

Európai Bizottság

**Műszaki Útmutató Dokumentum  
az anyagok azonosításához és  
elnevezéséhez a REACH-ben**

**TERVEZET A 2006.NOVEMBER 22-24-I CWG  
KONZULTÁCIÓRA**

REACH megvalósítási projekt, 3.10



## **JOGI NYILATKOZAT**

Az Európai Bizottság vagy a Bizottság nevében tevékenykedő személyek nem viselnek felelősséget az ebben a dokumentumban található információk felhasználásával kapcsolatban.

Az Európai Unióra vonatkozóan nagyszámú további adat található az Interneten. Ezek az Európa Szerveren keresztül érhetők el.  
(<http://europa.eu.int>).

A katalógusadatokat a kiadvány végén találhatók  
Luxemburg: Az Európai Közösség Hivatalos Kiadványainak Kiadó Hivatala, 2006

© Európai Közösség, 2006  
Másolat a forrás megnevezésével készíthető  
*Nyomtatás: Olaszország*



# ELŐSZÓ



# TARTALOM

Európai Bizottság	1
Tartalom	7
Táblázatok	9
<b>1 ÁLTALÁNOS TUDNIVALÓK</b>	<b>4</b>
1.1 Célok	5
1.2 Alkalmazási terület	5
1.3 A műszaki útmutató dokumentum felépítése	6
<b>2 MEGHATÁROZÁSOK ÉS RÖVIDÍTÉSEK</b>	<b>9</b>
2.1 Rövidítések	9
2.2 Meghatározások	12
<b>3 AZ ANYAGOK AZONOSÍTÁSÁNAK ALAPJAI A REACH-BEN</b>	<b>16</b>
3.1 Az „anyag” fogalmának meghatározása	16
3.2 EK listák	16
3.2.1 Az EK listák szerepe a REACH hatályba léptetésében	17
3.2.2 A REACH listája REACH hatályba lépése után	17
3.3 Az anyagok azonosításának követelményei a REACH-ben	18
<b>4 ÚTMUTATÓ AZ ANYAGOK AZONOSÍTÁSÁHOZ ÉS ELNEVEZÉSÉHEZ A REACH-BEN</b>	<b>20</b>
4.1 Bevezetés	20
4.2 Jól azonosítható összetételű anyagok	25
4.2.1 Egy-összetevőjű anyagok	26
4.2.1.1 Megnevezés	26
4.2.1.2 Azonosítók	26
4.2.1.3 Analitikai adatok	27
4.2.2 Több-összetevőjű anyagok	28
4.2.2.1 Megnevezés	28
4.2.2.2 Azonosítók	28
4.2.2.3 Analitikai adatok	29
4.2.3 Ismert kémiai összetételű és más fő azonosítójú anyagok	30
4.2.3.1 Megnevezés	30
4.2.3.2 Azonosítók	30
4.2.3.3 Analitikai adatok	31
4.3 UVCB anyagok	31
4.3.1 Általános útmutató az UVCB anyagokról	31
4.3.1.1 A kémiai összetételre vonatkozó adatok	31
4.3.1.2 A fő azonosító paraméterek – név, eredet és eljárás	31

4.3.1.3	Analitikai adatok	39
4.3.2	Az UVCB anyagok specifikus típusai	39
4.3.2.1	Különböző hosszúságú szénláncokat tartalmazó anyagok	40
4.3.2.2	Olajból vagy ahhoz hasonló kiindulási anyagokból nyert termékek	41
4.3.2.3	Enzimek	42
<b>5</b>	<b>KRITÉRIUMOK AZ ANYAGOK AZONOSSÁGÁNAK ELLENŐRZÉSÉRE</b>	<b>44</b>
<b>6</b>	<b>AZ ANYAGOK AZONOSÍTÁSA AZ ELŐZETES BEJELENTÉSKOR ÉS A TÁJÉKOZÓDÁS</b>	<b>50</b>
6.1	Előzetes bejelentés	50
6.2	Tájékoztatás	Hiba! A könyvjelző nem létezik.
<b>7</b>	<b>PÉLDÁK</b>	<b>52</b>
7.1	Dietil peroxi-dikarbonát	52
7.2	ZOLIMIDIN	53
7.3	Izomerek keveréke	53
7.4	AH illatanyag	56
7.5	Ásványok	61
7.5.1	Bevezetés	61
7.5.2	Montomorillonit	63
7.6	Lavandin grosso illóolaja	65
7.7	Krizantém olaj és izolált izomerjei	69
7.8	Fenol, izopropilénezett, foszfát	73
7.9	Kvaterner ammónium vegyületek	74
7.10	Olajtermékek	78
7.10.1	Benzin keverő komponens (C <sub>4</sub> -C <sub>12</sub> )	78
7.10.2	Gázolaj (olajtermék)	79
7.11	Enzimek	79
<b>8</b>	<b>AZ ANYAGOK LEÍRÁSA A IUCLID 5 RENDSZERBEN</b>	<b>78</b>
8.1	Általános alapelvek	75
8.1.1	Listák	80
8.1.2	Anyag adatkészlet (IUCLID 1.1, 1.2, 1.3 és 1.4 részek)	83
8.2	Példák a IUCLID 5 kitöltésére	85
8.2.1	Egy-összetevőjű anyagok	86
8.2.2	Több-összetevőjű anyagok	87
8.2.3	Kémiai összetételével és más azonosítókkal meghatározott anyag	89
8.2.4	UVCB anyag	88



