

GAIRĖS

# Rekomendacijos dėl cheminių medžiagų identifikavimo ir pavadinimo joms suteikimo pagal REACH ir CLP reglamentų reikalavimus

2023 m. gruodžio mėn.  
3.0 versija



## **TEISINĖ INFORMACIJA**

Šiuo dokumentu siekiama padėti naudotojams vykdyti įsipareigojimus pagal REACH ir CLP reglamentų nuostatas. Tačiau naudotojai turėtų įsidėmėti, kad REACH ir CLP reglamentų tekstas yra vienintelis autentiškas teisinis šaltinis ir kad šiame dokumente pateikiama informacija nėra teisinė konsultacija. Atsakomybė už informacijos naudojimą tenka tik jos naudotojui. Europos cheminių medžiagų agentūra neatsako už tai, kaip šiame dokumente pateikta informacija gali būti panaudota.

### ***Rekomendacijos dėl cheminių medžiagų identifikavimo ir pavadinimo joms suteikimo pagal REACH ir CLP reglamentų reikalavimus***

**Numeris:** ECHA-21-H-27-LT  
**Kat. Numeris** ED-09-23-444-LT-N  
**ISBN:** 978-92-9468-311-3  
**DOI:** 10.2823/043040  
**Pask. data:** 2023 m. gruodžio mėn.  
**Kalba:** LT

© Europos cheminių medžiagų agentūra, 2023  
Viršelis © Europos cheminių medžiagų agentūra

Jei turite klausimų ar pastabų dėl šio dokumento, siųskite juos (pateikę dokumento nuorodą ir paskelbimo datą) naudodami informacijos užklauso formą. Prašymo formą rasite interneto puslapyje „Susisiekite su ECHA“:

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

**European Chemicals Agency**

Adresas korespondencijai: P.O. Box 400, FI-00121 Helsinki, Finland

Adresas lankytojams: Annankatu 6, 00150 Helsinkis, Suomija

## **PRATARMĖ**

Šiame dokumente aprašoma, kaip pagal REACH ir CLP reglamentų reikalavimus suteikti cheminėms medžiagoms pavadinimą ir jas identifikuoti. Šis dokumentas yra vienas iš daugybės rekomendacinių dokumentų, kuriais siekiama padėti visiems suinteresuotiesiems subjektams pasirengti vykdyti REACH ir CLP reglamentuose nustatytus įpareigojimus. Šiuose dokumentuose pateiktos išsamios rekomendacijos dėl daugybės svarbių REACH ir CLP reglamentuose nustatytų procedūrų ir dėl konkrečių mokslinių ir (arba) techninių metodų, kuriuos pagal REACH ir CLP reglamentus turi taikyti pramonės atstovai arba institucijos.

Rekomendaciniai dokumentai parengti ir aptarti Komisijos tarnyboms vykdam REACH įgyvendinimo projektus (RIP), į kuriuos jos įtraukė visus suinteresuotuosius subjektus: valstybes nares, pramonės atstovus ir nevyriausybinės organizacijas. Šiuos rekomendacinius dokumentus galima rasti Europos cheminių medžiagų agentūros svetainėje (<http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>). Kiti rekomendaciniai dokumentai, kai bus parengti arba atnaujinti, taip pat bus skelbiami šioje interneto svetainėje.

## DOKUMENTO ISTORIJA

Versija	Pastaba	Data
1 versija	Pirmoji redakcija	2007 m. birželio mėn.
1.1 versija	<p>Taisymas, atliktas siekiant padaryti šiuos pakeitimus:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- antraštėje ir skyrių pavadinimuose įterpti nuorodą į CLP reglamentą (2008 m. gruodžio 16 d. Reglamentą (EB) Nr. 1272/2008);</li> <li>- įterpti papildomos informacijos siekiant patikslinti rekomendacinio dokumento taikymo sritį. visame dokumente išbraukti nereikalingą tekstą;</li> <li>- visame tekste, kur reikia, įterpti nuorodas į CLP reglamentą;</li> <li>- visame dokumente terminą „TGD“ pakeisti terminu „rekomendacinis dokumentas“;</li> <li>- visame dokumente terminą „preparatas“ pakeisti terminu „mišinys“;</li> <li>- visame dokumente terminą „punktas“ pakeisti terminu „skirsnis“;</li> <li>- visame dokumente terminas „preliminarioji registracija“ pakeista terminu „(vėlyvoji) preliminarioji registracija“;</li> <li>- įterpti santrumpas ASS ir CLP ir pašalinti santrumpas RIP ir TGD;</li> <li>- iš dalies pakeisti lydinio, EK aprašo ir IUCLID aprašymus; pateikti sąvokų „EB numeris“, „sąrašo numeris“, „mišinys“ ir „cheminės medžiagos, apie kurią pranešta“ apibrėžtis; išbraukti sąvokos „preparatas“ apibrėžtį;</li> <li>- peržiūrėti 3.2 skirsnį siekiant padaryti turinį aiškesnį;</li> <li>- peržiūrėti 3.3 skirsnį siekiant padaryti turinį, susijusį su CLP reglamente nustatytais įsipareigojimais, aiškesnį;</li> <li>- 4.2.2.1 skirsnį pakeisti taip, kad pagal koncentracijos procentinę dalį išdėstytos sudedamosios dalys būtų pateiktos abėcėlės tvarka, kad atitinkamos medžiagos sudėties nebūtų galima nustatyti pagal vietą sąrašė;</li> <li>- 4.2.3.1 skirsnyje terminą „grotelės“ pakeisti terminu „kristalas“;</li> </ul>	2011 m. lapkričio mėn. (tik anglų kalba)

	<ul style="list-style-type: none"> <li>- peržiūrėti 4.3.1.2.3 skirsnį siekiant padaryti turinį aiškesnį;</li> <li>- į 5 skirsnį įtraukti nuorodą į Duomenų teikimo vadovo 18 dalį „Kaip informaciją apie cheminės medžiagos tapatybę pateikti IUCLID 5, norint ją įregistruoti pagal REACH reglamentą“;</li> <li>- peržiūrėti 5 skirsnį siekiant padaryti turinį aiškesnį;</li> <li>- 6 skirsnyje preliminariosios registracijos aprašymą pakeisti (vėlyvosios) preliminariosios registracijos aprašymu;</li> <li>- atnaujinti neveikiančius saitus 1 priedėlyje;</li> <li>- pašalinti 2 priedėlio 4.3 skirsnį, nes jo turinys pateikiamas atitinkamoje svetainėje.</li> </ul>	
1.2 versija	<p>Taisymas          „Cheminės medžiagos, kuriai taikomas pereinamasis laikotarpis“ apibrėžtis suderinta su Reglamente (EB) Nr. 1907/2006 pateikta apibrėžtimi ir Reglamente (EB) Nr. 1354/2007 bei klaidų ištaisyme (OL L 36, 2009 2 5, p. 84) (1907/2006) pateikta apibrėžtimi.          Pastaba:          1.1 versijos ir 1.2 versijos pakeitimai kitomis kalbomis nei anglų konsoliduoti į vieną 1.2 vertimo versiją.</p>	2012 m. kovo mėn.
1.3 versija	<p>Taisymas          7.6 skyriuje įterptos dvi trūkstamos struktūrinės formulės</p>	2014 m. vasario mėn.
1.4 versija	<p>Taisymas, atliktas siekiant padaryti šiuos pakeitimus:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- performatuoti dokumentą, kad jis atitiktų dabartinį institucijos įvaizdį;</li> <li>- išbraukti 8 skyrių, kuriame pateikiamos techninės instrukcijos pagrįstos pasenusia IUCLID versija;</li> <li>- 7.5 skirsnyje ištaisyti kristobalito ir kvarco aprašymą ir išbraukti nuorodą į Direktyvą 2000/30/EB;</li> <li>- išbraukti nuorodas į 8 skyrių ir duomenų teikimo vadovus ir įterpti nuorodą į naujus ECHA vadovus;</li> <li>- išbraukti III priedą ir perkelti informaciją dokumento istorijos lentelę;</li> <li>- pataisyti neveikiančius saitus su svetainėmis ir pataisyti redakcines klaidas.</li> </ul>	2016 m. birželio mėn.

2.0 versija	<p>Iš dalies atnaujinta informacija:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Pridėtas naujas III priedėlis, kuriame aprašyta cheminės medžiagos tapatybės profilio sąvoka.</li><li>- 1 skyrius papildytas nauju tekstu su įvadine informacija apie naują III priedėlį.</li><li>- Ištaisytos korektūros ir redakcinės klaidos.</li></ul>	2016 m. gruodžio mėn.
Versija 2.1	<p>Įterptas ištaisymas, kuriuo siekiama ištaisyti tekste padarytas spausdinimo klaidas ir III priedėlio 2 paveiksle pateiktų pavyzdžių sudėties informacijos klaidas.</p>	2017 m. gegužės mėn.
3.0 versija	<p>Atnaujinta informacija:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Turinys suderintas su 2022 m. kovo 24 d. Komisijos reglamentu (ES) 2022/477 padarytais pakeitimais.</li><li>- Išbrauktos nuorodos į (vėlyvą) išankstinę registraciją.</li><li>- Ištaisytos korektūros ir redakcinės klaidos.</li><li>- Įterptos nuorodos į ECHA pagalbos puslapius ir klausimų bei atsakymų skiltį.</li><li>- Išbraukta III priedėlio 5 dalis dėl perėjimo nuo IUCLID 5 prie IUCLID 6.</li></ul>	2023 m. gruodžio mėn.

## Turinys

<b>1. BENDROJI INFORMACIJA .....</b>	<b>9</b>
1.1. Tikslai .....	9
1.2. Taikymo sritis.....	10
1.3. Rekomendacinio dokumento struktūra.....	11
<b>2. APIBRĖŽTYS IR TRUMPINIAI.....</b>	<b>12</b>
2.1. Santrumpos .....	12
2.2. Apibrėžtys .....	14
<b>3. REACH IR CLP REGLAMENTŲ CHEMINĖS MEDŽIAGOS IDENTIFIKAVIMO REIKALAVIMAI .....</b>	<b>17</b>
3.1. Cheminės medžiagos apibrėžtis .....	17
3.2. Skaitiniai identifikatoriai: .....	17
3.2.1. EK aprašas.....	17
3.2.2. Sąrašo numeriai.....	19
3.3. REACH ir CLP reglamentų Cheminės medžiagos identifikavimo reikalavimai.....	19
<b>4. REKOMENDACIJOS DĖL CHEMINIŲ MEDŽIAGŲ IDENTIFIKAVIMO IR PAVADINIMO JOMS SUTEIKIMO PAGAL REACH IR LP REGLAMENTŲ REIKALAVIMUS.....</b>	<b>22</b>
4.1. Įvadas.....	22
4.2. Aiškiai apibrėžtos sudėties cheminės medžiagos .....	28
4.2.1. Vieno komponento cheminės medžiagos .....	29
4.2.2. Cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis .....	32
4.2.3. Apibrėžtos cheminės sudėties cheminė medžiaga ir kiti pagrindiniai identifikatoriai.....	35
4.3. UVCB medžiagos.....	37
4.3.1. Bendrosios rekomendacijos dėl UVCB medžiagų.....	37
4.3.2. Specifiniai UVCB medžiagų tipai .....	46
<b>5. CHEMINIŲ MEDŽIAGŲ TAPATUMO PATIKRINIMO KRITERIJAI .....</b>	<b>55</b>
<b>6. CHEMINĖS MEDŽIAGOS TAPATYBĖS UŽKLAUSA.....</b>	<b>62</b>
<b>7. PAVYZDŽIAI .....</b>	<b>63</b>
7.1. Dietilo peroksidokarbonatas .....	63
7.2. ZOLIMIDINAS.....	64
7.3. Izomerų mišinys .....	64
7.4. AH kvapioji medžiaga .....	68
7.5. Mineralai.....	74
7.6. <i>Lavandin grosso</i> eterinis aliejus .....	77
7.7. Chrizantemų aliejus ir iš jo išgauti izomerai.....	83

7.8. Izopropilfenolio fosfatas.....	86
7.9. Ketvirtiniai amonio junginiai.....	88
7.10. Naftos cheminės medžiagos.....	92
7.10.1. Benzino maišymo srautas (C4-C12).....	92
7.10.2. (Naftos) gazoliai.....	93
7.11. Fermentai.....	94
7.11.1. Subtilizinas.....	94
7.11.2. $\alpha$ -amilazė.....	96
<b>I PRIEDĖLIS. PAGALBINĖ MEDŽIAGA.....</b>	<b>98</b>
<b>II PRIEDĖLIS. TECHNINĖS REKOMENDACIJOS DĖL CHEMINĖS MEDŽIAGOS IDENTIFIKAVIMO PARAMETRŲ.....</b>	<b>102</b>
<b>III PRIEDĖLIS. CHEMINIŲ MEDŽIAGŲ IDENTIFIKAVIMAS IR BENDRAS DUOMENŲ PATEIKIMAS.....</b>	<b>118</b>

## Lentelių sąrašas

Lentelė 1: Santrumpos.....	12
Lentelė 2: Apibrėžtys.....	14
Lentelė 3: Cheminės medžiagos identifikavimo parametrai, pateikiami REACH reglamento VI priedo 2 skirsnyje. ....	20
4 lentelė. Pagrindinių identifikatorių grupavimas pavyzdžiuose, kurie atspindi įvairius aiškiai apibrėžtų panašių medžiagų tipus.....	23
5 lentelė. Pagrindinių identifikatorių grupavimas pavyzdžiuose, kurie atspindi įvairius UVCB cheminių medžiagų tipus.....	24

## Paveikslų sąrašas

1 paveikslas. Nuorodos į dokumentų skyrius ir priedėlius, kuriuose pateikiamos tam tikros rekomendacijos dėl įvairiausio tipo cheminių medžiagų.....	27
2 pav. (kitas puslapis): Schematinė žingsnių, kuriuos potencialūs registruotojai atlieka nuo savo registracijos prievolių nustatymo (1) iki savo vienos cheminės medžiagos tapatybės SIP apibrėžimo (4) ir galiausiai registracijos dokumentacijos pateikimo, kad būtų įvykdytos jų cheminių medžiagų registracijos prievolės (8), apžvalga. ....	124
3 paveikslas. Iliustracinė SIP apibrėžimo schema (2 paveikslo 4 veiksmas) UVCB tipo cheminei medžiagai, identifikuotai pagal šaltinio ir proceso deskriptorius iš atskiro juridinio subjekto šaltinio ir proceso aprašymų. ....	127



## **1. Bendroji informacija**

REACH reglamentu (Reglamentas (EB) Nr. 1907/2006) nustatoma cheminių medžiagų registracijos, įvertinimo, autorizacijos ir apribojimų sistema ir įsteigiama Europos cheminių medžiagų agentūra (ECHA), kuri taikys šį reglamentą<sup>1</sup>.

CLP reglamentas (Reglamentas (EB) Nr. 1272/2008) yra naujasis Europos reglamentas dėl cheminių medžiagų ir mišinių klasifikavimo, ženklinimo ir pakavimo<sup>2</sup>. Šiuo teisės aktu visoje ES nustatoma naujoji cheminių medžiagų klasifikavimo ir ženklinimo sistema pagal Jungtinių Tautų visuotinai suderintą sistemą (GHS).

REACH reglamente daugiausia dėmesio skiriama cheminėms medžiagoms. Siekiant užtikrinti, kad REACH reglamente nurodytos procedūros būtų vykdomos tinkamai, būtina teisingai ir patikimai identifikuoti chemines medžiagas. Šis rekomendacinis dokumentas dėl cheminių medžiagų identifikavimo ir pavadinimo joms suteikimo yra skirtas padėti pramonės atstovams, valstybėms narėms ir Europos cheminių medžiagų agentūrai.

Šis rekomendacinis dokumentas grindžiamas patirtimi, kaip cheminės medžiagos identifikuojamos pagal ankstesnius chemines medžiagas reglamentuojančius teisės aktus (pagal Direktyvą 67/548/EEB ir Direktyvą 98/8/EB). Tačiau šių rekomendacijų tikslinimo pagrindas yra dabartinė praktika, susijusi su cheminių medžiagų identifikavimo pagal REACH reglamentą ir pagal CLP reglamentą dėl cheminių medžiagų ir mišinių klasifikavimo, ženklinimo ir pakavimo. Be to, tam tikrais atvejais taip pat atsižvelgiama į kitas, ne Europos Sąjungos cheminių medžiagų schemas.

Taip pat įtrauktos skirtingų tipų cheminėms medžiagoms taikomos rekomendacijos.

Šis rekomendacinis dokumentas turi būti taikomas cheminėms medžiagoms, reglamentuojamoms REACH ir CLP reglamentuose, identifikuoti ir pavadinti.

### **1.1. Tikslai**

Rekomendacinio dokumento tikslas – pateikti gamintojams ir importuotojams rekomendacijas dėl cheminių medžiagų įregistravimo ir pranešimo apie jas pagal REACH ir CLP reglamentų reikalavimus. Rekomendaciniame dokumente, kuris yra svarbus pagrindinis cheminės medžiagos identifikavimo elementas, pateikiamos rekomendacijos dėl pavadinimo cheminei medžiagai suteikimo. Taip pat paaiškinama, ar cheminės medžiagos gali būti laikomos tomis pačiomis pagal REACH ir CLP reglamentus ir kaip galima įgyvendinti principą „viena cheminė medžiaga – viena registracija“ (OSOR) apibrėžiant cheminės medžiagos tapatybės profilį (SIP). Apibrėžti vienodas chemines medžiagas, kurioms gali būti taikomas tas pats SIP, svarbu atsakant į užklausas, dalijantis duomenimis, bendrai teikiant duomenis, teikiant pranešimus į Klasifikavimo ir ženklinimo inventorių ir derinant klasifikavimą ir ženklinimą

Pageidautina, kad chemines medžiagas identifikuotų pramonės ekspertai. Pramonės atstovams, turintiems mažai cheminių medžiagų identifikavimo patirties, šio rekomendacinio dokumento priedėlyje pateikiamos papildomos rekomendacijos dėl cheminių medžiagų

---

<sup>1</sup> 2006 m. gruodžio 18 d. Europos Parlamento ir Tarybos reglamentas (EB) Nr. 1907/2006 dėl cheminių medžiagų registracijos, įvertinimo, autorizacijos ir apribojimų (REACH), įsteigiantis Europos cheminių medžiagų agentūrą, iš dalies keičiantis Direktyvą 1999/45/EB bei panaikinantį Tarybos reglamentą (EEB) Nr. 793/93, Komisijos reglamentą (EB) Nr. 1488/94, Tarybos direktyvą 76/769/EEB ir Komisijos direktyvas 91/155/EEB, 93/67/EEB, 93/105/EB bei 2000/21/EB (REACH).

2008 m. gruodžio 16 d. Europos Parlamento ir Tarybos reglamentas (EB) Nr. 1272/2008 dėl cheminių medžiagų ir mišinių klasifikavimo, ženklinimo ir pakavimo, iš dalies keičiantis ir panaikinantį direktyvas 67/548/EEB bei 1999/45/EB ir iš dalies keičiantis Reglamentą (EB) Nr. 1907/2006 (tekstas svarbus EEE) (CLP).

identifikavimo parametrų.

Be to, rekomendaciniame dokumente nurodomos svarbios pagalbinės priemonės cheminei medžiagai apibūdinti ir jos cheminei tapatybei patikrinti.

Išsamesni nurodymai, kaip IUCLID pateikti informaciją apie cheminės medžiagos tapatybę vykstant įvairiems REACH ir CLP reglamentuose numatytiems procesams, pateikiami ECHA vadovuose, kuriuose galima rasti adresu <http://echa.europa.eu/manuals>.

## **1.2. Taikymo sritis**

Pagal REACH reglamento 1 straipsnį reglamentuojama atskirų cheminių medžiagų ir cheminių medžiagų, esančių mišinių bei gaminių sudėtyje, gamyba, importas ir teikimas rinkai. REACH reglamentas netaikomas atskirai mišiniams ir gaminiams.

Pagal REACH reglamento 10 straipsnį, norint įregistruoti cheminę medžiagą, būtina naudoti REACH reglamento VI priedo 2 skirsnyje (žr. Lentelė 3) nurodytus cheminės medžiagos tapatybės registravimo parametrus. Kai pagal CLP reglamento 40 straipsnio 1 dalį norima pranešti apie cheminės medžiagos pavojingumą, panašūs parametrai (nurodyti REACH reglamento VI priedo 2.1–2.3.4 skirsniuose) yra privalomi registruojant cheminės medžiagos tapatybę. Šiame rekomendaciniame dokumente daugiausia dėmesio skiriama tam, kad cheminės medžiagos būtų tinkamai identifiкуotos atsižvelgiant į REACH ir CLP reglamentuose pateikiamą cheminės medžiagos apibrėžtį. Jame taip pat pateikiamos rekomendacijos dėl cheminių medžiagų identifikavimo parametrų, nurodytų REACH reglamento VI priedo 2 skirsnyje. Apie cheminės medžiagos tapatybę turi būti pateikiama tokia informacija, kurios pakaktų kiekvienai cheminei medžiagai identifiкуoti. Vienas arba keli cheminės medžiagos identifiкуavimo parametrai gali būti nenurodomi, jei techniškai neįmanoma ar moksliniu požiūriu atrodo nebūtina pateikti šią informaciją. Tokio nepateikimo priežastis turi būti aiškiai nurodoma ir mokslškai pagrįdžiama.

Cheminės medžiagos identifiкуavimo metodas priklauso nuo jos tipo. Jei šio rekomendacinio dokumento naudotojas nori sužinoti apie skirtingų tipų chemines medžiagas, jis nukreipiamas į atitinkamus skyrius.

Svarbios cheminių medžiagų identifiкуavimo priemonės yra EK aprašai, naudojami pagal Direktyvą 67/548/EEB (EINECS, ELINCS ir NLP sąrašai). Rekomendacijos dėl šių aprašų reikšmės pagal REACH reglamentą pateikiamos 3.2 skyriuje.

Cheminės medžiagos, kurioms taikomi REACH ir CLP reglamentai (ir dėl to – šis rekomendacinis dokumentas), paprastai yra cheminių reakcijų, kurios yra cheminių medžiagų gamybos dalis, rezultatas. Tokios cheminės medžiagos gali būti sudarytos iš daugybės skirtingų sudedamųjų dalių. Cheminės medžiagos, apibūdintos REACH ir CLP reglamentuose, taip pat apima chemines medžiagas, gautas cheminiu būdu arba išskiriant iš natūraliai susidarančių medžiagų, galinčių apimti atskirą elementą arba molekulę (pvz., gryni metalai arba tam tikri mineralai) arba keletą sudedamųjų dalių (pvz., eteriniai aliejai, metalo šteinas, kuris susidaro lydantis metalų rūdos sulfidams). Tačiau cheminės medžiagos, reglamentuojamos kituose Bendrijos teisės aktuose, priskiriamos daugumai cheminių medžiagų, kurios neregistruojamos pagal REACH reglamento reikalavimus (žr. Cheminės medžiagos, išvardytos REACH reglamento IV priede, ir cheminės medžiagos, atitinkančios tam tikrus kriterijus, nurodytus REACH reglamento V priede, taip pat neregistruojamos. Reikia pabrėžti, jog nors cheminės medžiagos gali būti neregistruojamos, tai nereiškia, kad joms netaikomi kiti REACH reglamento straipsniai arba CLP reglamento reikalavimai.

REACH reglamente reikalaujama, kad tos pačios cheminės medžiagos registruotojai susisiektų ir susitartų dėl bendro tam tikros informacijos apie cheminę medžiagą pateikimo (OSOR

principas)<sup>3</sup>. Įgyvendinant tokį principą reikia aiškiai nurodyti, kaip registruotojas apibrėžė savo SIP taikymo sritį.

### **1.3. Rekomendacinio dokumento struktūra**

Pagrindinė informacija – šio rekomendacinio dokumento tikslai ir taikymo sritis – pateikiama 1 skyriuje, vartojami trumpiniai ir apibrėžtys – 2 skyriuje. Atitinkama informacija apie cheminių medžiagų identifikavimo sistemą, nurodytą REACH reglamente, pvz., cheminės medžiagos sąvoka ir teisiniuose dokumentuose pateikiami informacijai keliami reikalavimai, pateikiama 3 skyriuje.

Cheminių medžiagų identifikavimo ir pavadinimo joms suteikimo praktinės rekomendacijos pateikiamos 4 skyriuje.

- 4.1 skyriuje aprašomi sąvokų „aiškiai apibrėžta cheminė medžiaga“ ir „neaiškiai apibrėžta cheminė medžiaga“ skirtumai. Šioms dviem pagrindinėms grupėms gali būti priskiriamos skirtingo tipo cheminės medžiagos ir pateikiamos specialios kiekvienos atskiros cheminės medžiagos identifikavimo rekomendacijos. Pagrindinėje diagramoje vartotojui pateikiamos nuorodos į atitinkamą skyrių, kuris apima rekomendacijas dėl tam tikro tipo cheminių medžiagų identifikavimo.
- Tolesniuose skyriuose kaip taisyklių rinkinys su paaiškinimais ir pavyzdžiais pateikiamos kiekvieno cheminės medžiagos tipo specialiosios rekomendacijos.

5 skyriuje pateikiamos rekomendacijos, kaip patikrinti, ar cheminės medžiagos yra identiškos, ar ne. Rekomendacijos dėl cheminės medžiagos tapatybės užklausos pateikimo metu pateikiamos 6 skyriuje.

Be to, 7 skyriuje, naudojant 4 skyriaus praktines rekomendacijas, paruošti keli detalūs pavyzdžiai.

I priedėlyje nurodomos svarbios pagalbinės priemonės cheminei medžiagai apibūdinti ir jos cheminei tapatybei patikrinti.

II priedėlyje pateikiama daugiau aiškinamosios informacijos apie atskirų cheminių medžiagų identifikavimo parametrus, naudojamus cheminių medžiagų identifikavimo procese, pavyzdžiui, apie nomenklatūros taisykles, EB numerius ir CAS numerius, molekulinių ir struktūrinių formulų žymėjimo sistemą ir analizės metodus.

III priedėlyje pateikiama informacija apie SIP sąvoką, jo svarbą vykdant bendro informacijos teikimo prievolę ir kaip jis turėtų būti apibrėžiamas ir pranešamas.

---

<sup>3</sup> Išsamiai informacija apie dalijimąsi duomenimis apie tą pačią cheminę medžiagą bendrai teikiant informaciją pateikta *Dalijimosi duomenimis rekomendacijose*.

## 2. Apibrėžtys ir trumpiniai

### 2.1. Santrumpos

Šiame dokumente vartojami pagrindiniai trumpiniai pateikti ir paaiškinti Lentelė 1.

**Lentelė 1: Santrumpos**

Trumpinys	Reikšmė
ASS	Atominės absorbcijos spektrometrija
AISE	Tarptautinė muilo, ploviklių ir buitinės chemijos produktų gamintojų asociacija
CAS	Cheminių medžiagų santrumpų tarnyba
CLP	Reglamentas (EB) Nr. 1272/2008 dėl cheminių medžiagų ir mišinių klasifikavimo, ženklinimo ir pakavimo
EB	Europos Komisija
EINECS	Europos esamų komercinių cheminių medžiagų sąrašas
ELINCS	Europos registruotųjų cheminių medžiagų sąrašas
ENCS	Esamos ir naujos cheminės medžiagos (Japonija)
ESIS	Europos cheminių medžiagų informacinė sistema
ES	Europos Sąjunga
GC	Dujų chromatografija
GHS	Visuotinai suderinta sistema
HPLC	Didelio slėgio skysčių chromatografija
InChI	IUPAC tarptautinis cheminių medžiagų identifikatorius
INCI	Tarptautinė kosmetikos ingredientų nomenklatūra
IR	Infraraudonieji spinduliai
ISO	Tarptautinė standartizacijos organizacija
IUCLID	Tarptautinės bendros informacijos apie chemines medžiagas duomenų bazė.
IUBMB	Tarptautinė biochemijos ir molekulinės biologijos sąjunga
IUPAC	Tarptautinė teorinės ir taikomosios chemijos sąjunga
MS	Masių spektrometrija
NLP	Polimeru nebelaikoma medžiaga
BMR	Branduolinis magnetinis rezonansas
ppm	Milijoninės dalys

REACH	Cheminių medžiagų registracija, įvertinimas, autorizacija ir apribojimai
SIEF	Informacijos apie cheminę medžiagą apsikeitimo forumas
SIP	Medžiagos tapatybės profilis
SMILES	Supaprastinta molekulių pateikimo linijine forma įvedimo sistema
TSCA	Toksinių cheminių medžiagų kontrolės įstatymas (JAV)
UVCB	Nežinomos ar kintamos sudėties medžiagos, sudedamieji reakcijų produktai ar biologinės medžiagos
UV/VIS	Ultravioletiniai / matomi šviesos spektro spinduliai
w/w	masė
XRD	Rentgeno spindulių difrakcija
XRF	Rentgeno spindulių fluorescencinė spektrometrija

## 2.2. Apibrėžtys

Pagrindinės apibrėžtys, vartojamos šiame rekomendaciniame dokumente, pateiktos ir apibūdintos Lentelė 2.

Kuriant šias apibrėžtis atsižvelgta į REACH ir CLP reglamentuose vartojamas apibrėžtis. Todėl kai kurie terminai apibrėžti kitaip, nei Direktyvoje 67/548/EEB vartojami terminai.

**Lentelė 2: Apibrėžtys**

Apibrėžtis	Apibūdinimas
Cheminei medžiagai su keliomis sudedamosiomis dalimis	Paprastai tai yra cheminė medžiaga, kurią apibrėžia jos sudėtis, kurios nuo $\geq 10\%$ iki $< 80\%$ masės (w/w) sudaro daugiau kaip viena pagrindinė sudedamoji dalis.
Cheminei medžiagai*	Natūralus arba gamybos proceso metu gautas cheminis elementas ir cheminių elementų junginys, įskaitant priedus, reikalingus jo stabilumui išlaikyti, ir priemaišas, atsirandančias gaminant, išskyrus tirpiklius, kurie gali būti atskirti nedarant poveikio medžiagos stabilumui ar nepakeičiant jos sudėties.
Cheminei medžiagai, apie kurią pranešta	Cheminei medžiagai, apie kurią buvo pateiktas pranešimas ir kuri gali būti tiekiamą rinkai pagal Direktyvą 67/548/EEB.
Chemiškai nemodifikuota medžiaga*	Cheminei medžiagai, kurios cheminė sandara išlieka nepakitusi net ir cheminiame procese ar ją chemiškai apdorojus arba fiziškai transformavus mineralogijos proceso metu, pavyzdžiui, norint pašalinti priemaišas.
Chromatografinis „pirštų atspaudas“	Cheminės medžiagos sudėties pateikimas pagal būdingą sudedamųjų dalių pasiskirstymą analitinėje chromatogramoje.
EB numeris	EB numeris – tai cheminių medžiagų skaitmeninis šaltinis EK apraše.
EK aprašas	Nors REACH reglamente nėra teisiškai apibrėžtas, EK aprašas yra trijų pagal ankstesnę ES chemikalų norminę bazę sudarytų savarankiškų ir teisiškai patvirtintų Europos cheminių medžiagų sąrašų derinys: EINECS, ELINCS ir NLP (polimerais nebelaikomų medžiagų). EK apraše įrašą sudaro cheminės medžiagos pavadinimas ir numeris (EB pavadinimas ir EB numeris), CAS numeris, molekulinė formulė (jei yra) ir apibūdinimas (tam tikrų cheminių medžiagų tipų).
Gaminys*	Daiktas, kuris gaminamas įgijo konkrečią formą ar struktūrą, labiau nulemiančią naudojimo paskirtį nei jo cheminė sudėtis.

Gamtoje randama cheminė medžiaga*	Gamtoje randama natūrali cheminė medžiaga, neperdirbta arba perdirbta tik rankiniu, mechaniniu arba gravitaciniu būdu, tirpinant vandenyje, flotacijos būdu, išgaunant vandeniu, distiliuojant vandens garais arba kaitinant vien tik tam, kad būtų pašalintas vanduo, arba kuri išgaunama iš oro bet koku būdu.
Gamyba*	Cheminių medžiagų gaminimas ir natūralių cheminių medžiagų išgavimas.
IUCLID	Tarptautinės bendros informacijos apie chemines medžiagas duomenų bazė. IUCLID – tai duomenų bazė ir valdymo sistema duomenims apie chemines medžiagas administruoti.
Komponentas	Cheminė medžiaga, kurios specialiai įdedama, kad susidarytų mišinys.
Lydinys*	Metalinė, mikroskopinėje skalėje vienalytė medžiaga, susidedanti iš dviejų ar daugiau elementų, susijungusių taip, kad jų nebūtų galima lengvai atskirti mechaninėmis priemonėmis.  Lydiniai laikomi tam tikrais mišiniais.
Mišinys*	Dviejų ar daugiau cheminių medžiagų mišinys ar tirpalas.
Monomeras*	Konkrečiam procesui naudojama cheminė medžiaga, kuri atitinkamos reakcijos, per kurią susidaro polimerai, sąlygomis gali sudaryti kovalentinius ryšius su papildomomis panašiomis ar nepanašiomis molekulėmis.
Pagrindinė sudedamoji dalis	Cheminės medžiagos sudedamoji dalis, kuri nėra priedas ar priemaiša, sudaranti didelę dalį tos medžiagos, todėl naudojama cheminės medžiagos pavadinime ir detalai identifikuojant cheminę medžiagą.
Polimeras*	Junginys, susidedantis iš pasikartojančių vienodų ar skirtingų monomerų grupių (monomerinių grandžių) molekulių. Tokios molekulės turi būti pasiskirsčiusios tam tikrame molekulinio svorio diapazone, kuriame jų molekulinio svorio skirtumai iš esmės priklauso nuo monomerinių grandžių skaičiaus. Polimerą sudaro:  (a) paprasta svorinė molekulių dauguma, turinti bent tris monomerines grandis, kovalentiškai sujungtas su bent viena kito monomero grandimi ar kita reaguojančia medžiaga; (b) mažesnė nei paprasta svorinė tos pačios molekulinės masės molekulių dauguma.  Šioje apibrėžtyje „monomerinė grandis“ – monomero reagavimo polimeruose forma.

Priedas	Tai junginys, specialiai dedamas gamybos proceso metu cheminei medžiagai stabilizuoti <sup>4</sup> .
Priemaiša	Nenumatyta sudedamoji dalis, esanti pagamintoje cheminėje medžiagoje. Ji gali atsirasti iš pradinių medžiagų arba susidaryti po šalutinių ar nebaigtų reakcijų gamybos proceso metu. Nors jos yra galutinėje cheminėje medžiagoje, specialiai jos nebuvo įdėta.
Sąrašo numeris	Agentūros suteiktas numeris. Pagal REACH-IT automatiškai priskirtas numeris. Taikomas visiems gaunamiems galiojantiems dokumentams, kuriuos reikia pateikti (pvz., preliminariosios registracijos, PPORD, užklausų, registracijos, klasifikacijos ir ženklinimo dokumentams).
Sudedamoji dalis	Bet kuri cheminės medžiagos cheminių junginių rūšis, kurią gali apibūdinti jos unikali cheminė tapatybė.
Tarpinė cheminė medžiaga*	<p>Cheminė medžiaga, pagaminta ir naudota cheminiam technologiniam procesui, kurį vykdant ji paverčiama kita chemine medžiaga (toliau vadinama <i>sinteze</i>):</p> <p>(a) <u>neišsiskirianti tarpinė cheminė medžiaga</u> – tarpinė medžiaga, kuri sintezės metu nėra tyčia pašalinta iš įrenginio (išskyrus mėginių ėmimą), kuriame vyksta sintezė. Prie tokių įrenginių priskiriama: reakcijos indai, jų papildoma įranga ir bet kokie įrenginiai, per kuriuos pereina cheminė (-ės) medžiaga (-os) nenutrūkstamo proceso arba periodinės gamybos metu, taip pat vamzdynai, skirti cheminėms medžiagoms transportuoti iš vieno indo į kitą ruošiantis kitam reakcijos etapui, tačiau nepriskiriamos talpyklos ar kitokie indai, kuriuose saugoma pagaminta (-os) cheminė (-ės) medžiaga (-os);</p> <p>(b) <u>gamybos vietoje išskiriama tarpinė cheminė medžiaga</u> – neišsiskiriančios tarpinės cheminės medžiagos kriterijų neatitinkanti tarpinė medžiaga, kurios gamyba ir kitos (-ų) cheminės (-ių) medžiagos (-ų) sintezė iš jos vyksta toje pačioje gamybos vietoje, kurią valdo vienas ar keli juridiniai asmenys;</p> <p>(c) <u>gabenama išskiriama tarpinė cheminė medžiaga</u> – tarpinė medžiaga, neatitinkanti neišsiskiriančios tarpinės medžiagos kriterijų, gabenama arba tiekiamą iš vienos gamybos vietos į kitą.</p>
Vieno komponento cheminė medžiaga	Paprastai tai yra cheminė medžiaga, kurią apibrėžia jos sudėtis, kurios bent 80 % masės (w/w) sudaro viena pagrindinė sudedamoji dalis.

\* Sąvokų apibrėžtys pagal REACH reglamento 3 straipsnį.

Pagal kitus teisės aktus priedas gali turėti kitų funkcijų, pvz., būti pH reguliatorius ar dažomoji medžiaga. Tačiau REACH reglamente ir šiame rekomendaciniame dokumente priedas – tai stabilizatorius.



## 3. REACH ir CLP reglamentų Cheminės medžiagos identifikavimo reikalavimai

REACH ir CLP reglamentuose pateikiama cheminės medžiagos apibrėžtis ir REACH reglamente išvardyti cheminių medžiagų identifikavimo parametrai (VI priedas 2 skirsnis) turi būti įtraukiami ir naudojami cheminei medžiagai identifikuoti registracijos tikslais.

Šiame skyriuje aprašoma REACH ir CLP reglamentuose pateikiama cheminės medžiagos apibrėžtis (3.1 skyrius), pateikiamos bendrosios rekomendacijos, kaip naudoti ankstesnės ES cheminių medžiagų norminės bazės EK aprašą (3.2 skyrius), ir pateikiama daugiau aiškinamosios informacijos apie cheminių medžiagų identifikavimo reikalavimus, nurodytus REACH reglamente (3.3 skyrius).

### 3.1. Cheminės medžiagos apibrėžtis

REACH (3 straipsnio 1 dalyje) ir CLP (2 straipsnio 7 dalyje) reglamentuose pateikiama cheminės medžiagos apibrėžtis:

Cheminė medžiaga – natūralus arba gamybos proceso metu gautas cheminis elementas ir cheminių elementų junginys, įskaitant priedus, reikalingus jo stabilumui išlaikyti, ir priemaišas, atsirandančias gaminant, išskyrus tirpiklius, kurie gali būti atskirti nedarant poveikio cheminės medžiagos stabilumui ar nepakeičiant jos sudėties.

REACH ir CLP reglamentuose pateikiama cheminės medžiagos apibrėžtis atitinka Pavojingų medžiagų direktyvos (Direktyva 92/32/EEB, iš dalies pakeičianti Direktyvą 67/548/EEB), 7-ame pakeitime pateikiamą cheminės medžiagos apibrėžtį. Abiem atvejais apibrėžtis platesnė nei gryno cheminio junginio, kuris apibrėžiamas tik kaip atskira molekulinė struktūra. Cheminės medžiagos apibrėžtis apima įvairias sudedamąsias dalis, pavyzdžiui, priemaišas.

### 3.2. Skaitiniai identifikatoriai:

#### 3.2.1. EK aprašas

Ankstesniais cheminių medžiagų reglamentavimo teisės aktais nustatyti trys atskiri aprašai. Tai Europos esamų komercinių cheminių medžiagų sąrašas (EINECS), Europos registruotųjų cheminių medžiagų sąrašas (ELINCS) ir Polimerais nebelaikomų medžiagų (NLP) sąrašas.

Nuo 1971 m. sausio 1 d. iki 1981 m. rugsėjo 18 d. Europos rinkoje esančios cheminės medžiagos įrašytos į Europos esamų komercinių cheminių medžiagų sąrašą (EINECS)<sup>5, 6, 7</sup>.

---

EINECS grindžiamas Europos pamatiniu sąrašu (angl. **European COre INventory**, ECOIN), į kurį pramonės atstovai turi papildomai įrašyti chemines medžiagas (pagal EINECS nurodytus cheminių medžiagų įrašymo į sąrašus kriterijus). ECOIN buvo sudarytas derinant skirtingus cheminių medžiagų, kurios, manoma, bus Europos rinkoje, sąrašus (pvz., TSCA). EINECS paskelbtas 1990 m. birželio 15 d. Jį sudaro daugiau kaip 100 000 cheminių medžiagų. Naudojant sąrašą aptikta daugybė klaidų (spausdinimo klaidų, pvz., neteisingas cheminės medžiagos pavadinimas, formulė arba CAS RN). Todėl 2002 m. kovo 1 d. išleistas pataisytas dokumentas.

ECB (2005) Sprendimų dėl Direktyvos 67/548/EEB šeštojo ir septintojo dalinio pakeitimo (Direktyva 79/831/EEB ir Direktyva 92/32/EEB) įgyvendinimo vadovo nekonfidenciali versija. EUR 20519 EN. 2005 m. birželio mėn. atnaujinta versija.

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, p. 21–33.

Šis aprašas apima daugiau kaip 100 000 cheminių medžiagų, identifikuotų pagal cheminės medžiagos pavadinimą (ir tam tikrų tipų cheminių medžiagų apibūdinimą), CAS numerį ir numerį, sudarytą iš septynių skaitmenų, vadinamą EINECS numeriu. EINECS numeris visada prasideda skaitmenimis 2 arba 3 (2xx-xxx-x; 3xx-xxx-xx). Prieš įrašant chemines medžiagas į EINECS, atliekamas jų patikrinimas.

