identiteta tvari	Izvor	Opis izvora
IUPAC naziv	http://www.iupac.org	Službene inernetske stranice IUPAC-a
	ili pobliže: http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html#inorganic (anorganske tvari) http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html (općenito)	
	http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac	Nomenklatura kemikalija i preporuke IUPAC-a (po ovlaštenju i pod nadzorom IUPAC-a)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) (Nomenklatura organske kemije (Plava knjiga)) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Glavne tiskovine koje se odnose na IUPAC-nomenklaturu, novo izdanje očekuje se 2006.

Naziv i ostale identifikacijske oznake		
Parametar identiteta tvari	Izvor	Opis izvora
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) (Vodič kroz IUPAC-nomenklaturu organskih spojeva (preporuke, 1993.) (dodatak Plavoj knjizi) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Glavne tiskovine koje se odnose na IUPAC-nomenklaturu, novo izdanje očekuje se 2006.
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) (Nomenklatura anorganske kemije (preporuke, 1990.) (Crvena knjiga)) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Glavne tiskovine koje se odnose na IUPAC-nomenklaturu, novo izdanje očekuje se u srpnju 2005.
IUPAC naziv	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) (Biokemijska nomenklatura i srodni dokumenti (Bijela knjiga)) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Glavne tiskovine koje se odnose na IUPAC-nomenklaturu
	Principles of Chemical Nomenclature: a Guide to IUPAC Recommendations (Načela kemijske nomenklature: vodič kroz preporuke IUPAC-a) Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Knjiga s osnovnim informacijama koja obuhvaća sve vrste spojeva
IUPAC naziv	http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/	Komercijalni računalni program za davanje naziva koji može biti od velike pomoći pri davanju naziva strukturama umjerene složenosti. Također i besplatan program za male molekule (preporučuje IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature	Nomenklatura organske kemije IUPAC-a (preporučuje IUPAC)
	http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm	Potpuni popis odobrenih trivijalnih i polusustavnih korijena naziva organskih spojeva
	http://www.chemexper.com/	Namjena ChemExper popisa kemikalija jest kreiranje zajedničke i slobodno dostupne baze podataka o kemikalijama putem interneta. U toj se bazi podataka nalaze fizikalne karakteristike kemikalija. Svatko može unijeti informacije o kemikalijama i dohvatiti informacije uz pomoć internetske tražilice.
IUBMB nomenklatura	http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/ ili http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb	Baza podataka biokemijske nomenklature IUBMB-a (po ovlaštenju i pod nadzorom IUBMB-a)

Naziv i ostale identifikacijske oznake		
Parametar identiteta tvari	Izvor	Opis izvora
Ostali nazivi	http://www.colour-index.org	Generički nazivi indeksa boje, međunarodni indeks boje, četvrto izdanje <i>online</i>
	http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp	INCI (Međunarodna nomenklatura kemijskih sastojaka), službene internetske stranice Vijeća za proizvode za osobnu njegu [SAD-a]
	http://www.epa.gov/oppt/existingchemicals/pubs/tscainventory/alkyl-rg.pdf	Internetske stranice američke Agencije za zaštitu okoliša (EPA) s podacima o tvarima koje sadrže promjenjive duljine ugljikova lanca (alkilna područja izražena CX-Y oznakama)
Ostale identifikacijske oznake	http://www.cenorm.be	Europske norme, službena stranica Europskog odbora za normizaciju (CEN)
EC broj	http://esis.jrc.ec.europa.eu/	ESIS: omogućava pretraživanje popisa EINCES, ELINCS, NLP i <i>Priloga I.</i> Direktive 67/548/EEZ
CAS broj	http://www.cas.org	Službene internetske stranice zbirke podataka o kemikalijama pri CAS-u
	http://www.chemistry.org	Službene internetske stranice Američkog kemijskog društva

Molekularna i strukturna formula		
Parametar identiteta tvari	Izvor	Opis izvora
SMILES	http://cactus.nci.nih.gov/services/translate/	Besplatni generator oznaka iz sustava SMILES
Molekularna masa i SMILES	http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html	ACDChemsketch, besplatan programski paket za crtanje kemijskih struktura uz pomoć računala (dostupan i uz plaćanje)
Nekoliko fizikalno-kemijskih parametara	http://www.epa.gov/opptintr/exposure/docs/episuite.htm	EPI (Estimation Programs Interface) Suite™ je na Windows®-ima utemeljen skup modela za procjenu fizikalno-kemijskih svojstava i sudbine tvari u okolišu koji su razvili Ured za zaštitu od zagađenja i toksikologiju američke Agencije za zaštitu okoliša i Syracuse Research Corporation (SRC).

DODATAK II. – TEHNIČKE UPUTE ZA IDENTIFIKACIJU TVARI PO POJEDINAČNIM PARAMETRIMA

Informacije u ovom dodatku namijenjene su korisnicima koji nisu upoznati s pravilima određivanja naziva, uporabe brojeva s različitih popisa, kao ni s pravilima zapisivanja molekularnih i strukturnih informacija, uporabe spektralnih podataka itd.

Uvodno se sažeto prikazuju osnovna načela, a potom se korisnika upućuje na odgovarajuće izvore gdje može naći potpune informacije.

Ovo je pojednostavljen prikaz, koji nije ni potpun ni iscrpan, nedostatan detaljan za profesionalnog korisnika. Ni u kojem slučaju ne može ga se smatrati jednakovrijednim službenom izvoru.

1. Naziv(i) prema IUPAC-ovoj ili drugoj međunarodnoj nomenklaturi

Kod registracije treba navesti naziv na engleskom prema IUPAC-ovoj nomenklaturi ili neki drugi međunarodno priznati naziv tvari.