## **9 HIVATKOZÁSOK**

### **TÁBLÁZATOK**

**1.1 táblázat RIP 3 Útmutató dokumentumok a REACH-hez**

**1.2 táblázat Rövidítések**

**1.3 táblázat Meghatározások**

**1.4 táblázat Anyagok azonosító paraméterei REACH IV. mellélet 2. pont szerint (Bizottsági Előterjesztés, 2006.június 12.)**

**1.5 táblázat A fő azonosítók csoportosítása jól meghatározható, hasonló anyagok típusainak példáin**

**1.2 táblázat A fő azonosítók csoportosítása UVCB anyagok különböző típusainak példáin**

**4.1. ábra Kulcs a TGD fejezetekhez és függelékekhez a különböző típusú anyagokról szóló, megfelelő szintű tájékoztató készítéséhez**

# 1 ÁLTALÁNOS TUDNIVALÓK

Az Európai Bizottság 2003. október 29-én hozta nyilvánosságra a REACH rendelet javaslatát [EC, 2003-A - EC, 2003-F dokumentumok], és ezután a Bizottság Szolgálata a tagállamokkal együtt egy „átmeneti stratégiát” kezdeményezett, amelynek a célja az, hogy minden érintettet felkészítsen a REACH gyakorlati alkalmazására.

A REACH műszaki előkészítése során az Európai Bizottság koordinálja a módszerek és eszközök fejlesztését, valamint a REACH működtetéséhez szükséges műszaki irányítást, több REACH megvalósítási projekten (REACH Implementation Project, RIP) keresztül.

Ez a RIP 3.10 műszaki útmutató dokumentum nem kötelező érvényű, tárgya a vegyi anyagok azonosításának, megnevezésének és bejelentésének módszertana a REACH keretén belül.

A REACH rendelet kizárólag „anyagokkal” foglalkozik. A REACH rendelet megfelelő működtetéséhez elengedhetetlen az anyagok egyértelmű azonosítása. Ebben az anyagok azonosításáról szóló műszaki útmutató dokumentummal az ipart, a tagállamokat és az Európai Vegyianyag Ügynökséget kívánjuk segíteni.

Ez a műszaki útmutató dokumentum az anyagok azonosításában a vegyi anyagokra vonatkozó eddigi jogszabályok (elsősorban a 67/548/EGK számú veszélyes anyag irányelv) és más EU előírások alapján szerzett anyag-azonosítási tapasztalatokat használja fel. Tartalmazza a REACH rendelet szerint megfelelő mindennapi gyakorlatot. Ahol lehetett, figyelembe vettük az Európai Közösségen kívüli vegyi anyag szabályozásban szerzett tapasztalatokat is.

A dokumentum tartalmazza a különböző típusú anyagokra vonatkozó speciális útmutatókat.

Ez a műszaki útmutató dokumentum önállóan is használható, de egyben tagja is egy műszaki útmutató dokumentum-sorozatnak. Az útmutató dokumentumokat az **1.1 táblázatban** soroljuk fel.

**1.1 táblázat** RIP 3 Útmutató dokumentumok a REACH-hez

RIP	Tárgy
3.1.	Útmutató dokumentum a regisztrációhoz szükséges műszaki dossziék elkészítéséhez.
3.2.	Műszaki útmutató dokumentum a kémiai biztonsági jelentés (chemical safety report, CSR) elkészítéséhez
3.3.	Műszaki útmutató dokumentum az anyagok tulajdonságaira vonatkozó szükséges adatokról.
3.4.	Útmutató dokumentum az adatközlésről (előzetes bejelentés)
3.5.	Útmutató dokumentum a továbbfelhasználókkal szembeni követelményekről
3.6.	Útmutató a Globális Harmonizált Rendszer (Globally Harmonised System GHS) szerinti osztályozásról és címkézésről.
3.7.	Útmutató az engedélyezéshez szükséges dosszié elkészítéséhez és alkalmazásához.
3.8.	Útmutató az árucikkkel szembeni követelmények teljesítéséhez.
3.9.	Műszaki útmutató dokumentum szociális és gazdasági elemzés (socio-economic analysis, SEA) készítéséhez, vagy az ahhoz szükséges adatok megadásához.
3.10.	Műszaki útmutató dokumentum az anyagok azonosításához és elnevezéséhez a REACH-ben (előzetes munkacím: „Műszaki útmutató dokumentum az anyagok azonosságának jellemzéséhez és ellenőrzéséhez”).