Cheminės medžiagos, apie kurias pranešta ir kurios rinkai pateiktos po 1981 m. rugsėjo 18 d., įtrauktos į Europos naujų cheminių medžiagų sąrašą (ELINCS)<sup>6</sup>. Šis aprašas (sąrašas) apima visas chemines medžiagas, apie kurias pranešta iki 2008 m. gegužės 31 d. pagal Direktyvą 67/548/EEB ir jos pakeitimus. Šios cheminės medžiagos vadinamos naujosiomis cheminėmis medžiagomis, nes nebuvo pateiktos Bendrijos rinkai iki 1981 m. rugsėjo 18 d. Europos Komisija šioms cheminėms medžiagoms priskiria ELINCS numerius po to, kai jas peržiūri valstybių narių kompetentingosios institucijos. Priešingai nei EINECS, į ELINCS įrašytoms cheminėms medžiagoms CAS numeris nepriskiriamas, tačiau nurodomas valstybių narių kompetentingųjų institucijų priskirtas numeris, prekės ženklo pavadinimas (jei toks yra), klasė ir klasifikuojamų cheminių medžiagų IUPAC pavadinimas. ELINCS numeris taip pat sudarytas iš septynių skaitmenų ir visada prasideda skaitmeniu 4 (4xx-xxx-x). Polimerai į EINECS nebetrūkiami.

Polimerai į EINECS nebetrūkiami. Jiems taikomos Direktyvos 67/548/EEB specialiosios taisyklės<sup>89</sup>. Sąvoka „polimeras“ išsamiau apibrėžta 7-ą kartą iš dalies pakeistoje Direktyvoje 67/548/EEB (Direktyva 92/32/EB). Pradėjus taikyti šią apibrėžtį, kai kurios cheminės medžiagos, kurios pagal įrašymo į EINECS taisyklės buvo laikomos polimerais, pagal 7-ąją dalinį pakeitimą *nebelaikomos* polimerais. Jeigu būtų pranešama apie visas chemines medžiagas, neįrašytas į EINECS sąrašą, teoriškai turėtų būti pranešama ir apie visas medžiagas, *nebelaikomas polimerais* (NLP). Tačiau Ministrų Taryba paaiškino, kad apie šias polimerais nebelaikomas medžiagas retrospektyviai pranešti nereikia. Komisija pareikalavo sudaryti polimerais nebelaikomų medžiagų sąrašą (NLP sąrašą). Į sąrašą įtraukiamos cheminės medžiagos, kurios ES rinkoje buvo nuo 1981 m. rugsėjo 18 d. (Direktyvos 79/831/EEB, kuri yra Direktyvos 67/548/EEB 6-asis dalinis pakeitimas, įsigaliojimo data) iki 1993 m. spalio 31 d. (Direktyvos 92/32/EEB, kuri yra Direktyvos 67/548/EEB 7-asis pakeitimas, įsigaliojimo data) ir kurios atitinka reikalavimą, kad jas būtų galima pripažinti polimerais pagal įrašymo į EINECS taisyklės, tačiau pagal 7-ąją dalinį pakeitimą daugiau nebelaikomos polimerais. NLP sąrašas nėra išsamus. NLP sąrašo cheminės medžiagos identifikuojamos pagal cheminį pavadinimą, CAS numerį ir septynių skaitmenų numerį, vadinamą NLP numeriu. NLP numeris visada prasideda skaitmeniu 5 (5xx-xxx-x).

Visi trys cheminių medžiagų sąrašai – EINECS, ELINCS ir NLP – bendrai vadinami EK aprašu. Visos šiame apraše esančios cheminės medžiagos turi EB numerį, kurį priskiria Europos Komisija (išsami informacija apie EB numerius pateikiama II priedėlyje).

Informaciją apie šias chemines medžiagas galima rasti Europos cheminių medžiagų agentūros svetainėje (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory>), kurioje taip pat tvarkomas ir skelbiamas įregistruotų cheminių medžiagų aprašas (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>).

Gamintojai ir importuotojai gali naudotis EB sąrašu kaip priemone, kad sužinotų savo cheminės medžiagos EB numerį.

---

ECB (2003) pranešimas apie naująsias chemines medžiagas pagal Direktyvą Nr. 67/548/EEB dėl pavojingų medžiagų klasifikavimo, pakavimo ir ženklavimo. Polimerais nebelaikomų medžiagų sąrašas. EUR 20853 EN.

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

### **3.2.2. Sąrašo numeriai**

Rengiant REACH-IT sistemą, ECHA nusprendė, kad visuose gaunamuose techniškai baigtuose dokumentuose (preliminarijos registracijos, PPORD, užklausos, registracijos dokumentuose, pranešimuose apie klasifikavimą ir ženklumą, kt.) esančioms cheminėms medžiagoms būtų tikslinga numerius priskirti automatiškai, jei tokių cheminių medžiagų EB numeris nenurodytas (žr. toliau pateikiamus sąrašo numerių priskyrimo kriterijus). Tai techniškai palengvino šių pateikiamų dokumentų valdymą, tolesnį jų apdorojimą ir cheminių medžiagų identifikavimą juose. Šių numerių, vadinamų sąrašų numeriais, numeravimo formatas toks pat kaip ir EINECS, ELINCS ir NLP numerių, tačiau jie prasideda kitais skaitmenimis.

Sąrašo numeriai, kaip ir EINECS, ELINCS ir NLP įrašai, yra skaitmeninio formato. Bet svarbiausia, kad niekada nebuvo tikrinama, ar dauguma sąrašo numerių ir su jais susijęs cheminių medžiagų identifikavimas yra teisingas, pagrįstas ir ar buvo laikomasi šiame rekomendaciniame dokumente nustatytos tvarkos.

Reikia pažymėti, kad jei cheminei medžiagai taikomi skirtingi identifikatoriai (pvz., pavadinimas), jai galima priskirti skirtingus sąrašo numerius. Todėl gali būti ir taip, kad EINECS, ELINCS arba NLP sąrašė esančiai cheminei medžiagai bus suteiktas sąrašo numeris. Taip gali atsitikti, jei teikiant informaciją ECHA per REACH-IT sistemą naudojamas cheminės medžiagos pavadinimas skiriasi nuo EB sąrašė nurodyto pavadinimo.

Sąrašo numeriai gali prasidėti, pavyzdžiui, skaitmenimis 6, 7, 8 arba 9 (6xx-xxx-x; 7xx-xxx-x; 8xx-xxx-x; 9xx-xxx-x).

Svarbu pažymėti, jog kai kuriuose EINECS įrašuose cheminės medžiagos apibrėžtis palyginti plati, todėl laikoma, kad pagal REACH reglamento 3 straipsnio 1 dalį ji gali apimti daugiau nei vienos cheminės medžiagos tapatybę. Tokiais atvejais būsimam registruotojui siūloma įrašomą cheminę medžiagą apibrėžti išsamiau (pvz., nurodant IUPAC pavadinimą arba kitus identifikatorius). Vis dėlto registruotojas turėtų nurodyti, kokiam EINECS įrašui priklauso cheminė medžiaga. Tokiais atvejais Europos cheminių medžiagų agentūra nusprendžia, ar įrašomai cheminei medžiagai tikslinga priskirti sąrašo numerį, ar geriau jo nepriskirti.

### **3.3. REACH ir CLP reglamentų Cheminės medžiagos identifikavimo reikalavimai**

Jei pagal REACH reglamentą registracija būtina, ji turi apimti informaciją apie cheminių medžiagų identifikavimą, nurodytą VI priedo 2 skirsnyje. Ši informacija turi būti tinkama ir pakankama cheminei medžiagai identifikuoti. Jei techniškai neįmanoma ar moksliniu požiūriu atrodo nebūtina pateikti informaciją apie vieną ar kelis cheminės medžiagos identifikavimo parametrus, tai turi būti aiškiai pagrįsta, kaip nurodyta VI priedo 1 pastaboje.

Jei privaloma pranešti (CLP 40 straipsnis), pranešimas turi apimti informaciją apie cheminės medžiagos identifikavimą, kaip nurodyta REACH reglamento VI priedo 2.1–2.3.4 skirsniuose. Ši informacija turi būti pakankama cheminei medžiagai identifikuoti. Jei techniškai neįmanoma ar moksliniu požiūriu atrodo nebūtina pateikti informaciją apie vieną ar kelis cheminės medžiagos identifikavimo parametrus, tai turi būti aiškiai pagrįsta, kaip nurodyta VI priedo 1 pastaboje.

Cheminės medžiagos identifikavimo parametrų, nurodomų REACH reglamento VI priede, apžvalga pateikiama Lentelė 3.

**Lentelė 3: Cheminės medžiagos identifikavimo parametrai, pateikiami REACH reglamento VI priedo 2 skirsnyje.**

<b>Cheminės medžiagos identifikavimo parametrai, pateikiami REACH reglamento VI priedo 2 skirsnyje.</b>	
2.	<p><b>CHEMINĖS MEDŽIAGOS IDENTIFIKAVIMAS</b></p> <p><i>Apie kiekvieną cheminę medžiagą pateikiamos informacijos turi užtekti jai identifikuoti. Jei techniškai neįmanoma ar moksliniu požiūriu atrodo nebūtina pateikti informaciją apie vieną ar kelis toliau nurodytus aspektus, tai aiškiai pagrįdžiama.</i></p>
2.1	<p><b>Kiekvienos cheminės medžiagos pavadinimas ir bet koks kitas identifikatorius</b></p>
2.1.1	<p><i>Pavadinimas (-ai) pagal IUPAC nomenklatūrą Jei nėra, kitas (-i) tarptautinis (-iai) cheminis (-iai) pavadinimas (-ai)</i></p>
2.1.2	<p><i>Kiti pavadinimai (įprastas pavadinimas, prekinis pavadinimas, trumpinys)</i></p>
2.1.3	<p><i>EB numeris, t. y. Einecs, ELINCS arba NLP numeris arba Agentūros paskirtas numeris (jei toks yra ir tinka)</i></p>
2.1.4	<p><i>CAS pavadinimas ir CAS numeris (jei yra)</i></p>
2.1.5	<p><i>Kitas identifikavimo kodas, pavyzdžiui, muitinės įrašo numeris (jei yra)</i></p>
2.2	<p><b>Informacija, susijusi su molekuline ir struktūrine kiekvienos cheminės medžiagos formule arba kristaline struktūra</b></p>
2.2.1	<p><i>Molekulinė formulė ir struktūrinė formulė (įskaitant SMILES žymėjimą ir kitą pavaizdavimą, jei yra) ir kristalinės (-ių) struktūros (-ų) aprašymas</i></p>
2.2.2	<p><i>Informacija apie optinį aktyvumą ir įprastinę (stereo-) izomerų proporciją (jei yra ir jei tinkama)</i></p>
2.2.3	<p><i>Molekulinė masė arba molekulinės masės intervalas</i></p>
2.3.	<p><b>Kiekvienos cheminės medžiagos sudėtis</b></p>
2.3.1	<p><i>Grynumo laipsnis (%), jei taikoma</i></p>

2.3.2	<p><i>Sudedamųjų dalių ir priemaišų pavadinimai</i></p> <p><i>Nežinomos ar kintamos sudėties cheminių medžiagų, sudedamųjų reakcijų produktų arba biologinių medžiagų (UVCB) atveju:</i></p> <ul style="list-style-type: none"><li><i>– sudedamųjų dalių, kurių koncentracija yra lygi arba didesnė nei 10 proc., pavadinimai,</i></li><li><i>– žinomų sudedamųjų dalių, kurių koncentracija yra mažesnė nei 10 proc., pavadinimai,</i></li><li><i>– sudedamųjų dalių, kurios negali būti identifikuojamos atskirai, atveju sudedamųjų dalių grupių aprašymas pagal chemines savybes,</i></li><li><i>– kilmės ar šaltinio ir gamybos proceso aprašymas</i></li></ul>
2.3.3	<p><i>Sudedamųjų dalių, sudedamųjų dalių, kurios negali būti identifikuojamos atskirai, grupių ir priemaišų, nurodytų 2.3.2 punkte, tipinė koncentracija ir koncentracijos intervalas (procentinė dalis)</i></p>
2.3.4	<p><i>Priedų pavadinimai ir tipinė koncentracija bei koncentracijos intervalas (procentinė dalis)</i></p>
2.3.5	<p><i>Visi reikiami kokybiniai analitiniai duomenys, susiję su cheminės medžiagos nustatymu, pavyzdžiui, ultravioletinis ir infraraudonasis spektras, magnetinis branduolių rezonansas, masių spektras ar difrakcijos duomenys</i></p>
2.3.6	<p><i>Visi reikiami kiekybiniai analitiniai duomenys, susiję su cheminės medžiagos nustatymu, pavyzdžiui, chromatografiniai, titrimetriniai, elementinės analizės ar difrakcijos duomenys</i></p>
2.3.7	<p><i>Cheminei medžiagai nustatyti skirtų analizės metodų aprašymas arba atitinkamos bibliografinės nuorodos, reikalingos cheminei medžiagai nustatyti (įskaitant jos sudedamųjų dalių ir tam tikrais atvejais jos priemaišų bei priedų nustatymą ir kiekybinį įvertinimą). Aprašymą sudaro taikyti eksperimentiniai protokolai ir susijęs pagal 2.3.1–2.3.6 punktus pateiktų rezultatų aiškinimas. Šios informacijos turi užtekti metodams naudoti.</i></p>
2.5	<p><b><i>Bet kokia kita turima informacija, susijusi su cheminės medžiagos identifikavimu</i></b></p>

## **4. Rekomendacijos dėl cheminių medžiagų identifikavimo ir pavadinimo joms suteikimo pagal REACH ir LP reglamentų reikalavimus**

### **4.1. Įvadas**

Įvairių tipų cheminių medžiagų identifikavimo ir pavadinimo joms suteikimo taisyklės skiriasi. Dėl praktinių priežasčių šis rekomendacinis dokumentas sudarytas taip, kad vartotojas, norėdamas gauti informacijos apie kiekvieno tipo chemines medžiagas, nukreipiamas į skyrių, kuriame pateikiamos atitinkamos rekomendacijos. Tuo tikslu toliau pateikiami keli paaiškinimai apie skirtingų tipų chemines medžiagas ir nurodoma, kaip rasti atitinkamą skyrių.

Cheminės medžiagos identifikacija turi būti pagrįsta cheminės medžiagos identifikavimo parametrais, nurodytais REACH reglamento VI priedo 2 skirsnyje (žr. Lentelė 3). Todėl cheminė medžiaga turi būti identifikuojama pagal atitinkamą identifikavimo parametrų derinį:

- IUPAC pavadinimą ir kitus identifikatorius ir (arba) kitą pavadinimą ir kitus identifikatorius, pvz., CAS numerį, EB numerį (VI priedas 2.1 skirsnis);
- molekulinę ir struktūrinę informaciją (VI priedas 2.2 skirsnis);
- cheminę sudėtį (VI priedas 2.3 skirsnis).

Cheminė medžiaga iki galo identifikuojama pagal cheminę sudėtį, pvz., cheminę tapatybę ir sudedamųjų dalių kiekį kiekvienoje cheminėje medžiagoje. Nors toks paprastas identifikavimas gali būti taikomas daugumai cheminių medžiagų, tačiau kai kurioms cheminėms medžiagoms, kurioms taikomi REACH ir CLP reglamentų reikalavimai, jo pritaikyti neįmanoma arba nepakanka. Tokiais atvejais būtina kita arba papildoma informacija apie cheminės medžiagos identifikaciją.

Todėl cheminės medžiagos gali būti skirstomos į dvi pagrindines grupes:

1. Aiškiai apibrėžtos cheminės medžiagos: kiekybiniais ir kokybiniais parametrais apibrėžtos cheminės medžiagos, kurias galima tinkamai identifikuoti remiantis identifikavimo informacija, privaloma pagal REACH reglamento VI priedo 2 skirsnį.
2. UVCB medžiagos: nežinomos ar kintamos sudėties medžiagos, sudėtiniai reakcijų produktai ar biologinės medžiagos. Tokios cheminės medžiagos negali būti aiškiai identifikuojamos pagal prieš tai nurodytus parametrus.

Aiškiai apibrėžtų cheminių medžiagų sudėties kintamumas nustatomas pagal pagrindinės (-ių) sudedamosios (-ųjų) dalies (-ių) koncentracijos intervalo (-ų) aukščiausią ir žemiausią ribą. UVCB medžiagų sudėties kintamumas yra palyginti didelis ir (arba) sunkiai nuspėjamas.

Pripažinta, kad gali būti tarpinių atvejų tarp aiškiai apibrėžtų cheminių medžiagų (reakcijų produktų, turinčių daug sudedamųjų dalių, kurių intervalas yra aiškus) ir UVCB medžiagų (reakcijos produktų, turinčių skirtingas arba sunkiai nuspėjamas sudedamąsias dalis). Registruotojas atsako už tai, kad cheminė medžiaga būtų identifikuota tinkamiausiu būdu.

Aiškiai apibrėžiamų cheminių medžiagų, turinčių vieną pagrindinę sudedamąją dalį, ir aiškiai apibrėžiamų cheminių medžiagų, turinčių daugiau nei vieną pagrindinę sudedamąją dalį, identifikavimo ir pavadinimo suteikimo taisyklės skiriasi. Aprašomos įvairių tipų cheminių medžiagų, priskiriamų UVCB medžiagoms, skirtingos identifikavimo ir pavadinimo joms suteikimo taisyklės.

4 ir 5 lentelė nurodyti kelių įvairių tipų cheminių medžiagų pavyzdžių pagrindiniai identifikatoriai. Šie pavyzdžiai sugrupuoti taip, kad cheminių medžiagų identifikavimo panašumai ir skirtumai būtų lengvai pastebimi.

4 5 lentelė nepateikiamas visų galimų cheminių medžiagų tipų išsamus sąrašas. Toks cheminių medžiagų grupavimas pagal identifikavimo ir pavadinimo joms suteikimo taisykles neturėtų būti laikomas oficialia cheminių medžiagų klasifikavimo sistema. Jis turėtų būti laikomas praktine pagalba, kad tam tikros taisyklės būtų taikomos tinkamai ir kad šiame rekomendaciniame dokumente būtų galima surasti reikiamą rekomendaciją.

**4 lentelė. Pagrindinių identifikatorių grupavimas pavyzdžiuose, kurie atspindi įvairius aiškiai apibrėžtų panašių medžiagų tipus**

<b>Bendros savybės</b>	<b>Bendrieji ir tipiniai pavyzdžiai</b>	<b>Pagrindiniai identifikatoriai</b>
Aiškiai apibrėžtos cheminės medžiagos pagal cheminę sudėtį (4.2 skyrius)	Vieno komponento cheminė medžiaga, pvz., - benzenas (95 %) - nikelis (99 %) (4.2.1 skyrius)	Cheminė sudėtis: viena pagrindinė sudedamoji dalis ≥ 80 %: - Pagrindinės sudedamosios dalies cheminė tapatybė (cheminis pavadinimas, CAS numeris, EB numeris, kt.) - Būdingoji koncentracija ir aukštesnė bei žemesnė riba
	Cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis, pvz., apibrėžtos reakcijos produktai, tokie kaip 2-, 3-, ir 4-chlortolueno (30 % kiekvienas) reakcijos masė [4.2.1 skyrius]	Cheminė sudėtis: Pagrindinės sudedamosios dalies mišinys (reakcijos masė), kiekviena tarp ≥ 10 ir < 80 %: - Kiekvienos pagrindinės sudedamosios dalies cheminė tapatybė - Būdingos koncentracijos ir aukštesnė bei žemesnė kiekvienos sudedamosios dalies riba ir kiekvienos reakcijos masė
	Cheminės medžiagos, kurias sudaro daugiau nei viena cheminė sudedamoji dalis, pvz., grafitas ir deimantas [4.2.3 skyrius]	Cheminės medžiagos su viena sudedamąja dalimi arba keliomis sudedamosiomis dalimis cheminė sudėtis IR Kiti fiziniai arba apibūdinimo parametrai: pvz., kristalografija, (geologinė) mineralo sudėtis ir kt.

5 lentelė. Pagrindinių identifikatorių grupavimas pavyzdžiuose, kurie atspindi įvairius UVCB cheminių medžiagų tipus

Bendros savybės		Bendrieji ir tipiniai pavyzdžiai	Pagrindiniai identifikatoriai		
			Šaltinis	Procesas	Kiti identifikatoriai
UVCB medžiagos (nežinomos ar kintamos sudėties medžiagos, sudėtiniai reakcijų produktai ar biologinės medžiagos) (4.3 skyrius)	Biologinės medžiagos (B)	Biologinių medžiagų ekstraktai, pvz., natūralios aromatinės medžiagos, natūralūs aliejai, natūralūs dažai ir pigmentai	- Augalų arba gyvūnų rūšys ir grupės - Augalo / gyvūno dalis	- Ekstrahavimas - Skaidymas, sodrinimas, išskyrimas, gryninimas, kt. - <u>Kilmės nustatymas**</u>	- Žinoma arba bendro pobūdžio sudėtis - Chromatografiniai ir kiti „pirštų atspaudai“ - Nuoroda į standartus - Spalvos indeksas
		Sudėtinės biologinės makromolekulės, pvz., fermentai, baltymai, DNR arba RNR fragmentai, hormonai, antibiotikai			- Standartinis fermento indeksas - Genetinis kodas - Stereoskopinė forma - Fizinės savybės - Funkcija / aktyvumas - Sandara - Aminorūgšties seka
	Fermentacijos produktai antibiotikai, biopolimerai, fermentai, žlaugtai (cukraus fermentacijos produktai), soforolipidai ir kt.	- Mitybos terpė - Naudojami mikroorganizmai	- Fermentacija - Produktų išskyrimas - Išgryninimo etapai	- Produktų tipai: pvz., antibiotikai, biopolimerai, baltymai ir kt. - Žinoma sudėtis	
Aiščiai apibrėžtos, sudėtinės	Sunkiai nuspėjamos ir (arba) kintamos sudėties reakcijos mišiniai	Pradinės medžiagos	<u>Cheminės reakcijos tipas</u> , pvz., esterifikavimas, alkilinimas, hidrinimas	- Žinoma sudėtis - Chromatografiniai ir kiti „pirštų atspaudai“ - Nuoroda į standartus	



	arba kintamos sudėties cheminės ir mineralinės medžiagos (UVC)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Frakcijos ir distiliatai, pvz., naftos medžiagos</li> <li>- Molis, pvz., bentonitas</li> <li>- Degutas</li> </ul> Koncentratai arba lydiniai, pvz., metalų mineralai arba įvairiausių lydymo arba metalurgijos procesų likučiai, pvz., nuodegos	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Žalia nafta</li> <li>- Akmens anglis / durpės</li> <li>- Mineralinės dujos</li> <li>- Mineralai</li> </ul> Rūda	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Skaidymas, distiliavimas</li> <li>- <u>Frakcijų konversija</u></li> <li>- Fizinis apdorojimas</li> <li>- Nuosėdos</li> </ul> - Lydymas - Terminis apdorojimas - Įvairiausių metalurgijos procesai	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Ribiniai intervalai</li> <li>- Grandinės ilgio intervalas</li> <li>- Aromatinių / alifatinių medžiagų santykis</li> <li>- Žinoma sudėtis</li> <li>Standartinis indeksas</li> </ul> - Žinoma arba bendro pobūdžio sudėtis - Metalų koncentracija
--	--	--	--	--	---

\* Pažymėti procesai parodo naujų molekulių sintezę

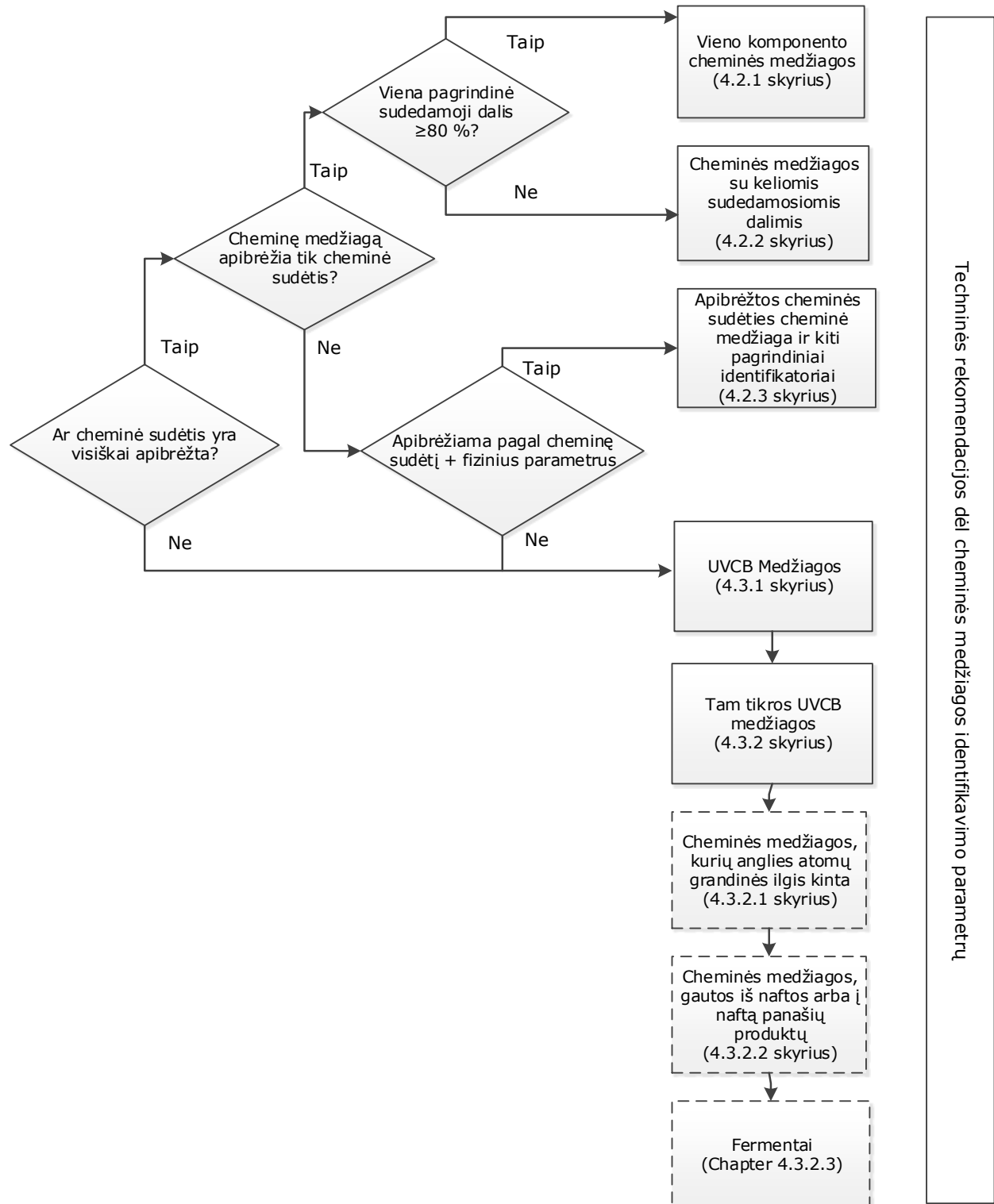
Šis skyrius padalytas į poskyrius, kurie apima tam tikras rekomendacijas dėl skirtingų tipų cheminių medžiagų identifikavimo. Nuorodos į atitinkamus skyrius pateiktos 1.

1 pateiktos nuorodos pagrįstos kriterijais, apimančiais pagrindines taisykles. Registruotojas privalo pasirinkti patį tinkamiausią skyrių ir cheminę medžiagą (registruoti pagal taisykles ir kriterijus, taikomus to tipo cheminei medžiagai).

Pagrindinė taisyklė – chemines medžiagas daugiausia apibūdina jų cheminė sudėtis ir identifiкуotos sudedamosios dalys. Jeigu techniškai tai neįgyvendinama, turėtų būti naudojami kiti įvairių rūšių UVCB medžiagoms nurodyti identifikatoriai.

**Jei registratorius nukrypsta nuo šio rekomendacinio dokumento cheminių medžiagų identifikavimo taisyklių ir kriterijų, jis tai turi išsamiai pagrįsti. Cheminės medžiagos identifikavimo procesas turi būti skaidrus, paaiškinamas ir užtikrinantis nuoseklumą.**

**1 paveikslas. Nuorodos į dokumentų skyrius ir priedėlius, kuriuose pateikiamos tam tikros rekomendacijos dėl įvairiausio tipo cheminių medžiagų.**



Turi būti pateikiamas analizės metodų apibūdinimas ir (arba) atitinkamos bibliografinės nuorodos cheminei medžiagai ir, jei būtina, priemaišoms ir priedams identifikuoti (REACH reglamento VI priedas, 2.3.5, 2.3.6 ir 2.3.7 skirsniai). Šios informacijos turi užtekti metodams naudoti. Pritaikius analizės metodus, taip pat turi būti pateikiami gauti standartiniai rezultatai.

## 4.2. Aiškiai apibrėžtos sudėties cheminės medžiagos

Aiškiai apibrėžtos sudėties cheminėms medžiagoms pavadinimas suteikiamas pagal pagrindinę (-es) sudedamąją dalį (-is). Kai kurio tipo cheminėms medžiagoms apibūdinti nepakanka vien tik cheminės sudėties. Tokiais atvejais identifikuojant cheminę medžiagą turi būti naudojami keli papildomi fiziniai parametrai, susiję su chemine sandara.

Paprastai turėtų būti siekiama apibūdinti sudėtį beveik 100 % ir turi būti pateikiama išsami kiekvienos sudedamosios dalies cheminė specifikacija, taip pat struktūrinė informacija. Cheminėse medžiagose, kurias apibūdina jų cheminė sudėtis, atskiriama:

- Pagrindinė sudedamoji dalis: cheminės medžiagos sudedamoji dalis, kuri nėra priedas ar priemaiša, sudaranti didelę dalį tos medžiagos, todėl naudojama cheminės medžiagos pavadinime ir detaliam identifikavimui cheminę medžiagą.
- Priemaiša: nenumatyta sudedamoji dalis, esanti pagamintoje cheminėje medžiagoje. Ji gali atsirasti iš pradinių medžiagų arba susidaryti po šalutinių ar nebaigtų reakcijų gamybos proceso metu. Nors priemaišų yra galutinėje cheminėje medžiagoje, tyčia jos nebuvo įdėtos.
- Priedas: tai junginys, specialiai dedamas gamybos proceso metu cheminei medžiagai stabilizuoti.

Visos sudedamosios dalys (išskyrus priedus), kurios nėra vieno- komponento cheminės medžiagos arba cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis pagrindinė (-ės) sudedamoji dalis (-ys), laikomos priemaišomis. Nors kai kuriuose sektoriuose įprasta vartoti terminą „pėdsakai“, šiame rekomendaciniame dokumente vartojamas tik terminas „priemaišos“.

Skirtingoms sudedamosioms dalims taikomi skirtingi identifikavimo reikalavimai:

- Pagrindinės sudedamosios dalys turi įtakos suteikiant cheminei medžiagai pavadinimą, todėl jos turi būti tiksliai apibrėžiamos.
- Priemaišos neturi įtakos medžiagos pavadinimui, tačiau kiekviena priemaiša turi būti tiksliai nurodyta.
- Priedai turi įtakos cheminės medžiagos sudėčiai (bet neturi įtakos suteikiant pavadinimą), todėl apie juos visada turi būti pateikiama išsami informacija.
- Tiksliai apibrėžiant pagrindines sudedamąsias dalis, priemaišas ir priedus, reikia nurodyti IUPAC pavadinimą, cheminį pavadinimą, struktūrinę formulę, EB numerį, CAS numerį, jei yra.

Pagal kelias konvencijas vieno komponento cheminės medžiagos atskiriamos nuo cheminių medžiagų su keliomis sudedamosiomis dalimis:

- Vieno komponento cheminė medžiaga – cheminė medžiaga, kurios bent 80 % masės (w/w) sudaro viena pagrindinė sudedamoji dalis ir kurioje priemaišos sudaro ne daugiau kaip 20 % masės (w/w).

Vieno komponento cheminei medžiagai pavadinimas suteikiamas pagal pagrindinę sudedamąją dalį.

- Cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis – tai cheminė medžiaga, kurios nuo  $\geq 10$  % iki  $< 80$  % masės (w/w) sudaro daugiau kaip viena pagrindinė sudedamoji dalis.

Pavadinimas cheminei medžiagai su keliomis sudedamosiomis dalimis suteikiamas atsižvelgiant į cheminės medžiagos pagrindinių komponentų reakcijos masę.

Prieš tai minėtos taisyklės naudojamos kaip rekomendacijos. Galima nuo jų nukrypti, jei nurodoma pagrįsta priežastis.

Paprastai, kai priemaišos cheminėje medžiagoje sudaro  $\geq 1$  % jos masės, priemaišos turi būti nurodomos. Tačiau priemaišos, kurios naudojamos klasifikuojant cheminę medžiagą ir (arba) įvertinant PBT<sup>10</sup>, nepaisant jų koncentracijos, turi būti nurodomos visada. Paprastai turi būti pateikiama 100 % informacijos apie sudėtį.

Priedai pagal REACH bei CLP reglamentus ir šį rekomendacinį dokumentą yra veiksniai, būtini cheminės medžiagos stabilumui išsaugoti. Todėl priedai yra labai svarbios cheminės medžiagos sudedamosios dalys ir į juos atsižvelgiama, kai sudaromas masės balansas. Tačiau atvejais, kai netaikoma REACH reglamento ir šio rekomendacinio dokumento apibrėžtis, žodžiu „priedas“ taip pat apibūdinamos kitas funkcijas atliekančios medžiagos, kurių dedama specialiai, pvz., pH reguliatoriai ar dažomoji medžiaga. Šios specialiai dedamos medžiagos nėra cheminės medžiagos atskiros dalys, todėl skaičiuojant masės balansą į jas neatsižvelgiama.

Mišiniai, apibrėžti REACH ir CLP reglamentuose, yra specialiai sudaromi cheminių medžiagų mišiniai, todėl nelaikomi cheminėmis medžiagomis su keliomis sudedamosiomis dalimis.

Specialias rekomendacijas dėl vieno komponento cheminių medžiagų galima rasti 4.2.1 skyriuje, specialias rekomendacijas dėl cheminių medžiagų su keliomis sudedamosiomis dalimis – 4.2.2 skyriuje. Rekomendacijas dėl cheminių medžiagų, apie kurias reikia pateikti papildomą informaciją (pvz., apie tam tikrus mineralus), galima rasti 4.2.3 skyriuje.

#### **4.2.1. Vieno komponento cheminės medžiagos**

Vieno komponento cheminė medžiaga – cheminė medžiaga, kurią apibrėžia jos sudėtis, kurios bent 80 % masės (w/w) sudaro viena pagrindinė sudedamoji dalis.

#### **Pavadinimo suteikimo konvencija**

Vieno komponento cheminei medžiagai pavadinimas suteikiamas pagal pagrindinę sudedamąją dalį. Teoriškai pavadinimas turi būti suteikiamas anglų kalba pagal IUPAC nomenklatūros taisykles (žr. I priedėlį). Papildomai gali būti priskiriami kiti tarptautiniu mastu priimti žymikliai.

#### **Identifikatoriai**

Vienos sudedamosios dalies cheminė medžiaga apibrėžiama nurodant pagrindinės sudedamosios dalies cheminį pavadinimą ir visus kitus žinomus identifikatorius (įskaitant molekulinę ir struktūrinę formulę arba kristalinę struktūrą). Turi būti apibrėžiamos visos vienos sudedamosios dalies cheminės medžiagos priemaišos ir (arba) priedai. Turi būti nurodyta tipinė pagrindinės sudedamosios dalies koncentracija (-os) ir koncentracijos intervalas (-ai), priemaišos ir (arba) priedai. Visa ši informacija turi būti pagrįsta analitine informacija.

<b>Pavyzdys</b>				
<b>Pagrindinė sudedamoji dalis</b>	<b>Sudėtis (%)</b>	<b>Priemaiša</b>	<b>Sudėtis (%)</b>	<b>Cheminės medžiagos tapatybė</b>
m-ksilenas	91	o-ksilenas	5	m-ksilenas

Daugiau informacijos apie PBT vertinimą ir susijusius kriterijus galima rasti Rekomendacijose dėl informacijai keliamų reikalavimų ir cheminės saugos vertinimo, R11 skyriuje: PBT vertinimas.

o-ksilenas	87	m-ksilenas	10	o-ksilenas
------------	----	------------	----	------------

Kai pagrindinė sudedamoji dalis sudaro > 80 % masės, ji dažniausiai turi būti apibūdinama pagal visus minėtus parametrus. Pagrindinių sudedamųjų dalių ir priemaišų tipinių koncentracijų suma turėtų būti 100 %. Priemaišos, kurių koncentracija > 1 %, turi būti įvardytos nurodant pavadinimą ir identifikatorius. Priemaišos, kurios naudojamos klasifikuojant cheminę medžiagą ir (arba) vertinant PBT<sup>11</sup>, neatsižvelgiant į jų koncentraciją, visada turi būti identifikuojamos tuo pačiu identifikatoriumi.

Siekiant teisingai taikyti 80 % taisyklę, tyčia įdėtos cheminės medžiagos, pvz., pH reguliatoriai ar dažomoji medžiaga, neįtraukiamos į masės balansą.

80 % taisyklė taikoma pranešimams apie naujas chemines medžiagas (Direktyva 67/548/EEB) ir numatyta REACH. Tačiau nukrypimas nuo 80 % taisyklės turi būti pagrįstas. Galimi pagrįsto nukrypimo pavyzdžiai:

- Jei pagrindinė sudedamoji dalis yra < 80 %, tačiau gali būti įrodoma, kad cheminei medžiagai būdingos panašios fizinės ir cheminės savybės ir tokios pat pavojingumo savybės kaip ir vieno komponento cheminės medžiagos atitinkamos savybės ir kad cheminė medžiaga turi tokią pačią tapatybę, atitinkančią 80 % taisyklę.
- Pagrindinės sudedamosios dalies ir priemaišų koncentracijos vertė atitinka 80 % kriterijų, o pagrindinė sudedamoji dalis – tik kartais ≤ 80 %.

#### Pavyzdžiai

Chem. medž.	Pagrindinė sudedamoji dalis	Didž. konc. (%)	Tipinė konc. (%)	Maž. konc. (%)	Priemaiša	Didž. konc. (%)	Tipinė konc. (%)	Maž. konc. (%)	Cheminės medžiagos tapatybė
1	o-ksilenas	90	85	65	m-ksilenas	35	15	10	o-ksilenas
2	o-ksilenas m-ksilenas	90 35	85 15	65 10	p-ksilenas	5	4	1	o-ksilenas

Dėl pagrindinės sudedamosios dalies ir priemaišos koncentracijos svyravimo 1 ir 2 cheminės medžiagos gali būti laikomos cheminėmis medžiagomis su keliomis sudedamosiomis dalimis, turinčiomis dvi pagrindines sudedamąsias dalis – o-ksileną ir m-ksileną, arba vieno komponento cheminėmis medžiagomis. Šiuo atveju cheminės medžiagos turi būti laikomos vieno komponento cheminėmis medžiagomis. Toks sprendimas priimamas dėl to, kad cheminėje medžiagoje o-ksileno dažniausiai būna > 80 %.

#### Analizės informacija

Turi būti pateikta pakankamai kokybinių duomenų, patvirtinančių vienos sudedamosios dalies medžiagos sudedamųjų dalių ir priemaišų tapatybę. Gali būti taikomi keli cheminės medžiagos tapatybę patvirtinantys spektroskopiniai metodai, pvz., ultravioletinė ir matomoji absorbcijos spektroskopija (UV / VIS), infraraudonoji spektroskopija (IR), branduolinio magnetinio rezonanso spektroskopija (NMR) ir masių spektroskopija (MS). Neorganinių medžiagų arba organinių ir (arba) metalo-organinių medžiagų, kurias galima aptikti ir (arba) išmatuoti pagal

<sup>11</sup> Daugiau informacijos apie PBT vertinimą ir susijusius kriterijus galima rasti Rekomendacijose dėl informacijai keliamų reikalavimų ir cheminės saugos vertinimo, R11 skyriuje: PBT vertinimas.

kristalinę struktūrą, atveju dažniausiai pageidautina naudoti rentgeno spindulių difrakciją (XRD).

Cheminės medžiagos sudėčiai patvirtinti turi būti taikomi kiekybiniai metodai, pavyzdžiui, chromatografiniai metodai, tokie kaip dujų chromatografija (GC) arba efektyvioji skysčių chromatografija (HPLC), kartu su aptikimo metodu. Neorganinių medžiagų atveju būtų tikslingiau naudoti rentgeno spindulių difrakciją (XRD), rentgeno fluorescenciją (XRF), atominės sugerties spektrometriją (AAS), induktyviai susietos plazmos optinę emisinę spektroskopiją (ICP-OES) arba induktyviai susietos plazmos masių spektrometriją (ICP-MS). Jeigu reikia, turi būti naudojami kiti galiojantys sudedamųjų dalių atskyrimo metodai.

Analizės metodų aprašyme turi būti nurodyti taikomi eksperimentiniai protokolai ir pateiktų rezultatų aiškinimas.

Analizės metodai nuolat tobulinami ir tikslinami. Todėl registruotojas atsako, kad būtų pateikti tinkami spektro duomenys.

#### 4.2.2. Cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis

Cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis – cheminė medžiaga, kurią apibrėžia jos kokybinė sudėtis, kurios nuo  $\geq 10\%$  iki  $< 80\%$  masės (w/w) sudaro daugiau kaip viena pagrindinė sudedamoji dalis. Cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis yra gamybos proceso rezultatas<sup>12</sup>.

Pagal REACH reglamento reikalavimus cheminė medžiaga turi būti įregistruota tokia, kokia ji pagaminta. Jeigu pagaminama cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis, tokia cheminė medžiaga ir turi būti įregistruota<sup>13 14</sup>. Nustatant, kuriuos cheminės medžiagos gamybos etapus apima apibrėžtis „gamyba“, sprendimas kiekvienu atveju priimamas atskirai. Cheminių medžiagų nebūtina tikrinti atskirai, jei pateikiama pakankamai informacijos, kuria apibūdinamos cheminės medžiagos pavojingumo savybės, apie atskiras sudedamąsias dalis.

#### Pavadinimo suteikimo konvencija

Cheminei medžiagai su keliomis sudedamosiomis dalimis pavadinimas suteikiamas atsižvelgiant į cheminės medžiagos pagrindinių sudedamųjų dalių reakcijos masę, t. y. ne į pradines medžiagas, būtinas cheminei medžiagai pagaminti. Bendras formatas yra toks: „[Pagrindinių sudedamųjų dalių pavadinimai] reakcijos masė“. Rekomenduojama sudedamųjų dalių pavadinimus pateikti abėcėlės tvarka ir atskirti jungtuku „ir“. Įtakos pavadinimui turi tik pagrindinės sudedamosios dalys, kurios paprastai sudaro  $\geq 10\%$ . Teoriškai pavadinimai turi būti suteikiami anglų kalba pagal IUPAC nomenklatūros taisykles. Papildomai gali būti priskiriami kiti tarptautiniu mastu priimti žymikliai.