IUPAC naziv temelji se na međunarodnoj kemijskoj nomenklaturi koju je uspostavila međunarodna organizacija IUPAC (Međunarodna unija za čistu i primijenjenu kemiju) (za odgovarajuće reference vidjeti dodatak I.). IUPAC-ova nomenklatura sustavan je način davanja naziva organskim i anorganskim kemijskim tvarima. Sukladno njoj, za opis vrste i položaja funkcionalnih skupina u tvari koriste se predmeci (prefiksi), domeci (sufiksi) i umeci (infiksi).

U primjeru naziva **penta-1,3-dien-1-ol**:

predmetak je **penta-1,3-**

umetak je **-di**, a

dometak je **-ol**;

en- je osnova naziva, tj. korijen.

Pravila su razvijana nekoliko godina i stalno se mijenjaju uzimajući u obzir nove komponente molekularne raznolikosti i moguće uočene nesuglasice ili zabune. Pravila IUPAC-a mogu se koristiti samo za dobro definirane tvari.

U nastavku su navedene opće upute o ustroju naziva prema IUPAC-nomenklaturi. Više pojedinosti potražite u poglavlju 4.

1.1. Organska tvar

Korak 1. Odredite broj ugljikovih atoma u najdužem neprekinutom lancu ugljikovih atoma. Taj broj određuje predmetak, prvi dio korijena naziva:

Broj ugljikovih atoma	Korijen
1	met-
2	et-
3	prop-
4	but-
5	pent-
6	heks-
7	hept-
8	okt-
N

Korak 2. Odredite zasićenost lanca; ona određuje dometak, drugi dio korijena naziva:

Zasićenost	Veze	Dometak
Nezasićene	dvostruka	-en
	trostruka	-in
Zasićene	-	-an

U slučaju višestrukih dvostrukih ili trostrukih veza, broj veza naznači se izrazima „mono“, „di“, „tri“ itd. prije dometka:

penten s 2 dvostruke veze: pentadien

Korak 3. Kombinirajte predmetak, dometak i dodatke korijenu naziva.

NB: Kao korijen se mogu koristiti i trivijalni i polusustavni nazivi koje je odobrio IUPAC:

benzen, toluen, itd.

Korak 4. Upotrijebite tablicu u nastavku:

- identificirajte supstituente i/ili funkcionalne skupine: ugljikove skupine ili skupine koje ne sadrže ugljikove atome vezane uz lanac ugljikovih atoma identificiran pod 1.;
- odredite nomenklaturnu prednost supstituenata i/ili funkcionalnih skupina;
- dodajte dometak prvom supstituentu, odnosno funkcionalnoj skupini, pa zatim svima ostalima po prioritarnom redosljedju;
- dodajte predmetak ostalim supstituentima i funkcionalnim skupinama abecednim redom.

Prioritetni redosljed	Skupina	Formula	Dometak	Predmetak
1	karboksilna kiselina	R-COOH	-oična kiselina	karboksi
2	ester	R-CO-O-R	-oat	-
3	amid	R-CONH ₂	-amid	karbamoil
4	cijanid	R-CN	-nitril	cijano
5	aldehid	R-CHO	-al	okso
6	keton	R-CO-R	-on	okso
7	alkohol	R-OH	-ol	hidroksil
8	tiol	R-SH	-tiol	sulfanil
9	amin	R-NH ₂	-amin	amino

1.2. Anorganska tvar

1.2.1 Određivanje naziva jednostavnih anorganskih tvari

Nazivi anorganskih tvari temelje se na skupu pravila (crvena knjiga IUPAC-a, vidjeti referencu u poglavlju 7.1.); osnovna su pravila prikazana u nastavku:

- 1 Anioni pojedinačnog atoma dobivaju dometak -id:

O²⁻ je oksid

- 2 Jednostavni ionski spojevi jesu nazivi s kationom, zatim anionom. Kod kationa naboja >1, naboj se piše rimskim brojkama u okruglim zagradama neposredno iza naziva elementa:

Cu²⁺ je bakar(II)

- 3 Hidrati dobivaju naziv kao ionski spoj iza kojeg dolazi brojčani predmetak i –hidrat. Brojčani predmeci jesu mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, heksa-, hepta-, okta-, nona-, deka-:

CuSO₄ · 5H₂O je „bakrov(II) sulfat pentahidrat“

NB: Za potrebe registracije, hidratizirane i, kad je primjenjivo, anhidrirane oblike određene metalne soli smatra se istom tvari.

- 4 Kod anorganskih molekularnih spojeva u nazivu svaki element dobiva predmetak (vidjeti hidrate). Više elektronegativan element se piše zadnji, s dometkom –id:

CO₂ je ugljikov dioksid, a CCl₄ je ugljikov tetraklorid.

- 5 Kiseline primaju naziv po anionu koji se stvara kad se kiselina otopi u vodi. Postoji nekoliko mogućnosti:

- a Ako pri otapanju u vodi, disocijacijom kiseline nastane anion naziva „x“-id, kiselina prima naziv hidro-„x“-na kiselina:

klorovodična (hidrokloridna, hidroklorična) kiselina stvara kloridni anion.

- b Ako pri otapanju u vodi, disocijacijom kiseline nastane anion naziva „x“-at, kiselina prima naziv „x“-na kiselina:

klorna kiselina disocira u kloratne anione u vodi.

- c Ako pri otapanju u vodi, disocijacijom kiseline nastane anion naziva „x“-it, kiselina prima naziv „x“-asta kiselina:

klorasta kiselina disocira u kloritne anione.