## 1.1 CÉLOK

Ennek a műszaki útmutató dokumentumnak az a célja, hogy a gyártók és az importőrök számára egyértelmű tájékoztatást adjon az anyagok azonosításának rögzítéséről a REACH-ben. A műszaki útmutató dokumentum az anyagok azonosításának kiemelkedő fontosságú elemeként adja meg az anyagok megnevezésének módját. Arról is ad tájékoztatást, hogy mikor lehet az anyagokat a REACH szempontjából azonosnak tekinteni. Az azonos anyagok meghatározása fontos része a bevezetett anyagok előzetes bejelentésének, a nem bevezetett anyagokra vonatkozó ismeretszerzésnek, az adatok megosztásának és a konzorciumok létrehozásának.

Az anyagok azonosítását ipari szakembereknek kell elvégezni. A műszaki útmutató dokumentum függeléke további tájékoztatást ad az anyagok azonosításáról azoknak az ipari partnereknek a számára, ahol nincs jelentős szakértelem az anyagok azonosítása területén.

A műszaki útmutató dokumentum felsorol továbbá néhány linket, ahol megfelelő eszközök találhatóak az anyagok kémiai azonosításához és annak ellenőrzéséhez.

## 1.2 ALKALMAZÁSI TERÜLET

Az anyagok azonosításával és megnevezésével foglalkozó műszaki útmutató dokumentum ezen verziója a 2003. október 29-i REACH javaslat szövegén alapul. [EC, 2003-A - EC, 2003-F dokumentumok]. Figyelembe vettük az Európai Parlament által elfogadott módosításokat (2005. november 17.) valamint az Európai Unió Tanácsa által engedélyezett módosításokat (2005. december 13. és 2006. június 12.). A REACH rendelet végleges szövegének elfogadása után szükség lehet a műszaki útmutató dokumentum módosítására, a szükségessé vált változtatások bevezetésére.

A REACH 1. cikke értelmében a rendelet az önmagukban, készítményekben és árucikkekben előforduló anyagok gyártására, importálására, forgalmazására és felhasználására vonatkozik. Magukat a készítményeket és árucikkeket a REACH nem szabályozza.

A REACH 10. cikkének megfelelően a bejelentéshez az anyagot azonosítani kell, a REACH IV. mellékletének 2. pontjában megadott paraméterek használatával (lásd a **3.1. táblázatot**). Ebben a műszaki útmutató dokumentumban azoknak az anyagoknak a megfelelő azonosítására helyezzük a hangsúlyt, amelyek megfelelnek az anyagok REACH szerinti Hivatalos meghatározásának, és tájékoztatást adunk az anyagok azonosításához szükséges, IV. melléklet 2. pontja szerinti paraméterekről. A közölt adatoknak elegendőnek kell lenni minden anyag azonosításához. Az anyagok azonosító paraméterei közül egyet vagy többet el lehet hagyni, ha az műszakilag nem hozzáférhető, vagy tudományosan nem tűnik elengedhetetlennek a szükséges információk megadásához. A paraméterek elhagyását tudományosan meg kell indokolni.

Az anyag azonosításának módja az anyag típusától függ. A műszaki útmutató dokumentum felhasználójának az egyes anyagfajtákra vonatkozó speciális fejezeteket kell használniuk.

A 67/548/EGK irányelv szerinti EK listák (EINECS, ELINCS és az NLP lista) az anyagok azonosításának fontos eszközei. Ezeknek a listáknak a REACH-ben való használatát a 3.2. fejezetben ismertetjük.

A REACH (és ezen műszaki útmutató dokumentum) hatálya alá tartozó anyagok jellemzően kémiai reakciók vagy gyártás termékei, és több különböző összetevőt tartalmazhatnak. A REACH meghatározásai szerinti anyagok közé tartoznak a természetes anyagok származékai,

amelyek állhatnak egy elemből vagy molekulából (például tiszta fémek vagy egyes ásványok), vagy több komponensből (például illóolajok, fémkeverékek). A más közösségi jogszabályok hatálya alá eső anyagok sok esetben nem regisztráció-kötelesek a REACH szerint (lásd a REACH 2. cikkét). A REACH IV. mellékletében felsorolt anyagok, valamint a REACH V. mellékletében megadott kritériumoknak megfelelő anyagok szintén nem regisztráció-kötelesek.

A regisztrálók tehát ismerjék meg a REACH-ben megadott meghatározásokat és kivételi szabályokat, hogy el tudják dönteni, hogy kell-e az anyagukat regisztrálni. A REACH rendszerében csak anyagokat lehet regisztrálni. A Rendelet előírásai azonban vonatkoznak az önmagukban, készítményekben és árucikkekben előforduló anyagok gyártására, importálására, forgalmazására és használatára.

Továbbá, ez a műszaki útmutató dokumentum nem tartalmaz semmilyen tájékoztatást a szerkezetileg hasonló anyagok csoportosítására. A csoportosítással a „Útmutató dokumentum az adatközlésről (előzetes regisztráció)” című 3.4 REACH megvalósítási projekt (RIP) foglalkozik.

Az ebben a műszaki útmutató dokumentumban nem szereplő témákat az **1.1. táblázatban** felsorolt egyéb műszaki útmutató dokumentumokban lehet keresni, vagy az illetékes hatóságok tájékoztatási szolgálataihoz (Helpdesk) lehet fordulni.