#### Identifikatoriai

Kelių sudedamųjų dalių cheminė medžiaga apibrėžiama pagal cheminės medžiagos cheminį pavadinimą ir visus kitus turimus identifikatorius, taip pat pagal sudedamųjų dalių cheminę tapatybę (įskaitant molekulinę ir struktūrinę formulę arba kristalinę (-es) struktūrą (-as)). Turi būti nurodomos visos kelių sudedamųjų dalių cheminės medžiagos priemaišos ir (arba) priedai. Turi būti nurodyta tipinė (-ės) sudedamųjų dalių, priemaišų ir (arba) priedų koncentracija (-os) ir koncentracijos intervalas (-ai). Visa ši informacija turi būti pagrįsta analitine informacija.

Pavyzdys				
Pagrindinės sudedamosios dalys	Sudėtis (%)	Priemaiša	Sudėtis (%)	Cheminės medžiagos tapatybė
m-ksilenas	50	p-ksilenas	5	m-ksileno ir o-ksileno reakcijos masė
o-ksilenas	45			

Cheminių medžiagų su keliomis sudedamosiomis dalimis cheminė sudėtis yra žinoma. Tokių cheminių medžiagų daugiau nei viena pagrindinė sudedamoji dalis yra susijusi su cheminės medžiagos identifikavimu. Be to, galima nuspėti ne tik cheminės medžiagos cheminę sudėtį, bet ir būdingąsias vertes bei intervalus. Pagrindinės sudedamosios dalys turi būti apibrėžiamos išsamiai pagal visus susijusius parametrus. Pagrindinių sudedamųjų dalių ( $\geq$

Mišinys ir cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis skiriasi tuo, kad mišinys gaunamas sumaišius dvi arba daugiau cheminių medžiagų, tačiau cheminė reakcija nevyksta. Cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis gaunama cheminės reakcijos metu.

Didelė dalis cheminių medžiagų pagal REACH reglamentą neregistruojamos (pvz., IV priede išvardytos cheminės medžiagos).

Toks principas netaikomas daugumai specifinių cheminių medžiagų, pvz., mineralams (daugiau informacijos žr. 7.5 skyriuje).



10 %) ir priemaišų (< 10 %) būdingų koncentracijų suma turi būti lygi 100 %.

Siekiant teisingai identifikuoti kelių sudedamųjų dalių cheminę medžiagą, specialiai įdėtos cheminės medžiagos, pvz., pH reguliatoriai ar dažomoji medžiaga, neįtraukiamos į masės balansą.

Priemaišos, kurių koncentracija  $\geq 1$  %, turi būti nurodomos pagal pavadinimą ir visus turimus identifikatorius. Priemaišos, kurios naudojamos klasifikuojant cheminę medžiagą ir (arba) vertinant PBT, neatsižvelgiant į jų koncentraciją, visada turi būti identifikuojamos tuo pačiu identifikatoriumi.

<b>Pavyzdys</b>								
<b>Pagrindinė sudedamoji dalis</b>	<b>Didž. konc. (%)</b>	<b>Tipinė konc. (%)</b>	<b>Maž. konc. (%)</b>	<b>Priemaiša</b>	<b>Didž. konc. (%)</b>	<b>Tipinė konc. (%)</b>	<b>Maž. konc. (%)</b>	<b>Cheminės medžiagos tapatybė</b>
anilinas	90	75	65	fenantrenas	5	4	1	anilino ir naftalino reakcijos masė
naftalenas	35	20	10					

Pagal šio rekomendacinio dokumento taisykles ši cheminė medžiaga yra cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis. Nors vienos sudedamosios dalies intervalas yra  $> 80$  %, taip būna tik kartais. Būdingoji sudėtis yra  $< 80$  % masės.

Tais atvejais, kai kelių sudedamųjų dalių cheminės medžiagos pagrindinė sudedamoji dalis sudaro  $\geq 80$  % arba  $< 10$  % masės, toks nukrypimas turi būti pagrindžiamas. Galimas pagrįsto nukrypimo pavyzdys:

- sudedamoji dalis tik kartais būna  $\geq 80$  % arba  $< 10$  %.

Pavyzdžiui, cheminę medžiagą sudaro dvi sudedamosios dalys: viena – 85 %, o kita – 10 % jos masės. Likusi dalis – priemaišos. Abi sudedamosios dalys turi įtakos cheminės medžiagos techniniam rezultatui ir yra labai svarbios. Šiuo atveju cheminė medžiaga gali būti apibūdinama kaip cheminė medžiaga, kurią sudaro dvi sudedamosios dalys, nepaisant to, kad viena sudedamoji dalis sudaro  $> 80$  % masės.

## **Analizės informacija**

Turi būti pateikta pakankamai kokybinių duomenų, patvirtinančių kelių sudedamųjų dalių medžiagos sudedamųjų dalių ir priemaišų tapatybę. Gali būti taikomi keli cheminės medžiagos tapatybę patvirtinantys spektroskopiniai metodai, pvz., ultravioletinė ir matomoji absorbcijos spektroskopija (UV / VIS), infraraudonoji spektroskopija (IR), branduolinio magnetinio rezonanso spektroskopija (NMR) ir masių spektroskopija (MS). Neorganinių medžiagų arba organinių ir (arba) metalo-organinių medžiagų, kurias galima aptikti ir (arba) išmatuoti pagal kristalinę struktūrą, atveju dažniausiai pageidautina naudoti rentgeno spindulių difrakciją (XRD).

Cheminės medžiagos sudėčiai patvirtinti turi būti taikomi kiekybiniai metodai, pavyzdžiui, chromatografiniai metodai, tokie kaip dujų chromatografija (GC) arba didelio efektyvumo skysčių chromatografija (HPLC), kartu su aptikimo metodu. Neorganinių medžiagų atveju būtų tiksliau naudoti rentgeno spindulių difrakciją (XRD), rentgeno spindulių fluorescencinę spektrometriją (XRF), atominės absorbcijos spektrometriją (AAS), induktyviai susietos plazmos optinę emisinę spektroskopiją (ICP-OES) arba induktyviai susietos plazmos masės spektrometriją (ICP-MS). Jeigu reikia, turi būti naudojami kiti galiojantys sudedamųjų dalių atskyrimo metodai.

Analizės metodų aprašyme turi būti nurodyti taikomi eksperimentiniai protokolai ir pateiktų rezultatų aiškinimas.

Analizės metodai nuolat tobulinami ir tikslinami. Todėl registruotojas atsako, kad būtų pateikti tinkami spektro duomenys.

### **Cheminių medžiagų su keliomis sudedamosiomis dalimis atskirų sudedamųjų dalių registracija**

Apskritai registruojant cheminių medžiagų tapatybę, kad cheminę medžiagą galima būtų įregistruoti iš anksto, turi būti vadovaujama cheminių medžiagų su keliomis sudėtinėmis dalimis metodu (t. y. registruojamos cheminės medžiagos su keliomis sudėtinėmis dalimis). Galima nesilaikyti šio metodo ir įregistruoti atskiras sudedamąsias dalis, tačiau tai turi būti pagrindžiama. Galimybė nukrypti nuo standartinio cheminių medžiagų identifikavimo pagal jų atskiras sudedamąsias dalis (ir potencialaus registravimo) būdo suteikiama, kai

- nesumažinami informacijai keliami reikalavimai;
- esamų duomenų pakanka atskirų sudedamųjų dalių įregistravimo metodui pagrįsti, t. y. paprastai taikant šį metodą neturi būti atliekami papildomi (su stuburiniais gyvūnais) bandymai, palyginti su taikomu standartiniu metodu;
- atskirų sudedamųjų dalių įregistravimas sukuria palankesnes aplinkybes (t. y. nereikia atlikti daugybės cheminių medžiagų, sukuriamų iš tokių pat sudedamųjų dalių, registracijos procedūrų);
- pateikiama informacija apie atskirų reakcijų masių sudėtį.

Negalima piktnaudžiauti suteiktomis išlygomis ir nepateikti reikalaujamų duomenų. Kai, pvz., (C + D) cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis, kurią 50 % sudaro C ir 50 % □ D, sukuriama 1200 tonų per metus (tpm), pagal čia pateikiamą metodą turi būti atliekamos dvi registracijos ir pateikiama tokia informacija:

C cheminę medžiagą

- 600 tonų
- Duomenys turi būti pateikiami, kai > 1000 tonų (X priedas)

D cheminę medžiagą

- 600 tonų
- Duomenys turi būti pateikiami, kai > 1000 tonų (X priedas)

Šis metodas turi būti suderintas su REACH reglamento reikalavimais, kad kiekvieno juridinio asmens tos pačios cheminės medžiagos masės būtų sumuojamos atskirai. Siūloma nustatyti tokius reikalavimus duomenims:

- pridėti visas atskirų sudedamųjų dalių mases (pagal kiekį cheminėje medžiagoje);
- nurodyti didžiausią cheminės medžiagos, kurioje yra ta sudedamoji dalis, masę.

Reikalavimai dėl informacijos pateikimo nustatomi pagal didžiausius rezultatus. Teikiant informaciją apie kiekį tonomis, turi būti įtraukti kiekvienos sudedamosios dalies kiekio tonomis sumavimo rezultatai. Toliau pateikiami supaprastinti pavyzdžiai, kuriais parodoma, kaip praktiškai taikyti šį metodą:

#### *1 pavyzdys*

Vieno juridinio asmens vykdomame gamybos procese gauta C+D+E cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis, kai iš tokios medžiagos sukuriamos skirtingos medžiagos:

- 1 cheminė medžiaga: C – 50 %, D – 25 % ir E – 25 %, 1100 tpm
- 2 cheminė medžiaga: C – 50 % ir D – 50 %, 500 tpm

Taip pat šiuo atveju reakcijos produktas yra pradžios taškas: dvi cheminės medžiagos turi būti įregistruotos kaip cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis. Jei vadovaujamesi<sup>15</sup> atskirų sudedamųjų dalių registravimo metodu, turi būti taikoma:

Informacija, pateikiama apie D cheminę medžiagą, šiuo atveju yra tokia:

- Kiekis tonomis:  $(25 \% * 1100) + (50 \% * 500) = 525$  tpm

Kokia informacija turi būti pateikta, nustatoma pagal griežčiausią reikalavimą. Šiuo atveju: > 1000 tpm, nes bendras „C+D+E“ cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis kiekis tonomis yra daugiau nei 1000 tpm.

Pastaba: šio pavyzdžio C ir E cheminės medžiagos turi būti atitinkamai užregistruotos.

## 2 pavyzdys

Vieno juridinio asmens vykdomame gamybos procese gauta G+H+I cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis, kai iš tokios medžiagos sukuriamos skirtingos medžiagos:

- 3 cheminė medžiaga: G – 65 %, H – 15 % ir I – 20 %, 90 tpm
- 4 cheminė medžiaga: G – 60 % ir H – 40 %, 90 tpm

G cheminė medžiaga, apie kurią pateikiama informacija:

- Kiekis tonomis:  $(65 \% * 90) + (60 \% * 90) = 112,5$  tpm

Kokia informacija turi būti pateikta, nustatoma pagal griežčiausią reikalavimą. Šiuo atveju: > 100 tpm, nes bendras G sudedamosios dalies kiekis tonomis yra daugiau nei 100 tpm.

Pastaba: šio pavyzdžio H ir I cheminės medžiagos turi būti atitinkamai užregistruotos.

Nustatant minėtus informacijai keliamus reikalavimus, taip pat turi būti įvertinama, kiek reikia atlikti naujų tyrimų (su stuburiniais gyvūnais). Prieš pasirinkdami strategiją, būsimi registruotojai turi įvertinti, ar atlikta pakankamai tyrimų (su stuburiniais gyvūnais) ir ar dėl siūlomos išlygos reikės mažiau, ar daugiau naujų bandymų (su stuburiniais gyvūnais). Turi būti pasirinkta strategija, pagal kurią nereikėtų atlikti naujo bandymo (su stuburiniais gyvūnais).

Jeigu abejojama, standartinis cheminės medžiagos tapatybės registracijos būdas, kad būtų galima įregistruoti cheminę medžiagą, visada turėtų būti toks – identifiukuoti tokią cheminę medžiagą, kokia ji buvo pagaminta.

### **4.2.3. Apibrėžtos cheminės sudėties cheminė medžiaga ir kiti pagrindiniai identifikatoriai**

Kai kurias chemines medžiagas (pvz., neorganinius mineralus), kurias galima identifiukuoti pagal cheminę sudėtį, būtina detaliau apibrėžti pagal papildomus identifikatorius, kad būtų nustatyta tik tos cheminės medžiagos tapatybė. Tokios cheminės medžiagos gali būti vieno komponento cheminės medžiagos arba cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis, tačiau būtini kiti pagrindiniai identifikatoriai (naudojami kartu su cheminės medžiagos identifikavimo parametrais, apibūdiniais ankstesniuose skyriuose), kad cheminės medžiagos tapatybė būtų įrašyta aiškiai.

## **Pavyzdžiai**

Pavyzdys tik parodo, kaip turi būti nustatyti informacijai keliami reikalavimai ir kokią informaciją pateikti apie apimtį. Jis neparodo, kad šiuo atveju taikomas metodas yra pagrįstas.

Siekiant aiškiai identifikuoti cheminę medžiagą, turi būti naudojama kai kurių unikalią sudėtį turinčių nemetalinių mineralų (natūralių arba žmogaus pagamintų) morfologija ir mineralo sudėtis. Pavyzdžiui, kaoliną (CAS 1332-58-7) sudaro kaolinitas, kalio aliuminio silikatas, lauko špatas ir kvarcas.

Rekomendacijos, kaip laikytis konkrečių REACH įpareigojimų, susijusių su chemine medžiaga „nanoformose“, pateikiamos *Rekomendacijų dėl registracijos ir cheminių medžiagų identifikavimo nanoformoms skirtame priedėlyje*<sup>16</sup>. Teikiamos konsultacijos apima konkrečius su nanomedžiagomis susijusius klausimus, kurie yra svarbūs ridentifikuojant ir apibūdinant nanoformas.

### **Pavadinimo suteikimo konvencija**

Iš esmės turi būti vadovaujama pavadinimo suteikimo konvencija, taikoma vieno komponento cheminėms medžiagoms (žr. 4.2.1 skyrių) arba cheminėms medžiagoms su keliomis sudedamosiomis dalimis (žr. 4.2.2 skyrių).

Neorganinių mineralų sudedamosioms dalims gali būti suteikiami mineraloginiai pavadinimai. Pavyzdžiui, apatitas yra cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis, kurią sudaro fosfatų mineralų grupė. Tokiai mineralų grupei priklauso hidroksilapatitas, fluorapatitas ir chlorapatitas, taip pavadinti dėl didelės OH-, F- arba Cl- jonų koncentracijos juose (atitinkamai ir kristale). Trijų dažniausių rūšių mišinio formulė yra  $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH}, \text{F}, \text{Cl})$ . Kitas pavyzdys yra aragonitas, viena iš kalcio karbonato ypatingų kristalinių struktūrų.

### **Identifikatoriai**

Šios cheminės medžiagos identifikuojamos ir pavadinimas joms suteikiamas pagal taisykles, taikomas vieno komponento cheminėms medžiagoms (žr. 4.2.1 skyrių) arba cheminėms medžiagoms su keliomis sudedamosiomis dalimis (žr. 4.2.2 skyrių). Kiti specialūs pagrindiniai identifikavimo parametrai, kuriuos taip pat reikia naudoti, priklauso nuo cheminės medžiagos. Kitų pagrindinių identifikatorių pavyzdžiai: elementinė sudėtis ir spektro duomenys, kristalinė struktūra, nustatyta rentgeno spindulių difrakcijos (XRD) būdu, infraraudonųjų spindulių sugerties smailės, plėtimosi indeksas, katijonų mainų talpa arba kitos fizinės ir cheminės savybės.

Labai svarbu mineralų elementinės sudėties rezultatus sujungti su spektro duomenimis, kad būtų galima nustatyti mineraloginę sudėtį ir kristalinę struktūrą. Po to tokie duomenys patvirtinami pagal būdingąsias fizines ir chemines savybes, pvz., kristalinę struktūrą (kokia buvo nustatyta rentgeno spindulių difrakcijos būdu), formą, kietumą, gebėjimą plėstis, tankį ir (arba) paviršiaus plotą.

Gali būti pateikiami tam tikrų mineralų tam tikrų papildomų pagrindinių identifikatorių pavyzdžiai, nes mineralams būdingos fizinės ir cheminės savybės, pagal kurias galima užbaigti jų identifikavimą, pvz., labai mažas talko kietumas, bentonito gebėjimas plėstis, diatomito forma, didelis barito tankis ir paviršiaus plotas (azoto adsorbcija).

### **Analizės informacija**

Pagrindinis kriterijus – turėtų būti pateikta visa būtina informacija, patvirtinanti cheminės medžiagos struktūrą. Turi būti pateikiama vienoda analizės informacija apie vieno komponento chemines medžiagas (žr. 4.2.1 skyrių) arba apie chemines medžiagas su keliomis sudedamosiomis dalimis (žr. 4.2.2 skyrių).

<sup>16</sup> Rekomendacijų dėl registracijos ir cheminių medžiagų identifikavimo nanoformoms skirtas priedėlis pateiktas <https://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>

### 4.3. UVCB medžiagos

Nežinomos (angl. *Unknown*) ar kintamos sudėties (angl. *Variable*) medžiaga, sudedamieji (angl. *Complex*) reakcijų produktai ar biologinės (angl. *Biological*) medžiagos<sup>17, 18, 19</sup>, taip pat dar vadinamos UVCB medžiagomis, kurių negalima tinkamai identifikuoti pagal cheminę sudėtį, nes:

- palyginti didelis jų sudėtinių dalių skaičius ir (arba)
- nežinoma reikšminga sudėties dalis ir (arba)
- palyginti didelis arba sunkiai nuspėjamas sudėties kintamumas.

Dėl to identifikuojant UVCB medžiagas būtina kitos rūšies informacija, pateikiama kartu su informacija apie jų cheminę sudėtį.

5 lentelė parodoma, kad pagrindiniai įvairių rūšių UVCB medžiagų identifikatoriai yra susiję su cheminės medžiagos šaltiniu ir gamybos procesu. Arba jie gali būti priskiriami grupei – „kiti pagrindiniai identifikatoriai“ (pvz., „chromatografiniai arba kiti „pirštų atspaudai“). 5 lentelė pateikiami identifikatorių numeriai ir jų rūšis – tipų kintamumo pavyzdys, todėl neturėtų būti laikomi išsamia apžvalga. Kai, pvz., sudėtinio reakcijos produkto arba biologinės kilmės medžiagos cheminė sudėtis yra žinoma, cheminė medžiaga turi būti identifikuojama atitinkamai kaip vieno komponento cheminė medžiaga arba kaip cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis. Jei cheminė medžiaga vadinama UVCB medžiaga, rezultatas – reikšmingai pasikeitus šaltiniui arba procesui sukuriama kita cheminė medžiaga, kuri turi būti vėl įregistruota. Jei reakcijos mišinys identifikuojamas kaip cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis, cheminė medžiaga gali būti gaunama iš kitokio šaltinio ir (arba) kitokiame procese, bet tik jei galutinės cheminės medžiagos sudėtis išlieka atitinkanti nustatytą intervalą. Tokiu atveju nebūtina atlikti naujos registracijos.

Bendrasias rekomendacijas dėl UVCB medžiagų galima rasti 4.3.1 skyriuje, o specialiasias rekomendacijas dėl cheminių medžiagų, pasižyminčių kintamu anglies atomų grandinės ilgiu, cheminių medžiagų, gautų iš naftos arba į naftą panašių produktų ir fermentų, kaip tam tikro tipo UVCB medžiagų, galima rasti 4.3.2 skyriuje.

#### 4.3.1. Bendrosios rekomendacijos dėl UVCB medžiagų

Šiame rekomendacinio dokumento skyriuje pateikiamos bendrosios rekomendacijos, kaip identifikuojant UVCB medžiagas naudoti ne tik REACH reglamento VI priede (2 skirsnyje) pateikiamus cheminių medžiagų identifikavimo parametrus, bet ir konkrečius pagrindinius identifikatorius.

#### Informacija apie cheminę sudėtį

UVCB medžiagoms negali būti priskirtas unikalūs sudedamosios dalies IUPAC numeris, nes ne visos sudedamosios dalys gali būti identifikuotos. UVCB medžiagos gali būti nurodytos tik bendrai, netiksliai, nes tiksliai sudėtis kinta. Kadangi sudedamosios dalys ir priemaišos negali būti atskirtos, terminai „pagrindinės sudedamosios dalys“ ir „priemaišos“ neturėtų būti vertinami kaip labai svarbūs apibūdinant UVCB medžiagas.

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

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

US EPA (2005-D) Toxic Substances Control Act Inventory Registration for Chemical Substances of Unknown or Variable Composition, Complex Reaction Products and Biological Materials: UVCB Substances.

Tačiau informacija (jei ji žinoma) apie cheminę sudėtį ir sudedamųjų dalių tapatybę vis tiek turi būti pateikiama. Sudėtis gali būti apibūdinama bendrais bruožais, pavyzdžiui, „linijinės riebalų rūgštys C8–C16“ arba „alkoholio etoksilatai su alkoholiu C10–C14 ir 4–10 etoksilato grupės“. Be to, gali būti pateikiama informacija apie cheminę sudėtį pagal gerai žinomus etaloninius mėginius arba standartus. Taip pat daugeliu atvejų gali būti naudojami rodikliai ir esami kodai. Kita bendroji informacija apie sudėtį gali apimti vadinamuosius pirštų atspaudus, t. y., pavyzdžiui, chromatografines arba spektro nuotraukas, kurios parodo būdingą smailių išsidėstymo modelį.

UVCB medžiagos atveju visos sudedamosios dalys, kurių koncentracija  $\geq 10\%$ , ir visos kitos žinomos sudedamosios dalys, kurių koncentracija  $< 10\%$ , turi būti įvardytos IUPAC pavadinimu anglų kalba, nurodant tipines koncentracijas ir koncentracijų intervalus.

Be to, jei galima, reikia nurodyti kiekvienos sudedamosios dalies skaitmeninį identifikatorių (CAS numerį ir (arba) EB arba sąrašo numerį).

Sudedamosios dalys, kurių negalima identifikuoti atskirai, aprašomos grupėmis pagal jų cheminį pobūdį. Tokiu atveju turite nurodyti bent tokią kiekvienos grupės informaciją: cheminį pavadinimą, tipinę koncentraciją ir koncentracijos intervalą. Be to, jei galima, turite pateikti molekulinę ir struktūrinę informaciją.

Sudedamosios dalys, kurios susijusios su cheminės medžiagos klasifikavimu ir (arba) PBT vertinimu<sup>20</sup>, visada turi būti identifikuojamos tuo pačiu identifikatoriumi, nepriklausomai nuo jų koncentracijos.

Nežinomos sudedamosios dalys, kurios klasifikacijai neaktualios, turi būti identifikuojamos pagal jų cheminių savybių bendrąjį apibūdinimą. Visi priedai turi būti išsamiai nurodyti būdu, kuris panašus į aprašytąjį aiškiai apibrėžtų cheminių medžiagų būdą.

### **Pagrindiniai identifikavimo parametrai – pavadinimas, šaltinis ir procesas**

Kadangi cheminę medžiagą nepakanka identifikuoti tik pagal cheminę sudėtį, paprastai ji turi būti identifikuojama pagal pavadinimą, kilmę arba šaltinį, aprašant gamybos procesą. Kitos cheminės medžiagos savybės taip pat gali būti svarbūs identifikatoriai: aktualūs bendrieji identifikatoriai (pvz., virimo temperatūra) arba lemiami cheminių medžiagų konkrečių grupių identifikatoriai (pvz., katalizinis fermentų aktyvumas).

#### **1. Pavadinimo konvencija**

Apskritai UVCB medžiagos pavadinimas yra šaltinio ir gamybos proceso derinys, pateikiamas bendroju formatu: pirmiausia šaltinis, po to gamybos procesas (-ai).

- Cheminė medžiaga, gauta iš biologinių šaltinių, identifikuojama pagal rūšies pavadinimą.
- Cheminė medžiaga, gauta iš nebiologinių šaltinių, identifikuojama pagal pradines medžiagas.
- Gamybos procesai, jeigu atliekama naujų molekulių sintezė, identifikuojami pagal cheminės reakcijos tipą arba kaip rafinavimo etapo rūšis, pvz., ekstrahavimas, frakcionavimas, sodrinimas, arba kaip nuosėdos.

#### **Pavyzdžiai**

**EB numeris**

**EB pavadinimas**

Daugiau informacijos apie PBT vertinimą ir susijusius kriterijus galima rasti Rekomendacijose dėl informacijai keliamų reikalavimų ir cheminės saugos vertinimo, R11 skyriuje: PBT vertinimas.

296-358-2	Lavandinas, <i>Lavandula hybrida</i> , ekst., acetiliuotas
307-507-9	Lavandinas, <i>Lavandula latifolia</i> , ekst., apdorotas siera, paladžio druska

EK apraše reakcijos produktams naudojami skirtingi formatai, pvz.:

- EINECS: pagrindinė pradinė medžiaga, kitos (-ų) pradinės (-ių) medžiagos (-ų) reakcijos produktas (-ai)
- ELINCS: pradinės (-ių) medžiagos (-ų) reakcijos produktas (-ai)

### Pavyzdžiai

EB numeris	EB pavadinimas
232-341-8	Azoto rūgštis, reakcijos su 4-metil-1,3-benzendiamino hidrochloridu produktai
263-151-3	Riebalų rūgštys, reakcijos su dietilentriaminu produktai
400-160-5	Reakcijos su talo alyvos riebalų rūgštimis, dietanolaminu ir boro rūgštimi produktai
428-190-4	Reakcijos su 2,4-diamino-6-[2-(2-metil-1H-imidazol-1-il)etil]-1,3,5-triazinu ir cianurine rūgštimi produktas

Šiame rekomendaciniame dokumente bendrasis reakcijos produkto (-ų) pavadinimo formatas yra: „[pradinių medžiagų pavadinimas] reakcijos produktas (-ai)“. Teoriškai pavadinimai turi būti suteikiami anglų kalba pagal IUPAC nomenklatūros taisykles. Papildomai gali būti priskiriami kiti tarptautiniu mastu priimti žymikliai. Rekomenduojama keisti žodį „reakcija“, esantį tam tikros rūšies reakcijos, apibūdinamos bendru būdu, pavadinime, pvz., į „esterifikavimas“ arba „druskos formavimas“ ir kt. (žr. toliau rekomendacijas dėl keturių specifinių UVCB poklasių).

## 2. Šaltinis

Šaltiniai gali būti skirstomi į dvi grupes:

### 2.1. Biologinio pobūdžio šaltiniai

Biologinės kilmės medžiagos turi būti apibūdinamos pagal gentį, rūšį ir šeimą (pvz., *Pinus cembra*, *Pinaceae* reiškia: *Pinus* – gentis, *cembra* – rūšis, *Pinaceae* – šeima) ir, jei reikia, pagal giminę arba genetinį tipą. Jeigu reikia, taip pat turi būti nurodomas audinys arba organizmo dalis, pvz., kaulų čiulpai, kasa, arba stiebas, sėklos arba šaknys, naudota cheminei medžiagai ekstrahuoti.

### Pavyzdžiai

EB numeris	EB pavadinimas
------------	----------------

283-294-5	<p><i>Saccharomyces cerevisiae</i>, ekstr</p> <p><b>EB aprašymas</b></p> <p>Ekstraktai ir jų fiziškai modifikuoti dariniai, pavyzdžiui, tinktūra, betonas, absoliutai, eteriniai aliejai, aliejingoji derva, terpenai, terpenų neturinčios frakcijos, distiliatai, nuosėdos ir kt., gaunami iš <i>Saccharomyces cerevisiae</i>, <i>Saccharomycelaceae</i>.</p>
296-350-9	<p><i>Arnica mexicana</i>, ekstr.</p> <p><b>EB aprašymas</b></p> <p>Ekstraktai ir jų fiziškai modifikuoti dariniai, pavyzdžiui, tinktūros, betonas, absoliutai, eteriniai aliejai, aliejingoji derva, terpenai, terpenų neturinčios frakcijos, distiliatai, nuosėdos ir kt., gaunami iš <i>Arnica mexicana</i>, <i>Compositae</i>.</p>

## 2.2. Cheminiai arba mineraliniai šaltiniai

Kai teikiama informacija apie cheminių reakcijų produktus, pradinės medžiagos turi būti apibūdinamos pagal savo IUPAC pavadinimą anglų kalba. Mineraliniai šaltiniai turi būti apibūdinami bendrosiomis sąvokomis, pvz., fosfato rūdos, boksitas, kaolinas, mineralinės dujos, anglis, durpės.

## 3. Procesas

Gamybos procesai, jeigu atliekama naujų molekulių sintezė, identifikuojami pagal cheminės reakcijos tipą arba kaip rafinavimo etapo rūšis, pvz., ekstrahavimas, frakcionavimas, sodrinimas, arba kaip rafinavimo nuosėdos.

Kai kurių cheminių medžiagų, pvz., cheminių darinių, procesai turi būti apibūdinami kaip rafinavimo ir sintezės derinys.

### 3.1 Sinteze

Tarp pradinių medžiagų vykstanti tam tikra cheminė arba biocheminė reakcija, per kurią sukuriama cheminė medžiaga. Pavyzdžiui, Grignardo reakcija, sulfoninimas, fermentinis atskyrimas proteaze arba lipaze ir kt. Dauguma cheminių darinių gamybos reakcijų taip pat priklauso šiam tipui.

Naujai susintetintų cheminių medžiagų, kurių cheminė sudėtis negali būti pateikiama, pagrindiniai identifikatoriai yra pradinės medžiagos ir reakcijos detalizavimas, t. y. nurodomas cheminės reakcijos tipas. Cheminės reakcijos tipas parodo, kokios ir kiek molekulių turėtų būti cheminėje medžiagoje. Cheminių reakcijų tipai būna kelių rūšių: hidrolizė, esterinimas, alkilimas, chloravimas ir kt. Kadangi tai suteikia tik bendrąją informaciją apie įmanomas sukurti chemines medžiagas, daugeliu atvejų reikalingas chromatografinis „pirštų atspaudas“, kad būtų galima išsamiai apibūdinti ir identifiкуoti cheminę medžiagą.

#### Pavyzdžiai

EB numeriai	EB pavadinimas
294-801-4	Sėmenų aliejus, epoksidintas, reakcijos su tetraetilenpentaminu produktas
401-530-9	(2-hidroksi-4-(3-propenoksi)benzofenono ir trietoksisilano) ir (silicio ir



metiltrimetoksisilano hidrolizės produkto) reakcijos produktas

### 3.2 Rafinavimas

Natūralios arba mineralinės kilmės cheminės medžiagos gali būti rafinuojamos daugeliu būdų, keičiant ne sudėtinių dalių cheminę tapatybę, bet jų koncentraciją, pvz., augalo audinio apdorojimas šalčiu, po to – ekstrahavimas naudojant spiritą.

Rafinavimas gali būti toliau apibrėžiamas tokiuose procesuose kaip ekstrahavimas. Cheminės medžiagos identifikavimas priklauso nuo gamybos proceso tipo:

- o jei cheminės medžiagos gautos fiziniiais būdais, pvz., jas rafinuojant arba frakcionuojant, turi būti nurodomas ribinis intervalas ir parametras (pvz., molekulinis dydis, grandinės ilgis, virimo temperatūra, lakumo intervalas ir kt.);
- o jei cheminės medžiagos išgautos sodrinimo būdu, pvz., kaip metalurgijos procesų produktai, centrifugavimo nuosėdos, filtravimo nuosėdos ir kt., turi būti detalai apibūdinamas sodrinimo etapas ir gautos cheminės medžiagos bendroji sudėtis, palyginti su pradinės medžiagos sudėtimi.

#### Pavyzdžiai

EB numeris	EB pavadinimas
408-250-6	Organinių junginių volframo koncentratas (volframo heksachlorido reakcijos su 2-metilpropan-2-oliu, nonilfenoliu ir pentan-2,4-dionu produktai)

- o Kai susidaro specifinės reakcijos liekanų, pvz., nuodegų, dervų ir nelakių liekanų, turi būti apibūdinamas procesas ir nurodoma gautos cheminės medžiagos bendroji sudėtis.

#### Pavyzdžiai

EB numeris	EB pavadinimas
283-659-9	Alavas, lydinių liekanos <b>EB aprašymas</b> Cheminė medžiaga, gaunama naudojant ir gaminant alavą ir jo lydinius, gautus iš pradinių ir antrinių šaltinių, taip pat perdirbimo įrenginio tarpinių medžiagų. Daugiausia sudaryta iš alavo sudedamųjų dalių, bet gali apimti ir kitų spalvotųjų metalų liekanas ir jų sudedamąsias dalis.
293-693-6	Sojų miltai, baltymų ekstr. Liekanos <b>EB aprašymas</b> Šalutiniai produktai, kuriuose daugiausiai yra karbohidratų, pagaminti naudojant sojų, iš kurių pašalinti riebalai, etanolinę ištrauką.

- o Jei gaunami ekstraktai, turi būti apibūdinamas ekstrahavimo metodas, nurodomi ekstrahuojant naudoti tirpikliai ir kitos svarbios sąlygos (pvz., temperatūra / temperatūros intervalas).
- o Kai taikomas gamybos procesų derinys, kiekvienas gamybos etapas turi būti nurodomas (įprastu būdu) kartu su informacija apie šaltinį. Toks procesų derinys

yra labai svarbus, kai gaunami cheminiai dariniai.

#### Pavyzdžiai:

- Augalas pirmiausia ekstrahuojamas, gautas ekstraktas distiliuojamas ir distiliuota augalo frakcija naudojama cheminiam dariniui gauti. Gauta cheminė medžiaga gali būti toliau gryninama. Išgrynintas produktas galiausiai gali būti aiškiai apibrėžiamas pagal cheminę sudėtį, todėl cheminės medžiagos nebūtina identifikuoti kaip UVCB. Jei produktas tebelaikomas UVCB, procesų derinys gali būti apibūdinamas kaip distiliuoto augalo ekstrakto frakcijos išgrynintas cheminis darinys.
- Jei tolesnis ekstrakto apdorojimas apima tik fizinį išgavimą, sudėtis pasikeis, bet numatytos naujų molekulių sintezės nebus. Vis dėlto pasikeitus sudėčiai bus gauta kita cheminė medžiaga, pvz., augalo ekstrakto distiliatas arba nuosėdos.
- Gaminant naftos produktus, cheminis išgavimas ir skaidymas dažniausiai vykdomi kartu. Pavyzdžiui, po naftos distiliavimo atlikus krekingą susidaro pradinės medžiagos frakcija ir naujos molekulės. Tokiu atveju turi būti identifikuoti abu procesai arba distiliatas turi būti nurodomas kaip krekingo pradinė medžiaga. Ypač tai taikoma naftos dariniams, kurie gaunami sujungus kelis procesus. Tačiau naftos cheminės medžiagos gali būti identifikuojamos pagal atskirą specifinę sistemą (žr. 4.3.2.2 skyrių).

Jei ekstrakto cheminis darinys neapima sudedamųjų dalių, kurios yra tokios pat kaip ir pirminio ekstrakto, jis turi būti laikomas kita chemine medžiaga. Taikant šią taisyklę gali atsitikti taip, kad identifikavimas pagal pavadinimą ir apibūdinimą gali skirtis nuo ankstesnio EINECS pavadinimo ir apibūdinimo. Kai buvo kuriamas EINECS sąrašas, per skirtingus gamybos procesus gauti ekstraktai, įvairūs tirpikliai ir netgi fiziniai arba cheminiai dariniai dažnai būdavo registruojami pagal vieną įrašą. Tačiau pagal REACH reglamento reikalavimus tokios cheminės medžiagos turi būti registruojamos kaip atskiros cheminės medžiagos.

#### **4. Kiti cheminės medžiagos identifikavimo parametrai**

UVCB medžiaga turi apimti ne tik cheminį pavadinimą, šaltinį ir gamybos proceso specifikaciją, bet ir svarbią informaciją, kurios reikalaujama pagal REACH reglamento IV priedo 2 skirsnį.

Kiti identifikavimo parametrai gali būti ypač svarbūs kitoms tam tikro tipo UVCB medžiagoms. Gali būti tokie kiti papildomi identifikatoriai:

- Bendrasis cheminės sudėties aprašymas
- Chromatografinis „pirštų atspaudas“ arba kitokio tipo „pirštų atspaudas“
- Referencinė medžiaga (pvz., ISO)
- Fiziniai ir cheminiai parametrai (pvz., virimo temperatūra)
- Spalvos indekso numeris
- AISE numeris

Toliau atskirai pagal kiekvieną šaltinio ir proceso tipą pateikiamos specifinės rekomendacijos dėl pavadinimo, šaltinio ir informacijos apie procesą naudojimo taisyklių ir kriterijų identifikuojant UVCB medžiagas. Toliau pateikiamuose paragrafuose keturi UVCB medžiagų potipiai apibūdinami kaip biologinių arba cheminių / mineralinių šaltinių ir procesų derinys (sintezė arba rafinavimas).

#### **UVCB 1 potipis – šaltinis yra biologinio pobūdžio ir naudojamas sintetinio procesas**

Biologinės kilmės medžiaga gali būti modifikuojama naudojant (bio)cheminį procesą, kad būtų sukurtos sudedamosios dalys, kurių nėra pradinėje medžiagoje, pvz., augalo ekstrakto cheminis darinys arba ekstraktų veikimo fermentu produktas. Pavyzdžiui, baltymus galima

hidrolizuoti proteaze, tuomet sukuriama oligopeptidai. Arba galima karboksilinti medienos celiuliozę, tuomet gaunama karboksimetilceliuliozė (CMC).

Fermentacijos produktai taip pat gali būti priskiriami šiam UVCB potipiui. Pavyzdžiui, žlaugtas yra cukraus fermentacijos produktas, kurį, palyginti su cukrumi, sudaro daugybė įvairių sudedamųjų dalių. Cheminės medžiagos gali būti identifikuojamos tik pagal cheminę sudėtį, jei fermentacijos produktai toliau gryninami. Jos nebeidentifikuojamos kaip UVCB medžiagos.

Fermentai yra specialios grupės cheminė medžiaga, kuri gali būti išgauti ekstrahuojant, po to – rafinuojant biologinės kilmės šaltinį. Nors apie šaltinį ir procesą galima pateikti detalią informaciją, tai nėra specifinė informacija apie fermentus. Tokios cheminės medžiagos turi būti klasifikuojamos, joms suteikiamas pavadinimas ir jos identifikuojamos pagal specialią sistemą (žr. 4.3.2.3 skyrių).

Identifikuojant chemines medžiagas, turi būti aprašomas paskutinis proceso etapas ir (arba) kiti proceso etapai, būtini cheminės medžiagos tapatybei nustatyti.

Cheminio proceso aprašymas – tai proceso tipo (esterinimas, šarminė hidrolizė, alkilimas, chloravimas, keitimas ir kt.) ir aktualių proceso aplinkybių bendrasis aprašymas.

Biocheminių procesų aprašymas gali būti katalizės reakcijos bendrasis aprašymas, nurodant fermentų, kurie katalizuoja reakciją, pavadinimą.

Aprašant chemines medžiagas, kurios pagamintos fermentacijos būdu, arba rūšių (audinius) kultūras turi būti nurodoma: fermentuojamos rūšys, fermentacijos tipas ir bendrosios sąlygos (periodinė arba nenutrūkstama fermentacija, aerobinės, anaerobinės sąlygos, deguonies trūkumas, temperatūra, pH ir kt.). Taip pat turi būti nurodomi toliau vykdomi gamybos proceso etapai, per kuriuos išskiriami fermentacijos produktai, pvz., centrifugavimas, nusodinimas, ekstrahavimas ir kt. Jei šios medžiagos toliau rafinuojamos, gali susidaryti frakcija, koncentratas arba nuosėdos. Šios toliau apdorojamos cheminės medžiagos identifikuojamos pateikiant papildomą detalią informaciją apie tolesnius proceso etapus.

### **UVCB 2 potipis – šaltinis yra cheminio arba mineralinio pobūdžio ir naudojamas sintetinio proceso**

UVCB medžiagos, gautos iš cheminių arba mineralinių šaltinių, pagamintos per naujų molekulių sintetinio proceso, yra reakcijos produktai. Cheminių reakcijų produktų pavyzdžiai: esterinimo, alkilimo arba chloravimo produktai. Biocheminės reakcijos taikant išskirtus fermentus – specialaus tipo cheminės reakcijos. Tačiau jei taikomas sudėtinis biocheminis sintezės būdas, kai naudojami gyvi mikroorganizmai, susidarantią cheminę medžiagą geriau būtų laikyti fermentacijos produktu ir identifikuoti pagal fermentacijos procesą bei fermentacijos rūšis, o ne pagal pradinę medžiagą (žr. UVCB 4 potipį).

Ne visi reakcijos produktai turi būti automatiškai priskiriami UVCB medžiagoms. Jei reakcijos produktas gali būti patikimai apibrėžtas chemine sudėtimi (įskaitant keletą nukrypimų), jis turi būti laikomas chemine medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis (žr. 4.2.2 skyrių). Bet kai reakcijos produkto sudėtis nepakankamai žinoma arba sunkiai nustatoma, cheminė medžiaga turi būti identifikuojama kaip UVCB medžiaga (reakcijos produktas). Reakcijos produkto identifikavimas pagrįstas reakcijos pradinėmis medžiagomis ir (bio)cheminiu reakcijos procesu, per kurį sukuriama cheminė medžiaga.