1.2.2. Nazivi mineraloških faza

Složene mineraloške faze obično sadrže kombinaciju najmanje triju elemenata. Većina prisutnih elemenata kombinira se s kisikom i radi jednostavnije identifikacije mineralozi obično smatraju da su složeni spojevi izgrađeni od oksida, od kojih su neki bazični, a drugi kiseli. Primjerice, silikate je uobičajeno predstavljati kao zbroj više oksida ili kao soli silicične kiseline, ili aluminij silicične kiseline. Prema tome, kalcijev ortosilikat može se predstaviti kao $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$, kombinacija odvojenih oksida ili Ca_2SiO_4 , kalcijeva sol ortosilicične kiseline H_4SiO_4 . Isto vrijedi i za ostale složene mineralne okside – primaju naziv s predmetkom prije svakog oksida (npr. Ca_3SiO_5 = trikalcijev silikat = $3\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$). U nekim industrijskim sektorima uvedena su daljnja pojednostavljenja kako bi se skratile formule spojeva. Primjerice, portland cementni klinker, $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ (kalcijev ortosilikat ili dikalcijev silikat) skraćuje se na C_2S , gdje C = CaO i S = SiO_2 . Kada treba odrediti naziv ili identificirati složene mineraloške faze preporučuje se konzultirati stručne tekstove.

1.3. Prirodni produkti i srodne komponente

IUPAC je razvio nekoliko pravila za sustavno nazivlje prirodnih proizvoda. Ukratko, to znači da se naziv tvari ekstrahirane iz prirodnih izvora temelji, kad god je to moguće, na nazivu obitelji, roda ili vrste organizma iz kojeg se tvar ekstrahira:

Za hipotetski protein, *Hypothecalia Exemplare* nazivi se temelje na *hypothecalia* i/ili *exemplare*, npr. *Horse Exemplare*

Ako je moguće, naziv treba odražavati poznatu i vjerojatnu raspodjelu prirodnog produkta. Ako je prikladno, razred ili red također se mogu koristiti kao osnova za naziv tvari koja se pojavljuje u više srodnih obitelji. Nazivi prirodnih produkata nepoznate strukture ne smiju imati predmetke, dometke i/ili umetke koji se koriste u organskoj nomenklaturi.

Kondenzacijski produkt *Horse exemplare*, valarin dodan je na N-kraj (amino-kraj)

Mnoge tvari koje se pojavljuju u prirodi pripadaju dobro definiranim strukturnim razredima, od kojih svaki može biti opisan skupom usko povezanih roditeljskih struktura, tj. svaki se može izvesti iz osnovne strukture. Sustavni nazivi tvari koje se pojavljuju u prirodi i njihovih derivata mogu se temeljiti na nazivu odgovarajuće temeljne roditeljske strukture.

Dobro poznate roditeljske strukture jesu alkaloidi, steroidi, terpenoidi i vitamini.

Temeljna roditeljska struktura treba odražavati osnovni skelet zajednički većini tvari u tom razredu. Tvari koje se pojavljuju u prirodi ili njihovi derivati primaju naziv po roditeljskoj strukturi uz dodatak predmetaka, dometaka ili umetaka koji označavaju:

- promjene strukture skeleta,
- zamjenu atoma skeleta,
- promjene stupnja hidrogenacije o kojem se može zaključiti iz naziva roditeljske strukture,
- atome ili skupine koji supstituiraju atome vodika roditeljske strukture,

- konfiguracije o kojima se ne može zaključiti iz naziva roditeljske strukture, ili su promijenjene u odnosu na onu iz koje se to može.

Tiamin klorid poznat je i kao vitamin B₁.

Za detaljnije informacije o sustavnim nazivima prirodnih produkata i srodnih tvari treba kontaktirati s IUPAC-om (vidjeti dodatak I.).

1.4. Nije moguće izvesti IUPAC naziv

Ako za neke tvari nije moguće izvesti naziv sukladno IUPAC-ovoj nomenklaturi, može se koristiti druge međunarodno priznate nomenklature specifične za te tvari, kao što su:

- Minerali i rude; mineraloški nazivi;
- Naftne tvari;
- Generički nazivi indeksa boje³;
- Dodaci nafti;
- INCI (Međunarodna nomenklatura kozmetičkih sastojaka)⁴;
- SDA (Udruga proizvođača sapuna i deterdženata) nazivi za površinski aktivne tvari⁵;
- itd.

2. Ostali nazivi

Sve relevantne nazive i/ili javne identifikacijske oznake na svim jezicima pod kojima je tvar u prometu ili će biti na tržištu EU-a (npr. trgovačke nazive) dobro je uključiti u registraciju u okviru REACH-a. To uključuje trgovačke nazive, sinonime, kratice itd.

- <http://www.colour-index.org/>, Međunarodni indeks boje, četvrto izdanje *online*
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, službene internetske stranice Međunarodne nomenklature kozmetičkih sastojaka
- <http://www.cleaning101.com>, službene internetske stranice Udruge proizvođača sapuna i deterdženata

3. EC broj s popisa EINECS, ELINCS ili NLP (EC inventar)

EC broj, tj. broj s popisa EINECS, ELINCS ili NLP, službeni je broj tvari unutar Europske unije. EC broj može se naći u službenim tiskovinama EINECS, ELINCS i NLP, ili Europske agencije za kemikalije.

EC broj sastoji se od 7 znamenaka oblika $x_1x_2x_3-x_4x_5x_6-x_7$. Prva znamenka određena je popisom kojemu tvar pripada:

Popis	Prva znamenka EC broja
EINECS	2 ili 3
ELINCS	4
NLP	5

4. CAS naziv i CAS broj

Služba za sažetke i ostale informacije iz područja kemije (Chemical Abstracts Service - CAS), odjel Američkog kemijskog društva (ACS), dodjeljuje CAS naziv i broj svakoj kemikaliji koja uđe u zbirku podataka pohranjenih u bazi CAS-a. Nazivi i brojevi dodjeljuju se u slijedu jedinstvenim tvarima koje identificiraju znanstvenici CAS-a. Svaka tvar registrirana pri CAS-u ima naziv sukladno CAS nomenklaturi, koje ACS usvaja nakon preporuka ACS odbora za nomenklaturu (vidjeti reference u dodatku I.).