### 1.3 MŰSZAKI ÚTMUTATÓ DOKUMENTUM FELÉPÍTÉSE

A háttérinformációk, például a célok és az érvényességi terület a 1. fejezetben található, a rövidítések és a meghatározások a 2. fejezetben, az anyagok REACH szerinti azonosításának alapjai a 3. fejezetben.

Az anyagok azonosítására és megnevezésére vonatkozó gyakorlati útmutató a 4. fejezetben található.

- A 4.1. fejezet írja le a „jól meghatározott” és a „rosszul meghatározott” anyagok közötti különbséget; ezen két fő anyagcsoporton belül típusokat lehet megkülönböztetni, mindegyikhez tartozik egy tájékoztató az anyagok azonosításáról. Itt található egy fontos diagram, amelynek alapján a felhasználó megtalálhatja, hogy egy adott anyagfajta azonosításával melyik fejezet foglalkozik.
- A következő fejezetek tájékoztatnak az egyes anyagfajtákkal kapcsolatban, megadják a szabályokat, és magyarázatokkal és példákkal támasztják alá.

Az 5. fejezet arról ad tájékoztatást, hogy hogyan ellenőrizhető az anyagok azonossága. A 6. fejezet tájékoztatást ad az anyagok azonosításáról az előzetes regisztráció és a vizsgálat során.

Ezenkívül, a 7. fejezetben, néhány gyakorlati példát ismertetünk részletesen a 4. fejezet gyakorlati útmutatását használva, és bemutatjuk, hogy az ipar hogyan tudja ezt a műszaki útmutató dokumentumot alkalmazni.

Végül a 8. fejezetben tájékoztatást adunk az anyagok IUCLID 5-ben szereplő leírásával kapcsolatban.

Az I. függelék felsorolja az anyagok jellemzésének és kémiai azonosságuk ellenőrzésének eszközeit.

A II. függelék további háttérinformációt nyújt az anyagoknak az azonosítási folyamatban használt egyedi azonosító paramétereiről, például a nevezéktani szabályokat, az EU számokat és

a CAS számokat, az összegképleteket, a szerkezeti képleteket és az analitikai módszereket.



## 2 MEGHATÁROZÁSOK ÉS RÖVIDÍTÉSEK

### 2.1 RÖVIDÍTÉSEK

A műszaki útmutató dokumentumban használt legfontosabb rövidítéseket a **2.1. táblázatban** soroljuk fel és magyarázzuk.

**2.1. táblázat** Rövidítések

Rövidítés	Jelentés
AISE	Szappanok, detergensok és karbantartási anyagok nemzetközi szövetsége (International Association for Soaps, Detergents and Maintenance Products)
CAS	Chemical Abstracts Service
EC	Európai Bizottság
EINECS	Létező Kereskedelmi Anyagok Európai Jegyzéke
ELINCS	Törzskönyvezett Vegyi Anyagok Európai Jegyzéke
ENCS	Forgalmazott és új vegyi anyagok (Existing and New Chemical Substances) (Japán)
ESIS	Anyagok Európai Információs Rendszere (European Substances Information System)
EU	Európai Unió (European Union)
GC	Gázkromatográfia
GHS	Globálisan Harmonizált Rendszer (Globally Harmonised System)
HPLC	Nagyteljesítményű folyadékkromatográfia
InChI	IUPAC nemzetközi kémiai azonosító (International Chemical Identifier)
INCI	Kozmetikai készítmények komponenseinek nemzetközi nevezéktana (International Nomenclature of Cosmetic Ingredients)
IR	infravörös
ISO	Nemzetközi Szabványügyi Szervezet (International Organization for Standardization)
IUCLID	Egységes Nemzetközi Vegyi Anyag Adatbázis (International Uniform Chemical Information Database)
IUBMB	Nemzetközi biokémiai és molekuláris biológiai szövetség (International Union of Biochemistry and Molecular Biology)
IUPAC	Nemzetközi tiszta és alkalmazott kémiai szövetség (International Union of Pure and Applied Chemistry)
MS	tömegspektroszkópia
NLP	Már-nem-polimer (No Longer Polymer)
NMR	Nukleáris mágneses rezonancia
ppm	Milliomodrész
REACH	Vegyianyagok regisztrációja, értékelése, engedélyezése és korlátozása (Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals)
RIP	REACH megvalósítási projekt (REACH Implementation Project)
SIEF	Anyaginformációs csereforum (Substance Information Exchange Forum)
SMILES	Egyszerűsített molekuláris beviteli címszavak specifikációja (Simplified Molecular Input Line Entry Specification)
TGD	Műszaki útmutató dokumentum (Technical Guidance Document)
TSCA	Mérgező anyagok kezelésére vonatkozó törvény (Toxic Substances Control Act) (USA)
UVCB	Ismeretlen vagy változó összetételű anyagok, összetett reakciótermékek vagy biológiai anyagok (Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials)



<b>Rövidítés</b>	<b>Jelentés</b>
UV/VIS	Ultraibolya/látható
w/w	Tömegarány
XRD	Röntgendiffrakció
XRF	Röntgen fluoreszcencia

## 2.2 MEGHATÁROZÁSOK

A műszaki útmutató dokumentumban használt legfontosabb meghatározásokat a **2.2. táblázatban** soroljuk fel és adjuk meg.