#### **Pavyzdžiai**

<b>EB numeris</b>	<b>EINECS pavadinimas</b>	<b>CAS numeris</b>
294-006-2	Nonano dirūgštis, reakcijos su 2-amino-2-metil-1-propanoliu produktai	91672-02-5

294-148-5	Formaldehidas, reakcijos su dietileno glikoliu ir fenoliu produktai	91673-32-4
-----------	---	------------

Pagrindinis reakcijos produktų identifikatorius – gamybos proceso aprašymas. Identifikuojant cheminę medžiagą turi būti nurodomi galutiniai arba svarbiausi proceso etapai. Cheminio proceso aprašymas – tai proceso tipo (pvz., esterinimas, šarminė hidrolizė, alkilinimas, chloravimas, keitimas ir kt.) ir aktualių proceso aplinkybių bendrasis aprašymas. Biocheminis procesas turi būti aprašomas pagal reakcijos tipą, nurodant fermento, katalizuojančio reakciją, pavadinimą.

### **UVCB 3 potipis – šaltinis yra biologinio pobūdžio ir naudojamas rafinavimo procesas**

Biologinės kilmės UVCB medžiagos, gaunamos rafinavimo procese, kuriame specialiai kuriamos naujos molekulės, gali būti, pvz., ekstraktai, ekstraktų frakcijos, ekstraktų koncentratai, išgryninti ekstraktai arba biologinės kilmės medžiagų proceso liekanos.

Kai tik pradedamas ekstrakto tolesnis apdorojimas, jis nebegali būti identifikuojamas kaip cheminė medžiaga. Tai yra kita cheminė medžiaga, kuri priklauso kitam UVCB potipiui, pvz., frakcija arba ekstrakto nuosėdos. Turi būti nurodomi šių cheminių medžiagų papildomo (tolesnio) apdorojimo parametrai. Jei ekstraktas modifikuojamas per cheminę arba biologinę reakciją, per kurią sukuriama naujų molekulių (darinių), cheminė medžiaga identifikuojama pagal UVCB 2 potipio rekomendacijas arba 4.2 skyrių, taikomą aiškiai apibrėžtoms cheminėms medžiagoms.

Dėl toliau apdorojamų ekstraktų atskyrimo naujasis pavadinimas ir aprašymas gali skirtis nuo pavadinimo ir aprašymo, pateikiamo EINECS sąrašė. Kai buvo sudaromas sąrašas, toks atskyrimas nebuvo atliktas, todėl visų tipų ekstraktai, skirtingi jų tirpikliai ir tolesni apdorojimo etapai galėjo būti registruojami pagal vieną įrašą.

Pirmasis pagrindinis tokio potipio UVCB medžiagų identifikatorius yra organizmo, iš kurio atsiranda cheminė medžiaga, šeima, gentis ir rūšis. Jeigu reikia, taip pat turi būti nurodomas audinys arba organizmo dalis, pvz., kaulų čiulpai, kasa, arba stiebas, sėklos arba šaknys, naudota cheminei medžiagai ekstrahuoti. Kai organizmai mikrobiologinės kilmės, turi būti apibrėžta rūšies giminė arba genetinis tipas.

Jei UVCB medžiagos išgaunamos iš skirtingų rūšių, jos bus laikomos skirtingomis cheminėmis medžiagomis, net jei cheminė sudėtis bus panaši.

<b>Pavyzdžiai</b>	
<b>EB numeris</b>	<b>EINECS pavadinimas</b>
290-977-1	Oksiduoto kampešmedžio ( <i>Haematoxylon campechianum</i> ) ekstraktas <b>EB aprašymas</b> Ši medžiaga identifikuojama pagal spalvos indeksą, remiantis spalvinio indekso registracijos Nr. C.I. 75290 oksiduotas.
282-014-9	Kasos ekstraktai, deproteinuoti

Antrasis iš pagrindinių identifikatorių – cheminės medžiagos apdorojimas, pvz., ekstrahavimo procesas, frakcionavimo, gryninimo arba sukauptimo procesas arba procesas, kuris veikia liekanų sudėtį. Todėl ekstraktus rafinuojant skirtingais būdais, pvz., naudojant įvairius

tirpiklius arba įvairius gryninimo etapus, bus sukurtos skirtingos cheminės medžiagos.

Kuo daugiau cheminės medžiagos rafinavimo etapų taikoma, tuo didesnė tikimybė cheminę medžiagą apibrėžti pagal cheminę sudėtį. Tokiu atveju, modifikuojant skirtingas šaltinio rūšis arba skirtingus procesus, skirtingos cheminės medžiagos automatiškai nesukuriamos.

Biologinės kilmės medžiagos pagrindiniai identifikavimo parametrai – atitinkamų procesų aprašymas. Kai tai ekstraktai, apie ekstrahavimo procesą turi būti pateikiama tiek informacijos, kiek jos reikia cheminės medžiagos tapatybei nustatyti. Galiausiai turi būti nurodomas naudotas tirpiklis.

Kai toliau gaminant cheminę medžiagą apdorojama pagal tokius etapus kaip skaidymas ir sodrinimas, turi būti aprašoma, kurie gamybos proceso etapai yra derinami, pvz., ekstrahavimas derinamas su skaidymu, taip pat kokie yra ribiniai intervalai.

#### **UVCB 4 potipis – šaltinis yra cheminio arba mineralinio pobūdžio ir naudojamas rafinavimo procesas**

Nebiologinės kilmės medžiagos, t. y. medžiagos, kurios atsiranda iš mineralų, rūdų, anglies, gamtinių dujų ir žaliavinės naftos arba kitos chemijos pramonės žaliavos, susidaranti procese apgalvotai netaikant cheminių reakcijų, galėtų būti (išgrynintos) frakcijos, koncentratai arba šių procesų nuosėdos.

Anglis ir žaliavinė nafta naudojamos distiliavimo arba gazifikavimo procese, kai gaminamos įvairiausios cheminės medžiagos, pvz., naftos medžiagos, dujos ir kt., taip pat nuosėdos, pvz., dervos ir nuodegos. Labai dažnai distiliuotų ar kitaip frakcionuotų produktų apdorojimo procesas nenutraukiamas ir tęsiamas, įskaitant chemines reakcijas. Tokiais atvejais cheminė medžiaga turi būti identifikuojama pagal UVCB 2 potipio rekomendacijas, nes procesas yra svarbesnis negu šaltinis.

Naftos medžiagos identifikuojamos pagal specialią identifikavimo sistemą (žr. 4.3.2.2 skyrių). Cheminės medžiagos, kurioms taikoma minėta sistema, apima frakcijas ir cheminės reakcijos produktus.

Kitos cheminės medžiagos UVCB 4 potipyje gali apimti rūdas, rūdų koncentracijas ir nuodegas, turinčias kintamo kiekio metalų, kurie gali būti išgauti metalurginiu būdu.

Mineralai, tokie kaip bentonitas arba kalcio karbonatas, gali būti gaunami, pvz., skaidant rūgštis ir (arba) cheminio nusodinimo būdu arba jonų mainų kolonose. Kai cheminė sudėtis yra visiškai apibrėžta, mineralai turi būti identifikuojami pagal 4.2 skyriaus tam tikros dalies rekomendacijas. Jei mineralai gaunami tik mechaniniu, pvz., šlifavimo, sijojimo, centrifugavimo, flotacijos ir kt. būdu, jie vis dar laikomi tokiais pačiais mineralais kaip ir iškasti mineralai. Kai identifikuojami<sup>21</sup> gamybos procese gaunami mineralai gali būti laikomi tokiais pat mineralais, kaip ir natūraliai susidarantys mineralai, jei sudėtis yra panaši ir toksiškumo savybės vienodos.

Ne biologinės kilmės medžiagos pagrindiniai identifikavimo parametrai – atitinkamo proceso etapo (-ų) aprašymas.

Kai tai frakcijos, frakcionavimo procesas turi būti aprašomas nurodant išskirtos frakcijos parametrus ir intervalo galutinę ribą. Taip pat, jei būtina, turi būti nurodomi ankstesnio proceso etapai.

Kai taikomas sodrinimo etapas, turi būti nurodomas proceso tipas, pvz., išgarinimas, nusodinimas ir kt., ir santykis tarp pagrindinių sudedamųjų dalių pradinės koncentracijos ir galutinės koncentracijos, pateikiamas kartu su informacija apie ankstesnio proceso etapą (-

---

Toks pats natūraliai susidarantių ir chemiškai sukurtų mineralų identifikavimo būdas nebūtinai reiškia, kad teisiniai reikalavimai (pvz., atleidimas nuo registracijos) yra tokie patys.

us).

Nebiologinės kilmės nuosėdų pagrindiniai identifikavimo parametrai – proceso, per kurį susidarė nuosėdos, aprašymas. Toks procesas gali būti bet kokia fizinė reakcija, pvz., gryninimo, frakcionavimo, sodrinimo procesas, sukuriantis nuosėdas.

### **Analizės informacija**

UVCB cheminėms medžiagoms priskiriamos labai įvairios medžiagų rūšys, kurios skiriasi pagal tokius parametrus kaip šaltinis ir gamybos procesas. Todėl turėtų būti pateikti tinkami analizės metodai, skirti informacijai apie UVCB cheminės medžiagos sudėtį pateikti; jie bus skirtingi kiekvienu konkrečiu atveju. Be to, įžvalgos, kaip naudoti tokius metodus, nuolat atnaujinamos ir tobulinamos. Todėl registruotojui tenka atsakomybė pateikti tinkamus analizės duomenis, kad būtų pateikta kuo daugiau informacijos, leidžiančios identifikuoti cheminę medžiagą.

UVCB medžiagoms apibūdinti gali būti taikomi keli kokybiniai metodai; pavyzdžiui, UV/Vis, infraraudonųjų spindulių ir masės spektrometrija, branduolinis magnetinis rezonansas, rentgeno spindulių difrakcija.

Cheminės medžiagos sudėčiai apibūdinti turi būti pateikiami kiekybiniai duomenys, pvz., chromatogramos arba difrakcijos duomenys, kurie gali būti naudojami kaip „pirštų atspaudas“.

Analizės metodų aprašyme turi būti nurodyti taikomi eksperimentiniai protokolai ir pateiktų rezultatų aiškinimas.

### **4.3.2. Specifiniai UVCB medžiagų tipai**

Šiame skyriuje pateikiamos rekomendacijos dėl specifinių UVCB medžiagų grupių: cheminės medžiagos, kurių anglies atomų grandinės ilgis yra kintamas (4.3.2.1), cheminės medžiagos, išgautos iš naftos arba iš į naftą panašių šaltinių (4.3.2.2), ir fermentai (4.3.2.3).

#### **4.3.2.1 Kintamo anglies atomų grandinės ilgio cheminės medžiagos**

UVCB medžiagų grupė, susijusi su ilgos atomų grandinės alkilo cheminėmis medžiagomis, kurių anglies atomų grandinės ilgis yra kintamas, pvz., parafinai ir alkenai. Šios cheminės medžiagos išgaunamos iš natūralių riebalų, aliejų arba gaminamos sintezės būdu. Natūralūs riebalai gaunami iš augalų arba gyvūnų. Ilgų anglies atomų grandinių cheminės medžiagos, išgaunamos iš augalų, paprastai turi grandines tik su lyginiu atomų skaičiumi. Ilgų anglies atomų grandinių cheminės medžiagos, išgaunamos iš gyvulinių šaltinių, taip pat turi ir (kelias) grandines su neporiniu atomų skaičiumi. Sintetiniu būdu pagamintų ilgos anglies atomų grandinės cheminės medžiagos gali apimti visą anglies atomų, numeruojamų poriniais ir neporiniais skaičiais, grandinių intervalą.

### **Identifikatoriai ir pavadinimo suteikimo konvencija**

Grupė apima chemines medžiagas, kurių atskiros sudedamosios dalys turi bendrą struktūrinę savybę: viena arba daugiau ilgos atomų grandinės alkilo grupių su visada prijungta funkcinė grupe. Sudedamosios dalys skiriasi viena nuo kitos pagal vieną ar kelias alkilo atomų grandinės grupės savybes:

- Anglies atomų grandinės ilgis (anglies numeris)
- Įsotinimas
- Struktūra (linijinė arba išsišakojusi)
- Funkcinės grupės vieta

Sudedamųjų dalių cheminė tapatybė gali būti išsamiai aprašyta ir sistemiškai pavadinta naudojant tris toliau pateikiamus apibūdinimus:

- **Alkilo deskriptorius**, kuris parodo anglies atomų skaičių alkilo grupės (-ių) anglies atomo grandinės ilgyje (-iuose).
- **Funkcionalumo deskriptorius**, kuris nustato cheminės medžiagos funkcinę grupę, pvz., aminas, amonis, karboksirūgštis.
- **Druskos deskriptorius** – bet kurios druskos katijonas / anijonas, pvz., natriis ( $\text{Na}^+$ ), karbonatas ( $\text{CO}_3^{2-}$ ), chloridas ( $\text{Cl}^-$ ).

### Alkilo deskriptorius

- Apskritai alkilo deskriptorius C<sub>x</sub>-y susijęs su sočiaja linijine alkilo atomų grandine, apimančia visą atomų grandinės ilgį nuo x iki y, pvz., C<sub>8-12</sub> atitinka C<sub>8</sub>, C<sub>9</sub>, C<sub>10</sub>, C<sub>11</sub> ir C<sub>12</sub>.
- Turi būti nurodyta, jei alkilo deskriptorius susijęs tik su lyginiais arba nelyginiais alkilo atomų grandinės skaičiais, pvz., C<sub>8-12</sub> (lyginiai skaičiai).
- Turi būti nurodyta, jei alkilo deskriptorius susijęs (taip pat) su šakotąja alkilo atomų grandine, pvz., C<sub>8-12</sub> (šakotoji) arba C<sub>8-12</sub> (linijinė ir šakotoji).
- Turi būti nurodyta, jei alkilo deskriptorius susijęs (taip pat) su nesočiaja alkilo atomų grandine, pvz., C<sub>12-22</sub> (C<sub>18</sub> nesočioji).
- Siauras alkilo atomų grandinės ilgio išdėstymas neapima platesnio alkilo atomų grandinės ilgio išdėstymo ir atvirkščiai, pvz., C<sub>10-14</sub> neatitinka C<sub>8-18</sub>.
- Alkilo deskriptorius taip pat gali būti susijęs su alkilo atomų grandinės šaltiniu, pvz., „koko“ dalimi arba lajumi. Tačiau pasiskirstymas per anglies atomų grandinės ilgį atitinka pasiskirstymą per šaltinio atomų grandinės ilgį.

Prieš tai aprašyta sistema turi būti naudojama cheminėms medžiagoms, kurių anglies atomų grandinės ilgis kinta, aprašyti. Ji netinka aiškiai apibrėžtomis cheminėms medžiagoms, kurios gali būti identifikuojamos pagal aiškia cheminę struktūrą.

Informacija apie alkilo deskriptorius, funkcionalumo deskriptorius ir druskos deskriptorius – pavadinimo tokio tipo UVCB medžiagoms suteikimo pagrindas. Be to, informacija apie šaltinį ir procesą gali būti naudinga identifikuojant cheminę medžiagą dar tiksliau.

Pavyzdžiai		
Deskriptoriai	Pavadinimas	
<b>Alkilo deskriptorius</b> <b>Funkcionalumo deskriptorius</b> <b>Druskos deskriptorius</b>	alkilo atomų grandinės ilgiai C <sub>10-18</sub> riebalų rūgštys (karboksirūgštis) kalcio druska	riebalų rūgštys (C <sub>10-18</sub> ), kadmio druskos
<b>Alkilo deskriptorius</b> <b>Funkcionalumo deskriptorius</b> <b>Druskos deskriptorius</b>	di-C <sub>10-18</sub> -alkil-dimetilas amonis chloridas	di-C <sub>10-18</sub> -alkil-dimetilamonio chloridas

<b>Alkilo deskriptorius</b> <b>Funkcionalumo deskriptorius</b> <b>Druskos deskriptorius</b>	trimetilo lajaus alkilas amonis chloridas	trimetilo lajaus alkilo amonio chloridas
---	---	--

#### 4.3.2.2 Cheminės medžiagos, gautos iš naftos arba naftos produktų

Cheminės medžiagos, gautos iš naftos (naftos medžiagų) arba į naftą panašių produktų (pvz., anglies), yra labai sudėtingos ir kintančios arba iš dalies neapibrėžtos sudėties cheminės medžiagos. Šiame skyriuje naftos medžiagos pasitelktos siekiant parodyti, kaip identifiukuoti tokias specifinio tipo UVCB medžiagas. Tačiau toks pats metodas galėtų būti taikomas kitoms cheminėms medžiagoms, gautoms iš į naftą panašių šaltinių, pvz., anglies, identifiukuoti.

Pradinės medžiagos, naudotos naftos rafinavimo pramonėje, gali būti žalia nafta arba tam tikras specifinis srautas, gautas iš vieno arba daugiau procesų. Galutinių produktų sudėtis priklauso nuo gamyboje ir tolesniame rafinavimo procese naudotos žalios naftos (nes žalios naftos sudėtis, priklausomai nuo jos kilmės vietos, yra kintama). Todėl nuo proceso nepriklausantis naftos medžiagų sudėties kintamumas yra įprastas<sup>16</sup>.

##### 1. Pavadinimo suteikimo konvencija

Identifikuojant naftos medžiagas, rekomenduojama joms pavadinimą suteikti pagal nustatytą nomenklatūros sistemą<sup>22</sup>. Šis pavadinimas paprastai apima rafinavimo procesą, srauto šaltinį ir bendrąją sudėtį arba savybes. Jei 4–6 žiedus turintys kondensuoti aromatiniai angliavandeniliai cheminėje medžiagoje sudaro > 5 % masės, ši informacija turi būti pateikiama aprašyme. Naftos medžiagoms, turinčioms EINECS numerius, turi būti suteikiamas EK apraše esantis pavadinimas.

##### 2. Identifikatoriai

Naftos medžiagų identifikavimo terminai ir apibrėžimai paprastai apima srauto šaltinį, rafinavimo procesą, bendrąją sudėtį, anglies atomų skaičių, virimo temperatūros intervalą arba kitas atitinkamas fizines savybes ir vyraujančią angliavandenilių tipą<sup>21</sup>.

Turi būti pateikiami REACH reglamento VI priedo 2 skirsnio identifikavimo parametrai. Pripažinta, kad naftos medžiagos yra gaminamos pagal darbinės specifikacijas, o ne pagal sudėties specifikacijas. Todėl, norint naftos medžiagas identifiukuoti kuo aiškiau, tokios savybės kaip pavadinimas, anglies atomų grandinės ilgis, virimo temperatūra, klampumas, ribinės vertės ir kitos fizinės savybės yra naudingesnės nei informacija apie sudėtį.

Nors cheminė sudėtis nėra pagrindinis UVCB medžiagų identifikatorius, turi būti nurodomos žinomos visos pagrindinės sudedamosios dalys, kurių koncentracija  $\geq 10\%$  ir žinomos sudedamosios dalys, kurių koncentracija  $< 10\%$ , o sudėtis turi būti apibūdinama bendraisiais terminais, pvz., nurodomas molekulinės masės intervalas, ar tai yra alifatinės, ar aromatinės medžiagos, hidrinimo lygis ir kita svarbi informacija. Sudedamųjų dalių grupės, kurių negalima identifiukuoti atskirai, taip pat turėtų būti apibūdintos tais pačiais parametrais. Be to, mažos koncentracijos kita sudedamoji dalis, turinti įtakos klasifikacijai pagal pavojingumą, turi būti identifiukuojama pagal pavadinimą arba būdingąją koncentraciją.

---

US EPA (1978) TSCA PL 94-469 Candidate list of chemicals substances Addendum I. Generic terms covering petroleum refinery process streams. US EPA, Office of Toxic Substances, Washington DC 20460.



### 4.3.2.3 Fermentai

Fermentai dažniausiai sukuriama fermentuojant mikroorganizmus, bet kartais gaunami iš augalų arba gyvūnų. Skysto fermento koncentratas, susidarantis atliekant fermentaciją arba ekstrahavimą ir tolesniuose gryninimo etapuose, turi ne tik vandens, bet ir aktyvių fermentinių baltymų ir kitų sudėtinių dalių, apimančių fermentacijos nuosėdas, t. y. baltymus, peptidus, aminorūgštis, karbohidratus, lipidus ir neorganines druskas.

Baltyminiai fermentai ir kitos sudedamosios dalys, susidaranti fermentacijos arba ekstrahavimo procese, išskyrus vandenį, kurį galima atskirti nepaveikiant baltyminių fermentų stabilumo arba nekeičiant jų sudėties, identifikacijos tikslais turi būti laikomi chemine medžiaga.

Baltyminiai fermentai paprastai sudaro 10-80 % fermentinės medžiagos masės (w/w). Kitų sudedamųjų dalių procentinė dalis kinta ir priklauso nuo naudojamo gamybos organizmo, fermentacijos terpės, fermentacijos procesą veikiančių parametrų, taip pat nuo tolesnio gryninimo. Tačiau sudedamųjų dalių sudėtis paprastai išliks atitinkanti toliau lentelėje nurodytas ribas.

Aktyvus baltyminis fermentas	10–80 %;
Kiti baltymai + peptidai ir aminorūgštys	5–55 %;
Karbohidratai	3–40 %;
Lipidai	0–5 %;
Neorganinės druskos	1–45 %;
Iš viso	100 %

Fermentinė medžiaga turi būti laikoma UVCB medžiaga, nes sudėtis yra kintama ir žinoma tik jos dalis. Baltyminis fermentas turi būti laikomas UVCB medžiagos sudedamąja dalimi. Ypač išgryninti fermentai gali būti identifikuojami kaip aiškiai apibrėžtos sudėties cheminės medžiagos (vieno komponento cheminės medžiagos arba cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis), todėl turi būti atitinkamai identifikuojami.

Pagal EINECS pagrindinis fermentų identifikatorius – katalizinis aktyvumas. Fermentai įrašomi, nurodant bendrą informaciją be tolesnės specifikacijos, arba specifinę informaciją apie pirminį organizmą arba substratą.

Pavyzdžiai		
EB numeris	EINECS pavadinimas	CAS numeris
278-547-1	Proteinazė, <i>Bacillus neutral</i>	76774-43-1
278-588-5	Proteinazė, <i>Aspergillus neutral</i>	77000-13-6
254-453-6	Elastazė (kiaulių kasa)	39445-21-1
262-402-4	Mananazė	60748-69-8

Pagal Europos Komisijos užsakytą fermentų tyrimą siūloma fermentus identifikuoti atsižvelgiant į tarptautinę fermentų nomenklatūros sistemą IUBMB (Tarptautinė biochemijos ir molekulinės biologijos sąjunga)<sup>23</sup>. Šiuo metodu, kuriuo grindžiamas šis rekomendacinis dokumentas, atliekamas sistemingesnis, detalesnis ir išsamesnis fermentų identifikavimas, palyginti su EINECS identifikavimu.

### 1. Pavadinimo suteikimo konvencija

Pavadinimas fermentams suteikiamas pagal IUBMB nomenklatūros konvencijas.

Pagal IUBMB klasifikavimo sistemą kiekvienam fermentų tipui ir kiekvienai katalizinei funkcijai suteikiamas unikalus keturių skaitmenų numeris (pvz., 3.2.1.1 –  $\alpha$ -amilazei)<sup>24</sup>. Kiekvienas atskiras numeris gali apimti fermentus, kurių aminorūgšties seka ir kilmė skiriasi, tačiau jų funkcionalumas yra vienodas. IUBMB nomenklatūros pavadinimas ir numeris turi būti naudojamas cheminei medžiagai identifikuoti. IUBMB nomenklatūroje fermentai suskirstyti į šešias pagrindines grupes:

- 1. Oksidoreduktazė
- 2. Transferazė
- 3. Hidrolazės
- 4. Liazė
- 5. Izomerazė
- 6. Ligazė

Toliau pateikiamu pavyzdžiu parodoma, kaip daromas įrašas pagal IUBMB nomenklatūrą:

EB 3.4.22.33

**Patvirtintas pavadinimas:** bromelijų vaisius

**Reakcija:** baltymų, turinčių labai įvairius peptidinius ryšius, hidrolizė. Bz-Phe-Val-Arg<sup>+</sup>NHMec yra tinkamas sintezės substratas, tačiau ant Z-Arg-Arg-NHMec (palyg. bromelijos stiebo) reakcija nevyksta.

**Kitas (-i) pavadinimas (-ai):** bromelijų sultys, ananasai, bromelazė, bromelainas, ekstranzė, bromelijų sultys, pinazė, ananasų fermentas, traumanazė, vaisių bromelainas FA2

**Pastabos:** iš ananaso augalo, *Ananas comosus*. Šiek tiek slopina vištų cistatinas. Pinguinainas (anksčiau EB 3.4.99.18) – kita cisteino endopeptidazė, panašiai veikianti mažų molekulių substratus, gaunama iš susijusio augalo, *Bromelia pinguin*, tačiau pinguinainas skiriasi nuo bromelaino, kurį slopina vištų cistatinas [4]<sup>25</sup>. Priklauso peptidazės šeimai C1<sup>26</sup> (papaino šeimai). Anksčiau buvo priskirtas numeris EB 3.4.22.5 ir įtrauktas į EB 3.4.22.4,

---

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

<sup>24</sup> Terminai „EB numeris“ (≡ Enzyme Commission number) ir „IUBMB numeris“ dažnai yra sinonimai. Norint išvengti nesusipratimų, rekomenduojama keturių skaičių numerį, esantį IUBMB, apibūdinti terminu „IUBMB numeris“.

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

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

CAS registro numeris: Nr. 9001--00-7

**Nuorodos į kitas duomenų bazes:**

[BRENDA \(http://www.brenda-enzymes.org/\)](http://www.brenda-enzymes.org/)

[EXPASY \(http://enzyme.expasy.org/EC/3.4.22.33\)](http://enzyme.expasy.org/EC/3.4.22.33)

[MEROPS \(http://merops.sanger.ac.uk/index.shtml\)](http://merops.sanger.ac.uk/index.shtml)

**Bendrosios nuorodos:**

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

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

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

**Fermentų klasifikavimo pagal IUBMB sistemą pavyzdžiai**

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

**Proteazė numeruojama pagal tokius kriterijus:**

3.	<b>Hidrolazės</b>
3.4	<b>Hidrolizuoja peptidų junginius (peptidazes). Poklasiai:</b>
3.4.1	α-amino-acil-peptido hidrolazės (dabar EB Nr. 3.4.11)
3.4.2	Peptidilaminorūgšties hidrolazės (dabar EB Nr. 3.4.17)
3.4.3	Dipeptidų hidrolazės (dabar EB Nr. 3.4.13)
3.4.4	Peptidilpeptido hidrolazės (dabar perklasifikuotos į EB Nr. 3.4)
3.4.11	Amino-peptidazės
3.4.12	Peptidilaminorūgšties hidrolazės arba acilaminorūgšties hidrolazės (dabar perklasifikuotos į 3.4)
3.4.13	Dipeptidazės
3.4.14	Dipeptidilpeptidazės ir tripeptidilpeptidazės
3.4.15	Peptidildipeptidazės
3.4.16	Serino rūšies karboksipeptidazės
3.4.17	Metalo karboksipeptidazės
3.4.18	Cisteino rūšies karboksipeptidazės

3.4.19	Omega peptidazės
3.4.21	Serino endopeptidazės
<b>Toliau identifikuojami specifiniai fermentai:</b>	
3.4.21.1	chimotoripsinas
3.4.21.2	chimotoripsinas C
3.4.21.3	metridinas
3.4.21.4	tripsinas
3.4.21.5	trombinas
3.4.21.6	krešėjimo faktorius Xa
3.4.21.7	plazminas
3.4.21.8	dabar įtrauktas į medžiagas, kurių numeriai EB 3.4.21.34 ir EB 3.4.21.35
3.4.21.9	enteropeptidazė
3.4.21.10	akrozinas
3.4.21.11	dabar įtrauktas į medžiagas, kurių numeriai EB 3.4.21.36 ir EB 3.4.21.37
3.4.21.12	12 a-litiko endopeptidazė
...	
3.4.21.105	
3.4.99	Nežinomo katalizinio mechanizmo endopeptidazės

**EINECS pavyzdžiai, papildomai pridėjus IUBMB numerius**

EB numeris	EINECS pavadinimas	CAS numeris	IUBMB numeris
278-547-1	Proteinazė, <i>Bacillus neutral</i>	76774-43-1	3.4.24.28
232-752-2	Subtilizinas	9014.01.01	3.4.21.62
232-734-4	Celiulazė	9012-54-8	3.2.1.4

## 2. Identifikatoriai

Fermentinės medžiagos identifikuojamos pagal sudėtyje esančius baltyminius fermentus (IUBMB nomenklatūra) ir kitas sudedamąsias dalis, gautas fermentacijos procese. Kiekviena specifinė sudedamoji dalis, išskyrus baltyminius fermentus, koncentracijoje sudaro ne daugiau kaip 1 %. Jei tokių specifinių sudedamųjų dalių tapatybė nežinoma, jos gali būti priskirtos tam tikrai grupei (t. y. baltymai, peptidai, aminorūgštys, karbohidratai, lipidai arba neorganinės druskos). Tačiau jei sudedamųjų dalių tapatybė žinoma, jas būtina nurodyti. Tačiau atskiros sudedamosios dalys turi būti nurodomos, jeigu jų tapatybė yra žinoma arba jeigu jų koncentracija yra lygi arba didesnė nei 10 %, arba jeigu jos yra svarbios atliekant klasifikavimą ir ženklimą arba PBT vertinimą<sup>27</sup>.

### **Baltyminiai fermentai**

Koncentrate esantys baltyminiai fermentai turi būti identifikuojami pagal:

- IUBMB numeris
- IUBMB suteiktus pavadinimus (sistemini pavadinimą, fermento pavadinimą, sinonimus)
- IUBMB pateiktos pastabos
- Reakciją ir reakcijos tipą
- EB numerį ir pavadinimą, jei reikia
- CAS numerį ir pavadinimą, jei toks yra

Turi būti nurodoma fermento sukelta reakcija. Šią reakciją apibrėžia IUBMB.

#### **Pavyzdys**

.alfa.-amilazė: polisacharidas, apimantis .alfa.-(1-4)-sujungtas gliukozės molekulės + H<sub>2</sub>O = maltooligosacharidai. 1,4-.alfa.-d-gliukozidinių junginių polisachariduose, apimančiuose tris ar daugiau 1,4-.alfa.-sujungtų d-gliukozės molekulių, endohidrolizė.

Reakcijos tipas turi būti nurodomas atsižvelgiant į fermentų klases. Tai galėtų būti oksidacija, redukcija, pašalinimas, papildymas arba reakcijos pavadinimas.

#### **Pavyzdys**

.alfa.-amilazė: o-gliukozidinės jungties hidrolizė (endohidrolizė).

### **Sudedamosios dalys, kurios nėra baltyminiai proteinais**

Visos sudedamosios dalys, kurios sudaro  $\geq 10$  % masės arba kurios turi būti klasifikuojamos, ženklinamos ir (arba) vertinamos kaip PBT<sup>28</sup>, turi būti identifikuojamos. Sudedamosios dalys, kurių koncentracija mažesnė nei 10 %, gali būti pateikiamos kaip cheminė grupė. Turi būti nurodomos jų būdingoji (-osios) koncentracija (-os) arba koncentracijos intervalai, t. y.:

- (Gliko)proteinais
- Peptidai ir aminorūgštys
- Karbohidratai

Daugiau informacijos apie PBT vertinimą ir susijusius kriterijus galima rasti Rekomendacijose dėl informacijai keliamų reikalavimų ir cheminės saugos vertinimo, R11 skyriuje: PBT vertinimas. Daugiau informacijos apie PBT įvertinimą ir aktualius koncentracijos apribojimus galima rasti RIP 3.2 TGD Cheminio saugumo vertinimo skyriuje, PBT vertinimo dalyje.

- Lipidai
- Neorganinės medžiagos (pvz., natrio chloridas arba kitos neorganinės druskos)

Jei neįmanoma identifikuoti visų kitų fermentinio koncentrato sudedamųjų dalių, turi būti nurodomas gamybos organizmo pavadinimas (gentis ir giminė arba genetinis tipas, jei būtina), kaip ir kitų biologinės kilmės UVCB medžiagų.

Jei įmanoma, gali būti nurodomi papildomi parametrai, pvz., funkciniai parametrai (t. y. pH arba optimali temperatūra ir intervalai), kinetiniai parametrai (t. y. tam tikras aktyvumas arba apyvirtos skaičius), ligandai, substratai, produktai ir kofaktoriai.

## 5. Cheminių medžiagų tapatumo patikrinimo kriterijai

Kai skirtingų gamintojų ir (arba) importuotojų cheminės medžiagos tikrinamos, ar jos gali būti laikomos tapačiomis, ar ne, turi būti vadovaujama tam tikromis taisyklėmis. Taisyklės, kurios buvo taikomos sudarant EINECS, reikia laikyti bendru cheminės medžiagos identifikavimo ir pavadinimo jai suteikimo, kartu ir potencialaus bendro šios konkrečios cheminės medžiagos registratoriaus suradimo pagrindu<sup>5, 6, 16, 29, 30</sup>. Tačiau cheminės medžiagos, kurios nelaikomos tapačiomis, gali būti laikomos susijusiomis pagal savo sandarą, jei tai patvirtina ekspertas. Vis dėlto galima keistis duomenimis apie šias chemines medžiagas, jei tai moksliskai pagrindžiama. Tačiau minėtas klausimas šiame rekomendaciniame dokumente nenagrinėjamas. Jis nagrinėjamas *Rekomendacijose dėl keitimosi duomenimis*.

- Vieno komponento cheminėms medžiagoms turi būti taikoma  $\geq 80$  % taisyklė, o cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis turi būti apibrėžiamos.

Koks cheminių medžiagų vertinimas (techninis, teorinis ar analizės) atliekamas, neturi reikšmės. Tai reiškia, kad tapati cheminė medžiaga gali turėti skirtingas švarumo ir (arba) užterštumo savybes, priklausomai nuo rūšies. Tačiau aiškiai apibrėžtas chemines medžiagas turi sudaryti vienoda (-os) pagrindinė (-ės) sudedamoji (-osios) dalis (-ys) ir tik tos leidžiamos priemaišos, kurios susidarė gamybos procese (daugiau informacijos pateikiama 4.2 skyriuje), ir priedai, būtini cheminei medžiagai stabilizuoti.

- Atliekant registraciją, hidratuotas ir bevandenės sudedamąsias dalis reikia laikyti tapačiomis cheminėmis medžiagomis.

Pavyzdžiai			
Pavadinimas ir formulė	CAS numeris	EB numeris	Taisyklė
Vario sulfatas ( $\text{Cu} \cdot (\text{H}_2\text{O}_4 \text{ S})$ )	7758-98-7	231-847-6	
Sieros rūgštis, vario (2+) druskos (1:1), pentahidratas ( $\text{Cu} \cdot \text{H}_2\text{O}_4 \text{ S} \cdot 5 \text{ H}_2\text{O}$ )	7758-99-8		Vietoj šios cheminės medžiagos įregistruota jos bevandenė forma (EB numeris: 231-847-6)

Hidratuotoms ir bevandenėms formoms priskiriami skirtingi cheminiai pavadinimai ir skirtingi CAS numeriai.

- Rūgštys arba bazės ir jų druskos turi būti laikomos skirtingomis cheminėmis medžiagomis.

### Pavyzdžiai

Vollmer et al. (1999) Compilation of EINECS: Descriptions and definitions used for substances, impurities and mixtures. Tox Env Chem Vol. 65, p. 113–122.

Manual of Decisions, Criteria for reporting substances for EINECS, ECB web-site; Geiss et al. 1992, Vollmer et al. 1998, Rasmussen et al. 1999.

EB numeris	Pavadinimas	Taisyklė
201-186-8	Peracto rūgštis $C_2H_4O_3$	Ši cheminė medžiaga negali būti laikoma tapačia, pavyzdžiui, savo natrio druskai (EINECS Nr. 220-624-9)
220-624-9	Natrio glikolatas $C_2H_4O_3 \cdot Na$	Ši cheminė medžiaga negali būti laikoma tapačia atitinkamai savo rūgščiai (EINECS Nr. 201-186-8)
202-426-4	2-chloroanilinas $C_6H_6ClN$	Ši cheminė medžiaga negali būti laikoma tapačia, pavyzdžiui, 2-chloroanilino hidrobromidui (1:1) ( $C_6H_6ClN \cdot HBr$ )

- Atskiros druskos (pvz., natrio arba kalio) turi būti laikomos skirtingomis cheminėmis medžiagomis.

### Pavyzdžiai

EB numeris	Pavadinimas	Taisyklė
208-534-8	Natrio benzoatas $C_7H_5O_2 \cdot Na$	Ši cheminė medžiaga negali būti laikoma tapačia, pavyzdžiui, kalio druskai (EINECS Nr. 209-481-3)
209-481-3	Kalio benzoatas $C_7H_5O_2 \cdot K$	Ši cheminė medžiaga negali būti laikoma tapačia, pavyzdžiui, natrio druskai (EINECS Nr. 208-534-8)

- Šakotosios arba linijinės alkilo grandinės turi būti laikomos skirtingomis cheminėmis medžiagomis.

### Pavyzdžiai

EB numeris	Pavadinimas	Taisyklė
295-083-5	Fosforo rūgštis, dipentilo esteris, šakotoji arba linijinė	Ši cheminė medžiaga negali būti laikoma tapačia atskiroms cheminėms medžiagoms: šakotosioms fosforo rūgštims, dipentilo esterio arba linijinėms fosforo rūgštims, dipentilo esterio grandinėms.



- Cheminės medžiagos pavadinime turi būti nurodoma, kad tai šakotosios grandinės grupė. Cheminėms medžiagoms, kuriose yra alkilo grupių, apie kurias informacija nepateikta, apima tik nešakotąsias linijines grandines, nebent nurodyta kitaip.

<b>Pavyzdžiai</b>		
<b>EB numeris</b>	<b>Pavadinimas</b>	<b>Taisyklė</b>
306-791-1	Riebalų rūgštys, C <sub>12-16</sub>	Tapačiomis laikomos tik linijinės ir nešakotosios alkilo grupės cheminės medžiagos.
279-420-3	Alkoholiai, C <sub>12-14</sub>	
288-454-8	Amino, C <sub>12-18</sub> -alkilmetilas	

- Cheminės medžiagos, kuriose yra alkilo grupių, ir kurios apima papildomus terminus, pavyzdžiui, iso, neo, šakotoji ir pan., neturėtų būti laikomos tapačiomis cheminėmis medžiagomis, jei tai nenurodyta.

<b>Pavyzdžiai</b>		
<b>EB numeris</b>	<b>Pavadinimas</b>	<b>Taisyklė</b>
266-944-2	Gliceridai, C <sub>12-18</sub> Ši cheminė medžiaga identifikuojama pagal SDA cheminės medžiagos pavadinimą: C <sub>12</sub> -C <sub>18</sub> trialkilgliceridas ir pranešimo apie SDA numeris: 16-001-00	Ši cheminė medžiaga negali būti laikoma ta pačia C <sub>12-18</sub> -iso cheminei medžiagai su sočiosiomis alkilo grandinėmis, kurios visais atvejais yra šakotosios.

- Rūgščių arba alkoholių alkilo grandinės ir kt. turi būti laikomos tik priklausančiomis sočiosioms grandinėms, nenurodant detalios specifikacijos. Jei grandinės yra nesočiosios, tai turi būti nurodoma. Jos laikomos skirtingomis cheminėmis medžiagomis.

<b>Pavyzdžiai</b>		
<b>EB numeris</b>	<b>Pavadinimas</b>	<b>Taisyklė</b>
200-313-4	Stearino rūgštis, gryna C <sub>18</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>	Ši cheminė medžiaga negali būti laikoma tapačia grynai oleino rūgščiai C <sub>18</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub> (EINECS Nr. 204-007-1)

- Chiralinį centrą turinčios cheminės medžiagos

Vieną stereocentrą turinti cheminė medžiaga gali būti dviejų formų (veidrodiniai atspindžiai), kurios skiriasi kaip dešinė ir kairė rankos (enantiomerai). Jeigu nėra priešingybės požymių, laikoma, kad cheminė medžiaga yra dviejų formų vienodas

(raceminis) mišinys.

<b>Pavyzdžiai</b>		
<b>EB numeris</b>	<b>Pavadinimas</b>	<b>Taisyklė</b>
201-154-3	2-chloropropan-1-olis	Atskiri enantiomerai (R)-2-chloropropan-1-olis ir (S)-2-chloropropan-1-olis nėra laikomi tapačiais šiam įrašui

Racematai laikomi cheminėmis medžiagomis su keliomis sudedamosiomis dalimis. Jeigu cheminė medžiaga buvo papildyta atskira enantiomerine forma, taikomos vienos sudedamosios dalies ar kelių sudedamųjų dalių cheminėms medžiagoms taikomos taisyklės, t. y. priklausomai nuo izomerų koncentracijos intervalų, cheminė medžiaga yra vienos arba kelių sudedamųjų dalių cheminė medžiaga.

Kelis stereocentrus turinčios cheminės medžiagos gali būti  $2^n$  formų ( $n$  – stereocentru skaičius). Šios skirtingos formos gali turėti skirtingas viena kitą veikiančias fizines ir chemines, toksikologines ir (arba) ekotoksikologines savybes. Jos turėtų būti laikomos atskiromis cheminėmis medžiagomis.

- Neorganiniai katalizatoriai

Neorganiniai katalizatoriai laikomi mišiniais. Atliekant identifikavimą, sudėtyje esantys metalai arba metalo junginiai turėtų būti laikomi atskiromis cheminėmis medžiagomis (naudojimo būdų nurodyti nereikia).

<b>Pavyzdžiai</b>		
	<b>Pavadinimas</b>	<b>Taisyklė</b>
	Kobalto oksido-aliuminio oksido katalizatorius	Turi būti identifikuojami atskirai kaip: <ul style="list-style-type: none"> <li>- Kobalto II oksidas</li> <li>- Kobalto III oksidas</li> <li>- Aliuminio oksidas</li> <li>- Aliuminio kobalto oksidas</li> </ul>

- Vienodą IUBMB numerį turintys fermentų koncentratai, nepaisant naudojamų skirtingų gamybos organizmų, bet įrodžius, jog pavojingumo savybės reikšmingai nesiskiria, ir užtikrinus, kad taikoma ta pati klasifikacija, gali būti laikomi tapačiomis cheminėmis medžiagomis.