4.1. CAS naziv

CAS naziv dodjeljuje Chemical Abstracts Service i razlikuje se od naziva prema IUPAC-ovoj nomenklaturi. CAS nomenklatura temelji se na ograničenom skupu kriterija koji nisu uvijek dostatni za izvođenje naziva tvari. Stoga je općenito preporučljivo kontaktirati s CAS-om (Chemical Abstracts Service) radi pribavljanja ispravnog CAS naziva.

Ukratko, osnovna pravila nomenklature jesu sljedeća:

- „glavni“ dio tvari izabere se da služi kao glava ili roditelj;
- supstituenti su navedeni nakon glave/roditelja, na koju se upućuje obrnutim redoslijedom;
- kada ima više supstituenata, navode se abecednim redom (uključujući predmetke):

o-ksilen-3-ol je benzen, 1,2-dimetil, 3-hidroksi.

4.2. CAS broj

CAS brojeve može se dobiti od Službe za sažetke i ostale informacije iz područja kemije.

CAS broj sastoji se od najmanje 5 znamenaka, podijeljenih u tri dijela, odvojenih crticama. Drugi se dio uvijek sastoji od 2 znamenke, a treći dio od jedne:

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

Za provjeru CAS broja dostupan je kontrolni zbroj (*checksum*):

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

CAS broj mora biti točan prema toj provjeri.

5. Ostale identifikacijske šifre

Ostale međunarodno prihvaćene identifikacijske šifre mogu se dodatno navesti, npr.:

- UN broj,
- indeks boje,
- broj boje,
- itd.

6 Molekularna formula, strukturna formula i SMILES

6.1. Molekularna formula

Molekularna formula identificira svaku vrstu elementa njegovim kemijskim simbolom i identificira broj atoma svakog takvog elementa koji se nalazi u jednoj zasebnoj molekuli tvari.

Molekularne formule treba navoditi prema (tradicionalnom) Hillovom sustavu i, osim toga, sukladno sustavu CAS-a, ako se razlikuje od formule prema Hillovu sustavu.

Pri primjeni Hillove metode treba učiniti korake navedene u nastavku.

1. Identificirati elemente i navesti kemijske simbole
2. Postaviti elemente u ispravan redosljed:
 - a. Tvari koje sadrže ugljik:
za svaki element navodi se kemijski simbol, sljedećim redosljedom:
 - (1) ugljik,
 - (2) vodik,
 - (3) simboli ostalih elemenata abecednim redom:

pentan: C₅H₁₂

penten: C₅H₁₀

pentanol: C₅H₁₂O

- b. Tvari koje ne sadrže ugljik:
svaki se element navodi abecednim redom:

klorovodična kiselina: ClH

3. Kod svakog elementa koji ima više od jednog atoma, navesti broj atoma u supskriptu kemijskim simbolima
4. Informacije koje nisu povezane s glavnom strukturom dodati na kraju molekularne formule, odvojene točkom ili zarezom:

natrijev benzoat je C₇H₆O₂ , natrijeva sol

bakrov sulfat dihidrat je CuO₄S · 2H₂O

Ako se Hillova metoda ne može primijeniti na određenu tvar, molekularnu formulu treba navesti na drugačiji način, npr. kao empirijsku formulu, osnovni opis atoma i dostupan omjer atoma, ili formulu koju određuje Chemical Abstract Service (vidjeti poglavlje 4. ovih smjernica).

6.2. Strukturna formula

Strukturna je formula potrebna radi predočavanja rasporeda molekula u tvari i njihovih međusobnih odnosa. Ona treba naznačiti smještaj atoma, iona ili skupina i prirodu njihovih veza. To uključuje i izomeriju, tj. cis/trans, kiralnost, enantiomere itd.

Strukturna formula može se navesti u različitim oblicima: u obliku molekularne formule i/ili prikaza strukture.

- *Strukturna formula u obliku molekularne formule*

1. Napišite sve elemente s obzirom na skupinu i redosljed pojavljivanja:

n-pentan: CH₃CH₂CH₂CH₂CH₃

2. Svaki supstituent piše se u zagradama, neposredno iza atoma na koji se veže:

2-metilbutan: CH₃CH(CH₂)CH₂CH₃

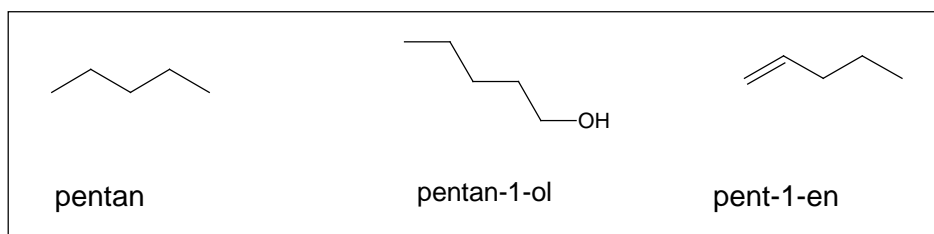
3. Dvostruke ili trostruke veze trebe prikazati između skupina elemenata na koje se odnose:

pent-1-en: CH₂=CHCH₂CH₂CH₃

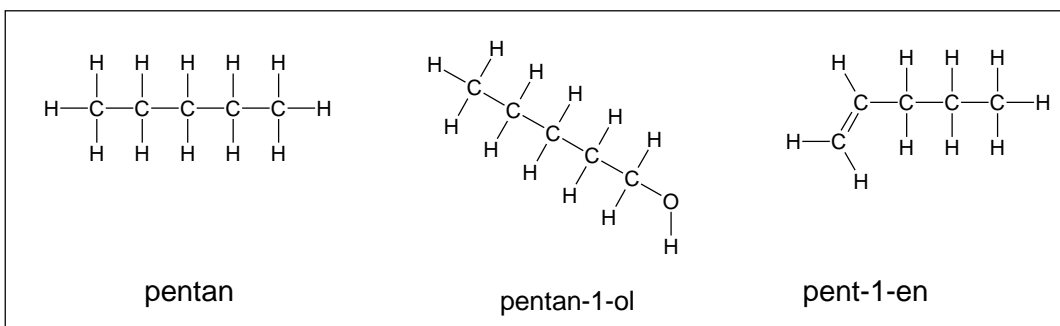
- *Strukturna formula u obliku prikaza strukture*