Ezek a meghatározások figyelembe veszik a REACH rendelet meghatározásait és a jövőben kialakítandó Globálisan Harmonizált Rendszer (Globally Harmonised System GHS) osztályozásra és címkézésre vonatkozó előírásait. Ezért néhány fogalmat eltérően határozzunk meg ahhoz képest, ahogyan a 67/548/EGK irányelv szerint használtuk.

**2.2. táblázat** Meghatározások

Meghatározás	Leírás
Adalék	Olyan anyag, amelyet szándékosan adtak az anyaghoz annak stabilizálására. <sup>1</sup>
Ötvözet*	Fémes anyag, makroszkopikus méretben homogén, két vagy elemből áll, amelyeket úgy elegyítettek, hogy mechanikus módszerekkel nem lehet könnyen elválasztani őket.
Árucikk*	Olyan tárgy, amely a gyártása során egyedi alakot, felületet vagy kialakítást kap, és ez nagyobb mértékben befolyásolja a használatát, mint a kémiai összetétele.
Kromatográfiás ujjlenyomat	Az anyag összetételének jellemzése összetevőinek jellegzetes eloszlása alapján, egy analitikai kromatogramban.
Komponens	Szándékosan az anyaghoz adott másik anyag, készítmény előállítása céljából.
Összetevő	Egy anyagban előforduló, kémiaiilag egyedileg azonosítható anyag, .
EK listák	A régi európai szabályozás szerinti három vegyi anyag lista, az EINECS, ELINCS és NLP lista, együttes megnevezésük EK listák. Az EK listák az anyagokat azonosító EK számok forrásai.
Szennyeződés	Az anyagban lévő, a gyártás közben nem szándékosan belekerült összetevő. Származhat a kiindulási anyagból, vagy lehetnek a gyártási eljárás melléktermékei vagy származhat a nem teljes átalakulásból. A végtermékben jelen van, de nem szándékosan került bele.

A 4.2. táblázat a következő oldalon folytatódik .

<sup>1</sup> Más területeken az adaléknak más funkciója lehet, például a pH vagy a szín beállítása. A REACH rendeletben és ebben a műszaki útmutató dokumentumban azonban az adalék stabilizáló anyagot jelent.

## 4.2. táblázat, folytatása Meghatározások

Meghatározás	Leírás
Intermediér*	<p>Olyan anyag, amelyet vegyipari felhasználásra vagy annak során gyártanak, felhasználnak vagy alkalmaznak, és ennek során másikká alakítják (a továbbiakban <i>szintézis</i>):</p> <p>(a) <i>nem izolált intermediér</i>: olyan anyag, amelyet a szintézis közben nem távolítanak el szándékosan (a mintavételezés kivételével) abból a berendezésből, amelyben a szintézist végzik. Ilyen berendezés lehet a reakcióedény, annak kiegészítő berendezési, és az a berendezés, amelyen az anyag(ok) áthalad(nak) a folyamatos vagy szakaszos gyártási eljárás során, valamint a következő reakcióedényhez vezető csővezeték, ahol a szintézis következő lépése zajlik; de nem tartoznak ide a tartályok vagy más edényzet, amelyben az anyagot a szintézis után tárolják.</p> <p>(b) <i>telephelyen elkülönített intermediér</i> olyan intermediert jelent, amely nem teljesíti a nem izolált intermediér kritériumait, és ahol az intermediér gyártása és (egy) más anyag(ok) előállítása ebből az intermediérből egyazon helyszínen történik, amelyet egy vagy több jogi személy üzemeltet;</p> <p>(c) <i>szállított elkülönített intermediér</i>, olyan intermediert jelent, amely nem teljesíti a nem izolált intermediér kritériumait, és más helyszínrre szállítják;</p>
IUCLID	IUCLID a vegyi anyagok adatainak kezelésére szolgáló adatbázis és adatkezelő rendszer.
Főbb összetevő	Egy anyagnak azon összetevője, amely nem adalék vagy szennyeződés, az anyag jelentős hányadát alkotja, és ezért szerepel az anyag nevében és az anyag részletes azonosításában.
Gyártás*	Anyagok előállítása és természetes állapotban való extrahálása
Monomer*	Olyan anyag, amely kovalens kötést tud létrehozni további hasonló vagy nem hasonló molekulákkal az adott eljárásban használt polimerképző reakciókörülmények között.
Egy-összetevőjű anyag	Általános szabályként olyan, az összetétele által meghatározott anyag, amelyben egy főbb összetevő legalább 80 tömeg %-ban van jelen.
Több-összetevőjű anyag	Általános szabályként olyan, az összetétele által meghatározott anyag, amelyben több főbb összetevője van, és ezek legalább 10, de 80 tömeg %-nál kisebb arányban vannak jelen.
Nem bevezetett anyag	Olyan regisztráció-köteles anyag, amelyre nem vonatkoznak a bevezetett anyagokra vonatkozó REACH szerinti átmeneti rendszer előnyei.
Kémiaiilag nem módosított anyag*	Olyan anyag, amelynek a kémiai szerkezete nem változott meg kémiai feldolgozás vagy kezelés vagy a kristályszerkezet fizikai átalakítása után sem, amelyek célja például a szennyeződések eltávolítása volt.