### **Cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis**

Direktyva 67/548/EEB buvo reglamentuojamas cheminių medžiagų pateikimas rinkai. Cheminių medžiagų gamybos būdas nebuvo svarbus. Todėl rinkai pateikta cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis buvo įtraukiama į EINECS, jei *visos* jos atskiros sudedamosios dalys buvo įrašytos į EINECS, pvz., difluorbenzeno izomerinis mišinys buvo įtraukiamas į EINECS pagal įrašus 1,2-difluorbenzenas (Nr. 206-680-7), 1,3-difluorbenzenas

(Nr. 206-746-5) ir 1,4-difluorbenzenas (Nr. 208-742-9), nors izomerinis mišinys atskirai į EINECS nebuvo įtraukiamas.

Pagal REACH reglamentą reikalaujama registruoti pagamintas chemines medžiagas. Pagal REACH reglamentą reikalaujama registruoti pagamintas chemines medžiagas. Nustatant, kuriuos cheminės medžiagos gamybos etapus apima apibrėžtis „gamyba“, sprendimas kiekvienu atveju priimamas atskirai (pvz., skirtingi gryninimo arba distiliavimo etapai). Jei pagaminama cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis, ji turi būti registruojama (išskyrus, jei registruojamos atskiros jos sudedamosios dalys, žr. 4.2.2.4 skyrių), pvz., jei pagamintas difluorbenzeno izomerinis mišinys, tuomet turi būti registruojamas difluorbenzenas, kaip izomerinis mišinys. Tačiau registruojant chemines medžiagas su keliomis sudedamosiomis dalimis tokios cheminės medžiagos tikrinti nereikia, jei apie atskiras sudedamąsias dalis pateikiama pakankamai informacijos, kuria apibūdinamos cheminės medžiagos pavojingumo savybės. Jei pagaminti atskiri izomerai – 1,2-difluorbenzenas, 1,3-difluorbenzenas ir 1,4-difluorbenzenas – ir po to jie sumaišyti, turi būti registruojami atskiri izomerai, o izomerinis mišinys bus laikomas mišiniu.

Cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis, kurios pagrindinės sudedamosios dalys yra A, B ir C, neturėtų būti laikoma tapačia cheminei medžiagai su keliomis sudedamosiomis dalimis, kurios pagrindinės sudedamosios dalys yra A ir B, arba A, B, C ir D reakcijos mase.

- Cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis nelaikoma lygia cheminei medžiagai, turinčiai tik dalį atskirų sudedamųjų dalių.

<b>Pavyzdžiai</b>		
<b>EB numeris</b>	<b>Pavadinimas</b>	<b>Taisyklė</b>
207-205-6	2,5-difluortoluenas	Šios dvi cheminės medžiagos nelaikomos tapačiomis difluortolueno izomeriniam mišiniui, nes jos yra tik visų galimų izomerų dalis.
207-211-9	2,4-difluorotoluenas	

- Registruojant cheminę medžiagą su keliomis sudedamosiomis dalimis, atskiros sudedamosios dalys neįtraukiamos.

<b>Pavyzdžiai</b>		
<b>EB numeris</b>	<b>Pavadinimas</b>	<b>Taisyklė</b>
208-747-6	1,2-dibrometilenas	Ši cheminė medžiaga apibūdina cis- ir trans-izomerų mišinius. Atskiros cheminės medžiagos (1Z)-1,2-dibrometenas ir (1E)-1,2-dibrometenas registruojant izomerinius mišinius neįtraukiamos.

### UVCB medžiagos

- UVCB medžiaga, turinti siaurą sudedamųjų dalių išsidėstymą, nelaikoma tapačia UVCB medžiagai, turinčiai platesnę sudėtį, ir atvirkščiai.

<b>Pavyzdžiai</b>		
<b>EB numeris</b>	<b>Pavadinimas</b>	<b>Taisyklė</b>
288-450-6	Amino, C12–18-alkil, acetatas	Cheminės medžiagos aminai, C12–14-alkil, acetatai arba aminai, C12–20-alkil, acetatai, arba cheminės medžiagos, kurių alkilo grandinė turi lyginį atomų skaičių, nelaikomos tapačiomis šiai cheminei medžiagai.

- Cheminė medžiaga, kuri apibūdinama pagal rūšį ir (arba) gentį, nelaikoma tapačia cheminei medžiagai, išskirtai iš kitų rūšių ir (arba) genčių.

<b>Pavyzdžiai</b>		
<b>EB numeris</b>	<b>Pavadinimas</b>	<b>Taisyklė</b>
296-286-1	Gliceridai, saulėgražų aliejus di-	Ši cheminė medžiaga nelaikoma tapačia gliceridui, sojų di- (EINECS Nr. 271-386-8), ir gliceridui, lajaus di- (EINECS) Nr. 271 -388 -9)
232-401-3	Sėmenų aliejus, epoksidintas	Ši cheminė medžiaga nelaikoma tapačia oksiduotam sėmenų aliejui (EINECS Nr. 272-038-8), maleinizuotam sėmenų aliejui (EINECS Nr. 268-897-3), epoksidiniam ricinos aliejui (kuris neįrašytas į EINECS).

- Išgrynintas ekstraktas arba koncentratas laikomi cheminėmis medžiagomis, kurios skiriasi nuo ekstrakto.

<b>Pavyzdžiai</b>		
<b>EB numeris</b>	<b>Pavadinimas</b>	<b>Taisyklė</b>
232-299-0	Rapsų aliejus Ekstraktai ir jų fiziškai modifikuoti dariniai. Sudaryti daugiausia iš eruko, linolo ir oleino riebalų rūgščių gliceridų. ( <i>Brassica napus</i> , <i>Cruciferae</i> )	Cheminė medžiaga (Z)-dokoiz-13-eno rūgštis (eruko rūgštis) yra cheminės medžiagos rapsų aliejaus sudedamoji dalis. Eruko rūgštis nelaikoma tapačia rapsų aliejui, nes ji yra iš rapsų aliejaus išgauta gryna cheminė medžiaga. Eruko rūgštis turi savo įrašą EINECS (Nr. 204-011-3).

		<p>Išgauti palmitino, oleino, linolo, linoleno, eruko ir eikozeno rūgščių mišiniai nelaikomi tapačiais rapsų aliejui, nes šios sudedamosios dalys nesudaro viso aliejaus.</p>
--	--	---

## 6. Cheminės medžiagos tapatybės užklausa

Rekomendacijos, kaip identifikuoti chemines medžiagas ir joms suteikti pavadinimą, pateikiamos šio rekomendacinio dokumento 4 skyriuje. Šiomis rekomendacijomis turi būti vadovojamasi nustatant, ar cheminės medžiagos gali būti laikomos tapačiomis įgyvendinant REACH ir CLP reglamentų reikalavimus. Toliau pateikiama išsamesnė informacija apie užklausas dėl medžiagų.

Kiekvienas gamintojas arba kiekvienas importuotojas pagal 4 straipsnį gali (būdamas visiškai atsakingas už savo įsipareigojimus pagal REACH reglamento reikalavimus) paskirti trečiąją šalį atstovauti visose III antraštėje nurodytose procedūrose, taip pat diskusijose su kitais gamintojais arba importuotojais.

Visų cheminių medžiagų atveju potencialus registruotojas, prieš pradėdamas registraciją, privalo pateikti agentūrai užklausa, ar jau buvo pateikta tos pačios cheminės medžiagos registracijos dokumentacija (REACH reglamento 26 straipsnis). Tokioje užklausoje turi būti nurodoma:

- potencialaus registruotojo tapatybė, kaip nurodyta REACH reglamento VI priedo 1 skirsnyje, išskyrus naudojimo vietas;
- cheminės medžiagos tapatybė, kaip nurodyta REACH reglamento VI priedo 2 skirsnyje;
- kuriems informacijos reikalavimams patenkinti potencialiam registruotojui reikės atlikti naujus tyrimus su stuburiniais gyvūnais;
- kuriems informacijos reikalavimams patenkinti potencialiam registruotojui reikės atlikti kitus naujus tyrimus.

Potencialus registruotojas savo tapatybę ir cheminės medžiagos pavadinimą turi nurodyti pagal šio rekomendacinio dokumento 4 skyriuje išdėstytas taisykles.

Agentūra privalo informuoti, ar tapati cheminė medžiaga jau buvo įregistruota anksčiau. Tai taip pat turi būti atlikta pagal šio rekomendacinio dokumento 4 skyriuje išdėstytas taisykles. Rezultatai pateikiami potencialiam registruotojui. Taip pat informuojami visi ankstesni arba visi potencialūs registruotojai.

Daugiau informacijos apie užklauso teikimo procedūras galima rasti *Rekomendacijose dėl keitimosi duomenimis* ir specialiame ECHA svetainės puslapyje:

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

## 7. Pavyzdžiai

Tolesniuose puslapiuose pateikiami pavyzdžiai, skirti parodyti, kaip vartotojui vadovautis šio rekomendacinio dokumento rekomendacijomis. Tai nėra REACH reglamento reikalavimų vykdymo praktika.

Minėti pavyzdžiai yra šie:

- dietilo peroksodikarbonatas – vieno komponento cheminės medžiagos, kuri taip pat yra ir tirpiklis, veikiantis kaip stabilizuojanti medžiaga, pavyzdys (žr. 7.1 skyrių);
- zolimidinas – cheminės medžiagos, kuri gali būti identifikuojama kaip vieno komponento cheminė medžiaga arba kaip cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis, pavyzdys (žr. 7.2 skyrių);
- izomerų mišinys, sukuriamas gamybos procese, pateikiamas kaip cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis pavyzdys (žr. 7.3 skyrių). Ši medžiaga anksčiau buvo įtraukta į EINECS pagal atskirų izomerų įrašus;
- AH kvapioji medžiaga – cheminės medžiagos, kuri gaminama skirtingų rūšių ir kurią galima apibūdinti penkių sudedamųjų dalių, kurių koncentracija svyruoja, reakcijos mase, pavyzdys (žr. 7.4 skyrių). Tai taip pat yra pagrįsto nukrypimo nuo 80 % ir 10 % ribų pavyzdys;
- nemetaliniai mineralai, taip pat montmorilonitas, yra aiškiai apibrėžiamų cheminių medžiagų, kurių fizines savybes būtina papildomai apibūdinti, pavyzdys, pateikiamas 7.5 skyriuje;
- lavandinų eterinis aliejus – UVCB medžiagų, išgaunamų iš augalų, pavyzdys (žr. 7.6 skyrių);
- chrizantemų aliejus ir iš jo išgauti izomerai – biologinės kilmės UVCB medžiagų, kurios toliau apdorojamos, pavyzdys (žr. 7.7 skyrių);
- izopropilfenolio fosfatas – įvairių UVCB medžiagų, kurios nėra aiškiai apibrėžtos, pavyzdys (žr. 7.8 skyrių);
- ketvirtiniai amonio junginiai – cheminių medžiagų, kurių anglies atomų grandinės ilgis yra kintamas, pavyzdys (žr. 7.9 skyrių);
- du naftos cheminių medžiagų pavyzdžiai – benzino maišymo srautas ir gazoliai, pateikiami 7.10 skyriuje;
- du pavyzdžiai, kaip identifikuoti fermentus – lakazę ir amilazę – pateikiami 7.11 skyriuje.

### 7.1. Dietilo peroksidokarbonatas

Cheminė medžiaga dietilo peroksodikarbonatas (EB Nr. 238-707-3, CAS Nr. 14666-78-5,  $C_6H_{10}O_6$ ) gaminama kaip izododekano (EB NR. 250-816-8, CAS Nr. 31807-55-3) 18 % tirpalas. Izododekanas taip pat veikia kaip stabilizuojančioji medžiaga, silpninanti sprogstamąsias savybes. 27 % tirpalas – didžiausia įmanoma koncentracija, kuriai esant saugu naudoti cheminę medžiagą.

Kaip prieš tai apibūdintos cheminės medžiagos turi būti identifikuojamos ir koks pavadinimas turi būti joms suteikiamas, kad būtų įregistruotos?

Tirpikliai, kurie pagal REACH reglamente pateiktą cheminės medžiagos apibrėžtį gali būti atskirti nedarant poveikio cheminės medžiagos stabilumui ar nepakeičiant jos sudėties, neištraukiami. Izododekanas turi būti laikomas ne tik tirpalu, kaip prieš tai nurodytu atveju, bet ir priedu, nes jis veikia ir kaip stabilizuojančioji medžiaga, todėl negali būti visiškai atskirtas dėl cheminės medžiagos sprogstamųjų savybių. Tačiau cheminė medžiaga turi būti laikoma vieno komponento chemine medžiaga. Todėl cheminė medžiaga turi būti registruojama kaip tirpalas, turintis mažiausią izododekano koncentraciją, kuriai esant saugu naudoti cheminę medžiagą:

dietilperoksodikarbonatas (didžiausia leistina norma: 27 %). Informacija apie izododekaną turi būti pateikiama dalyje „Priedai“ ir nurodoma, kad jis atlieka stabilizavimo funkciją.

## 7.2. ZOLIMIDINAS

Pagamintas metanolio tirpalas apima zolimidiną (EB Nr. 214-947-4; CAS Nr. 1222-57-7, C<sub>14</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>S) ir imidazolą (EB Nr. 206-019-2; CAS Nr. 288-32-4, C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>N<sub>2</sub>). Po to, kai pašalinamas metanolio tirpalas ir pagerinamas gamybos procesas, 74–86 % cheminės medžiagos sudaro zolimidinas ir 4–12 % imidazolas.

Kaip prieš tai apibūdintos cheminės medžiagos turi būti identifikuojamos ir koks pavadinimas turi būti joms suteikiamas, kad būtų įregistruotos?

Tirpikliai, kurie pagal REACH reglamente pateiktą cheminės medžiagos apibrėžtį gali būti atskirti nedarant poveikio cheminės medžiagos stabilumui ar nepakeičiant jos sudėties, neįtraukiami. Metanolis yra tirpalas, atsižvelgiant į prieš tai pateiktą atvejį, todėl gali būti lengvai atskiriamas. Tuomet registruojama cheminė medžiaga, kurioje nėra tirpiklio.

Paprastai cheminė medžiaga laikoma vieno komponento chemine medžiaga, jeigu viena pagrindinė sudedamoji dalis sudaro  $\geq 80$  % jos masės. Cheminė medžiaga laikoma chemine medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis, jeigu daugiau nei viena sudedamoji dalis sudaro nuo  $\geq 10$  % iki  $< 80$  % jos masės. Dėl prieš tai pateikto pavyzdžio kyla abejonių, nes peržengtos nustatytos ribos. Todėl cheminė medžiaga gali būti laikoma vieno komponento chemine medžiaga – zolimidinu arba chemine medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis, kurios reakcijos masę sudaro zolimidinas ir imidazolas.

Tokiu abejotinu atveju siekiant nustatyti, kuris iš pateiktų cheminės medžiagos apibūdinimų geriausias, gali būti naudojama cheminės medžiagos pagrindinių sudedamųjų dalių būdingoji koncentracija:

- (1) 1) jeigu būdingoji zolimidino koncentracija yra 77 %, o imidazolo – 11 %, rekomenduojama cheminę medžiagą laikyti zolimidino ir imidazolo reakcijos mase;
- (2) 2) jeigu būdingoji zolimidino koncentracija yra 85 %, o imidazolo – 5 %, rekomenduojama cheminę medžiagą laikyti vieno komponento chemine medžiaga zolimidinu.

## 7.3. Izomerų mišinys

Tokia cheminė medžiaga – tai dviejų izomerų mišinys (reakcijos masė), susidaręs gamybos procese. Informacija apie atskirus izomeras buvo įtraukta į EINECS. Direktyva 67/548/EEB buvo reglamentuojamas cheminių medžiagų pateikimas rinkai. Mišinys į EINECS buvo įtraukiamas darant du įrašus pagal atskirus izomeras, nes cheminės medžiagos gamybos būdas nebuvo svarbus. Pagal REACH reglamentą reikalaujama įregistruoti pagamintas chemines medžiagas. Nustatant, kuriuos cheminės medžiagos gamybos etapus apima apibrėžtis „gamyba“, sprendimas priimamas kiekvienu atskiru atveju. Jeigu izomerų mišinys registruojamas kaip cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis (vadovaujantis 4.2.2 skyriaus rekomendacijomis), nebūtina atlikti tokios cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis patikrinimo, jei pavojingumo savybėms apibūdinti pateikiama pakankamai informacijos apie atskiras sudedamąsias dalis.



## 1. Pavadinimas ir kiti identifikatoriai

<b>Pavyzdžiai</b>	
<b>IUPAC pavadinimas arba kitas (cheminės medžiagos) tarptautinis cheminis pavadinimas</b>	2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolio ir 2,2'-[[[(5-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolio reakcijos masė
<b>Kiti (cheminės medžiagos) pavadinimai</b>	2,2'-[[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis Etanolio, 2,2'-[[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis- vandens reakcijos masė Etanolis, 2,2'-[[[(metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bis-(9CI) izomerinis junginys
<b>(Cheminės medžiagos) EB numeris EB pavadinimas EB aprašymas</b>	Cheminės medžiagos EB numerio nėra, nes EINECS nėra pranešta apie izomerų mišinį. Tačiau cheminės medžiagos sudedamosios dalys (Nr. 279-502-9, Nr. 279-501-3) buvo įrašytos į EINECS.
<b>(Cheminės medžiagos) CAS numeris CAS pavadinimas</b>	Nėra Nėra
<b>(A sudedamosios dalies) EB numeris EB pavadinimas EB aprašymas</b>	279-502-9 2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis /
<b>(B sudedamosios dalies) EB numeris EB pavadinimas EB aprašymas</b>	279-501-3 2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis /
<b>(A sudedamosios dalies) CAS numeris CAS pavadinimas</b>	80584-89-0 2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis
<b>(B sudedamosios dalies) CAS numeris CAS pavadinimas</b>	80584-88-9 2,2'-[[[(4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis
<b>Kitas tapatybės kodas Nuoroda</b>	ENCs Nr. 5-5917

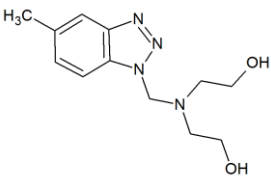
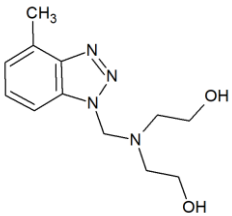
## 2. Informacija apie sudėtį – pagrindinės sudedamosios dalys

Pagrindinės sudedamosios dalys						
	IUPAC pavadinimas	CAS numeris	EB numeris	Mol. formulė Hill metodas	Būdingoji konc. (% masė)	Konc. intervalas (% masė)
<b>A</b>	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis	80584-89-0	279-502-9	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	60	50-70
<b>B</b>	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis	80584-88-9	279-501-3	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	40	30-50

Pagrindinės sudedamosios dalys	
Kiti pavadinimai	
<b>A</b>	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis
<b>B</b>	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis

Pagrindinės sudedamosios dalys		
	EB pavadinimas	EB aprašymas
<b>A</b>	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis	/
<b>B</b>	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis	/

Pagrindinės sudedamosios dalys		
	CAS pavadinimas	CAS numeris
<b>A</b>	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis	80584-89-0
<b>B</b>	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-il)metil]imino]bisetanolis	80584-88-9

Pagrindinės sudedamosios dalys			
	Molekulinė formulė CAS metodus	Struktūrinė formulė	SMILES kodas
<b>A</b>	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
<b>B</b>	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Pagrindinės sudedamosios dalys		
	Molekulinė masė [g mol <sup>-1</sup> ]	Molekulinės masės intervalas
<b>A</b>	250	/
<b>B</b>	250	/

## 7.4. AH kvapioji medžiaga

AH kvapiają medžiagą sudaro gama (izo-alfa) metiljononas ir jo izomerai. Ji gaminama trijų skirtingų rūšių (A, B ir C rūšių), kurios skiriasi izomerų santykiu.

Šioje lentelėje pateikiama skirtingų rūšių sudėties apžvalga.

<b>AH kvapiosios medžiagos skirtingų rūšių sudėtis.</b>				
<b>Koncentracijos intervalas [%]</b>	<b>A rūšis</b>	<b>B rūšis</b>	<b>C rūšis</b>	<b>Bendras intervalas</b>
gama (izo-alfa) metiljononas	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta (izo-beta) metiljononas	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
alfa n-metiljononas	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gama n-metiljononas	0,5–1,5	2 - 4	2 - 4	0,5–4
beta n-metiljononas	0,5–1,5	4 - 6	5 - 15	0,5–15
pseudometiljononai	0,5–1,5	1 - 3	1 - 3	0,5–3

Cheminė medžiaga gali būti identifikuojama keliais būdais:

- A rūšyje yra ne mažiau kaip 80 % gama (izo-alfa) metiljonono izomero, todėl ji gali būti laikoma vieno komponento chemine medžiaga, kurios pagrindinė sudedamoji dalis yra gama (izo-alfa) metiljonono izomeras, o kiti izomerai – priemaišos.
- B ir C rūšyse gama (izo-alfa) metiljonono izomero yra mažiau nei 80 %, o kiti izomerai sudaro  $\geq 10$  %. Todėl šios rūšys gali būti laikomos cheminėmis medžiagomis su keliomis sudedamosiomis dalimis:
  - B rūšis: gama (izo-alfa) metiljonono (65–75 %) ir alfa n-metiljonono (10–20 %) reakcijos masės, o kiti izomerai – priemaišos.
  - C rūšis: gama (izo-alfa) metiljonono (50–60 %) ir alfa n-metiljonono (20–30 %) reakcijos masės, o kiti izomerai – priemaišos.

Kadangi sudėtis kinta, kartais izomeras sudaro  $\geq 10$  % (todėl dažniausiai vadinamas pagrindine sudedamąja dalimi), o kartais  $< 10$  % (todėl dažniausiai vadinamas priemaiša).

Skirtingas rūšis būtų galima įregistruoti atskirai. Todėl būtų vykdomos trys registracijos procedūros. Tačiau gali būti pagrįsta ir analogiška duomenų registracija.

Taip pat gali būti įvertinti tokie variantai:

- vienu įrašu registruojama dviejų porūšių vieno komponento cheminė medžiaga. Tokiu atveju porūšiai neatitinka 80 % taisyklės (žr. 4.2.1 skyrių);
- viena apibrėžtos reakcijos masės, kurią sudaro 5 izomerai (cheminė medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis), registracija. Tokiu atveju kai kurie izomerai (pagrindinės sudedamosios dalys) neatitinka 10 % taisyklės, pagal kurią pagrindinės sudedamosios dalys atskiriamos nuo priemaišų (žr. 4.2.2 skyrių);
- viena apibrėžtos reakcijos masės, kai sudėtis yra nepastovi, tačiau ją sudaro visos visų

izomerų intervalas, registracija.

Svarbu įvertinti tai, kad:

- šių trijų rūšių fizinės ir cheminės savybės yra vienodos arba labai panašios;
- šios trys rūšys yra panašiai naudojamos ir jų poveikio scenarijus panašus;
- visos rūšys vienodai klasifikuojamos pagal pavojingumą ir vienodai žymimos, o saugos duomenų lapai ir saugos duomenų ataskaitos yra tapačios;
- yra prieinami šių trijų rūšių kintamumo atliktų (ir būsimų) bandymų duomenys.

Šiame pavyzdyje apibūdinamas cheminės medžiagos, kaip apibrėžtos 5 izomerų reakcijos masės (cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis), identifikavimas. Pagrindimas būtinas, nes nukrypstama nuo 80 % taisyklės (žr. 4.2.1 skyrių) ir 10 % ribos (kelių sudedamųjų dalių cheminės medžiagos apibrėžtis, žr. 4.2.2 skyrių). Jei kiekviena rūšis pagaminama tokia, kaip nurodyta, registracijos dokumentacijoje turi būti nurodoma visų trijų rūšių sudėtis atskirai. Tačiau jei vadovaujamesi taisyklėmis, turėtų būti ne mažiau kaip dvi registracijos: 1) gama (izo-alfa) metiljonono ir 2) gama (izo-alfa) metiljonono ir alfa-n-metiljonono reakcijos masės.

### **Cheminės medžiagos identifikavimas**

AH kvapioji medžiaga pagaminta trijų rūšių (A, B ir C), kurių kokybinė sudėtis vienoda, o kiekybinė sudėtis – skirtinga. Visos trys rūšys apibūdintos vienoje cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis registracijos dokumentacijoje. Nors tai parodo, kad 80 % taisyklė ir 10 % taisyklė netaikomos griežtai, vieno komponento cheminės medžiagos registracija yra pagrįsta, jei: 1) esami bandymų duomenys apima trijų rūšių kintamumą, 2) fizinės ir cheminės trijų rūšių savybės yra panašios, 3) visos rūšys vienodai klasifikuojamos pagal pavojingumą ir vienodai žymimos (todėl ir saugos duomenų lapai yra tapatūs) ir 4) šios trys rūšys yra panašiai naudojamos ir jų poveikio scenarijus yra panašus (todėl cheminės saugos ataskaitos yra tapačios).

#### **1. Pavadinimas ir kiti identifikatoriai**

IUPAC pavadinimas arba kitas tarptautinis cheminis pavadinimas	Reakcijos masė: 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)but-3-en-2-onas; 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)but-3-en-2-onas; [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-onas; 1-(6,6-metil-2-metilenocikloheks-1-il)pent-1-en-3-onas; 1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-onas
Kiti pavadinimai	A rūšies metiljononas gama B rūšies metiljononas gama C rūšies metiljononas gama
EB numeris	Nėra
EB pavadinimas	/
EB aprašymas	/

CAS numeris	Nėra
CAS pavadinimas	/

## 2. Informacija apie sudėtį – pagrindinės sudedamosios dalys

Teoriškai galimi papildomi enantiomerai. Tačiau buvo analizuojami tokie izomerai:

<b>Pagrindinės sudedamosios dalys</b>						
	<b>IUPAC pavadinimas</b>	<b>CAS numeris</b>	<b>EB numeris</b>	<b>Mol. formulė Hill metodus</b>	<b>Maž. konc. (% masė)</b>	<b>Didž. konc. (% masė)</b>
<b>A</b>	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)but-3-en-2-onas	127-51-5	204-846-3	C14H22O	50	85
<b>B</b>	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)but-3-en-2-onas	79-89-0	201-231-1	C14H22O	3	10
<b>C</b>	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-onas	127-42-4	204-842-1	C14H22O	3	30
<b>D</b>	1-(6,6-metil-2-metilenocikloheks-1-il)pent-1-en-3-onas	Nėra	Nėra	C14H22O	0,5	4
<b>E</b>	1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-onas	127-43-5	204-843-7	C14H22O	0,5	15

<b>Pagrindinės sudedamosios dalys</b>	
<b>Kiti pavadinimai</b>	
<b>A</b>	alfa izometiljononas; gama metiljononas

<b>B</b>	beta izometiljononas; delta metiljononas
<b>C</b>	alfa n-metiljononas
<b>D</b>	gama n-metiljononas
<b>E</b>	beta n-metiljononas

#### Pagrindinės sudedamosios dalys

EB pavadinimas		EB aprašymas
<b>A</b>	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)-3-buten-2-onas	/
<b>B</b>	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)-3-buten-2-onas	/
<b>C</b>	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-onas	/
<b>D</b>	1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-onas	/
<b>E</b>	1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)pent-1-en-3-onas	/

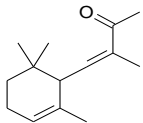
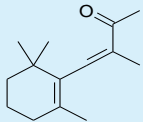
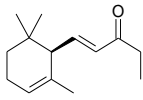
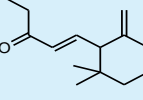
#### Pagrindinės sudedamosios dalys

CAS pavadinimas		CAS numeris
<b>A</b>	3-buten-2-onas, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)-	127-51-5
<b>B</b>	3-buten-2-onas, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il)-	79-89-0
<b>C</b>	1-penten-3-onas, 1-[(1R)-2,6,6-trimetil-2-cikloheksen-1-il]-, (1E)-	127-42-4
<b>D</b>	Nėra	Nėra
<b>E</b>	1-penten-3-onas, 1-(2,6,6-trimetil-1-cikloheksen-1-il)-	127-43-5

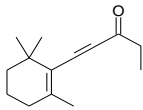
### Pagrindinės sudedamosios dalys

Kitas tapatybės kodas		Nuoroda
<b>A</b>	2714 07.036	FEMA ES kvapiųjų medžiagų registras
<b>B</b>	07.041	ES kvapiųjų medžiagų registras
<b>C</b>	2711 07.009	FEMA ES kvapiųjų medžiagų registras
<b>D</b>	Nėra	Nėra
<b>E</b>	2712 07.010	FEMA ES kvapiųjų medžiagų registras

### Pagrindinės sudedamosios dalys

	Molekulinė formulė CAS metodas	Struktūrinė formulė	SMILES kodas
<b>A</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
<b>B</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C</chem>
<b>C</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC</chem>
<b>D</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		<chem>C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC</chem>



<b>E</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC
----------	-----------------------------------	---	------------------------------

### Pagrindinės sudedamosios dalys

	Molekulinė masė / g <sub>mol</sub> -1	Molekulinės masės intervalas
<b>A</b>	206,33	/
<b>B</b>	206,33	/
<b>C</b>	206,33	/
<b>D</b>	206,33	/
<b>E</b>	206,33	/

### 3. Informacija apie sudėtį – priemaišos ir priedai

#### Priemaišos

	IUPAC pavadinimas	CAS numeris	EB numeris	Mol. formulė	Būdingoji konc. (% masė)	Konc. intervalas (% masė)
<b>F</b>						
nenurodytų priemaišų skaičius:				11 (pseudometiljononų)		
bendra nenurodytų priemaišų koncentracija:				0,5–3 % masės (w/w)		

#### Priedai

	IUPAC pavadinimas	CAS numeris	EB numeris	Mol. formulė	Būdingoji konc. (% masė)	Konc. intervalas (% masė)
<b>G</b>	Butilintas hidroksitoluenas (BHT)	128-37-0	204-881-4	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O	0,1	0,05–11

#### 4. Informacija apie skirtingas rūšis

Toliau pateikiami trijų pagrindinių rūšių penkių pagrindinių sudedamųjų dalių intervalai:

Koncentracijos intervalas [%]	A rūšis	B rūšis	C rūšis
gama (izo-alfa) metiljononas	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (izo-beta) metiljononas	6 - 10	3 - 7	3 - 7
alfa n-metiljononas	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gama n-metiljononas	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4
beta n-metiljononas	0,5-1,5	4 - 6	5 - 15
pseudometiljononai	0,5-1,5	1 - 3	1 - 3

### 7.5. Mineralai

Mineralas apibrėžiamas kaip neorganinių sudedamųjų dalių, randamų žemės plutoje, derinys, turintis tik jam būdingą cheminę sudėtį, kristalines formas (nuo labai kristališkos iki amorfinės) ir fizines bei chemines savybes.

Mineralų nereikia registruoti, jeigu jie atitinka gamtoje randamų cheminių medžiagų apibrėžimą (REACH reglamento 3 straipsnio 39 dalis) ir jeigu jie nėra chemiškai modifikuoti (REACH reglamento 3 straipsnio 40 dalis). Tokia nuostata taikoma mineralams, kurių cheminė sandara išlieka nepakitusi net ir cheminiame procese arba chemiškai apdorojus ar fiziškai transformavus mineralogijos procese, pavyzdžiui, norint pašalinti priemaišas.

Kai kurie mineralai gali būti apibūdinami tik pagal savo cheminę sudėtį (žr. 4.2.1 skyrių dėl vieno komponento cheminių medžiagų ir 4.2.2 skyrių dėl cheminių medžiagų su keliomis sudedamosiomis dalimis), o kiti negali būti identifikuojami kaip cheminė medžiaga vien tik pagal cheminę sudėtį (žr. 4.2.3 skyrių).

Skirtingai negu kitos vieno komponento cheminės medžiagos arba cheminės medžiagos su keliomis sudedamosiomis dalimis, dauguma mineralų turi būti identifikuojami pagal cheminę sudėtį ir vidinę struktūrą (pvz., kokia buvo nustatyta rentgeno spindulių difrakcijos būdu), nes tokie identifikatoriai atskleidžia svarbiausią informaciją apie mineralą ir nurodo jo fizines bei chemines savybes.

CAS numeris, kaip ir identifikuojant kitas chemines medžiagas su keliomis sudedamosiomis dalimis, yra viena iš mineralų identifikavimo (t. y. kaip neorganinių sudedamųjų dalių derinio) priemonių. Skirtingoms sudedamosioms dalims apibūdinti naudojami neorganinių sudedamųjų dalių CAS numeriai (kaip apibrėžta sisteminėje mineralogijoje). Jei bus pagaminta atskira sudedamoji dalis (vieno komponento cheminė medžiaga), šios cheminės medžiagos CAS numeris turėtų būti naudojamas šiai cheminei medžiagai identifiкуoti. Pavyzdžiui:

- Kaolinas (EINECS Nr. 310-194-1, CAS Nr. 1332-58-7) – daugiausia sudarytas iš pirminio ir antrinio kaolinito (EINECS 215286-4, CAS Nr. 1318-74-7), kuris yra hidratuotas

aliuminio silikato molis.

Tuo atveju, kai kaolinas bus rafinuojamas, siekiant išgauti atskirą kaolino sudedamąją dalį, pvz., kaolinitą, cheminė medžiaga bus identifikuojama ne pagal kaolino CAS ir (arba) EINECS numerius, bet pagal kaolinito EINECS Nr. 215-286-4 ir CAS Nr. 1318-74-7.

- Bentonitas (EINECS Nr. 215-108-5, CAS Nr. 1302-78-9), kuris EINECS apibūdinamas kaip „koloidinis molis, kurio didžiausią dalį daugiausia sudaro montmorilonitas“, sudarytas iš didelės dalies neorganinės sudedamosios dalies – montmorilonito (EINECS Nr. 215-288-5, CAS Nr. 1318-93-0), likusi dalis – kitos sudedamosios dalys.

Tuo atveju, kai bus pagamintas grynas montmorilonitas (EINECS Nr. 215-288-5, CAS Nr. 1318-93-0), cheminė medžiaga bus identifikuojama ne pagal pagamintos cheminės medžiagos CAS numerį, o pagal montmorilonito CAS numerį.

Turi būti pažymėta, kad bentonitas (EINECS Nr. 215-108-5, CAS Nr. 1302-78-9) ir montmorilonitas (EINECS Nr. 215-288-5, CAS Nr. 1318-93-0) nelaikomos tapačiomis medžiagomis.

Ir galiausiai – pavadinimas mineralams paprastai suteikiamas pagal jų neorganinių sudedamųjų dalių derinį. Jie gali būti laikomi vieno komponento cheminėmis medžiagomis arba cheminėmis medžiagomis su keliomis sudedamosiomis dalimis (4.2.1 ir 4.2.2 skyrių bendrosios rekomendacijos). Kai kurių mineralų neįmanoma apibūdinti vien tik pagal cheminę sudėtį, todėl, norint juos tinkamai identifiкуoti, reikia papildomos informacijos apie fizines savybes arba apdorojimo parametrus (žr. 4.2.3 skyrių). Keli pavyzdžiai pateikiami šioje lentelėje.

**Mineralų pavyzdžiai**

<b>Pavadinimas</b>	<b>CAS</b>	<b>EINECS</b>	<b>Papildomas apibūdinimas</b>
Kristobalitas	14464-46-1	238-455-4	O <sub>2</sub> Si (kristalinė struktūra: kubinė/tetragoninė)
Kvarcas	14808-60-7	238-878-4	O <sub>2</sub> Si (kristalinė sistema: trikampė/šešiakampė)
Kizelgūras	61790-53-2	-	Taip pat vadinamas diatomitu, kizelgūru ir celitu Apibūdinimas: porėta, silicio turinti uoliena, sudaryta iš mažų priešistorinių vandens augalų liekanų. Didžiausią dalį sudaro silicis.
Dolomitas	16389-88-1	240-440-2	CH <sub>2</sub> O <sub>3</sub> .1/2Ca.1/2Mg
Lauko špatas – mineralų grupė	68476-25-5	270-666-7	Neorganinė cheminė medžiaga, kuri susidaro kalcinavimo procese, vykstančiame aukštoje temperatūroje, kai aliuminio oksido, bario oksido, kalcio oksido, magnio oksido, silicio oksido ir stroncio oksido įvairūs kiekiai išskaidomi homogeniškai ir pagal jonus, kad sudarytų kristalinę formą.
Talkas	14807-96-6	238-877-9	Mg <sub>3</sub> H <sub>2</sub> (SiO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>
Vermikulitas	1318-00-9	-	(Mg <sub>0.33</sub> [Mg <sub>2-3</sub> (Al <sub>0-1</sub> Fe <sub>0-1</sub> ) <sub>0-1</sub> ])(Si <sub>2.33-3.33</sub> Al <sub>0.67-1.67</sub> )(OH) <sub>2</sub> O <sub>10</sub> .4H <sub>2</sub> O)

### Privaloma pateikti analizės informacija apie mineralus

<b>Elementinė sudėtis</b>	Cheminė sudėtis parodo, iš ko sudaryti mineralai, nepriklausomai nuo sudedamųjų dalių skaičiaus ir jų santykio minerale. Remiantis konvencija, cheminė sudėtis išreiškiama oksidais.
<b>Spektro duomenys (XRD arba lygiaverčiai)</b>	Atsižvelgiant į kristalografinę struktūrą, mineralus galima identifikuoti pagal XRD arba kitus metodus. Kartu su trumpu analizės metodų aprašymu arba bibliografiniu nuoroda reikėtų pateikti būdingus XRD arba tinkamus alternatyvius mineralo identifikavimo duomenis.
<b>Būdingosios fizinės ir cheminės savybės</b>	Mineralai pasižymi jiems būdingomis fizinėmis ir cheminėmis savybėmis, pagal kurias užbaigiamas jų identifikavimas. Tokių savybių pavyzdžiai: <ul style="list-style-type: none"><li>- - Labai mažas kietumas</li><li>- - Gebėjimas didėti</li><li>- - Diatomito forma (optinis mikroskopas)</li><li>- - Labai didelis tankis</li><li>- Paviršiaus plotas (azoto adsorbicija)</li></ul>

## 7.6. *Lavandin grosso* eterinis aliejus

Eteriniai aliejai – cheminės medžiagos, gaunamos iš augalų. Todėl eteriniai aliejai taip pat gali būti vadinami botaniniu būdu išgautomis cheminėmis medžiagomis.

Dažniausiai botaniniu būdu išgautos cheminės medžiagos – sudėtinės natūralios cheminės medžiagos, gaunamos augalą arba jo dalis veikiant tokiais būdais: ekstrahavimu, distiliavimu, spaudimu, frakcionavimu, gryninimu, sodrinimu arba fermentavimu. Tokių medžiagų sudėtis yra įvairi ir priklauso nuo genties, rūšies, augimo sąlygų, šaltinio derliaus nuėmimo periodo ir apdoravimo būdų.

Eterinius aliejus, kaip ir chemines medžiagas su keliomis sudedamosiomis dalimis, galima apibrėžti pagal pagrindines sudedamąsias dalis. Tačiau eterinius aliejus gali sudaryti keli šimtai sudedamųjų dalių ir jos, priklausomai nuo daugybės veiksnių (pvz., genties, rūšies, augimo sąlygų, derliaus periodo, apdirbimo metodo), gali keistis. Todėl tokioms UVCB medžiagoms apibūdinti dažnai nepakanka vien tik informacijos apie pagrindines dalis. Apibūdinant eterinius aliejus turi būti nurodomas naudojamas augalas ir apdirbimo procesas, kaip nurodyta 4.3.1 skyriuje (pagal UVCB 3 potipį).

Daugeliu atvejų eteriniai aliejai gali būti apibūdinami pagal pramonės standartus (dauguma eterinių aliejų – taip pat pagal ISO-standartus). Papildomai galima pateikti informaciją apie standartus. Tačiau turi būti identifikuojama tokia cheminė medžiaga, kokia ji buvo pagaminta.

Toliau pateiktame pavyzdyje apibūdinamas *Lavandin grosso* eterinis aliejus, kuriam galima taikyti ISO standartą (ISO 8902-1999).

## 1. Pavadinimai ir kiti identifikatoriai

### Šaltinis

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

### Procesas

#### Biocheminės reakcijos proceso, taikyto gaminant cheminę medžiagą, apibūdinimas:

*Lavendula hybrida grosso* (Lamiaceae) žydinčios viršutinės dalies distiliavimas vandens garais, po to – vandens pašalinimas iš eterinio aliejaus.

Vėliau atliekamas pašalinimas yra savaiminis fizinis procesas, kuris paprastai vyksta atskyrimo aparate (vadinamame Florencijos kolba), kuriame atskirtas aliejus yra nesunkiai išskiriamas. Šio distiliavimo proceso etapo temperatūra yra apie 40 °C.

### Pavadinimas

IUPAC pavadinimas arba kitas tarptautinis cheminis pavadinimas	<i>Lavendula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) eterinis aliejus
EB numeris	297-385-2
EB pavadinimas	Lavandinas, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ekstraktas
EB aprašymas	Ekstraktai ir jų fiziškai modifikuotas vedinys, pavyzdžiui, betonas, absoliutai, eteriniai aliejai, aliejingoji derva, terpenai, terpenų neturinčios frakcijos, distiliatai, nuosėdos ir kt., gaunami iš <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae <sup>31</sup> .
CAS numeris	93455-97-1
CAS pavadinimas	Lavandinas, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ekstraktas

<sup>31</sup> „Labiatae“ ir „Lamiaceae“ yra sinonimai.