Elementi i veze između njih prikazuju se kao dvo- ili trodimenzionalna slika. Postoji nekoliko metoda:

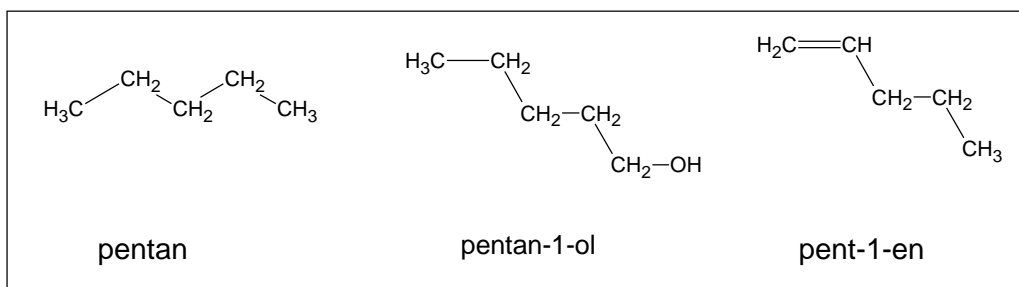
1. Ugljikovi i vodikovi atomi nisu prikazani, no prikazani su svi ostali elementi vezani za ugljikov atom, kao i vodikovi atomi vezani za druge elemente (osim za ugljik)



2. Prikazivanje svih elemenata poimenično



3. Prikazivanje ugljika i vodika kao skupina (npr. CH₃), svih elemenata bez atoma ugljika i svih vodika koji nisu vezani na ugljik.



6.3. Sustav oznaka SMILES

SMILES je akronim za Simplified Molecular Input Line Entry Specification³¹ (pojednostavljena molekulska specifikacija ulaznih linijskih podataka). To je sustav oznaka kemikalija koji se koristi za predstavljanje molekularne strukture linearnim nizom simbola. Uobičajeno je naziv molekule istoznačan njezinoj strukturi: neizravno pokazuje dvodimenzionalnu sliku molekularne strukture. Budući da se dvodimenzionalnu kemijsku strukturu može nacrtati na različite načine, postoji nekoliko ispravnih SMILES oznaka za istu molekulu. Osnova je sustava SMILES predstavljanje modela valentnih veza molekule; stoga nije prikladno opisivati molekule koje se ne može predstaviti modelom valentnih veza.

SMILES oznake sastoje se od atoma, označenih simbolima za elemente, veza, zagrada, koje pokazuju grananje, i brojeva, koji se koriste za cikličke strukture. SMILES oznaka označava molekularnu strukturu kao graf s neobveznim naznakama kiralnosti. Oznaka koja opisuje strukturu samo uz pomoć veza i atoma jest generička SMILES oznaka; oznaka koja ima i podatke o izotopima i kiralnosti jest izomerna SMILES oznaka.

Ukratko, sustav oznaka SMILES temelji se na nekoliko osnovnih pravila:

1. Atome predstavljaju njihovi atomski simboli;
2. Svaki atom osim vodika navodi se zasebno;
 - a. Elementi u "organskom podskupu" B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br i I pišu se bez uglatih zagrada i bez pridruženog H, sve dotle dok broj vodika odgovara najnižoj/im uobičajenoj/im valentnosti(ma) sukladno eksplicitnim vezama:

Element u „organskom podskupu“	„Najniža/e uobičajena/e valentnost(i)“
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. Elementi u "organskom podskupu" pišu se u uglatim zgradama čim broj vodika ne odgovara najmanjoj uobičajenoj valentnosti:

amonijev kation je NH₄⁺
 - c. Elementi koji nisu u „organskom podskupu“ pišu se u uglatim zgradama i prikazuju se svi na njih vezani vodici.
3. Alifatski atomi pišu se velikim slovima; aromatski atomi malima:

benzen je c1ccccc1, a cikloheksan je C1CCCCC1

³¹ 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.

4. Vodik se navodi samo u sljedećim situacijama:
- Nabijeni vodik, tj. proton, [H+];
 - Vodici povezani s drugim vodicima, tj. molekularni vodik, [H][H];
 - Vodici povezani s više od jednog atoma, tj. vodikovi mostovi;
 - Izotopi vodika, npr. deuterij ([2H]);
 - Ako je vodik vezan na kiralni atom.
5. U nastavku su prikazane četiri osnovne vrste veza:

Vrsta veze	Sustav oznaka SMILES
jednostruka	ne treba prikazivati
dvostruka	=
trostruka	#
aromatska	mala slova

6. Supstituenti su prikazani u okruglim zagradama, neposredno iza atoma s kojima su povezani:

2-metilbutan je CC(C)CC

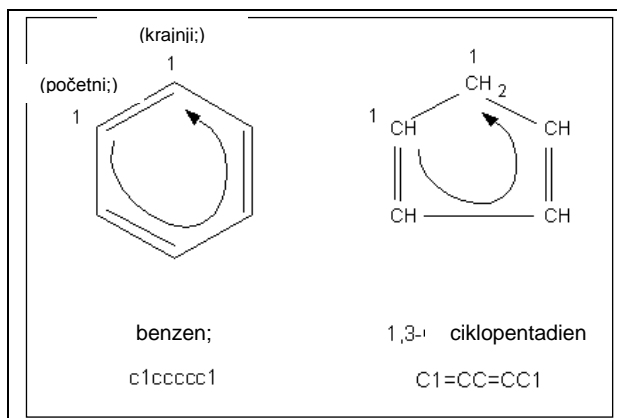
- a. Supstituenti se uvijek prikazuju neposredno iza relevantnih atoma; oni ne mogu doći iza simbola za dvostruku ili trostruku vezu:

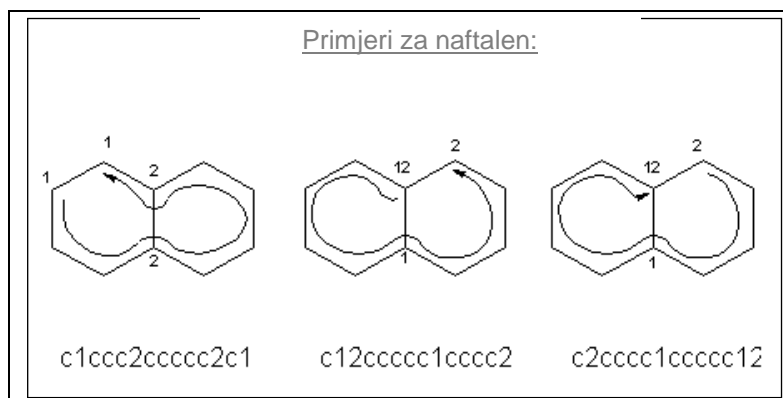
pentanoična kiselina je CCCCC(=O)O

- b. Dopušteni su supstituenti unutar drugih supstituenata:

2-(1-metiletil)butan je CC(C(C)C)CC

7. Kod prstenastih struktura, brojevi 1 do 9 koriste se za obilježavanje početnog i krajnjeg atoma prstena.
- Isti broj koristi se za obilježavanje početnog i krajnjeg atoma u svakom prstenu. Početni i krajnji atom moraju biti povezani.
 - Brojevi se unose neposredno iza atoma koji obilježavaju početni i krajnji položaj.
 - Početni ili krajnji atom može biti povezan s dva uzastopna broja.





8. Nepovezani spojevi označavaju se kao pojedinačne strukture ili ioni te se odvajaju točkom („.“). Susjedni atomi odvojeni točkom („.“) nisu izravno povezani, npr. vezani su Van der Waalsovima:

aminopropen hidroklorid je C=CC(N).HCl

9. Izomerna konfiguracija bilježi se kosim crtama „\“ i „/“. Ti simboli naznačuju relativni smjer između dviju izomernih veza. (cis = „/ \“, trans = „/ /“). Sustav SMILES koristi prostorni raspored svakog atoma, što znači da kiralnost mora biti potpuno određena:

cis-1,2-dibromoeten je Br/C=C\Br

trans-1,2-dibromoeten je Br/C=C/Br

10. Enantiomeri ili kiralnost označavaju se simbolom „@“. Simbol „@“ znači da su susjedi kiralnog atoma koji slijede navedeni u smjeru suprotnom od kretanja kazaljke na satu. Simbol „@@“ znači da su atomi navedeni u smjeru kretanja kazaljke na satu. Kiralni atom i „@“ pišu se u uglatim zagradama:

**2-kloro-2-hidroksipropanoična kiselina s
navedenom kiralnosti je C[C@](Cl)(O)C(=O)O**

11. Podaci o izotopima označavaju se pisanjem broja koji odgovara relevantnoj integralnoj atomskoj masi ispred simbola atoma. Atomska masa može se navesti samo unutar uglatih zagrada:

ugljik-13 je [13C], a kisik-18 je [18O]

Nekoliko alata (generatora SMILES oznaka) stoji na raspolaganju za određivanje SMILES oznaka (vidjeti dodatak I.).

7. Informacije o optičkoj aktivnosti

Optička aktivnost sposobnost je asimetričnih tvari da zakreću ravninu polariziranog svjetla. Takve tvari, i njihove zrcalne slike, nazivaju se enantiomerima i imaju jedno ili više kiralnih središta. Iako se razlikuju u geometrijskom rasporedu, enantiomeri imaju identična kemijska i fizikalna svojstva. Budući da svaka vrsta enantiomera ima drugačiji utjecaj na polarizirano svjetlo, optička aktivnost može poslužiti za identifikaciju enantiomera u uzorku, a time i za određivanje čistoće tvari. Kut zakretanja intrinzično je svojstvo molekule.

Enantiomeri uvijek imaju suprotna zakretanja: polariziraju svjetlo u istoj mjeri, no u suprotnim smjerovima. Optička aktivnost smjese enantiomera stoga je pokazatelj omjera između dvaju enantiomera. Smjesa enantiomera u omjeru 50:50 ima optičku aktivnost 0.

Kut zakretanja ovisi o koncentraciji, duljini kivete, temperaturi i valnoj duljini svjetla.

Optička je aktivnost, stoga, ključan parametar za određivanje identiteta asimetrične tvari; to je jedini parametar na temelju kojega se tvar razlikuje od svoje zrcalne slike. Zbog toga treba navesti podatke o optičkoj aktivnosti tvari, ako je to primjenjivo.

Norma optičke aktivnosti jest specifično zakretanje. Specifično zakretanje definira se kao opaženo zakretanje svjetla pri 5896 angstroma, s duljinom puta 1 dm, pri koncentraciji uzorka 1 g/ml. Specifično je zakretanje opaženo zakretanje podijeljeno s duljinom puta (dm), pomnoženo s koncentracijom uzorka (g/ml).

Nekoliko se metoda može primijeniti za mjerenje optičke aktivnosti. Najčešće su sljedeće:

- optičko zakretanje, gdje se mjeri zakretanje ravnine polarizirane zrake svjetla pri prolasku kroz uzorak;
- cirkularni dikroizam, gdje se mjeri koliko je uzorak apsorbirao desno ili lijevo polariziranu svjetlost.

Ako tvar zakreće ravninu polarizirane svjetlosti udesno (u smjeru kretanja kazaljke na satu) zove se desnozakrećuća i označava se znakom +. Ako zakreće ravninu polarizirane svjetlosti ulijevo (u smjeru suprotnom od kretanja kazaljke na satu) zove se lijevozakrećuća i označava se znakom -.