A 4.2. táblázat a következő oldalon folytatódik .

**4.2. táblázat, folytatás** Meghatározások

Meghatározás	Leírás
Bevezetett anyag*	<p>Olyan anyagok, amelyek a következő kritériumok közül legalább egyet teljesítenek:</p> <p>(a) Szerepel a Létező Kereskedelmi Anyagok Európai Jegyzékében (EINECS);</p> <p>(b) A Közösségben, vagy az Európai Unióhoz 2004 május 1-én csatlakozott országok egyikében gyártották, de a gyártó vagy az importőr nem forgalmazta legalább egyszer a REACH rendelet hatályba lépése előtt;</p> <p>(c) A Közösségben, vagy az Európai Unióhoz 2004. május 1-én csatlakozott országok egyikében forgalmazták, és 1981. szeptember 18. és 1993. október 31. között, a határnapokat beleértve is forgalmazta a gyártó vagy az importőr, és akkor bejegyzett anyagnak számított a 67/548/EGK irányelv 8 (1) cikke szerint, a 79/831/EGK irányelv szerinti módosítással, de ugyanakkor nem felelt meg a polimerek meghatározásának a 67/548/EGK szerint, a 92/32/EGK irányelv szerinti módosítással.</p> <p>Feltéve, ha ezt lehet bizonyítani</p>
Készítmény*	Két vagy több anyagból álló keverék vagy oldat. <sup>2</sup>
Polimer*	<p>Olyan anyag, amelynek molekuláit egy vagy több monomer egység sorrendje jellemzi. Ezeket a molekulákat molekulasúly-eloszlás jellemzi., amikor is a molekulasúlyok különbségei elsősorban a monomer egységek számában lévő különbségekhez rendelhetők. A polimerekre a következők jellemzők:</p> <p>(a) egyszerű súlytöbbségben vannak a legalább három monomer egységet tartalmazó molekulák, amelyek kovalens kötéssel kapcsolódnak legalább még egy monomer egységhez vagy más reagenshez;</p> <p>(b) a molekulák egyszerű súlytöbbségnél kisebb mennyiségének azonos a molekulasúlya.</p> <p>Ebben a meghatározásban „monomer egység” alatt a monomer anyag reagált formája értendő, ahogyan a polimerben előfordul. .</p>
Anyag*	Kémiai anyag vagy annak vegyületei természetes állapotban vagy egy gyártási folyamat eredményeként, tartalmazhat adalékot a stabilitásának biztosítására, valamint az alkalmazott gyártási folyamatból származó szennyeződést, de nem tartoznak ehhez az anyaghoz az oldószerek, amelyek a stabilitás vagy az összetétel megváltozása nélkül eltávolíthatók.
Természetben előforduló anyag*	A természetben található anyag önmagában, feldolgozás nélkül, vagy kézi, mechanikus vagy gravitációs módszerrel, vízben való oldással, flotációval, vízből való extrakcióval, vízgőz desztillációval feldolgozva, vagy kizárólag a víz eltávolítására eszközölt melegítéssel kinyerve vagy a levegőből bármilyen módszerrel kivonva.

\* A REACH rendelet 3. cikke szerinti meghatározások [A Tanács javaslata, 2006. június 12.]

<sup>2</sup> A GHS szerinti definíció: Keverék olyan két vagy több anyag keveréke vagy oldata, amelyek nem reagálnak egymással. A keverék és a készítmény szinonimái egymásnak.

Megjegyzés: A keverék/készítmény nem azonos a több komponensből álló anyagokkal, noha a többkomponensű anyagokat is lehet úgy nevezni, hogy „keveréke x ...anyagoknak”...A többkomponensű anyagok kémiai reakció eredményei, nem pedig egy akkor fellépő kémiai reakció amikor a készítmény készül.

### 3 AZ ANYAGOK AZONOSÍTÁSÁNAK ALAPJAI A REACH SZERINT

A REACH javaslat [2006. június 12.] tartalmazza annak meghatározását, hogy mit tekintünk anyagnak (3. cikk), és melyek az anyag azonosításának azon paraméterei (VI. melléklet 2. pont) amelyek az anyag regisztrációjakor azonosítóként meg kell adni.

Ebben a fejezetben leírjuk az anyag REACH szerinti meghatározását (3.1. fejezet), általános ismertetést adunk arról, hogy hogyan kell használni a vegyi anyagokra vonatkozó eddigi jogszabályi háttér EK listáit (3.2. fejezet), és további háttérinformációt adunk az anyagok azonosításának REACH-ből származó követelményeiről (3.3. fejezet).