2. Informacija apie sudėtį – žinomos sudedamosios dalys

Zinomos sudedamosios dalys					
	Cheminės medžiagos pavadinimas EB CAS IUPAC Kitas	Numeris EB CAS	Mol. Formulė Hill metodas	Būdingoji konc. % (masė)	Konc. intervalas % (masė)
<b>A</b>	<b>EB</b> linalilo acetatas <b>CAS</b> 1,6-oktadien-3-olis, 3,7-dimetil-, acetatas <b>IUPAC</b> 3,7-dimetil okta-1,6-dien-3-ilo acetatas	<b>EB</b> 204-116-4 <b>CAS</b> 115-95-7	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	33	28 – 38
<b>B</b>	<b>EB</b> linalolis <b>CAS</b> 1,6-oktadien-3-olis, 3,7-dimetil <b>IUPAC</b> 3,7-dimetilo okta-1,6-dien-3-olis	<b>EB</b> 201-134-4 <b>CAS</b> 78-70-6	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	29,5	24 – 35
<b>C</b>	<b>EB</b> bornan-2-onas <b>CAS</b> biciklo[2.2.1] heptan-2-onas, 1,7,7-trimetil- <b>IUPAC</b> 1,7,7-trimetilbiciklo[2.2.1]-2-heptanonas <b>Kitas</b> kamparas	<b>EB</b> 200-945-0 <b>CAS</b> 76-22-2	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O	7	6 – 8
<b>D</b>	<b>EB</b> cineolas <b>CAS</b> 2-oksabiciklo [2.2.2]oktanas, 1,3,3-trimetil- <b>IUPAC</b> 1,3,3-trimetil-2-oksabiciklo[2.2.2]oktanas <b>Kitas</b> 1,8-cineolas	<b>EB</b> 207-431-5 <b>CAS</b> 470-82-6	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	5,5	4 – 7

<b>E</b>	<p><b>EB</b> p-ment-1-en-4-olis</p> <p><b>CAS</b> 3-cikloheksen-1-olis, 4-metil-1-(1-metiletil)-</p> <p><b>IUPAC</b> 1-(1-metiletil)-4-metil-3-cikloheksen-1-olis</p> <p><b>Kitas</b> terpinen-4-olis</p>	<p><b>EB</b> 209-235-5</p> <p><b>CAS</b> 562-74-3</p>	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	3,25	1,5–5
<b>F</b>	<p><b>EB</b> 2-izopropenil-5-metilheks-4-enilo acetatas</p> <p><b>CAS</b>4-heksen-1-olis, 5-metil-2-(1-metiletenil)-, acetatas</p> <p><b>IUPAC</b> 2-(1-metiletenil)-5-metilheks-4-en-1-olis</p> <p><b>Kitas</b> (±)-lavandulolio acetatas</p>	<p><b>EB</b> 247-327-7</p> <p><b>CAS</b> 25905-14-0</p>	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	2,25	1,5–3
<b>G</b>	<p><b>EB</b> DL-borneolis</p> <p><b>CAS</b> biciklo[2.2.1] heptan-2-olis, 1,7,7-trimetil-, (1R,2S,4R)-rel-</p> <p><b>IUPAC</b> (1R,2S,4R)-rel-1,7,7-trimetil biciklo[2.2.1]heptan-2-olis</p> <p><b>Kitas</b> borneolis</p>	<p><b>EB</b> 208-080-0</p> <p><b>CAS</b> 507-70-0</p>	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	2,25	1,5–3
<b>H</b>	<p><b>EB</b> kariofilenas</p> <p><b>CAS</b> biciklo[7.2.0]undec-4-enas, 4,11,11-trimetil-8-metilenas-, (1R,4E,9S)-</p> <p><b>IUPAC</b>(1R,4E,9S)-4,11,11-trimetil-8-metileno biciklo[7.2.0]undec-4-enas</p> <p><b>Kitas</b> trans-beta-kariofilenas</p>	<p><b>EB</b> 201-746-1</p> <p><b>CAS</b> 87-44-5</p>	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	1,75	1–2,5



<b>I</b>	<p><b>EB</b> (E)-7,11-dimetil-3-metilendodeca-1,6,10-trienas <b>CAS</b> 1,6,10-dodecatrienas, 7,11-dimetil-3-metileno-, (6E)- <b>IUPAC</b> (E)-7,11-dimetil-3-metileno-1,6,10-dodecatrienas</p> <p><b>Kitas</b> trans-beta-farnesenas</p>	<p><b>EB</b> 242-582-0 <b>CAS</b> 18794-84-8</p>	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub>	1,1	0,2–2
<b>J</b>	<p><b>EB</b> (R)-p-menta-1,8-dienas <b>CAS</b> cikloheksenas, 1-metil-4-(1-metietenil)-, (4R)- <b>IUPAC</b> (4R)-1-metil-4-(1-metietenil)cikloheksenas</p> <p><b>Kitas</b> limonenas</p>	<p><b>EB</b> 227-813-5 <b>CAS</b> 5989-27-5</p>	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1	0,5–1,5
<b>K</b>	<p><b>EB</b> 3,7-dimetilokta-1,3,6-trienas <b>CAS</b> 1,3,6-oktatrienas, 3,7-dimetil- <b>IUPAC</b> 3,7-dimetilokta-1,3,6-trienas <b>Other</b> cis-beta-ocimenas</p>	<p><b>EB</b> 237-641-2 <b>CAS</b> 13877-91-3</p>	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub>	1	0,5–1,5

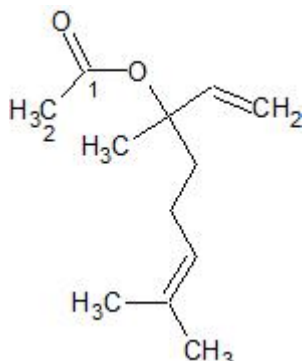
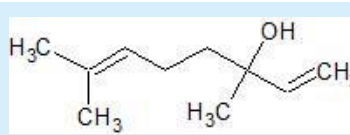
**Žinomos sudedamosios dalys ≥ 10 %**

Žinomos sudedamosios dalys		
	EB pavadinimas	EB aprašymas
<b>A</b>	linalilo acetatas C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	
<b>B</b>	linalolis C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	

### Žinomos sudedamosios dalys

	CAS pavadinimas	Susijęs CAS numeris
<b>A</b>	linalilo acetatas C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	115-95-7
<b>B</b>	linalolis C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	78-70-6

### Žinomos sudedamosios dalys

	Molekulinė formulė CAS metodus	Struktūrinė formulė	SMILES kodas
<b>A</b>	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>		
<b>B</b>	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O		

### Žinomos sudedamosios dalys

	Molekulinė masė	Molekulinės masės intervalas
A	196,2888	/
B	154,2516	/

## 7.7. Chrizantemų aliejus ir iš jo išgauti izomerai

Įmonė gamina chrizantemų aliejų. Jis išgaunamas iš susmulkintų *Chrysanthemum cinerariaefolium*, *Compositae* žiedų ir lapų naudojant tirpiklį, kurį sudaro vandens ir etanolio mišinys (1:10). Baigus ekstrahuoti, tirpiklis atskiriamas. Grynas ekstraktas toliau rafinuojamas ir paskutiniame rafinavimo etape gaunamas chrizantemų aliejus.

Be to, iš ekstrakto kaip reakcijos masė išskiriami du izomerai:

### I žasmolinas

(ciklopropankarboksilinė rūgštis, 2,2-dimetil-3-(2-metil-1-propenil)-, (1S)-2-metil-4-okso-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciklopenten-1-ilo esteris, (1R,3R)-; CAS Nr. 4466-14-2), ir

### II žasmolinas

(ciklopropankarboksilinė rūgštis, 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-ilesteris, (1R,3R)-; CAS Nr. 1172-63-0.

Be to, įmonė nusprendė sintetinti I žasmolino ir II žasmolino izomerų reakcijos masę.

Įmonė uždavė tokius klausimus:

1. Kaip identifikuoti chrizantemų aliejų, kuris bus registruojamas?
2. Ar išskirtų I žasmolino ir II žasmolino izomerų reakcijos masė registruojama tuo pačiu įrašu kaip ir aliejus?
3. Ar dviejų izomerų sintezės mišinys ir izomerų, išskirtų iš chrizantemų aliejaus, mišinys gali būti laikomi vienodais?

### 1. Kaip identifikuoti chrizantemų aliejų, kuris bus registruojamas?

Chrizantemų aliejus laikomas UVCB medžiaga, kuri negali būti tinkamai identifikuota pagal cheminę sudėtį (žr. 4.3 skyrių, kuriame pateikiamos išsamios rekomendacijos). Būtina naudoti tokius identifikavimo parametrus kaip šaltinis ir procesas. Chrizantemų aliejus yra biologinio pobūdžio, todėl turi būti identifikuojamas pagal rūšis ir organizmų dalis, iš kurių gautas, taip pat pagal valymo procesą (išgavimas naudojant tirpiklį). Tačiau informacija (jei ji žinoma) apie cheminės medžiagos cheminę sudėtį ir tapatybę turi būti pateikiama.

Toliau nurodyta informacija laikoma būtina cheminei medžiagai tinkamai identifikuoti:

Cheminės medžiagos pavadinimas	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , <i>Compositae</i> – aliejus, išgaunamas iš susmulkintų žiedų ir lapų, ekstrahuojant vandeniu ir etanolium (1:10).
<b>Šaltinis</b>	
Gentis, rūšis, porūšis	<i>Chrysanthemum</i> , <i>cinerariaefolium</i> , <i>Compositae</i>
Aliejui išgauti naudota augalo dalis	Žiedai ir lapai
<b>Procesas</b>	

Gamybos būdas	Susmulkinama, po to ekstrahuojama			
Ekstrahuojant naudotas tirpiklis	Vanduo ir etanolis (1:10)			
<b>Informacija apie sudėtį – žinomų sudedamųjų dalių masė % (w/w)</b>				
<b>Sudedamosios dalies pavadinimas</b>	<b>EB Nr.</b>	<b>CAS Nr.</b>	<b>Maž. %</b>	<b>Didž. %</b>
<b>I piretrinas:</b> 2-metil-4-okso-3-(penta-2,4-dienil) ciklopent-2-enil [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-chrizantematas	204-455-8	121-21-1	30	38
<b>II piretrinas:</b> 2-metil-4-okso-3-(penta-2,4-dienil) ciklopent-2-enil [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)-2,2-dimetilciklopropankarboksilatas	204-462-6	121-29-9	27	35
<b>I cinerinas:</b> 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oksociklopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropankarboksilatas	246-948-0	25402-06-6	5	10
<b>II cinerinas:</b> 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oksociklopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)ciklopropano karboksilatas	204-454-2	121-20-0	8	15
<b>I žasmolinas:</b> 2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1α[S*(Z)],3β]]-2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropankarboksilatas	Nėra	4466-14-2	4	10
<b>II žasmolinas:</b> 2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-en-1-il [1R-[1α[S*(Z)],3β(E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)ciklopropankarboksilatas	Nėra	1172-63-0	4	10

Be to, cheminėje medžiagoje yra apie 40 sudedamųjų dalių, kurios sudaro ne daugiau kaip 1 % jos masės.

Taip pat galima įvertinti, ar cheminė medžiaga gali būti identifikuojama kaip aiškiai apibrėžta cheminė medžiaga su šešiomis pagrindinėmis sudedamosiomis dalimis (I piretrino, II piretrino, I cinerino, II cinerino, I žasmolino, II žasmolino reakcijos masė).

Cheminė medžiaga bus laikoma gamtoje randama chemine medžiaga, jeigu gamybos procesas apims tik smulkinimą. Tokia cheminė medžiaga neregistruojama, jeigu neatitinka Direktyvoje 67/548/EEB nurodyto kriterijaus, pagal kurį cheminė medžiaga klasifikuojama kaip pavojinga.

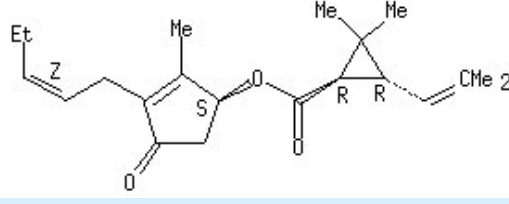
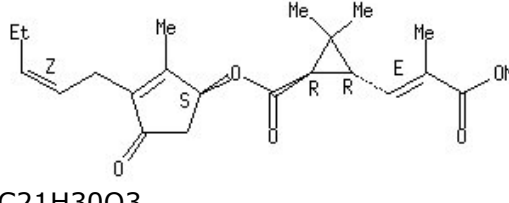
## 2. Ar išskirtų I žasmolino ir II žasmolino izomerų reakcijos masė registruojama tuo pačiu įrašu kaip ir aliejus?

Išskirtų I žasmolino ir II žasmolino izomerų reakcijos masė neregistruojama tuo pačiu įrašu kaip ir *Chrysanthemum cinerariaefolium*, *Compositae* aliejus, nes UVCB medžiaga neapima atskiros (-ų) sudedamosios (-ųjų) dalies (-ių) ir atvirkščiai. I žasmolino ir II žasmolino reakcijos masė yra kita cheminė medžiaga.

I žasmolino ir II žasmolino reakcijos masė gali būti laikoma chemine medžiaga su keliomis sudedamosiomis dalimis (žr. 4.3 skyrių, kuriame pateikiamos išsamios rekomendacijos), apimančia dvi sudedamąsias dalis.

Toliau nurodyta informacija laikoma būtina cheminei medžiagai tinkamai identifiкуoti:

Cheminės medžiagos IUPAC pavadinimas	Reakcijos masė: 2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent -2-enil [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-di metil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklo propankarboksilatas ir (2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-en-1-il [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)ciklopropankarboksilatas)			
Kitas pavadinimas	I žasmolino ir II žasmolino reakcijos masė			
Cheminės medžiagos grynumas	95–98 % masės (w/w)			
Informacija apie sudėtį – pagrindinių sudedamųjų dalių masė (w/w) %				
Sudedamosios dalies pavadinimas	EB Nr.	CAS Nr.	Maž. %	Didž. %
I žasmolinas: 2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklopent -2-enil [1R-[1α [S*(Z)],3β]]-2,2-di metil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklo propankarboksilatas	Nėra	4466-14-2	40	60

<p>Molekulinė formulė</p> <p>Struktūrinė formulė</p> <p>Molekulinė masė</p>		 <p>C<sub>22</sub>H<sub>30</sub>O<sub>5</sub> M = 374 g/mol</p>		
<p>II žasmolinas: 2-metil-4-okso-3-(pent-2-enil)ciklo pent-2-en-1-il [1R-[1α [S*(Z)],3β (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoksi-2-metil-3-oksoprop-1-enil)ciklopropankarboksilatas</p> <p>Molekulinė formulė</p> <p>Struktūrinė formulė</p> <p>Molekulinė masė</p>	<p>Nėra</p>	<p>1172-63-0</p>  <p>C<sub>21</sub>H<sub>30</sub>O<sub>3</sub> M = 374 g/mol</p>	<p>35</p>	<p>65</p>

### 3. Ar dviejų izomerų sintezės mišinys (reakcijos masė) ir izomerų, išskirtų iš chrizantemų aliejaus, mišinys gali būti laikomi vienodais?

Jeigu cheminės medžiagos cheminė sudėtis yra aiškiai apibrėžta ir jeigu ją tiksliai apibūdina sudedamosios dalys, nėra svarbu, ar cheminė medžiaga išgauta iš ekstrakto, ar sintetinta cheminiame procese. Todėl per skirtingus gamybos procesus gauta sintetinta I žasmolino ir II žasmolino reakcijos masė ir iš chrizantemos išgautų izomerų mišinys yra laikomi vienodais. Tačiau būtina įrodyti, kad mišinio grynumas ir pagrindinių sudedamųjų dalių intervalas yra vienodas.

### 4. Išvados

Identifikuojamos dvi cheminės medžiagos:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, *Compositae* – aliejus, išgaunamas iš susmulkintų žiedų ir lapų, ekstrahuojant vandeniu ir etanolu (1:10).
2. I žasmolino ir II žasmolino izomerų reakcijos masė, nepriklausomai nuo cheminės medžiagos gamybos būdo.

Jei minėtos cheminės medžiagos bus naudojamos tikaugalų apsaugos produktuose ir biocidiniuose produktuose, jos bus laikomos įregistruotomis pagal REACH reglamento reikalavimus (15 straipsnis).

## 7.8. Izopropilfenolio fosfatas

Izopropilfenolio fosfatas (3:1) – UVCB medžiaga, kai izopropilu veikiamos visumos

kintamumas negali būti išsamiai apibrėžtas.

### 1. Pavadinimas ir kiti identifikatoriai

<b>IUPAC pavadinimas arba kitas tarptautinis cheminis pavadinimas</b>	Izopropilfenolio fosfatas (3:1)
<b>Kiti pavadinimai</b>	Izopropilfenolio fosfatas Izopropilfenolio fosfatas (3:1) (kai propileno ir fenolio molinis santykis yra 1:1)
<b>EB numeris</b> <b>EB pavadinimas</b> <b>EB aprašymas</b>	273-066-3 Izopropilfenolio fosfatas (3:1) /
<b>CAS numeris</b> <b>CAS pavadinimas</b>	68937-41-7 Izopropilfenolio fosfatas (3:1)

### 2. Informacija apie sudėtį – pagrindinės sudedamosios dalys

<b>Pagrindinės sudedamosios dalys</b>					
<b>IUPAC pavadinimas</b>	<b>CAS numeris</b>	<b>EB numeris</b>	<b>Mol. formulė Hill metodu</b>	<b>Būdingoji konc. (% masė)</b>	<b>Konc. intervalas (% masė)</b>
Izopropilfenolio fosfatas (3:1)	68937-41-7	273-066-3	Nenurodyta		

<b>Pagrindinės sudedamosios dalys</b>	
<b>EB pavadinimas</b>	<b>EB aprašymas</b>
Izopropilfenolio fosfatas (3:1)	/
<b>CAS pavadinimas</b>	<b>CAS numeris</b>
Izopropilfenolio fosfatas (3:1)	68937-41-7

## 7.9. Ketvirtiniai amonio junginiai

Įmonė sintetina tokias chemines medžiagas:

### A cheminę medžiagą

Ketvirtiniai amonio junginiai, di-C<sub>10-18</sub>-alkildimetil, chloridas

EB numeris 294-392-2

CAS numeris 91721-91-4

Anglis-grandinė-ilgis-pasiskirstymas:

C<sub>10</sub> 10 %

C<sub>11</sub> 5,5%

C<sub>12</sub> 12 %

C<sub>13</sub> 7,5 %

C<sub>14</sub> 18 %

C<sub>15</sub> 8 %

C<sub>16</sub> 24 %

C<sub>17</sub> 7 %

C<sub>18</sub> 8 %

### B cheminę medžiagą

Ketvirtiniai amonio junginiai, koko-dialkildimetil, chloridas

EB numeris 263-087-6

CAS numeris 61789-77-3

Įmonė nežino šios cheminės medžiagos tikslios sudėties.

### C cheminę medžiagą

Didodecildimetilamonio bromidas



### **D cheminę medžiagą**

Didodecildimetilamonio chloridas

### **E cheminę medžiagą**

E cheminė medžiaga pagaminta kaip didodecildimetilamonio bromido ir didodecildimetilamonio chlorido reakcijos masė (C ir D cheminių medžiagų reakcijos masė).

### **F cheminę medžiagą**

Ketvirtiniai amonio junginiai, di-C<sub>14-18</sub>-alkildimetilamonio chloridas

EB numeris 268-072-8

CAS numeris 68002-59-5

Anglis-grandinė-ilgis-pasiskirstymas:

C<sub>14</sub>20 %

C<sub>15</sub>10 %

C<sub>16</sub>40 %

C<sub>17</sub>10 %

C<sub>18</sub>20 %

### **G cheminę medžiagą**

Ketvirtiniai amonio junginiai, di-C<sub>4-22</sub>-alkildimetil, chloridas

Anglis-grandinė-ilgis-pasiskirstymas (viengubas kabučių ženklas parodo vieną dvigubą jungtį, dvigubas – vieną trigubą jungtį):

C<sub>4</sub> 0,5 %

C<sub>6</sub> 3,0 %

C<sub>8</sub> 6,0 %

C<sub>10</sub> 10,0 %

C<sub>12</sub> 12,0 %

C<sub>14</sub> 24,0 %

C<sub>16</sub> 20,0 %

C<sub>18</sub> 16,0 %

C<sub>18'</sub> 2,0 %

C<sub>18''</sub> 0,5 %

C<sub>20</sub> 4,0 %

C<sub>22</sub> 2,0 %

Iki šiol įmonė pavadinimą cheminei medžiagai suteikia tik pagal B cheminę medžiagą (ketvirtiniai amonio junginiai, koko-dialkildimetilchloridas, EB numeris 263-087-6 ir CAS numeris 61789-77-3), nes ji iš visų cheminių medžiagų (nuo A iki G) tinka geriausiai. Įmonė norėtų sužinoti, ar įmanoma visas chemines medžiagas (nuo A iki G) registruoti pagal vieną, B cheminės medžiagos įrašą.

## 1. Bendrosios pastabos

Hidrokarbonai (parafinai, olefinai), išgaunami iš riebalų ir aliejų arba sintetinių pakaitalų, identifikuojami pagal anglies atomų išsidėstymą grandinėje arba pagal kilmę (alkilo deskriptorių), funkcinę grupę (funkcijos deskriptorius), pvz., amonis ir anijonas / katijonas (druskos deskriptorius), pvz., chloridas. Anglies atomų išsidėstymo per visą grandinės ilgį, pvz., C<sub>8-18</sub>, galimi variantai:

sočioji

linijinė (nešakotoji)

apimanti visus anglies numerius (C<sub>8</sub>, C<sub>9</sub>, C<sub>10</sub>, C<sub>11</sub>,..., C<sub>18</sub>), nes siauras išsidėstymas neapima platesnio ir atvirkščiai.

Kitu atveju turi būti nurodoma tokia informacija:

nesočioji (C<sub>16</sub> nesočioji)

šakotoji (C<sub>10</sub> šakotoji)

lyginis skaičius (C<sub>12-18</sub> lyginis skaičius)

Anglies grandinės, kurios apibūdinamos pagal šaltinį, turi apimti šaltinyje esantį išsidėstymą, pvz., lajaus alkilo aminorai.

Lajaus alkilo aminorai yra 99 % linijinės alkilamino grandinės pirminė struktūra, kai anglies atomų pasiskirstymas per grandinės ilgį yra toks (Ullmann, 1985) [viengubas kabučių ženklas parodo vieną dvigubą jungtį, dvigubas – vieną trigubą jungtį]:

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

## 2. Kaip identifikuoti chemines medžiagas, kurios bus registruojamos?

Visos cheminės medžiagos palyginamos su B chemine medžiaga (kuri iki šiol buvo naudojama suteikiant pavadinimą), kad galima būtų nuspręsti, ar dvi cheminės medžiagos gali būti laikomos tapačiomis.

A ir B cheminių medžiagų palyginimas

Toliau pateikiamas atomų išsidėstymas per grandinės ilgį gali būti randamas B cheminėje medžiagos dalyje „koko“ (Ullmann, 1985) [viengubas kabučių ženklas parodo vieną dvigubą jungtį, dvigubas – vieną trigubą jungtį]:

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

Tokiu atveju A cheminės medžiagos anglies atomų išsidėstymas per grandinės ilgį skiriasi nuo B cheminės medžiagos „koko“ dalies anglies atomų išsidėstymo per grandinės ilgį. Kadangi dviejų cheminių medžiagų kokybinė ir kiekybinė sudėtis reikšmingai skiriasi, jos negali būti laikomos tapačiomis.

### **B ir C cheminių medžiagų palyginimas**

B cheminė medžiaga – ketvirtiniai amonio junginiai, koko-dialkildimetilchloridas – yra sudedamųjų dalių, turinčių skirtingus anglies grandinės ilgius (nuo C<sub>6</sub> iki C<sub>18</sub>, lyginiai skaičiai, linijinė, sočioji ir nesočioji), mišinys. O C cheminė medžiaga – tik viena sudedamoji dalis, turinti vieną apibrėžtos ir sočiosios grandinės ilgį (C<sub>12</sub>) su skirtingu anijonu (bromidu). Todėl C ir B cheminės medžiagos negali būti laikomos tapačiomis.

### **B ir D cheminių medžiagų palyginimas**

B cheminė medžiaga – ketvirtiniai amonio junginiai, koko-dialkildimetilchloridas – yra sudedamųjų dalių, turinčių skirtingus anglies grandinės ilgius (nuo C<sub>6</sub> iki C<sub>18</sub>, lyginiai skaičiai, linijinė, sočioji ir nesočioji), mišinys. O D cheminė medžiaga – tik viena sudedamoji dalis, turinti vieną apibrėžtos ir sočiosios grandinės ilgį (C<sub>12</sub>) ir vienodą anijoną (chloridą). B ir D cheminės medžiagos, kurių pavadinimai skirtingi, negali būti laikomos tapačiomis cheminėmis medžiagomis, nes mišinys, kuriame yra tam tikra sudedamoji dalis, neapima tos atskiros sudedamosios dalies ir atvirkščiai.

### **B ir E cheminių medžiagų palyginimas**

E cheminė medžiaga yra C ir D cheminių medžiagų mišinys. Abi jos turi sočiųjų grandinių ilgius C<sub>12</sub>, tačiau skirtingus anijonus (bromidą ir chloridą). B cheminė medžiaga – ketvirtiniai amonio junginiai, dikoko-alkildimetilchloridas – yra sudedamųjų dalių, turinčių skirtingus anglies grandinės ilgius (nuo C<sub>6</sub> iki C<sub>18</sub>, lyginiai skaičiai, linijinė, sočioji ir nesočioji), mišinys, kuriame anijonas – chloridas. Tačiau E cheminė medžiaga apibūdinama tik C<sub>12</sub> anglies grandinės ilgiu ir joje bromidas – papildomas anijonas. Todėl B ir E cheminės medžiagos negali būti laikomos tapačiomis. Taigi E cheminė medžiaga turi būti registruojama atskirai.

### **B ir F cheminių medžiagų palyginimas**

F cheminė medžiaga ketvirtiniai amonio junginiai, di-C<sub>14-18</sub>-alkildimetilamonio chloridas –

sudedamųjų dalių, turinčių skirtingus anglies grandinės ilgius (nuo C<sub>14</sub> iki C<sub>18</sub>, lyginiai ir nelyginiai skaičiai, linijinė ir sočioji), mišinys. F ir B cheminių medžiagų sudėtis ir anglies grandinės variantų intervalas yra skirtingi. F cheminės medžiagos anglies grandinės variantų intervalas yra siauras ir ji turi anglies grandines C<sub>15</sub>- ir C<sub>17</sub>-. Todėl B ir F cheminės medžiagos negali būti laikomos tapačiomis.

### **B ir G cheminių medžiagų palyginimas**

B ir G cheminės medžiagos atrodo labai panašios, nes anglies grandinių variantų intervalai beveik vienodi. Tačiau G cheminė medžiaga papildomai turi anglies grandinės ilgius C<sub>4</sub>, C<sub>20</sub> ir C<sub>22</sub>. G cheminės medžiagos anglies grandinės ilgių variantai apima platesnį intervalą nei B cheminės medžiagos anglies grandinės ilgių variantai. Todėl B ir G cheminės medžiagos negali būti laikomos tapačiomis.

## **3. Išvados**

Hidrokarbonai (parafinai, olefinai) gali būti laikomi tapačiomis cheminėmis medžiagomis, jeigu tik visi deskriptoriai (alkilo, funkcijos ir druskos) yra vienodi.

Prieš tai pateiktuose pavyzdžiuose visais atvejais deskriptoriai yra skirtingi. Todėl cheminės medžiagos negali būti registruojamos pagal B cheminės medžiagos įrašą.

## **7.10. Naftos cheminės medžiagos**

Vadovaujantis 4.3.2 skyriaus rekomendacijomis dėl tam tikrų UVCB medžiagų, pateikiami du pavyzdžiai.

### **7.10.1. Benzino maišymo srautas (C4-C12)**

#### **1. Pavadinimas ir kiti identifikatoriai**

Pavadinimas

<b>IUPAC pavadinimas arba kitas tarptautinis cheminis pavadinimas</b>	Pirminis benzinas (naftos), po katalizinio riformingo
---	---

Šaltinis

<b>Srauto šaltinio identifikacija ir apibūdinimas</b>	Žalia nafta
---	-------------

Procesas

<b>Valymo proceso apibūdinimas</b>	<b>Katalizinio riformingo procesas</b>
------------------------------------	--

<b>Anglies atomų grandinės intervalas</b>	C4–C12
<b>Virimo temperatūros intervalas arba riba</b>	Nuo 30 °C iki 220 °C
<b>Kitos fizinės savybės, pvz., klampa</b>	Žemiau 7 mm <sup>2</sup> /s esant 40 °C (klampa)
<b>EB numeris</b> <b>CAS numeris</b> <b>EB pavadinimas / CAS pavadinimas</b> <b>EB apibūdinimas / CAS apibūdinimas</b>	273-271-8 68955-35-1 Pirminis benzinas (naftos), po katalizinio riformingo Sudėtingas angliavandenilių mišinys, gaunamas distilijuojant katalizinio riformingo produktus. Jį sudaro angliavandeniliai, kurių vyraujantis anglies atomų skaičius yra nuo C4 iki C12, virimo temperatūros intervalas – nuo 30 °C iki 220 °C (nuo 90 °F iki 430 °F). Jame yra palyginti daug aromatinių ir šakotosios grandinės angliavandenilių. Taip pat gali būti 10 arba daugiau tūrio % benzeno.

## 2. Informacija apie sudėtį

<b>Žinomos sudedamosios dalys</b>			
<b>IUPAC pavadinimas</b>	<b>CAS numeris</b>	<b>EB numeris</b>	<b>Konc. intervalas (% masė)</b>
Benzenas	71-43-2	200-753-7	1-10
Toluenas	108-88-3	203-625-9	20-25
Ksilenas	1330-20-7	215-535-7	15-20

### 7.10.2. (Naftos) gazoliai

#### 1. Pavadinimas ir kiti identifikatoriai

<b>IUPAC pavadinimas arba kitas tarptautinis cheminis pavadinimas</b>	(Naftos) gazolis, sunkusis atmosferinis
---	---

## Šaltinis

<b>Srauto šaltinio identifikacija ir apibūdinimas</b>	Žalia nafta
---	-------------

## Procesas

<b>Valymo proceso apibūdinimas</b>	<b>Atmosferinė distiliacija</b>
<b>Anglies atomų grandinės intervalas</b>	C7–C35
<b>Virimo temperatūros intervalas arba riba</b>	Nuo 121 °C iki 510 °C
<b>Kitos fizinės savybės, pvz., klampa</b>	20 mm <sup>2</sup> /s esant 40 °C (klampa)
<b>EB numeris</b> <b>CAS numeris</b> <b>EB pavadinimas / CAS pavadinimas</b> <b>EB apibūdinimas / CAS apibūdinimas</b>	272-184-2 68783-08-4 (Naftos) gazolis, sunkusis atmosferinis Sudėtingas angliavandenilių mišinys, gaunamas distiliuojant žalią naftą. Jį sudaro angliavandeniliai, kurių vyraujantis anglies atomų skaičiaus intervalas yra nuo C7 iki C35, apytikslės virimo temperatūros intervalas – nuo 121 °C iki 510 °C (nuo 250 °F iki 950 °F).

## 2. Cheminė sudėtis

Informacijos nėra.

### 7.11. Fermentai

Vadovaujantis 4.3.3.3 skyriaus rekomendacijomis dėl tam tikrų UVCB medžiagų, pateikiami du fermentų koncentrato pavyzdžiai: subtilizinas (identifikuotas pagal IUBMB nomenklatūrą ir kitas sudedamąsias dalis) ir  $\alpha$ -amilazė (identifikuota pagal IUBMB nomenklatūrą ir gamybos organizmus)

#### 7.11.1. Subtilizinas

Baltyminis fermentas	Subtilizinas
<b>IUBMB numeris</b>	3.4.21.62
<b>IUBMB suteikti pavadinimai</b> (sisteminiis pavadinimas, fermento pavadinimas, sinonimai)	Subtilizinas; alkalazė; 0.6L alkalazė; 2.5L alkalazė; ALK fermentas; A bacilapeptidazė; B bacilapeptidazė; Bacillus subtilis alkalinproteinizė bioprazė; AL 15 bioprazė; APL 30 bioprazė; kolistinazė; (taip pat žr. pastabas); J subtilizinas; S41 subtilizinas; Sendai subtilizinas; GX subtilizinas; E subtilizinas; kt.
<b>IUBMB pateiktos pastabos</b>	Subtilizinas yra serino endopeptidazė, <a href="#">S8 peptidazės šeimos</a> pavyzdys. Jame nėra cisteino likučių (nors jų yra randama homologiiniuose fermentuose). Įvairios rūšys apima BPN' subtilizina (taip pat B subtilizina, B subtilopeptidazę, C subtilopeptidazę, Nagarse, Nagarse proteinazę, Novo subtilizina, Novo bakterinę proteinazę) ir Carlsberg subtilizina (A subtilizina, A subtilopeptidazę, Novo alkalazę). Ankstesnis jo EB Nr. 3.4.4.16, taip buvo registruojamas cheminėje medžiagoje, kurios EB Nr. 3.4.21.14. Panašius fermentus gamina įvairios <i>Bacillus subtilis</i> bakterijų giminės arba kitos <i>Bacillus</i> bakterijų rūšys [1,3]
<b>Reakcija</b>	Hidrolizuojami baltymai su labai įvairiais peptidiniais ryšiais, kai pirmenybė – dideliame neįkrautų liekanų kiekiui pirminėje baltymo struktūroje P1. Hidrolizuoja peptido amidus
<b>Reakcijos tipas</b>	Hidrolizė Hidrolizuoja peptidų junginius (peptidazė) Serino endopeptidazės
<b>EB numeris</b>	232-752-2
<b>EB pavadinimas</b>	Subtilizinas
<b>CAS numeris</b>	9014-01-1
<b>CAS pavadinimas</b>	Subtilizinas

<b>Baltyminių fermentų koncentracija</b>	26 %
<b>Kitos sudedamosios dalys</b>	
Kiti baltymai, peptidai ir aminorūgštys	39 %
Karbohidratai	11 %
Lipidai	1 %
Neorganinės druskos	23 %
<b>Papildomi parametrai</b>	
<b>Substratai ir produktai</b>	Baltymai arba oligopeptidai, vanduo Peptidai

### 7.11.2. $\alpha$ -amilazė

Baltyminis fermentas	$\alpha$ -amilazė
<b>IUBMB numeris</b>	3.2.1.1
<b>IUBMB suteikti pavadinimai</b> (sisteminis pavadinimas, fermento pavadinimas, sinonimai)	1,4- $\alpha$ -D-gliukan gliukanohidrolazė glikogenazė $\alpha$ -amilazė alfa amilazė endoamilazė A taka-amilazė
<b>IUBMB pateiktos pastabos</b>	Veikia krakmolą, glikogeną ir susijusius polisacharidus bei oligosacharidus atsitiktiniu būdu. Atskiriamos $\alpha$ konfigūracijos suskaidytos grupės. „ $\alpha$ “ terminas susijęs su trijų atskirtų cukraus grupių pradine anomerine forma, o ne su hidrolizuotos jungties konfigūracija.
<b>Reakcija</b>	1,4- $\alpha$ -D-gliukozidinių junginių polisachariduose, apimančių tris arba daugiau 1,4- $\alpha$ -sujungtų D-gliukozės molekulių, endohidrolizė



<b>Reakcijos tipas</b>	hidrolazė gliukozidazė gliukozidazė, t. y. fermentai, hidrolizuojantys O- ir S-gliukozilio sudedamąsias dalis
<b>EB numeris</b>	232-565-6
<b>EB pavadinimas</b>	amilazė, $\alpha$ -
<b>CAS numeris</b>	9000-90-2
<b>Susijęs CAS numeris</b>	9001-95-0, 9036-05-9, 9077-78-5, 135319-50-5, 106009-10-3, 70356-39-7, 144133-13-1 (visi panaikinti)
<b>CAS pavadinimas</b>	amilazė, $\alpha$ -
<b>Baltyminių fermentų koncentracija</b>	37 %
<b>Kitos sudedamosios dalys</b>	
Kiti baltymai, peptidai ir aminorūgštys	30 %
Karbohidratai	19 %
Neorganinės druskos	14 %
<b>Papildomi parametrai</b>	
<b>Substratai ir produktai</b>	krakmolas; glikogenas; vanduo; polisacharidas; oligosacharidas

## I priedėlis. Pagalbinė medžiaga

Šis priedėlis apima interneto svetainių, duomenų bazių ir vadovų sąrašą, kurį galima naudoti ieškant atitinkamų IUPAC, CAS ir EB pavadinimų, molekulinį formulių ir struktūrinių formulių (įskaitant SMILES žymėjimą) bei kitų parametrų, kurių reikia cheminei medžiagai identifikuoti. Komerinės duomenų bazės ir rekomendacinės priemonės neįtrauktos.

<b>Bendroji informacija</b>		
<b>Cheminės medžiagos identifikavimo parametras</b>	<b>Šaltinis</b>	<b>Šaltinio apibūdinimas</b>
JAV sveikatos ir paslaugų žmonėms departamentas	<a href="https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/">https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/</a>	Duomenų ir priemonių visuma, padedanti vartotojams ieškoti informacijos apie chemines medžiagas
„Perkin Elmer Informatics“	<b>Error! Hyperlink reference not valid.</b> <a href="https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice">https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice</a>	Nemokama duomenų bazė, kurioje pateikiama informacija apie chemines struktūras, fizines savybes ir nuorodos į atitinkamą informaciją
„BIOVIA Experiment Knowledge Base“ (EKB)	<a href="https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/">https://www.3ds.com/products-services/biovia/products/</a>	Cheminių medžiagų registracijos programinė įranga; suderintas abėcėlinis produktų sąrašas

<b>Pavadinimas ir kiti identifikatoriai</b>		
<b>Cheminės medžiagos identifikavimo parametras</b>	<b>Šaltinis</b>	<b>Šaltinio apibūdinimas</b>
IUPAC pavadinimas	<a href="https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/">https://iupac.org/what-we-do/nomenclature/</a>	Oficialioji IUPAC interneto svetainė
	<a href="https://iupac.qmul.ac.uk/">https://iupac.qmul.ac.uk/</a>	IUPAC cheminių medžiagų nomenklatūra ir rekomendacijos (prižiūri IUPAC)
	Nomenclature of Organic Chemistry (Blue Book) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	Pagrindinė IUPAC nomenklatūros publikacija, 2006 m. laukiama atnaujinimo
	A Guide to IUPAC Nomenclature of Organic Compounds (recommendations 1993) (supplementary Blue Book) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	Pagrindinė IUPAC nomenklatūros publikacija, 2006 m. laukiama atnaujinimo
	Nomenclature of Inorganic Chemistry (recommendations 1990) (Red Book) Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	Pagrindinė IUPAC nomenklatūros publikacija, 2005 m. liepos mėn. laukiama atnaujinimo
IUPAC pavadinimas	Biochemical Nomenclature and Related Documents (White Book) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	Pagrindinė IUPAC nomenklatūros publikacija
	Cheminių medžiagų nomenklatūros principai: IUPAC rekomendacijų gidas Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Įvadinis tomas, apimantis visus sudedamųjų dalių tipus
IUPAC pavadinimas	<a href="http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/">http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/</a>	Komercinė kompiuterinė pavadinimo suteikimo programa, kuri gali būti labai naudinga suteikiant pavadinimus vidutinio sudėtingumo struktūroms. Taip pat nemokama programa, pritaikyta mažoms molekulėms (rekomenduojama IUPAC)

	<a href="http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature">http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature</a>	IUPAC organinės chemijos nomenklatūra (rekomenduojama IUPAC)
	<a href="http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm">http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm</a>	Organinių sudedamųjų dalių, kurių nereikšmingi ir pusiau sisteminiai pagrindiniai pavadinimai yra patvirtinti, išsamus sąrašas
	<a href="http://www.chemexper.com/">http://www.chemexper.com/</a>	„ChemExper“ cheminių medžiagų žinyno tikslas – sukurti bendrą, internetu laisvai prieinamą cheminių medžiagų duomenų bazę. Šioje duomenų bazėje cheminės medžiagos pateikiamos su cheminėmis savybėmis. Teikti ir gauti informaciją apie chemines medžiagas gali visi, naudodami interneto naršyklę
IUBMB nomenklatūra	<a href="https://iubmb.qmul.ac.uk/">https://iubmb.qmul.ac.uk/</a>	IUBMB biocheminės nomenklatūros duomenų bazė (prižiūri IUBMB)
Kiti pavadinimai	<a href="http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name">http://www.colour-index.com/colour-index-generic-name</a>	Spalvos indekso bendrieji pavadinimai, tarptautiniai spalvos indeksai, ketvirtasis leidimas internete
	<a href="https://incipedia.personalcarecouncil.org/">https://incipedia.personalcarecouncil.org/</a>	INCI (Tarptautinė kosmetikos ingredientų nomenklatūra), Asmens priežiūros produktų tarybos oficialioji interneto svetainė
	<a href="https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges">https://www.epa.gov/tsca-inventory/certain-chemical-substances-containing-varying-carbon-chain-lengths-alkyl-ranges</a>	JAV EPA cheminės medžiagos, turinčios kintamą anglies atomų grandinės ilgį (alkilo intervalai, naudojant CX-Y žymėjimą)
Kiti identifikatoriai	<a href="https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en">https://single-market-economy.ec.europa.eu/single-market/ce-marking_en</a>	CE normos, CE oficialioji Europos interneto svetainė
EB numeris	<a href="https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory">https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/ec-inventory</a>	EB aprašas: galima ieškoti EINECS, ELINCS, NLP ir Direktyvos 67/548/EEB I priede

CAS numeris	<a href="http://www.cas.org">http://www.cas.org</a>  <a href="http://www.chemistry.org">http://www.chemistry.org</a>	<p>CAS registravimo tarnybos oficialioji interneto svetainė</p> <p>Amerikos cheminių medžiagų organizacijos oficialioji interneto svetainė</p>
-------------	--	--

### Molekulinė ir struktūrinė formulė

Cheminės medžiagos identifikavimo parametras	Šaltinis	Šaltinio apibūdinimas
SMILES	<a href="http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html">http://www.cheminfo.org/flavor/malaria/Utilities/SMILES_generator_checker/index.html</a>	Nemokamas SMILES generatorius
Molekulinė masė ir SMILES	<a href="http://www.acdlabs.com/download/chemsketch.html">http://www.acdlabs.com/download/chemsketch.html</a>	Nemokama programa „ACDChemsketch“ (taip pat galima nusipirkti)
Keletas fizinių ir cheminių parametru	<a href="https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface">https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite-estimation-program-interface</a>	EPI (vertinimo programų sąsaja) programų paketas™ su „Windows®“ veikiantis fizinių ir cheminių savybių išlikimo aplinkoje vertinimo modelių programų paketas, sukurtas EPA Teršalų ir nuodų prevencijos tarnybos ir Sirakūzų tyrimų bendrovės (SRC).
Papildoma pagalba dėl konkrečių medžiagų	<a href="#">Klausimai ir atsakymai - ECHA</a> <a href="#">Konkrečioms sektoriams skirta pagalba cheminei medžiagai identifikuoti - ECHA</a>	Pagalbinė medžiaga apie konkrečių cheminių medžiagų pavadinimų sudarymo ir apibūdinimo metodus pateikiama ECHA svetainėje ir klausimų ir atsakymų skiltyje.