8. Molekularna masa ili područje molekularne mase

Molekularna masa jest masa molekule tvari izražena u jedinicama atomske mase (u) ili kao molarna masa (g/mol). Molekularna masa može se izračunati iz molekularne formule tvari: to je zbroj atomskih masa atoma koji čine molekulu. Kod molekula, kao što su neki proteini ili nedefinirane reakcijske smjese, kojima se ne može odrediti molekularna masa, može se navesti područje molekularne mase.

Nekoliko je metoda moguće primijeniti za određivanje molekularne mase tvari:

- molekularna masa plinovitih tvari može se odrediti uz pomoć Avogadrova zakona, koji kaže da se u jednakim volumenima svih plinova pri istim uvjetima temperature i tlaka nalazi jednak broj čestica molekula plina;

$$PV = nRT = NkT$$

n = množina tvari (broj molova)

R = univerzalna plinska konstanta = 8.3145 J/mol K

N = broj molekula

k = Boltzmannova konstanta = 1.38066×10^{-23} J/K = 8.617385×10^{-5} eV/K

$k = R/NA$

NA = Avogadrov broj = 6.0221×10^{23} /mol

- molekularna masa tekućina i čvrstih tvari može se odrediti iz utjecaja molekularne mase na talište, vrelište, tlak para ili osmotski tlak nekog otapala;
- spektrometrija masa, visoko precizna mjerna metoda;

- kod molekula složenih tvari visoke molekularne mase, kao što su proteini ili virusi, molekularnu masu može se odrediti, primjerice mjerenjem brzine sedimentacije u ultracentrifugi ili difraktivnom spektrofotometrijom;
- dostupno je nekoliko alata za računanje molekularne mase na osnovi strukturnog dijagrama ili molekularne formule tvari (vidjeti dodatak I.).

9. Sastav tvari

Za svaku tvar treba navesti sastav kao kombinaciju osnovnih sastojaka, dodataka i nečistoća, sukladno pravilima i kriterijima navedenima u 4. poglavlju ovih smjernica.

Svaki sastojak, dodatak ili nečistoću treba ispravno identificirati uz pomoć:

- naziva (prema nomenklaturi IUPAC ili drugom međunarodno prihvaćenom kemijskom nazivu);
- CAS broja (ako je raspoloživ);
- EC broja (ako je raspoloživ).

Za svaki sastojak, dodatak ili nečistoću treba navesti postotak (najbolje po masi ili volumenu), navodeći, kad je moguće, područje u komercijalnoj tvari.

Za sastojak, odnosno sastojke, treba navesti uobičajeni postotak čistoće s gornjim i donjim graničnim vrijednostima za tipične komercijalne šarže; za dodatke i nečistoće treba navesti uobičajene postotke čistoće ili gornje i donje granične vrijednosti. Vrijednosti bi u zbroju trebale dati 100%.

10. Podaci o spektru

Spektralni su podaci potrebni kako bi se potvrdila struktura tvari od jednog sastojka ili činjenica da reakcijska masa nije smjesa. Za pribavljanje spektra koriste se različite spektroskopske metode (apsorpcija u ultraljubičastom i infracrvenom spektru, nuklearna magnetska rezonancija ili masena spektroskopija). Nisu sve metode prikladne za sve vrste tvari. Gdje god je to moguće, upućujemo na odgovarajuće vrste spektra za različite tipove tvari (ECB, 2004; ECB, 2005).

Kod nekih od dobro poznatih metoda treba navesti sljedeće informacije na samom spektru ili u prilogima:

Ultraljubičasti/vidljivi spektar

- identitet tvari,
- otapalo i koncentraciju,
- područje,
- položaj (i vrijednosti molarnog ekstinkcijskog koeficijenta (ϵ)) glavnih vrhova,
- utjecaj kiseline,
- utjecaj lužine.

Infracrveni spektar

- identitet tvari,
- medij,
- područje,
- rezultate (obilježite glavne vrhove važne za identifikaciju, npr. interpretaciju „otiska prsta“).

Nuklearna magnetska rezonancija

- identitet tvari,
- jezgru i frekvenciju,
- otapalo,
- interne i vanjske reference, ako je prikladno,
- rezultate (označite signale važne za identifikaciju tvari i signale koji odgovaraju otapalu i nečistoćama),
- Za ^1H NMR spektre treba navesti integracijsku krivulju,
- intenzitet slabih NMR vrhova treba pojačati vertikalno i proširiti složene obrasce.

Masena spektroskopija

- identitet tvari,
- voltaža ubrzanja,
- metoda punjenja (izravno uvođenje, putem plinske kromatografije, itd.),
- način ionizacije (elektronska ionizacija, kemijska ionizacija, ionizacija desorpcijom, itd.),
- molekularni ion (M),
- fragmente značajne za identifikaciju tvari,
- M/z vrijednosti ili dodijeljene vrhove važne za identifikaciju strukture,
- složene obrasce treba proširiti.

Mogu se koristiti i druge međunarodno priznate metode ako će spektralni podaci potvrditi identifikaciju tvari, npr. unutarnju strukturu. To mogu biti rendgenska difrakcija za identifikaciju sastojaka složenih mineralnih oksida i rendgenska fluorescencija za analizu njihova kemijska sastava.

Treba zadovoljiti sljedeće opće zahtjeve za jasno razumijevanje i/ili tumačenje spektra:

- zabilježiti značajne valne duljine ili ostale prikladne podatke,
- podastrijeti dodatne informacije, npr. spektre početnih materijala,

- dati podatke o upotrijebljenom otapalu i/ili druge bitne pojedinosti, kako je prethodno navedeno kod nekih metoda,
- dati čiste kopije (ne izvornike) s ispravno obilježenima skalama,
- dati informacije o korištenim koncentracijama tvari,
- osigurati da se najintenzivniji vrhovi koji se odnose na tvar približe najvišoj oznaci na skali.

11. Tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti, plinska kromatografija

Kad je prikladno s obzirom na vrstu tvari, treba dati kromatogram kako bi se potvrdio njezin sastav. Primjerice, odgovarajući kromatogram potvrdit će postojanje nečistoća, dodataka i sastojaka reakcijske mase. Dvije najpoznatije metode za odvajanje i identifikaciju smjesa jesu plinska kromatografija (GC) ili tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti (HPLC). Te se dvije metode temelje na međudjelovanju pokretne i nepokretne faze, koje dovodi do odvajanja sastojaka u smjesi.

Kod GC/HPLC kromatograma treba navesti sljedeće informacije na samom kromatogramu ili u prilogima (ECB, 2004; ECB, 2005):

- *Tekućinska kromatografija visoke djelotvornosti (HPLC)*
 - identitet tvari,
 - podatke o koloni, kao što su promjer, pakiranje, duljina;
 - temperaturu, također i područje temperature ako se koristi,
 - sastav pokretne faze, također i područje ako se koristi,
 - područje koncentracije tvari,
 - metodu vizualizacije, npr. UV-VIS,
 - rezultate (obilježite glavne vrhove važne za identifikaciju tvari).

Plinska kromatografija (GC)

- identitet tvari,
- podatke o koloni, kao što su promjer, pakiranje, duljina,
- temperaturu, također i područje temperature ako se koristi,
- temperaturu injektiranja,
- plin nosač i tlak plina nosača,
- područje koncentracije tvari,
- metodu vizualizacije, npr. MS,
- identifikaciju vrha,

- rezultate (obilježite glavne vrhove važne za identifikaciju tvari).

12. Opis analitičkih metoda

Sukladno *Prilogu VI.* Uredbe REACH, podnositelj registracije treba opisati analitičke metode i/ili navesti odgovarajuće bibliografske bilješke za metode korištene pri identifikaciji tvari te, prema potrebi, pri identifikaciji nečistoća i dodataka. Te informacije moraju biti dostatne za reprodukciju metoda.

DODATAK III. – PROMJENE U DOKUMENTU

Sve izmjene ovoga dokumenta navedene su u tablici u nastavku, osim manjih promjena, kao što su ispravke tiskarskih pogrešaka, neznatne promjene radi jezičnih poboljšanja ili dodavanje poveznica na druge smjernice.

Poglavlje 9. (Reference) uklonjeno je, a reference su uvrštene u relevantna poglavlja kao fusnote.

I. Izmjene u verziji 1.1. u usporedbi s verzijom 1. (ispravak, studeni 2011.)

Odjeljak	Promjena
Naslov	Uputa na Uredbu CLP (Uredba (EZ) br. 1272/2008, od 16. prosinca 2008.) dodana je u naslov dokumenta i u naslove poglavlja.
Općenito	Na svim prikladnim mjestima u tekstu dodana je uputa na Uredbu CLP.
Općenito	Dodatnim tekstom razjašnjava se područje primjene smjernica. Uklonjen je suvišan tekst.
1.1.	Izraz „TGD“ zamijenjen je izrazom „smjernice“ u cijelom dokumentu.
1.2.	U cijelom dokumentu umjesto izraza „pripravak“ koristi se izraz „smjesa“ sukladno izmjenama i dopunama Uredbe REACH iz Uredbe CLP (Uredba (EZ) br. 1272/2008, od 16. prosinca 2008.).
1.2.	U cijelom dokumentu umjesto izraza „stavka“ koristi se izraz „odjeljak“.
1.3.	Uklonjen je suvišan tekst.
1.3.	U cijelom dokumentu umjesto izraza „predregistracija“ koristi se izraz „(kasna) predregistracija“.
2.1.	Uvedene su kratice AAS i CLP, a uklonjene su RIP i TGD.
2.2.	Izmijenjeni su i dopunjeni opisi legure, EC inventara i programa IUCLID. Uvedene su definicije EC broja, urudžbenog broja, smjese i prijavljene tvari. Uklonjena je definicija „pripravka“.
3.2.	Odjeljak je prerađen tako da bude jasniji.
3.3.	Odjeljak je prerađen tako da budu jasnije obveze prema Uredbi CLP.
4.2.2.1.	Način predstavljanja sastojaka promijenjen je iz postotka koncentracije u abecedni redoslijed, tako da se o relativnom sastavu ne može zaključiti iz redoslijeda na popisu.
4.2.3.1.	Umjesto izraza „rešetka“ koristi se izraz „kristal“.
4.3.1.2.3.	Odjeljak je prerađen tako da bude jasniji.
5.	Uklonjen je suvišan tekst.
5.	Uključena je uputa na Priručnik za podnošenje podataka, dio 18. – „Kako opisati identitet tvari u programu IUCLID 5 za registraciju sukladno Uredbi REACH“.
5.	Odjeljak je prerađen tako da bude jasniji.
6.1.	Umjesto izraza „predregistracija“ koristi se izraz „(kasna) predregistracija“.
6.1.	Uklonjen je suvišan tekst.
7.2.	Uklonjen je suvišan tekst radi jasnoće.
Dodatak I.	Poveznice su ažurirane, a one koje nisu funkcionirale promijenjene su.

Dodatak II.	Odjeljak 4.3. uklonjen je jer se isti sadržaj može naći na dotičnim internetskim stranicama.
-------------	--

II. Izmjene u verziji 1.2. u usporedbi s verzijom 1.1. (ispravak, ožujak 2012.)

2.2.	Definicija „tvari u postupnom uvođenju“ usklađena je s definicijom u Uredbi (EZ) br. 1907/2006 koju je uvela Uredba Vijeća (EZ) br. 1354/2007 i Ispravkom, Službeni list Europske unije br. 36. od 5. veljače 2009. godine, stranica 84. (1907/2006).
------	---

European Chemicals Agency
P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki
<http://echa.europa.eu>