#### 3.1 AZ „ANYAG” FOGALMÁNAK MEGHATÁROZÁSA

A REACH javaslat meghatározása szerint (3. cikk, 1. meghatározás) az „anyag” fogalma:

*Anyag* kémiai elemet vagy annak vegyületeit jelenti természetes állapotban vagy egy gyártási folyamat eredményeként, tartalmazhat adalékot a stabilitásának biztosítására, valamint az alkalmazott gyártási folyamatból származó szennyeződést, de nem tartoznak ehhez az anyaghoz az olyan oldószerek, amelyek a stabilitás vagy az összetétel megváltozása nélkül eltávolíthatók.

Az „anyag” fogalmának REACH-beli meghatározása azonos azzal, amelyet a veszélyes anyag irányelv 7. módosítása használ (92/32/EGK irányelv, a 67/548/EGK irányelv módosítása). A definíció mind a két esetben tágabb meghatározást ad az egyetlen molekulából álló tiszta vegyi anyagnál.

#### 3.2 EK LISTÁK

A vegyi anyagokra vonatkozó eddigi rendelet szerint három különböző listát használtak. Ezek : Létező Kereskedelmi Anyagok Európai Jegyzéke (EINECS); Törzskönyvezett Vegyi Anyagok Európai Jegyzéke (ELINCS); már-nem-polimerek listája (No-Longer Polymers, NLP).

Az Európában 1971. január 1. és 1981. szeptember 18. között forgalmazott anyagok a Létező Kereskedelmi Anyagok Európai Jegyzékében (EINECS) szerepelnek<sup>3</sup>; az 1981. szeptember 18-a után bejegyzett és forgalmazott anyagok az Új Törzskönyvezett Vegyi Anyagok Európai Jegyzékében (ELINCS) találhatóak.

A polimereket nem vették fel az EINECS-be, rájuk külön szabályok vonatkoztak a 67/548/EGK irányelvben. A 67/548/EGK 7. kiegészítés (a 92/32/EGK irányelv) a „polimer” fogalmának újabb meghatározását adta. Ennek a meghatározásnak az alkalmazásával egyes anyagok, amelyek az EINECS bejelentési szabályai szerint polimereknek minősültek, a 7. kiegészítés értelmében már nem minősülnek polimereknek. Miután minden, az EINECS-ben nem felsorolt

---

<sup>3</sup> Az EINECS az Európai Központi Listán (European COre Inventory, ECOIN) alapul, ehhez további anyagokat ipari vállalatok nyújthatnak be (azon kritériumok alapján, amelyek az EINECS-be való felvételhez is érvényesek). Az ECOIN különböző anyaglisták (például TSCA) összevonásával készült, és feltételezték, hogy ezek az anyagok Európában forgalomban vannak.

anyag bejelentés-köteles, elméletileg az összes „már nem polimer” (NLP) anyagot be kell jelenteni. A Miniszterek Tanácsa világos állásfoglalása szerint azonban ezeket a „már-nem-polimereket” nem kell utólag bejelenteni. A Bizottságot felkérték, hogy állítsa össze a „már nem polimerek” listáját (NLP-list). Erre a listára azok az anyagok kerültek fel, amelyeket 1981. szeptember 18. és 1993. október 31. között Európában forgalmaztak, az EINECS bejelentési szabályai értelmében polimereknek tekintették őket, de a 7. kiegészítés értelmében már nem minősülnek polimernek. Az NLP lista nem teljes lista.

Ezt a három anyaglistát, tehát az EINECS, ELINCS és az NLP-listákat nevezzük együttesen EK listáknak. A listákon szereplő minden anyagnak van az Európai Bizottság által adott EK száma. (az EK számokról részletes információ a II. függelékben található).

Ezekről az anyagokról az Európai Vegyianyag Hivatal weboldalán (<http://ecb.jrc.it>) található információ, az „ESIS” alfejezetben. A jövőben a bejegyzett anyagok listáit az Európai Vegyianyag Ügynökség gondozza és adja ki.

### **3.2.1 Az EK listák szerepe a REACH hatályba léptetésében**

Az EK listák használatával a gyártók és az importőrök eldönthetik, hogy egy adott anyag bevezetett vagy nem bevezetett anyagnak számít-e. Ezért az EK listák segítenek a gyártóknak és az importőröknek annak eldöntésében, hogy *mikor* kell egy anyagot regisztrálni, és szükség van-e előzetes regisztrációra vagy adatgyűjtésre.

Ha egy anyag szerepel az EINECS vagy az NLP listán, akkor ez az anyag ennek a gyártónak vagy importőrnek a számára bevezetett anyagnak számít. Bizonyos körülmények között az EINECS vagy az NLP listán nem szereplő anyagok is bevezetett anyagnak tekinthetők: (1) azok az anyagok, amelyek megfelelnek az NLP lista kritériumainak, de nem szerepelnek az NLP listán; (2) azok az anyagok, amelyeket a Közösségben vagy az Európai Unióhoz 2004 májusában csatlakozott országokban gyártottak, de a gyártó vagy az importőr nem forgalmazta legalább egyszer a REACH rendelet hatályba lépése előtt eltelt 15 évben.