## II priedėlis. techninės rekomendacijos dėl cheminės medžiagos identifikavimo parametrų

Šio priedėlio informacija skirta rekomendacinio dokumento naudotojams, kurie nesusipažinę su nomenklatūrai taikomomis techninėmis taisyklėmis, įvairiausių registru numerių naudojimu ir nacionalinėmis taisyklėmis, taikomomis molekulinei ir struktūrinei informacijai, spektro duomenims ir kt.

Tokia informacija yra bendroji įžanga, kurioje pateikiami apibendrinti pagrindiniai principai ir nuorodos į pradinis šaltinius, kad naudotojas turėtų išsamią informaciją.

Ši apžvalga – tai supaprastinta versija, kuri profesionaliems naudotojams yra neišbaigta arba neišsami ir nepakankamai detali. Visais atvejais ji nėra lygiavertė oficialiajam šaltiniui.

### 1 pavadinimas (-ai), esantis (-ys) IUPAC arba kitoje tarptautinėje nomenklatūroje

Registruojant cheminę medžiagą, turi būti suteikiamas IUPAC pavadinimas anglų kalba arba kitas aiškiai apibrėžtas ir tarptautiniu mastu priimtas pavadinimas.

IUPAC pavadinimas yra pagrįstas tarptautine standartine cheminių medžiagų nomenklatūra, kurią sudarė tarptautinė organizacija IUPAC – Tarptautinė teorinės ir taikomosios chemijos sąjunga (atitinkamos nuorodos pateiktos 1 priedėlyje). IUPAC nomenklatūra – tai pavadinimo organinėms ir neorganinėms cheminėms medžiagoms suteikimo sisteminis būdas. Funkcinių grupių, esančių cheminėje medžiagoje, tipui ir pozicijai apibūdinti IUPAC nomenklatūroje naudojami priešdėliai, priesagos ir intarpai.

Pavyzdžiui, **penta-1,3-dien-1-olis**:

**penta-1,3-** yra priešdėlis

**di** yra intarpas

**ol** yra priesaga

**en-** yra pavadinimo pagrindas, pagrindinis pavadinimas

Taisyklių rinkinys buvo kuriamas septynerius metus ir yra tebekeičiamas, kad būtų galima taikyti naujoms sudedamosioms dalims, turinčioms įvairią molekulinę struktūrą, ir pašalinti galimus prieštaravimus arba identifikuotus nesusipratimus. IUPAC taisyklės gali būti taikomos tik aiškiai apibrėžtoms cheminėms medžiagoms.

Toliau pateikiama keletas bendrųjų rekomendacijų dėl IUPAC pavadinimo sudarymo. Jeigu reikia detalesnės pagalbos, naudokite šio rekomendacinio dokumento 4 skyriuje pateiktas rekomendacijas.

### 1.1 Organinės cheminės medžiagos

1 žingsnis Identifikuoti ilgiausios ištisinės anglies atomų grandinės C atomų skaičių. Šis skaičius nurodo pagrindinio pavadinimo priešdėlį, pirmąją dalį:

Anglies atomų skaičius	Šaknis
1	met-
2	eti-
3	prop-
4	but-
5	pent-
6	heks-
7	hept-
8	okt-
N	....

2 žingsnis Nustatyti grandinės įsotinimą. Grandinės įsotinimas lemia pagrindinio pavadinimo priesagą, antrąją dalį:

Įsotinimas	Jungtys	Priesaga
Nesočioji	Dviguba Triguba	-enas -in
Sočioji	-	-anas

Jeigu yra kelios dvigubos ir trigubos jungtys, jungčių skaičius nurodomas prieš priesagą rašant „mono“, „di“, „tri“ ir kt.

Pentenas su 2 dvigubomis jungtimis: pentadienas

3 žingsnis Pagrindiniame pavadinime derinti priešdėlį, priesagą ir priedus.

Pastaba: IUPAC patvirtino rūšinius ir pusiau sisteminius pavadinimus, kurie gali būti naudojami sudarant pagrindinį pavadinimą:

benzenas, toluenas ir kt.

4 žingsnis Naudokite toliau pateiktą lentelę:

- Identifikuoti pakaitus ir (arba) funkcines grupes: anglies grupes ir grupes be anglies, prijungtas prie anglies atomų grandinės, kuri buvo identifiukuota 1 žingsnyje.
- Nustatyti pakaitalų ir (arba) funkcinių grupių pirmumo grandinėje tvarką.
- Pagal pirmumo grandinėje tvarką pridėti priesagą pirmajam pakaitalui / funkcinei grupei ir kitoms toliau einančioms.
- Abėcėlės tvarka pridėti priešdėlius kitiems pakaitalams ir funkcinėms grupėms.

Pirmumas	Grupė	Formulė	Priesaga	Priešdėlis
1	Karboksirūgštis	R-COOH	-inė rūgštis	Karboksi-
2	Esteris	R-CO-O-R	-atas	-
3	Amidas	R-CONH <sub>2</sub>	-amidas	Karbomoil-
4	Cianidas	R-CN	-nitrilas	Ciano-
5	Aldehydas	R-CHO	-al	Okso-
6	Ketonas	R-CO-R	-onas	Okso-
7	Alkoholis	R-OH	-ol	Hidroksil-
8	Tiolis	R-SH	-tiol	Sulfanil-
9	Aminas	R-NH <sub>2</sub>	-aminas	Amino-

## 1.2 Neorganinės cheminės medžiagos

### 1.2.1 Pavadinimo paprastoms neorganinėms cheminėms medžiagoms suteikimas

Pavadinimas neorganinėms cheminėms medžiagoms suteikiamas pagal taisyklių rinkinį (IUPAC raudonąją knygą, žr. nuorodas 7.1 skyriuje). Pagrindinės taisyklės:

1 Vieno atomo anijonų pavadinime įterpiama priesaga „-idas“:

**O<sup>2-</sup> □ oksidas**

2 Paprasti joniniai junginiai – tai pavadinimai, kuriuose nurodomi katijonai, o po jų – anijonai. Katijonų, kurių įkrova > 1, įkrova rašoma po elemento pavadinimo romėniškais skaitmenimis lenktiniuose skliaustuose:

**Cu<sup>2+</sup> □ tai varis(II)**

3 Rašant hidratų pavadinimą, pirmiausia nurodomos joninės jungtys, po to – priešdėlis skaitmenimis ir -hidratas. Priešdėliai skaitmenimis yra tokie: mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hekso-, hepta-, okta-, nona-, deka-:

**CuSO<sub>4</sub> · 5H<sub>2</sub>O □ „vario(II) sulfato pentahidratas“**

Pastaba: jei registruojami hidratatai ir, kai taikoma, tam tikro metalo druskos bevandenė forma, jie laikomi tapačiomis cheminėmis medžiagomis.

4 Neorganinių molekuliųjų jungčių pavadinime prieš kiekvieną elementą nurodomas priešdėlis (žr. hidratas). Didžiausią neigiamą elektros krūvį turintis elementas rašomas paskutinis, jis turi būti nurodomas su priesaga -idas:

**CO<sub>2</sub> – anglies dioksidas, o CCl<sub>4</sub> – anglies tetrachloridas**

5 Rūgštims pavadinimas suteikiamas pagal anijonus, kurie susidaro, kai rūgštys tirpsta vandenyje. Galimi keli variantai:

Kai rūgštis tirpsta vandenyje, ji suskyla į anijonus, vadinamus „x“-idais. Rūgščiai



suteikiamas pavadinimas hidro-„x“-inė rūgštis:

**chlorido anijonus sudaro hidrochlorinė rūgštis**

Kai rūgštis tirpsta vandenyje, ji suskyla į anijonus, vadinamus „x“-atai. Rūgščiai suteikiamas pavadinimas „x“-nė rūgštis:

**chlorinė rūgštis vandenyje skyla į chlorato anijonus**

Kai rūgštis tirpsta vandenyje, ji suskyla į anijonus, vadinamus „x“-itais. Rūgščiai suteikiamas pavadinimas „x“-o rūgštis:

**chloro rūgštis skyla į chlorito anijonus**

**1.2.2 Pavadinimo mineraloginėms fazėms suteikimas**

Sudėtinės mineraloginės fazės paprastai apima tris arba daugiau elementų derinių. Dauguma esamų elementų yra sujungti su deguonimi. Todėl mineralogai, siekdami palengvinti identifikavimą, laiko, kad sudėtiniai junginiai paprastai turi būti sudaryti iš oksidų. Dalis oksidų yra bazės, o kiti – rūgštys. Pavyzdžiui, silikatus buvo įprasta rodyti kaip oksidų skaičiaus sumą, kaip silicio rūgšties druskas arba aliuminio silicio rūgštis. Pagal tai kalcio ortosilikatas gali būti pateikiamas kaip  $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ , atskirų oksidų derinys, arba kaip  $\text{Ca}_2\text{SiO}_4$  – ortosilicio rūgšties  $\text{H}_4\text{SiO}_4$  kalcio druska. Tokia pat tvarka taikoma ir kitiems sudėtiniais mineralų oksidams. Suteikiant pavadinimą, prieš kiekvieną oksidą nurodomas priešdėlis (pvz.,  $\text{Ca}_3\text{SiO}_5$  = trikalcio silikatas =  $3\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ ). Kai kuriuose pramonės sektoriuose buvo pradėta taikyti supaprastinta tvarka, siekiant sutrumpinti sudėtinę formulę. Pavyzdžiui, Portlendo cemento klinkerio formulė  $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$  (kalcio ortosilikatas, arba dikalcio silikatas) buvo sutrumpinta taip:  $\text{C}_2\text{S}$ , kurioje C yra CaO ir S yra  $\text{SiO}_2$ . Jei pavadinimas suteikiamas sudėtinėms mineralogijos fazėms arba jos turi būti identifikuojamos, rekomenduojama pateikti nuorodas į standartinės mineralogijos arba pramonės dokumentus.

**1.3 Natūralūs produktai arba susijusios sudedamosios dalys**

IUPAC sukūrė keletą taisyklių, pagal kurias sistemiskai suteikiami pavadinimai natūraliems produktams. Trumpai tariant, tai reiškia, kad cheminių medžiagų, gautų iš natūralaus šaltinio, pavadinimas yra pagrįstas (kai tik tai įmanoma) organizmo, iš kurio išgauta cheminė medžiaga, šeimos, genties arba rūšies pavadinimu:

**hipotetinio baltymo (*Hypothecalia Exemplare*) pavadinimai yra pagrįsti *hypothecalia* ir (arba) *exemplare*, pavyzdžiui, *Horse exemplare***

Jeigu įmanoma, pavadinimas turi atspindėti žinomą arba tikėtiną natūralių produktų pasiskirstymą. Jeigu reikia, kaip cheminės medžiagos, kuri randama daugybėje susijusių šeimų, pavadinimo pagrindas taip pat gali būti naudojama klasė arba tvarka. Nežinomos sandaros natūralių produktų pavadinime turėtų nebūti priešdėlių, priesagų ir (arba) intarpų, naudojamų organinėje nomenklatūroje:

**Horse exemplare kondensacijos produktas valarinas pridamas prie N galo**

Dauguma natūraliai randamų cheminių medžiagų priskiriamos aiškiai apibrėžiamai struktūrinei klasei, kurių kiekvieną galima apibūdinti pagal artimai susijusių (t. y. kiekviena gali būti išvedama iš pagrindinės struktūros) pirminių struktūrų rinkinį. Tokių natūraliai randamų cheminių medžiagų ir jų darinių sisteminiai pavadinimai gali būti pagrįsti tam tikros svarbiausios pirminės struktūros pavadinimu:

## gerai žinomos pirminės struktūros – alkaloidai, steroidai, terpenoidai ir vitaminai

Svarbiausia pirminė struktūra turi atspindėti pagrindines skeletines struktūras, būdingas daugumai tos klasės cheminių medžiagų. Natūraliai randamoms cheminėms medžiagoms arba dariniams pavadinimai suteikiami pagal pirminę struktūrą, pridodant priešdėlius, priesagas arba intarpus, kurie reiškia:

- skeletinės struktūros keitimai
- skeletinių atomų keitimas kitais
- hidrinimo etapų keitimai, atliekami dėl pirminės struktūros pavadinimo
- pirminės struktūros atomai arba vandenilių atomus pakeičiančios grupės
- konfigūracijos, kurioms pirminės struktūros pavadinimas įtakos neturėjo, arba pakeistos konfigūracijos, kurioms įtakos turėjo pirminės struktūros pavadinimas

### **tiamino chloridas, taip pat vadinamas vitaminu B<sub>1</sub>**

Jei reikia daugiau išsamesnės informacijos apie sisteminį pavadinimo natūraliems produktams ir susijusioms cheminėms medžiagoms suteikimą, susisieki su IUPAC (žr. 1 priedėlį).

## 1.4 Kai neįmanoma priskirti IUPAC pavadinimo

Jei kai kurioms cheminėms medžiagoms neįmanoma priskirti IUPAC pavadinimo, gali būti naudojama kita pasaulyje pripažinta nomenklatūra, skirta būtent tokioms cheminėms medžiagoms:

- Mineralams ir rūdoms; mineraloginiams pavadinimams
- Naftos cheminės medžiagos
- Spalvos indekso bendriesiems pavadinimams<sup>3</sup>
- Naftos priedams
- INCI (Tarptautinė kosmetikos ingredientų nomenklatūra)<sup>4</sup>
- SDA (Muilo ir ploviklių gamintojų asociacija) cheminių medžiagų pavadinimams<sup>5</sup>
- Kita

## 2 Kiti pavadinimai

Registruojant pagal REACH sistemą naudinga įtraukti visus atitinkamus pavadinimus ir (arba) viešuosius identifikatorius visomis kalbomis, pagal kuriuos cheminė medžiaga yra arba bus žymima ES (pvz., prekybiniai pavadinimai). Tokia informacija apima prekius pavadinimus, sinonimus, trumpinius ir kt.

- <http://www.colour-index.com>, Tarptautiniai spalvos indeksai, ketvirtasis leidimas internete
- <http://online.personalcarecouncil.org/jsp/Home.jsp>, INCI, Asmens priežiūros produktų tarybos oficialioji interneto svetainė
- <http://www.cleaninginstitute.org/>, Amerikos švaros instituto (angl. *American Cleaning Institute*, ACI) oficialioji interneto svetainė

## 3 EINECS, ELINCS arba NLP (EK aprašo) EB numeriai

EB numeris, t. y. EINECS, ELINCS arba NLP numeris, yra oficialus cheminės medžiagos numeris Europos Sąjungoje. EB numerį galima surasti EINECS, ELINCS, NLP ir Europos cheminių medžiagų agentūros oficialiuosiuose leidiniuose.

EB numerį sudaro 7 skaitmenys, išdėstyti tokia tvarka:  $x_1x_2x_3-x_4x_5x_6-x_7$ . Pirmasis skaitmuo parodo, kuriame sąraše yra cheminė medžiaga:

Sąrašas	EB numerio pirmasis skaitmuo
EINECS	2 arba 3
ELINCS	4
NLP	5

#### 4 CAS pavadinimas ir CAS numeris

Cheminių medžiagų santrumpų tarnyba (CAS), Amerikos cheminių medžiagų organizacijos (ACS) padalinys, kiekvienai cheminei medžiagai, kuri įvedama į CAS registro duomenų bazę, priskiria CAS pavadinimą ir numerį. Pavadinimai ir numeriai unikalūs cheminei medžiagai, kurią identifikavo CAS mokslininkai, priskiriami eilės tvarka. Kiekviena cheminė medžiaga, įregistruota Cheminių medžiagų santrumpų tarnyboje, turi pagal CAS nomenklatūrą suteiktą pavadinimą, kurį ACS patvirtina pagal ACS nomenklatūros komiteto rekomendacijas (žr. 1 priedėlio nuorodas).

##### 4.1 CAS pavadinimas

CAS pavadinimas – Cheminių medžiagų santrumpų tarnybos suteiktas pavadinimas, kuris skiriasi nuo IUPAC pavadinimo. CAS nomenklatūra pagrįsta ribotu kriterijų rinkiniu, kurio ne visada pakanka cheminės medžiagos pavadinimui nustatyti. Todėl dažniausiai rekomenduojama susisiekti su Cheminių medžiagų santrumpų tarnyba – ji nurodys teisingą CAS pavadinimą.

Trumpai tariant, pagrindinės nomenklatūros taisyklės yra tokios:

- Pagrindinė cheminės medžiagos dalis naudojama kaip antraštė arba šaltinis.
- Pakaitalai įrašomi po antraštės / šaltinio, t. y. atvirkštine tvarka
- Jei pateikiama daugiau pakaitalų, jie įrašomi abėcėlės tvarka (įskaitant priešdėlius):

**o-ksilen-3-olis – tai benzenas, 1,2-dimetilas, 3-hidroksi**

##### 4.2 CAS numeris

CAS numerį galima gauti iš Cheminių medžiagų santrumpų tarnybos.

CAS numerį sudaro ne mažiau kaip 5 skaitmenys, suskirstyti į tris dalis, atskirtas brūkšneliais. Antrąją dalį visada sudaro 2 skaitmenys, trečiąją dalį – 1 skaitmuo:

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

Norint patikrinti CAS numerį, galima naudoti funkciją „kontrolinė suma“:

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

Atlikus patikrinimą pagal kontrolinę sumą, CAS numeris turi būti teisingas.

#### 5 Kiti tapatybės kodai

Taip pat gali būti suteikiami kiti pasaulyje pripažinti tapatybės kodai, pavyzdžiui:

- Muitinės numeris
- JT numeris
- Spalvos indekso numeris
- Dažų numeris

## **6 Molekulinė formulė, struktūrinė formulė ir SMILES**

### **6.1 Molekulinė formulė**

Molekulinėje formulėje kiekvienas elementas nurodomas pagal jo cheminį simbolį. Taip pat molekulinėje formulėje nurodomas kiekvieno tokio elemento atomų skaičius, esantis vienoje atskiroje cheminės medžiagos molekulėje.

Molekulinė formulė turi būti užrašoma pagal (tradicinę) Hill sistemą ir papildomai pagal CAS sistemą, jei ji skiriasi nuo Hill sistemos formulės.

Taikant Hill metodą, gali būti atliekami tokie žingsniai:

1. Identifikuoti elementus ir surašyti cheminius simbolius.
2. Išdėstyti elementus tinkama tvarka:

- a. Cheminės medžiagos, kuriose yra anglies:

kiekvienas elementas nurodomas pagal jo cheminį simbolį tokia tvarka:

- (1) anglis,
- (2) vandenilis,
- (3) kiti elemento simboliai abėcėlės tvarka:

**pentanas: C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>**

**pentenas: C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>**

**pentanolis: C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>O**

- b. Cheminės medžiagos, kuriose nėra anglies:

visi elementai pateikiami abėcėlės tvarka:

**hidrochlorinė rūgštis: ClH**

3. Jeigu elemento atomų skaičius > 1, kiekvieno tokio elemento atomų skaičius nurodomas šalia cheminio simbolio kaip apatinis indeksas.

4. Papildoma informacija, nesusijusi su pagrindine struktūra, pateikiama molekulinės formulės pabaigoje ir atskiriama tašku arba kableliu:

**natrio benzoatas – C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>, natrio druska**

**vario sulfato dihidratas – CuO<sub>4</sub>S.2H<sub>2</sub>O**

Tais atvejais, kai specifinei cheminei medžiagai negalima pritaikyti Hill metodo, molekulinė formulė turi būti užrašoma kitu būdu, pavyzdžiui, kaip empirinė formulė, atomų ir galimo atomų santykio paprastasis apibūdinimas arba Cheminių medžiagų santrumpų tarnybos nurodyta formulė (žr. šio rekomendacinio dokumento 4 skyrių).

### **6.2 Struktūrinė formulė ir kristalinės struktūros aprašymas**

Struktūrinė formulė reikalinga, kad galima būtų pavaizduoti, kaip molekulės išsidėsčiusios cheminėje medžiagoje ir koks jų tarpusavio ryšys. Struktūrinėje formulėje turi būti matoma atomų, jonų arba grupių padėtis ir juos jungiančių jungčių pobūdis. Tai apima ir izomeriją, t. y. cis- / trans- junginius, chiralumą, enantiomerus ir kt.

Struktūrinė formulė gali būti pateikiama skirtingomis formomis: kaip molekulinė formulė ir (arba) kaip struktūrinė diagrama.

- Struktūrinė formulė pateikiama kaip molekulinė formulė

1. Visus elementus rašyti pagal grupes ir pagal jų išsiskyrimo eiliškumą:

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

2. Kiekvienas pakaitalas rašomas skliausteliuose, po atomo, su kuriuo yra susijęs:

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

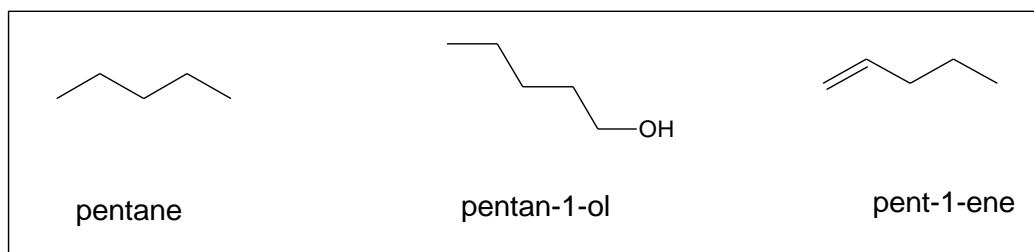
3. Jei yra dvigubos arba trigubos jungtys, jos nurodomos tarp elementų grupių, kurias veikia:

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

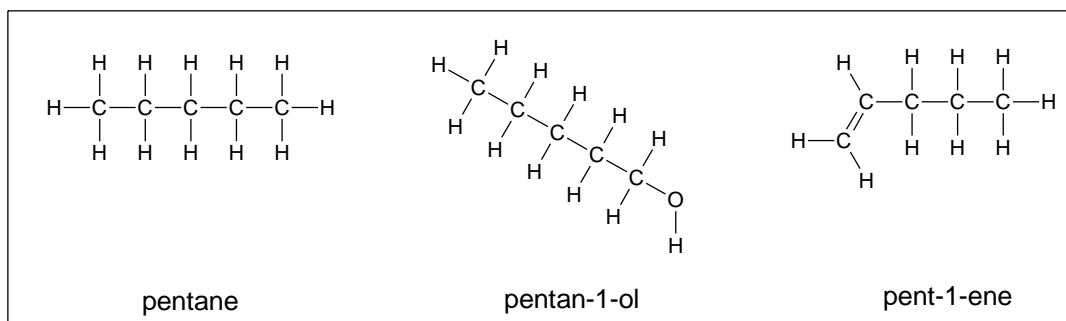
Struktūrinė formulė pateikiama kaip struktūrinė diagrama

Struktūrinėje diagramoje elementai ir ryšiai tarp elementų parodomi kaip dvimatis arba trimatis vaizdas. Galimi keli metodai:

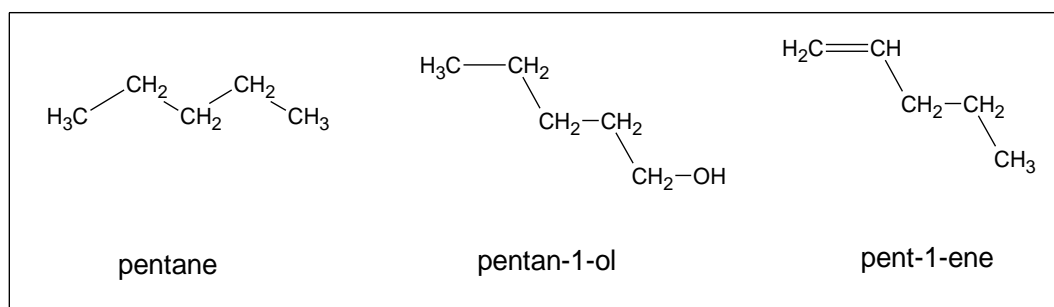
1. Parodomi visi elementai, neturintys anglies, ir vandeniliai, prijungti prie elementų, neturinčių anglies. pentanas



2. pentan-1-olis pent-1-enas



3. Parodomi visi elementai pagal pavadinimus Parodomi kaip grupės anglis ir vandenilis (pvz., CH<sub>3</sub>), visi elementai, neturintys anglies, ir visi vandeniliai, neprijungti prie anglies.

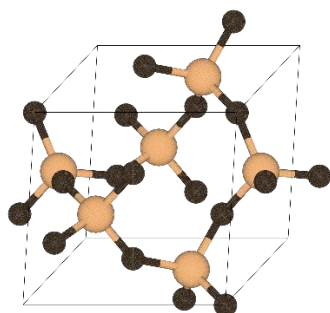


- - Struktūrinė formulė pateikiama kaip molekulinė formulė

1. Pateikite molekulinę formulę:

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

2. Nurodykite cheminės medžiagos kristalinę struktūrą



3. Pateikite mineraloginį ir (arba) kristalografinį pavadinimą pagal kristalinę sistemą<sup>32</sup> ir kristalų klasę:

a kvarcas [ $\beta$  kvarcas] / **kristalų sistema**: trikampė - šešiakampė, **kristalų klasė**: trigoninė-trapecohedrinė 3 2

### 6.3 SMILES žymėjimas

SMILES – Supaprastinto molekulių pateikimo linijine forma įvedimo sistemos trumpinys<sup>33</sup>. Tai cheminių medžiagų žymėjimo sistema, naudojama molekulinei struktūrai išreikšti simbolių linijine grandine. Pagal SMILES standartą molekulės pavadinimas sinonimiškas jos struktūrai: ji netiesiogiai parodo molekulinės struktūros dvimatį vaizdą. Kadangi dvimatę cheminės medžiagos struktūrą galima nupiešti įvairiais būdais, yra keletas teisingų molekulės SMILES žymėjimo būdų. SMILES pagrindas – molekulės pateikimas pagal valentiškumo modelį. Todėl SMILES netinka apibūdinti molekulėms, kurių negalima pateikti pagal valentiškumo modelį.

<sup>32</sup> kubinis/tetragoninis/orthorhombinis/romboedrinis (arba trigoninis)/heksagoninis/monoklininis/triklininis

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.

SMILES žymėjimai apima atomus, kurie žymimi atominiais simboliais, jungtis, laužtinius skliaustus, kuriais parodomi išsišakojimai, ir skaičius, kurie naudojami ciklinėse struktūrose. SMILES žymėjime molekulinė struktūra parodoma kaip grafikas, kuriame nebūtina nurodyti chiralizmo. SMILES žymėjimas, pagal kurį struktūra apibūdinama tik pagal jungtis ir atomus, vadinamas bendruoju SMILES. SMILES žymėjimas, kuris rašomas su izotopine ir chiraline specifikacija, vadinamas izomeriniu SMILES.

Trumpai tariant, SMILES pagrįstas keliomis pagrindinėmis taisyklėmis:

1. Atomai parodomi pagal jų atomų simbolius.
2. Kiekvienas atomas, išskyrus vandenilį, nurodomas atskirai.
  - a. Organinio poaibio elementai B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br ir I rašomi be skliaustelių ir nenurodant H, bet tik jei H skaičius atitinka žemiausią (-ius) normalų (-ius) valentiškumą (-us), kuris (-ie) atitinka tikslus junginius:

Organinio poaibio elementas	Žemiausias normalus valentiškumas
B	3
C	4
N	3 ir 5
O	2
P	3 ir 5
S	2, 4 ir 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. Organinio poaibio elementai rašomi skliausteliuose, kai tik H skaičius nebeatitinka mažiausio normalaus valentiškumo:

**amonio katijonas – NH<sub>4</sub><sup>+</sup>**

- c. Kiti, organiniame poaibyje nesantys elementai rašomi skliausteliuose. Šalia jų nurodomas vandenilis.

3. Alifatiniai atomai rašomi didžiosiomis raidėmis, aromatiniai atomai – mažosiomis raidėmis:

**benzenas – c1ccccc1, o cikloheksanas – C1CCCCC1**

4. Vandenilis rašomas kartu tik tokiais atvejais:

- a. Vandenilis yra įkrautas, t. y. protonas, [H+].
- b. Vandeniliai sujungti su kitais vandeniliais, t. y. molekulinis vandenilis, [H][H].
- c. Vandeniliai sujungti su daugiau nei vienu kitu atomu, pvz., tilteliniai vandeniliai.
- d. Esant izotopinėms vandenilio atmainoms, pvz., deuteris ([2H]).
- e. Kai vandenilis sujungtas su chiraliniu atomu.

5. Keturios pagrindinės jungtys parodomos tokiu būdu:

Jungties tipas	SMILES žymėjimas
Vienguba	- (nebūtina parodyti)
Dviguba	=
Triguba	#
Aromatinė	Mažosiomis raidėmis

6. Pakaitalai nurodomi skliaustuose, iškart po atomų, su kuriais yra sujungti:

**2-metilbutanas – CC(C)CC**

- a. Pakaitalai visada nurodomi iškart po susijusių atomų. Jie negali būti rašomi po dvigubos arba trigubos jungties simbolio:

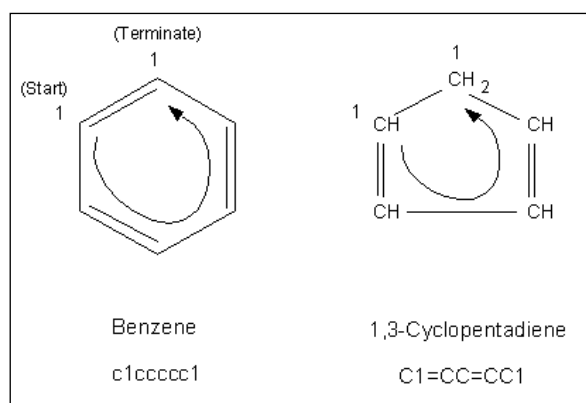
**pentano rūgštis – CCCCC(=O)O**

- b. Vieni pakaitalai gali būti įterpti tarp kitų pakaitalų:

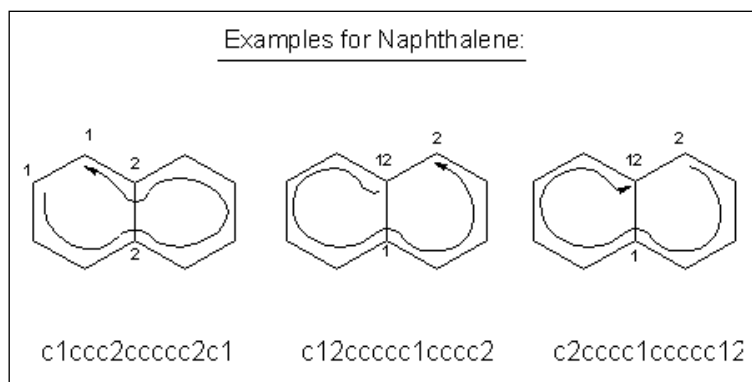
**2-(1-metileti)butanas – CC(C(C)C)CC**

7. Ciklinėse struktūrose ciklo pradžios ir pabaigos atomui pažymėti naudojami skaitmenys nuo 1 iki 9.

- a. Kiekvieno žiedo pradžios ir pabaigos atomas žymimas tuo pačiu numeriu. Pradžios ir pabaigos atomai turi būti sujungti.
- b. Skaičiai rašomi iš karto po atomų, kuriais parodoma pradžios ir pabaigos pozicija.
- c. Pradžios arba pabaigos atomas gali būti susijęs su dviem skaitmenimis, jie pateikiami eilės tvarka.







8. Atskirti junginiai nurodomi kaip atskiros struktūros arba tašku atskirti jonai (.). Šalia esantys atomai, kurie atskiriami tašku (.), nėra tiesiogiai sujungti, pvz., van der Waals junginys:

**aminopropeno hidrochloridas – C=CC(N).HCl**

9. Nurodant izomerinę konfigūraciją, naudojami pasivirojo brūkšnio simboliai: \ ir /. Šiais simboliais nurodomos tam tikros dviejų izomerinių junginių pusės. (cis =/ \, trans =/ /) SMILES naudojamas vietinis chiralizmas. Tai reiškia, kad chiralizmas turi būti išsamiai ir tiksliai apibrėžtas:

**cis-1,2-dibromoetas – Br/C=C\Br**

**trans-1,2-dibromoetas – Br/C=C/Br**

10. Nurodant enantiomerus arba chiralumą, naudojamas @ simbolis. @ simbolis parodo, kad šalia esantys chiraliniai atomai pateikiami prieš laikrodžio rodyklę. Jei naudojamas @@ simbolis, atomai pateikiami pagal laikrodžio rodyklę. Chiralinis atomas ir @ simbolis rašomi skliaustuose:

**2-chloro-2-hidroksipropano rūgštis, kai**

**nurodomas chiralizmas – C[C@](Cl)(O)C(=O)(O)**

11. Izotopines specifikacijas parodo prieš atomo simbolį rašomas skaičiai, lygus tam tikro elemento atominei masei. Atomų masė gali būti nurodoma tik skliaustuose:

**anglis-13 – [13C], o deguonis-18 – [18O]**

Kurį SMILES žymėjimą taikyti, galima nustatyti keletu priemonių (SMILES generatoriais) (žr. 1 priedėlį).

## 7 Informacija apie optinį aktyvumą

Optinis aktyvumas – nesimetriškų cheminių medžiagų gebėjimas pasukti poliarizuotos šviesos svyravimų plokštumą. Tokios cheminės medžiagos ir jų veidrodiniai atspindžiai vadinami enantiomerais. Jos turi vieną chiralinį centrą arba daugiau chiralinių centrų. Nors enantiomerų geometrinis išdėstymas yra skirtingas, jiems būdingos vienodos cheminės ir fizinės savybės. Kadangi skirtingo tipo enantiomerai poliarizuotą šviesą veikia skirtingai, optinis aktyvumas gali būti naudojamas siekiant nustatyti, kuris enantiomeras patenka į imtį, po to – ir cheminės medžiagos grynumą. Sukimo dydis priklauso nuo molekulės vidinės savybės.

Enantiomerai visada suka priešingomis kryptimis: jų poveikis poliarizuotai šviesai yra toks pat, skiriasi tik kryptys. Enantiomerų mišinio optinis aktyvumas parodo dviejų enantiomerų proporciją. 50–50 enantiomerų mišinio optinis aktyvumas lygus 0.

Pasukimas priklauso nuo koncentracijos, mėgintuvėlio ilgio, temperatūros ir šviesos šaltinio bangos ilgio.

Todėl optinis aktyvumas yra apibrėžiamasis parametras, kai norima identifikuoti asimetrinę cheminę medžiagą. Tai vienintelis parametras, pagal kurį cheminę medžiagą galima atskirti nuo jos veidrodinio atvaizdo. Todėl, jei taikytina, turi būti nurodomas cheminės medžiagos optinis aktyvumas.

Optinio aktyvumo standartas vadinamas specifiniu pasukimu. Specifinis pasukimas apibrėžiamas kaip stebimas šviesos pasukimas 5896 angstromais, kai šviesos kelio ilgis 1 dm ir mėginio koncentracija 1 g/ml. Specifinis pasukimas lygus stebimam pasukimui, padalytam iš šviesos kelio ilgio (dm) ir koncentracijos (g/ml) sandaugos.

Optinis aktyvumas gali būti matuojamas keliais skirtingais būdais. Dažniausiai naudojami:

- Optinė rotacija, per kurią matuojamas plokštumos pasisukimas, kai bandinį pereina poliarizuotos šviesos spindulys.
- Apskritasis dichrozmas, kai matuojama bandinio šviesos sugertis su kairine ir dešinine apskritąja poliarizacija.

Jei cheminė medžiaga suka šviesos poliarizacijos plokštumą į dešinę (pagal laikrodžio rodyklę), ji vadinama pasisukusia į dešinę ir žymima + ženklu. Jei ji suka šviesos poliarizacijos plokštumą į kairę (prieš laikrodžio rodyklę), vadinama pasisukusia į kairę ir žymima - ženklu.

## **8 Molekulinė masė arba molekulinės masės intervalas**

Molekulinė masė – tai cheminės medžiagos molekulių masė, išreiškiama atominės masės vienetais (amu) arba molio mase (g/mol). Molekulinė masė gali būti apskaičiuojama pagal cheminės medžiagos molekulinę formulę: tai atomų, sudarančių molekulę, atominių masių suma. Kai tam tikrų baltymų arba neapibrėžtų reakcijų mišinių molekulinės masės nustatyti neįmanoma, nurodomas molekulinės masės intervalas.

Gali būti taikomi keli metodai cheminės medžiagos molekulinei masei nustatyti:

- Kai nustatoma dujinių cheminių medžiagų molekulinė masė, gali būti taikomas Avogadro dėsnis. Remiantis šiuo dėsniu, esant tam tikrai temperatūrai ir slėgiui tam tikrame dujų kiekyje yra tam tikras dujų molekulių skaičius

$$PV = nRT = NkT$$

n – molių skaičius

R – universali dujų konstanta = 8,3145 J/mol K

N – molekulių skaičius

k – Boltzmann konstanta = 1,38066 x 10<sup>-23</sup> J/K = 8,617385 x 10<sup>-5</sup> eV/K

k – R/NA

NA – Avogadro skaičius = 6,0221 x 10<sup>23</sup> /mol

- Skysčių ir kietųjų medžiagų molekulinė masė gali būti nustatoma pagal rezultatus lydymosi, virimo temperatūroje, slėgiant garais, esant kai kurių tirpiklių osmosiniam slėgiui.
- Masės spektrometrija – labai tikslus matavimo metodas.

- Sudėtinių cheminių medžiagų, kurių molekulinė masė yra didelė, pavyzdžiui, baltymų arba virusų, molekulinė masė gali būti nustatoma matuojant, pavyzdžiui, nusėdimo normą ultracentrifugoje, arba šviesos sklaidos matavimo metodu.
- Molekulinę masę galima apskaičiuoti naudojant keletą priemonių, pagrįstų struktūrine diagrama arba cheminės medžiagos molekuline formule (žr. 1 priedėlį).

## **9 Cheminės medžiagos sudėtis**

Informacija apie kiekvienos cheminės medžiagos sudėtį – pagrindinių sudedamųjų dalių, priedų ir priemaišų derinį – turi būti pateikiama pagal šio rekomendacinio dokumento 4 skyriuje aprašytas taisykles ir kriterijus.

Kiekviena sudedamoji dalis, priedas arba priemaiša turi būti tinkamai identifikuota pagal:

- pavadinimą (IUPAC pavadinimą arba, jei nėra, kitą pasaulyje pripažintą pavadinimą);
- CAS numerį (jei toks yra);
- EB numerį (jei toks yra).
- Visi kiti prieinami identifikatoriai

Jei įmanoma, komercinėse partijose turi būti nurodoma kiekvienos sudedamosios dalies, sudedamųjų dalių grupės, priedo arba priemaišos būdingoji koncentracija procentais (pageidautina – pagal svorį arba kiekį). Paprastai pateikiamos vertės turi neviršyti 100 %. Visada turėtų būti nurodomos viršutinės ir apatinės koncentracijos ribos, pvz., intervalas komercinėje cheminėje medžiagoje.

## **10 Spektro duomenys**

Spektro duomenys reikalingi tam, kad būtų galima patvirtinti vieno komponento cheminės medžiagos struktūrą arba faktą, kad reakcijos mišinys nėra preparatas. Spektrui (ultravioletinių, infraraudonųjų spindulių, magnetinio branduolių rezonanso arba masių spektrui) gali būti taikomi keli metodai. Ne visų rūšių cheminėms medžiagoms tinka visi metodai. Tais atvejais, kai įmanoma, rekomendaciniame dokumente bus pateiktos rekomendacijos dėl tinkamo spektro, kuris turi būti priskirtas skirtingo tipo cheminėms medžiagoms (ECB, 2004; ECB, 2005).

Kai taikoma keletas gerai žinomų metodų, kartu su spektro duomenimis arba prieduose turi būti pateikiama tokia informacija:

*Ultravioletinis – matomas (UV-VIS) spektras*

- Cheminės medžiagos tapatybė
- Tirpiklis ir koncentracija
- Intervalas
- Pagrindinių smailių pozicija (ir epsilon vertės)
- Rūgšties įtaka
- Šarmų įtaka

*Infraraudonosios spektroskopijos (IR) spektras*

- Cheminės medžiagos tapatybė
- Aplinka
- Intervalas

- Rezultatai (identifikuojant svarbu nurodyti pagrindines smailes, pvz., aiškinant „pirštų atspaudų“ sritį)

#### *Branduolinio magnetinio rezonanso spektroskopijos (NMR) spektras*

- Cheminės medžiagos tapatybė
- Branduolys ir dažnis
- Tirpiklis
- Jeigu reikia, vidinės ir išorinės nuorodos
- Rezultatai (svarbu nustatyti impulsus, būtinus cheminei medžiagai identifikuoti, ir impulsus, atitinkančius tirpiklį ir priemaišas)
- Jei yra  $^1\text{H}$  NMR spektras, turi būti pateikiama integravimo kreivė
- Turi būti vertikaliai padidintas mažas NMR smailių intensyvumas, o sudėtinės struktūros – išskleistos.

#### *Masių spektroskopijos (MS) spektras*

- Cheminės medžiagos tapatybė
- Didėjanti įtampa
- Įkrovimo metodai (tiesioginis įterpimas, per GC ir kt.)
- Jonizavimas (elektronų įtaka, cheminė jonizacija, lauko desorbcija ir kt.)
- Molekulinis jonas (M)
- Reikšmingi fragmentai, svarbūs identifikuojant cheminę medžiagą
- M/z vertės arba priskirtos smailes, svarbios identifikuojant struktūrą
- Sudėtinės struktūros turi būti išskleistos

#### *Rentgeno spindulių difrakcijos masės spektroskopijos (XRD) spektras*

- Cheminės medžiagos tapatybė
- Įtampa
- Srovės stiprumas
- Rentgeno spinduliuotės šaltinis ir visos bibliografinės nuorodos, pagal kurias galima nustatyti cheminėje medžiagoje esančią (-ias) kristalinę (-es) fazę (-es);

Šiuos reikalavimus reikia įvykdyti bent jau tuo atveju, kai nustatant cheminės medžiagos kristalinę arba amorfinę fazę ir jos kiekį taikomas XRD metodas:

- Taikomų tikslinimo metodų ir vidaus standartų aprašymas,
- Prioritetinės vertės dydis, atspindintis atitikimą modeliui ar etaloniniam difrakcijos modeliui
- Išmatuotas modelis ir prioritetinės vertės dydžio skalė (pvz., 0–1 arba 0–100)

Taip pat gali būti taikomi kiti pasaulyje pripažinti metodai, jei spektro duomenys patvirtins cheminės medžiagos identifikavimą, pvz., vidinę struktūrą.

Norint aiškiai suprasti ir (arba) paaiškinti spektrą, būtina taikyti šiuos bendruosius reikalavimus:

- Aprašykite mėginio paruošimą
- Pažymėti reikšmingus bangos ilgius arba kitą atitinkamą informaciją
- Pateikti papildomą informaciją, pvz., pradinių cheminių medžiagų spektrą
- Nurodyti naudotus tirpiklius ir (arba) kitą svarbią informaciją, kaip nurodyta prieš tai kai kuriems metodams
- Pateikti aiškias kopijas (bet ne originalus), tinkamai pažymėjus skales
- Pateikti informaciją apie naudotą cheminės medžiagos koncentraciją

- Užtikrinti, kad intensyviausios su chemine medžiaga susijusios smailės kuo mažiau nukryptų nuo optimalaus dydžio

## **11 Didelio slėgio skysčių chromatografija, dujų chromatografija**

Siekiant patvirtinti cheminės medžiagos sudėtį, turi būti pateikiama tam tikrų tipų cheminės medžiagos chromatograma. Pavyzdžiui, tam tikra chromatograma patvirtins, kad yra priemaišų, priedų ir reakcijos masės sudedamųjų dalių. Du geriausiai žinomi mišinių atskyrimo ir identifikavimo metodai – dujų chromatografija (GC) ir didelio slėgio skysčių chromatografija (HPLC). Šie du metodai pagrįsti judriosios ir nejudriosios fazės sąveika, dėl kurios atskiriamos mišinio sudedamosios dalys.

GC / HPLC chromatogramose arba prieduose (ECB, 2004; ECB, 2005) turi būti pateikiama tokia informacija:

### HPLC

- Cheminės medžiagos tapatybė
- Kolonėlės savybės, pavyzdžiui, skersmuo, pripildymas, ilgis
- Temperatūra, taip pat temperatūros intervalas (jei naudojamas)
- Mobiliosios fazės sudėtis, taip pat intervalas (jei naudojamas)
- Cheminių medžiagų koncentracijos intervalas
- Vizualizacijos metodas, pvz., UV-VIS
- Rezultatai (nurodyti pagrindines smailes, būtinas identifikuojant cheminę medžiagą)

### GC

- Cheminės medžiagos tapatybė
- Kolonėlės savybės, pavyzdžiui, skersmuo, pripildymas, ilgis
- Temperatūra, taip pat temperatūros intervalas (jei naudojamas)
- Įpurškimo temperatūra
- Nešiklio dujos ir nešiklio dujų slėgis
- Cheminių medžiagų koncentracijos intervalas
- Vizualizacijos metodas, pvz., MS
- Smalių identifikacija
- Rezultatai (nurodyti pagrindines smailes, būtinas identifikuojant cheminę medžiagą)

## **12 Analizės metodų apibūdinimas**

Pagal REACH reglamento *VI priedo* reikalavimus registruotojas privalo apibūdinti analizės metodus ir (arba) pateikti cheminių medžiagų ir, kai reikia, priemaišų bei priedų identifikavimo metodų bibliografines nuorodas. Šios informacijos turi užtekti metodams naudoti.

### III priedėlis. Cheminių medžiagų identifikavimas ir bendras duomenų pateikimas

Pagrindinėje šių gairių dalyje išdėstyti bendrieji principai, kurių turi laikytis potencialūs registruotojai, identifikuodami jų juridiniam statusui aktualias konkrečias registruotinas chemines medžiagas. Šiame priedėlyje pateikiamos praktinės rekomendacijos potencialiems registruotojams, kaip taikyti cheminės medžiagos identifikavimo principus bendrai apibrėžiant cheminės medžiagos tapatybę ir cheminės medžiagos tapatybės taikymo sritį bendros registracijos tikslais, laikantis REACH reglamente įtvirtinto principo „Viena cheminė medžiaga – viena registracija“ (OSOR). Daugiau informacijos apie bendro teikimo prievoles ir apskritai dalijimosi duomenimis procesą pateikiama Dalijimosi duomenimis gairėse, kurias galima rasti adresu <http://echa.europa.eu/guidance-documents/guidance-on-reach>.

Savaime aišku, kad, atsižvelgiant į cheminės medžiagos rūšį, bendrai registruojamos cheminės medžiagos tapatybei taikomi tie patys cheminių medžiagų identifikavimo principai, kurie pateikti pagrindinėse rekomendacijose.

Iš tiesų, REACH reglamento 11 straipsnio 1 dalies ir 19 straipsnio 1 dalies pradžioje nustatytas reikalavimas „keliems registruotojams duomenis teikti bendrai“. Tiksliau, šiose nuostatose reikalaujama, kad „kai cheminę medžiagą Bendrijoje ketina gaminti ir (arba) importuoti vienas arba keli gamintojai“, informaciją, susijusią su cheminės medžiagos savybėmis ir jos klasifikavimu, „pirmiausia pateikia vienas registruotojas, veikdamas abipusišku sutarimu su kitu (-ais) registruotoju (-ais) (toliau – pagrindinis registruotojas)“.

Komisijos įgyvendinimo reglamentu (ES) 2016/9 dėl bendro duomenų teikimo ir dalijimosi duomenimis dar kartą patvirtinama ir įtvirtinama kelių tos pačios cheminės medžiagos tapatybės registruotojų pareiga bendrai teikti tam tikrą informaciją. Praktiniu požiūriu, bendrai teikiant informaciją, suinteresuotosios šalys turi susitarti dėl cheminės medžiagos tapatybės ribų ir apimties. Tai vadinama cheminės medžiagos tapatybės profiliu arba SIP. Tikimasi, kad SIP bus nurodytos konkrečios cheminės medžiagos, kurią registruotojai susitarė įtraukti į bendrai teikiamų duomenų rinkinį, ribinės sudėtys. Tai taip pat aktualu registruotojams, kurie galėjo nedalyvauti bendrai teikiant tam tikrą informaciją.

Taigi, susitarimas dėl registruojamos cheminės medžiagos tapatybės apimties yra būtina bendro pateikimo sąlyga. Vienos cheminės medžiagos tapatybės taikymo srities ir duomenų, su kuriais ji susijusi, skaidrumas yra labai svarbus įgyvendinimo aspektas. Todėl pagrindinio registruotojo dokumentų rinkinyje visų kitų užsiregistravusių subjektų vardu turi būti aiškiai nurodyta cheminės medžiagos arba SIP apimtis, o visi registruotojai savo informaciją apie sudėtį pateikia atskirai.

#### **Paprastas pavyzdys, kaip galima nustatyti cheminių medžiagų, kurias gamina ir (arba) į ES importuoja atskiri registruotojai, tapatybės profilį, schematiškai pateiktas**

2 lentelėje. Joje parodyta, kaip identifiкуoti registruotiną cheminę medžiagą, apibendrinti įvairias sudėtis, generuoti duomenis ir galiausiai pateikti juos IUCLID formatu registracijos dokumentacijoje. Pateiktas paprastos gerai apibrėžtos vienos sudedamosios dalies medžiagos pavyzdys. Nustatant sudėtingesnių cheminių medžiagų SIP, gali reikėti kartoti paveiksle pateiktus 3–5 žingsnius.

Vykstant diskusijoms tarp potencialių registruotojų, SIP dokumentacija gali būti pateikiama, pavyzdžiui, „Word“ dokumente arba „Excel“ lentelėje, kur įrašoma atitinkama suderinta informacija, pateikiama visiems esamiems ir potencialiems nariams. Kai kurios pramonės asociacijos yra parengusios SIP dokumentavimo šablonus, kuriais naudojasi

daugelis registruotojų (pvz., „Cefic“ šablonas<sup>34</sup>). Kitos valstybės narės atitinkamą informaciją tiesiog užfiksavo „Word“ dokumente arba konsorciumo, įsteigto visiems su atitinkamos medžiagos registracija susijusiems darbams atlikti, tinklalapyje.

## **2. Cheminės medžiagos tapatybės ir taikymo srities, atitinkančių registruojant pateiktus duomenis, apibrėžimas**

Veiksmai, kurių gali imtis keli potencialūs registruotojai, apibrėždami cheminės medžiagos tapatybę pagal duomenis, kuriuos jie teikia kartu, schematiškai pavaizduoti

2 (1–4 etapai) pateiktame pavyzdyje, skirtame paprastoms ir aiškiai apibrėžtoms cheminėms medžiagoms.

Kiekvienas potencialus registruotojas apibrėžia savo pareigas dėl gaminamų ir (arba) importuojamų medžiagų remdamasis 3 straipsnio 1 dalyje pateikta cheminės medžiagos apibrėžtimi ir taikydamas cheminės medžiagos identifikavimo principus, išdėstytus pagrindinėje šių gairių dalyje (žr. 1 ir 2 etapus

2).

Tada kiekvienas potencialus registruotojas gali patikrinti, ar kiti potencialūs registruotojai nurodė tą patį „pavadinimą ir kitus identifikatorius“ (3 etapas). Nuo šio atskaitos taško potencialūs registruotojai gali kolektyviai taikyti šių rekomendacijų pagrindinės dalies principus, kad nustatytų cheminės medžiagos tapatybės ribas pagal bendrai teikiamus duomenis, t. y. cheminės medžiagos tapatybės profilį (4 etapas).

Šiame SIP bendrai aprašoma cheminės medžiagos apimtis, atsižvelgiant į jos sudėties informaciją (įskaitant visus kitus svarbius parametrus, pavyzdžiui, morfologiją, pvz., fizinę formą, pavidalą), pavadinimą ir kitus identifikatorius, kuriems bus aktualūs bendrai pateikti klasifikavimo ir pavojingumo duomenys. Apibrėžiant SIP neturėtų būti laikomasi pernelyg konservatyvaus požiūrio, kad konkurentams nebūtų užkirstas kelias bendrai teikti informaciją.

Šiuo SIP nustatomas neatsiejamas ryšys tarp cheminės medžiagos tapatybės ir pavojingumo duomenų, kurie turi būti teikiami bendrai. Jei jis nustatomas pakankamai anksti, tai gali palengvinti informacijos generavimą ir (arba) rinkimą vykdant registracijos prievoles (apibrėžta Informacijos reikalavimų ir cheminių medžiagų saugos vertinimo gairėse;

2 nurodytas 5 etapas), siekiant užtikrinti, kad būtų sukaupti arba surinkti su visais cheminės medžiagos tapatybės aspektais susiję duomenys .

Kaip nurodyta pagrindinių rekomendacijų 4.2.3 ir 4.3 skirsniuose, sudėtingesnių cheminių medžiagų atveju potencialūs registruotojai 1–3 etapuose paprastai taiko papildomus parametrus ir (arba) sudėties informacijos deskriptorius (pvz., šaltinio ir (arba) proceso aprašymą), o tuos, dėl kurių susitariama, galima įtraukti į SIP (4 etapas). Tam tikrais atvejais cheminės medžiagos tapatybės ribos ir bendrai pateiktų pavojingumo duomenų sąsaja gali tapti visiškai aiški tik tada, kai surenkama dalis arba visi turimi pavojingumo duomenys. Atsižvelgiant į cheminės medžiagos tapatybės sudėtingumą ir 5 etape surinktus duomenis, prireikus 3–5 etapai gali būti kartojami, pvz., kai tam tikruose junginiuose yra sudedamųjų dalių, kurioms reikalingas klasifikavimas, ženklavimas ir

---

<sup>34</sup> Ši SIP buvo aprašyta „Cefic“ rekomendacijose pagrindiniams registruotojams, kurios skelbiamos adresu <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Guidances-and-Tools1/>. SIP, kuriuos registruotojai parengė naudodami šį šabloną, pavyzdžių galima rasti, pvz., REACH interneto svetainėje <http://www.reachcentrum.eu/consortium.html>.

(arba) PBT vertinimas. SIP gali apimti daugiau nei vieną sudėties profilį, kuriuo tinkamai apibūdinamos cheminės medžiagos tapatybės ribos.

SIP turi būti pateikta bendra informacija, leidžianti nustatyti cheminės medžiagos tapatybės ribas pagal bendrai pateiktus duomenis:

- cheminės medžiagos pavadinimas
- kiti identifikatoriai (pvz., CAS, EB, molekulinė ir struktūrinė informacija, aprašymas, jei reikia), kuriuos nurodo visi atitinkamos cheminės medžiagos tapatybės registruotojai
- informacija apie sudėtį:
  - su cheminės medžiagos identifikavimu susijusi sudedamųjų dalių tapatybė ir atitinkami koncentracijos intervalai;
  - bendras cheminės medžiagos identifikavimui svarbių stabilizavimo priemonių tapatybių sąrašas (ir, jei taikoma, atitinkami koncentracijos intervalai);
  - papildomų parametru, susijusių su cheminės medžiagos rūšimi, bendrasis sąrašas (pvz., kai kurių UVCB medžiagų šaltinio proceso deskriptoriai)

Svarbu, kad dėl parametru, apibrėžiančių cheminės medžiagos, apie kurią informacija teikiama bendrai, tapatybės ribas, susitartų visi bendrai informaciją teikiantys registruotojai ir šie parametrai būtų aiškiai patvirtinti SIP dokumentais. Atitinkamai, SIP gali tekti keisti arba išplėsti pagal bet kurio naujo potencialaus registruotojo prašymą, jei jis sutinka, kad dalis arba visi bendrai pateikti duomenys taip pat yra svarbūs šio registruotojo gaminamai arba importuojamai cheminei medžiagai.

Dėl SIP registruotojai neturi dalytis konfidencialia verslo informacija arba tokia informacija bendro teikimo metu negali būti atskleista trečiosioms šalims. Tais atvejais, kai bendri registruotojai, siekdami aiškiai apibrėžti SIP, turi dalytis potencialiai konfidencialia verslo informacija, jie gali pasitelkti patikėtinį, kaip nurodyta Dalijimosi duomenimis gairėse.

### **3. Cheminės medžiagos tapatybės profilio dokumentavimo praktinės rekomendacijos**

Bendrieji cheminių medžiagų identifikavimo principai, taikomi tiksliai apibrėžtoms ir UVCB medžiagoms, išdėstyti pagrindinėse gairėse. Toliau pateikiama keletas praktinių rekomendacijų, kaip šiuos principus taikyti kolektyviai. Pagrindinėse gairėse numatyta, kad nuo bendrųjų principų galima nukrypti. Taikant tokias nukrypti leidžiančias nuostatas reikalaujama, kad registruotojai galėtų įrodyti neatsiejamą ryšį tarp cheminės medžiagos tapatybės ir bendrai pateiktų pavojaus duomenų.

#### **3.1 Aiškiai apibrėžtos cheminės medžiagos**

Jei cheminė medžiaga yra gerai apibrėžta, apibrėžiant pagrindinę (-es) sudedamąją (-es) medžiagą (-as) ir jos (jų) koncentracijos intervalus bei priemaišas, identifikuojant vienos sudedamosios dalies cheminę medžiagą, reikia vadovautis  $\geq 80\%$  (m/m) principu, identifikuojant kelių sudedamųjų dalių cheminę medžiagą –  $< 80\%$ ,  $\geq 10\%$  principu. Ši nuostata taikoma kiekvienam atskiram registruotojui ir bendrai keliems kartu duomenis teikiantiems registruotojams, kai jie nustato SIP. Visų pirma reikėtų pranešti apie priemaišų profilius, dėl kurių susitarta SIP. Jeigu SIP nurodytos konkrečios priemaišos, galinčios turėti įtakos klasifikavimui, ženklavimui ir (arba) PBT vertinimui, registruotojams, kurių cheminėse medžiagose yra šių priemaišų, į jas reikėtų atsižvelgti duomenų rinkimo etape (5 etapas). Atitinkamą VII–XI priedų informaciją jie gali pateikti kartu arba atskirai pagal REACH reglamento 11 straipsnio 3 dalį (vadinamoji galimybė atsisakyti bendrai teikti informaciją). Nurodant koncentracijos vertes, reikėtų atsižvelgti į koncentracijos intervalą, kuris taikomas bendrai teikiant informaciją.



Dėl cheminių medžiagų, kurioms vienareikšmiškai identifikuoti reikia papildomų parametrų, kiekvienas registruotojas turėtų laikytis šių rekomendacijų pagrindinės dalies 4.2.3 skyriuje išdėstytų principų. Reikėtų apsvarstyti, ar dėl šių parametrų skirtumų prireikus reikėtų patikslinti klasifikaciją arba bendrai pateiktus duomenis apie pavojingumą. Apibrėžiant SIP, kai informacija teikiama bendrai, gali būti taikomos panašios nuostatos. Pavyzdžiui, į cheminės medžiagos tapatybės profilį gali reikėti įtraukti tuos parametrus (pvz., fizinės formos ir (arba) morfologinius parametrus, tokius kaip akytumas, dalelių dydis, dalelių forma), kurie gali turėti įtakos savybėms, svarbioms nustatant pavojingumo profilį (pvz., tirpumas, reaktyvumas, toksiškumas įkvėpus ir t. t.). Tokiu atveju reikėtų skaidriai pateikti bendruosius parametrų, įtrauktų į SIP, intervalus (pvz., visiems registruotojams taikomus dalelių dydžio intervalus, jų formos (-ų) sąrašą ir paviršiaus cheminių savybių sąrašą). Tokiu būdu užtikrinamas bendrai teikiamų SIP pavojingumo duomenų išsamumas.

Panašiai ir tuo atveju, kai dėl neorganinių cheminių medžiagų (pvz., kvarco, kristabolito, amorfinio silicio dioksido) kristalinės fazės skirtumų atsiranda skirtingų šioms fazėms būdingų pavojaus profilio aspektų. Atsižvelgiant į galimus skirtingų fazių savybių skirtumus, potencialūs šių cheminių medžiagų registruotojai turi apsvarstyti, ar pateikti vieną bendrą registraciją, apimančią visas fazes, įskaitant skirtingoms fazėms būdingus pavojingumo duomenis, ar pateikti skirtingas bendras registracijas, apimančias skirtingas fazes (t. y. skirtingas cheminių medžiagų tapatybes). Abiem atvejais nagrinėjami etapai turėtų būti išvardyti SIP, o atitinkami VII–XI priedo duomenys turėtų apimti visus su registracija susijusius etapus, taip užtikrinant, kad duomenys apimtų visus SIP aspektus.

Reikia pažymėti, kad junginiai gali turėti skirtingus priemaišų ir (arba) pavojingumo profilius ir šie skirtumai nebūtinai reiškia, kad šių junginių negalima registruoti toje pačioje registracijos dokumentacijoje.

### **3.2 UVCB medžiagos**

UVCB medžiagų identifikavimas gali būti sudėtingesnis, todėl, siekiant susitarti dėl cheminės medžiagos tapatybės bendros registracijos atveju, labai naudinga turėti aiškia dokumentaciją. Kiekvienas potencialus registruotojas turėtų individualiai susipažinti su šių rekomendacijų pagrindinėje dalyje pateiktais patarimais ir tada bendrai taikyti tuos pačius principus. Atkreipkite dėmesį, kad sujungus koncentracijos intervalus SIP, profilio koncentracijos intervalas gali tapti labai platus, galbūt net toks, kad jo nebebus galima laikyti viena chemine medžiaga.

Kaip nurodyta pagrindinėse rekomendacijose, kai kurių UVCB medžiagų identifikavimo pagrindas yra jų gamybos šaltinis ir procesas, o ne tiesiog jų sudedamųjų dalių tapatybė ir koncentracijos intervalai. Šiais atvejais kaip pakaitiniai sudedamųjų dalių tapatybių ir jų atitinkamų koncentracijos intervalų atitikmenys naudojami kiti deskriptoriai. Potencialūs registruotojai gali aprašyti gamybos procesą, nurodydami šaltinį ir procesą tiek, kiek tai būtina cheminei medžiagai identifikuoti. Aprašyme gali būti nurodyti bet kokie papildomi parametrai ir (arba) požymiai, kurie, registruotojų manymu, yra svarbūs jų cheminės medžiagos tapatybei (žr. pvz., pagrindinių gairių 5 lentelė). Bendros registracijos tikslais aprašymais dalijamasi tik tiek, kiek registruojant reikia susitarti dėl UVCB medžiagos tapatybės taikymo srities. Potencialūs registruotojai gali vadovautis pagrindinėse gairėse išdėstytais principais tiek individualiai, tiek kolektyviai. Taigi pagal SIP bendrai pranešama apie šaltinį ir proceso parametrus, kad jie apimtų visus atskirų registruotojų junginius. Tai schematiškai pavaizduota 3.

Kalbant apie chemines medžiagas, kurių tapatybė nustatoma pagal šaltinį ir procesą, kaip nurodyta pagrindinėse rekomendacijose, bet koks svarbus šaltinio ar proceso pakeitimas veikiausiai lemtų kitokią cheminės medžiagos tapatybę, kurią reikėtų registruoti atskirai.

Nuo šio principo nukrypti leidžiančios nuostatos reikštų, kad registruotojai gali įrodyti, jog kiekvienas proceso ir (arba) šaltinio darinys sukuria junginius, kuriuos galima įtraukti į tą pačią bendrą registraciją. Į nedidelius pradinių medžiagų ir proceso ir (arba) proceso sąlygų skirtumus galima atsižvelgti SIP. Registruotojai turėtų susitarti, kad kiekvienas proceso ir (arba) šaltinio darinys sukuria junginius, kurie yra tokie panašūs, kad būtų prasminga juos priskirti vienai cheminės medžiagos tapatybei, ir įsitikinti, kad pavojingumo duomenys apima visus SIP skirtumus. Konkrečiau, registruotojai turi sugebėti pagrįsti, kad bendrai pateiktas pavojingumo duomenų rinkinys aktualus visiems šiems junginiams arba, kai reikia, patikslinamas, apie konkrečius junginius pateikiant papildomą informaciją, kaip numatyta REACH reglamento 11 straipsnio 3 dalyje (atsisakymas bendrai teikti informaciją).

Siekiant įrodyti duomenų rinkinio tinkamumą kiekvienam proceso ir šaltinio deriniui, šie deriniai turi būti skaidriai dokumentuoti SIP, kad būtų galima dokumentuoti įtraukimo ir (arba) neįtraukimo kriterijus, taikomus esamiems ir būsimiems registruotojams, dokumentaciją teikiantiems bendrai.

Kalbant apie kitų rūšių UVCB (žr. pagrindinių rekomendacijų 4.3.2 skyrių), prireikus potencialūs registruotojai gali naudoti sudėties ir papildomų deskriptorių derinį. Pavyzdžiui, kai kurių oleocheminių medžiagų sudėtis yra kintama dėl sudedamųjų dalių alkilo atomų grandinės ilgio pasiskirstymo skirtumų, o alkilo atomų grandinės ilgio pasiskirstymas gali būti papildomas deskriptorius, naudojamas identifikavimui. SIEF taikomas metodas turėtų būti skaidriai dokumentuotas jų SIP.

### **3.3 Medžiagos tapatybės profilis**

Visi informaciją teikiantys registruotojai privalo bendrai susitarti dėl būtinų cheminės medžiagos identifikavimo parametrų ir skaidriai juos dokumentuoti atitinkamame SIP. Visi nukrypimai nuo įprastų cheminės medžiagos tapatybės principų ar nuo jų nukrypti leidžiančios nuostatos turėtų būti apibendrintai skaidriai dokumentuojami. Kadangi įtraukimo ir (arba) neįtraukimo kriterijai dokumentuojami SIP, SIEF turėtų užtikrinti, kad taikomi kriterijai būtų skaidrūs ir kad atitinkami surinkti ir (arba) parengti VII–XI priedų duomenys akivaizdžiai apimtų visus sutartus sudėties profilius.

Jeigu potencialūs registruotojai pagal 3 straipsnio 1 dalį į savo tapatybės profilį atskirai įtraukia stabilizuojančius priedus, dėl jų tapatybių ir koncentracijos intervalų turi būti susitarta ir skaidriai pranešta SIP.

Duomenų rinkimo etape reikėtų įvertinti bandymų medžiagos (-ų), naudojamos (-ų) duomenims gauti ir (arba) rinkti, tinkamumą vykdant VII–XI priedų informacijos reikalavimus. Išvadų dėl sudėčių, kurioms taikomas SIP, reprezentatyvumo pagrindimą reikėtų dokumentuoti ir įtraukti į techninę dokumentaciją. Tai visų pirma būtų aktualu kompleksinių cheminių medžiagų tapatybių, apimančių plačius sudėties profilius, atveju.

Rinkdami duomenis potencialūs registruotojai gali nuspręsti, kad jų SIP yra pernelyg platus ir netinka bendrai teikiant informaciją apie pavojingumą, atspindinčią atitinkamą cheminės medžiagos tapatybę. Tokiu atveju potencialūs registruotojai gali nuspręsti suskaidyti SIEF ir dvi chemines medžiagas ar daugiau apibrėžti atskirai<sup>35</sup>. Tada kiekviena cheminė medžiaga turėtų savo SIP ir bendrą informaciją apie pavojingumą, kuri turi tiksliai

---

<sup>35</sup> Svarstymus dėl EINECS vaidmens nustatant cheminės medžiagos tapatybę pagal REACH galima rasti CARACAL dokumente, dėl kurio susitarta 4-ajame REACH ir CLP kompetentingų institucijų susitikime (CARACAL): CA/74/2009 rev.2 „Medžiagos tapatybė ir SIEF formavimas (EINECS vaidmuo)“.

atspindėti tos cheminės medžiagos tapatybę. Priežastys, dėl kurių tam tikra informacija apie pavojingumą netiksliai atspindi tam tikrus cheminės medžiagos tapatybės parametrus, turėtų būti skaidriai dokumentuotos kiekvienos atskiros registracijos SIP. Atitinkami potencialūs registruotojai šiame etape taip pat gali nustatyti, kad sudėties profilius reikia toliau tikslinti atsižvelgiant į sudedamąsias dalis ir (arba) priemaišas, kurias reikia klasifikuoti, ženklinti, atlikti PBT vertinimą ir pan.

Potencialūs registruotojai, ketinantys prisijungti prie kitų potencialių registruotojų, kai dėl SIP jau sutarta, o registracija dar nepateikta, turėtų apsvarstyti, ar SIP aprėpia jų informaciją apie cheminės medžiagos tapatybę. Jei ne, su potencialiais registruotojais jie turėtų aptarti ir susitarti, ar būtina išplėsti profilio taikymo sritį įtraukiant naują narį arba susitarti, kad duomenys į taikymo sritį nepatenka.

SIP reikėtų pritaikyti, jeigu potencialaus registruotojo registruojama cheminė medžiaga pasižymi konkrečiais cheminės medžiagos tapatybės parametrais, dėl kurių gali pasikeisti bendrai pateiktos informacijos apie pavojingumą reprezentatyvumas ir todėl reikalingas konkretus pagrindimas (pvz., konkreti priemaiša, skirtingas sudėties santykis, skirtingas etapas, skirtingas dalelės dydis ir pan.). Siekiant skaidrumo, šis parametras turės būti nurodytas SIP.

Atskirais atvejais potencialūs ir esami registruotojai gali sutarti, kad bendrai pateikti pavojingumo duomenys iš esmės nėra reprezentatyvūs potencialaus registruotojo cheminei medžiagai dėl nukrypstančių cheminės medžiagos tapatybės parametrų, kurie neatitinka sutartų SIP ribų. Tokiu atveju potencialus registruotojas pateikia atskirą registracijos dokumentaciją kartu su kitais registruotojais, kurių cheminės medžiagos tapatybė apima šį parametą, arba atskirai, jeigu kitų tos pačios cheminės medžiagos tapatybės registruotojų nėra.

#### **4. Cheminės medžiagos tapatybės profilio pateikimas registracijos dokumentacijoje**

**Kai potencialūs registruotojai surenka (parengia) visus reikiamus VII–XI priedo duomenis apie savo cheminę medžiagą (t. y.**

**2 pavaizduotas 5 etapas), duomenų paketą galima pateikti IUCLID formatu Agentūrai pateiktinose dokumentacijose (t. y.**

2 pavaizduotas 6 etapas). Norint informaciją apie SIP perduoti IUCLID formatu, pavadinimas ir kiti identifikatoriai, informacija apie sudėtį ir kiti atitinkami parametrai pateikiami IUCLID 1.1 ir 1.2 skirsniuose.

<b>Medžiagos tapatybės profilis</b>	<b>Pateikta IUCLID</b>
pavadinimas ir kiti identifikatoriai	Visų dokumentacijų 1.1 skirsnis
informacija apie sudėtį ir kiti atitinkami parametrai	Pagrindinio registruotojo dokumentacijos 1.2 skirsnis

SIP pavadinimas ir kiti identifikatoriai nurodomi visų dokumentacijų 1.1 skirsnyje. Pagrindinis registruotojas savo dokumentacijos 1.2 skirsnyje pateikia informaciją apie SIP sudėtį ir kitus atitinkamus parametrus, nuroydamas „ribinę cheminės medžiagos

sudėtį<sup>36</sup>. Pagrindinis registruotojas visų registruotojų vardu taip pat turi pateikti visus atitinkamus VII–XI priedų duomenis 4–14 skirsniuose (jeigu nėra pagrįstų išimčių taikyti vieną ar daugiau informacijos reikalavimų).

Kiekvienas registruotojas (įskaitant pagrindinį registruotoją) dokumentacijos 1.2 skirsnyje pateikia savo juridiniam statusui aktualią informaciją apie cheminės medžiagos, kurią jis konkrečiai gamina ar importuoja, sudėtį. Tai reiškia, kad pagrindinis registruotojas savo dokumentų rinkinio 1.2 skirsnyje pateikia ir SIP sudėties informaciją, ir savo juridiniam statusui aktualią sudėties informaciją, o visi kiti registruotojai pateikia savo konkrečią sudėties informaciją. Kiekvienoje standartinėje registracijoje taip pat turi būti pateikta atitinkama IUCLID 1.4 skirsnyje nurodyta analitinė informacija.

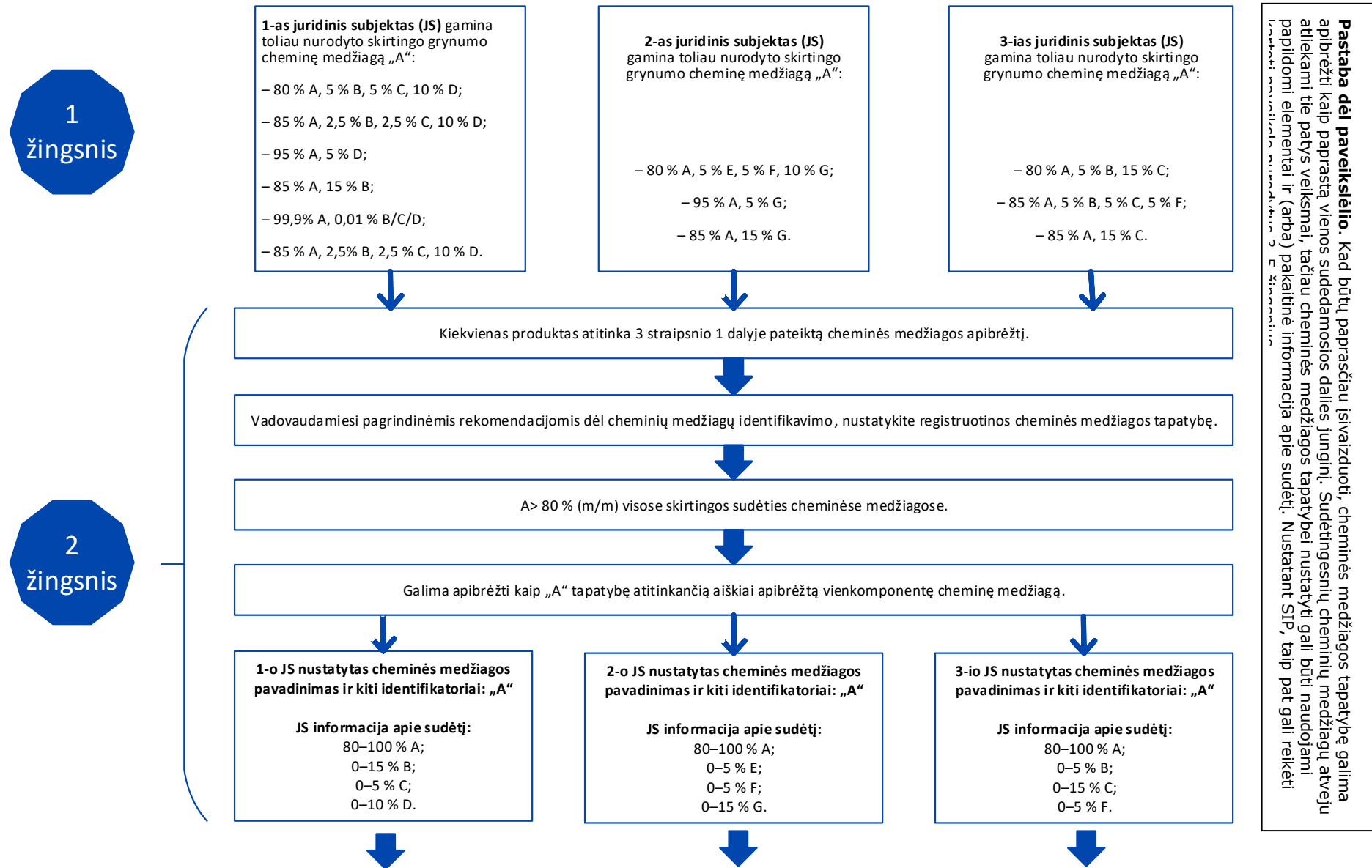
Kiekvienas registruotojas turėtų įrodyti, kad informacija apie konkrečiai jo gaminamų ar importuojamų cheminių medžiagų sudėtį yra įtraukta į SIP, kaip nurodyta „ribinėje sudėtyje“, ir savo ruožtu yra įtraukta į VII–XI priedo duomenis, pateiktus pagrindinio registruotojo dokumentacijoje (jei nėra pagrįstų atsisakymų).

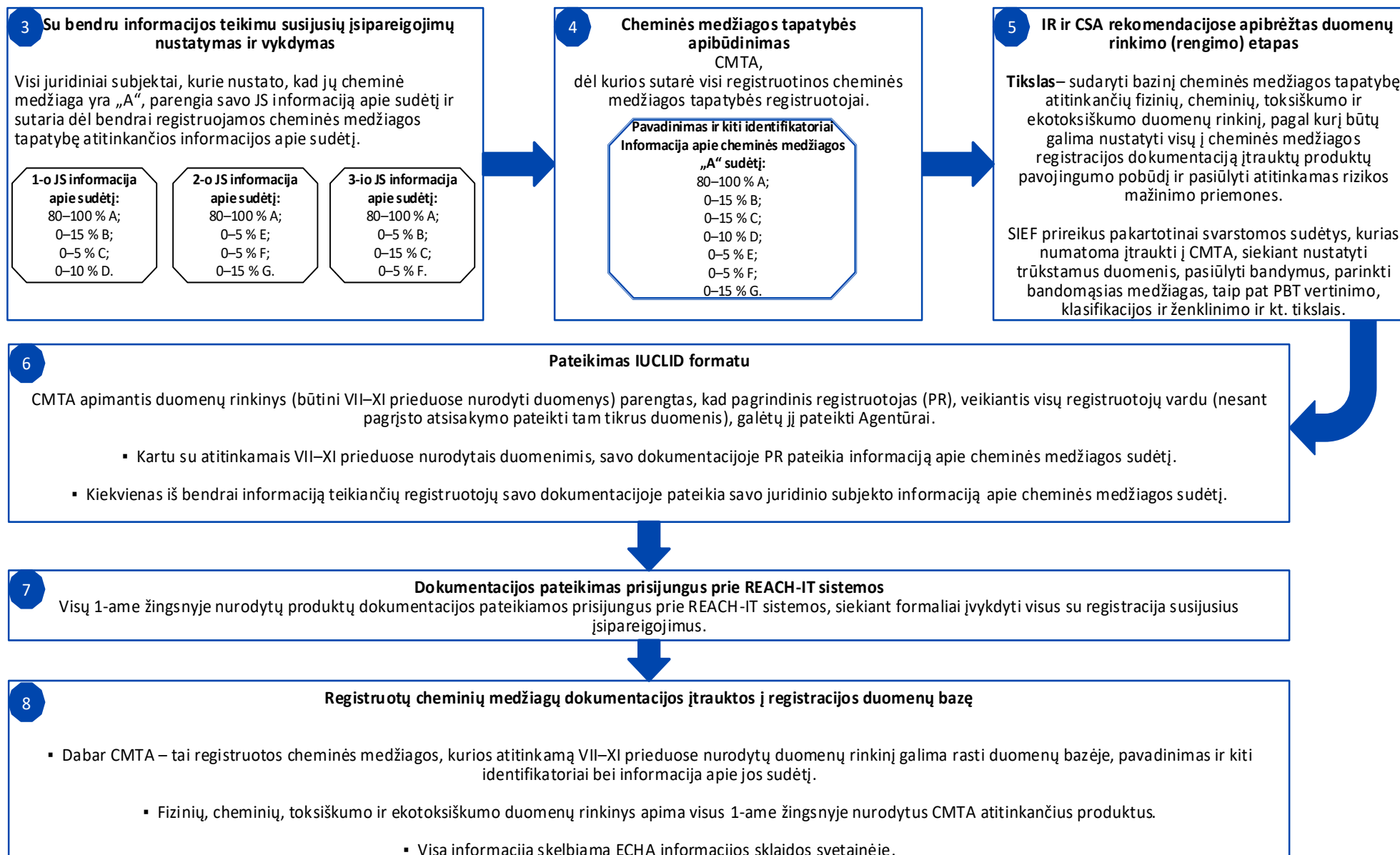
Techninių nurodymų, kaip pateikti informaciją apie sudėtį IUCLID formatu, galima rasti IUCLID vadovuose (<http://echa.europa.eu/manuals>).

**2 pav. (kitas puslapis): Schematinė žingsnių, kuriuos potencialūs registruotojai atlieka nuo savo registracijos prievolių nustatymo (1) iki savo vienos cheminės medžiagos tapatybės SIP apibrėžimo (4) ir galiausiai registracijos dokumentacijos pateikimo, kad būtų įvykdytos jų cheminių medžiagų registracijos prievolės (8), apžvalga.**

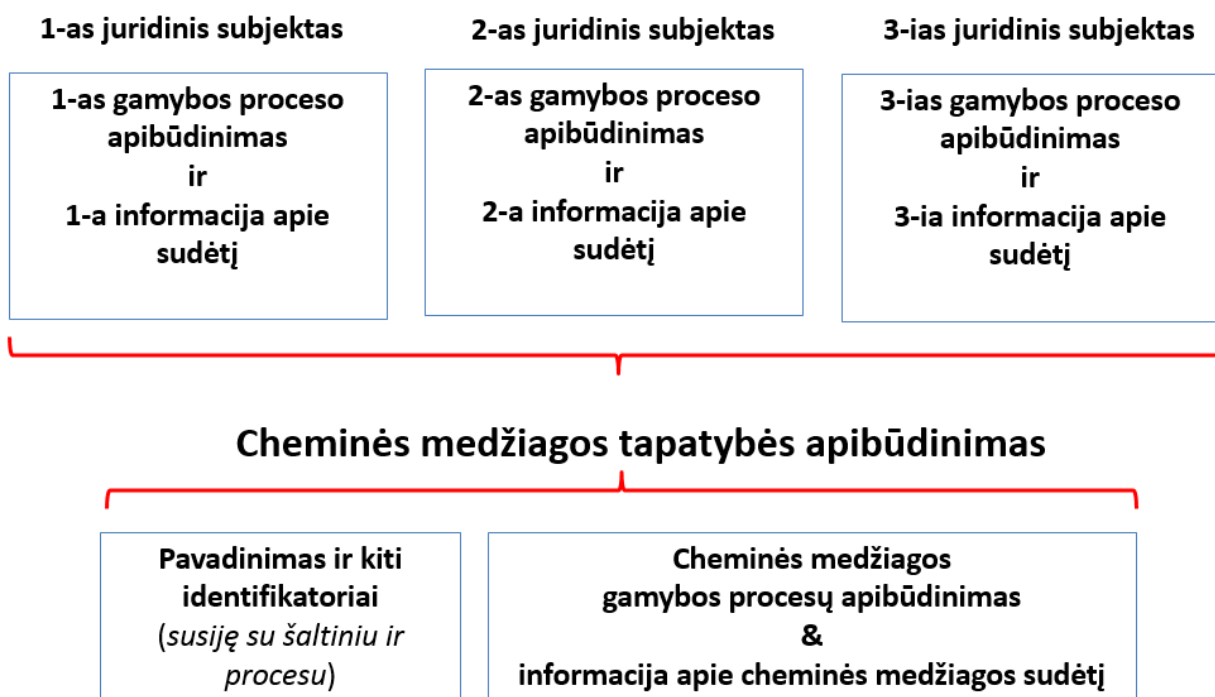
---

<sup>36</sup> Instrukcijas, kaip įvesti „ribinę cheminės medžiagos sudėtį“, galima rasti vadove „Kaip parengti registracijos ir PPORD dokumentacijas“ adresu <http://echa.europa.eu/manuals>.





3 paveikslas. Iliustracinė SIP apibrėžimo schema (2 paveikslo 4 veiksmas) UVCB tipo cheminei medžiagai, identifikuotai pagal šaltinio ir proceso deskriptorius iš atskiro juridinio subjekto šaltinio ir proceso aprašymų.



**EUROPEAN CHEMICALS AGENCY  
P.O. BOX 400, FI-00121 HELSINKI  
[HTTP://ECHA.EUROPA.EU.](http://echa.europa.eu)**