Ha az anyagot a 67/548/EGK irányelv előírásainak megfelelően előzőleg már törzskönyvezték, ezt a REACH-ben való regisztrációnak kell tekinteni (24. cikk). Ezeket az anyagokat az adott gyártók vagy importőrök regisztrált anyagainak kell tekinteni, és ezeknek a gyártóknak vagy importőröknek nem kell regisztrációt kérelmezni. Ez a gyártó vagy importőr azonban köteles a regisztrációt frissíteni. Egy ELINCS listán szereplő anyag további gyártói és importőri, akik nem szerepelnek az eddigi törzskönyvezés(ek)ben, kötelesek a nem bevezetett anyagokat regisztrálni, és megszervezni az előző bejelentővel az adatok megosztását.

### **3.2.2 A REACH listája REACH hatályba lépése után**

A REACH hatályba lépése után az Európai Vegyianyag Ügynökség egy listán fogja szerepeltetni a regisztrált anyagokat. A regisztrálók regisztrációs számot fognak kapni egy anyag minden regisztrációjáról. Az anyagot azonosító EK számmal (EINECS, ELINCS vagy NLP számmal) nem rendelkező anyagokhoz az Európai Vegyianyag Ügynökség rendel EK számot.

Ezt a listát az Európai Vegyianyag Ügynökség rendszeresen frissíteni fogja. Az új REACH anyagokat (a REACH-ben ezeket nem bevezetett anyagoknak nevezik) hozzáadják a listához. A regisztrációs eljárásnak lehetővé kell tennie, hogy a regisztrált anyagok új listája alapján a

jelenlegi EINECS listát „ki lehessen javítani”, ahol az „hibás”<sup>4</sup>. Nagyon valószínű, hogy az EK számok hozzárendelése az új REACH anyagokhoz ugyanazzal a módszerrel történik majd, ahogy az EINECS, ELINCS és az NLP listáknál.

Egy anyag leírása az EINECS-ben néha eléggé távolról értelmezhető. Ezekben az esetekben a potenciális regisztrálót felkérjük, hogy írja le pontosabban az anyagot (például adja meg a IUPAC nevet vagy más azonosítót). A regisztráló kihasználhatja a bevezetés szabályozásában rejlő előnyöket, ha megjelöli, hogy az anyag melyik EINECS címszó alá tartozik. Ezekben az esetekben az Európai Vegyianyag Ügynökség dönti el, hogy kell-e új EK számot adni a kérdéses anyagnak.

### **3.3 AZ ANYAGOK AZONOSÍTÁSÁNAK KÖVETELMÉNYEI A REACH RENDSZERBEN**

Ha a REACH előírások szerint regisztrációra van szükség, akkor annak tartalmaznia kell az anyag azonosítását, a IV. melléklet 2. pontja szerint. Ennek az információnak minden esetben elégségesnek kell lennie az anyag egyértelmű azonosításához. Ha műszakilag nem lehetséges, vagy tudományos alapon szükségtelen az azonosítási paraméterek valamelyikének vagy többnek a megadása, akkor azt meg kell indokolni [Lásd a Megjegyzést a VI. függelékben!].

A REACH 28. cikke szerint a bevezetett anyagok előzetes regisztrációja szükséges ahhoz, hogy a gyártók és az importőrök kihasználhassák az átmeneti rendszer nyújtotta előnyöket, tovább folytatva a gyártást vagy az importálást amíg a regisztrációra felkészülnek. Ebben a fázisban az anyagok azonosításának követelményei a REACH rendszerben nem írják elő a IV: melléklet 2. pontja szerinti teljes azonosító dosszié beadását, csak az anyag nevét kell megadni a potenciális regisztrálónak, vagy az anyagcsoportot kell megnevezni az EK számmal és a CAS számmal, ha ezek léteznek.

Az anyagok azonosító paramétereit, a REACH IV. mellékletének megfelelően, a **3.1. táblázatban** foglaltuk össze.

---

<sup>4</sup>Az EINECS 1990. június 15-én jelent meg, és több mint 100000 anyagot tartalmaz. A lista használata közben rögzítették annak hibáit (sajtóhibák, például helytelen kémiai név, összegképlet vagy CAS szám) Ezért 2002. március 1-én kiadtak egy hibajegyzéket. Azonban azóta is mutattak ki hibákat.



**3.1 táblázat** Anyagok azonosító paraméterei, REACH IV. mellélet 2. pont [Tanácsi javaslat, 2006. június 12.]

<b>2.</b>	<b>Az anyag azonosítása</b> Minden anyagra elegendő információt kell megadni az egyértelmű azonosításhoz. Ha műszakilag nem lehetséges, vagy tudományos alapon szükségtelen az alább felsorolt azonosítási paraméterek valamelyikének vagy többnek a megadása, akkor azt meg kell indokolni
<b>2.1</b>	<b>Az anyag neve vagy más azonosítója</b>
2.1.1	<i>IUPAC név(ek) vagy más nemzetközi kémiai név(ek)</i>
2.1.2	<i>Egyéb nevek (hagyományos név, kereskedelmi név, rövidítés)</i>
2.1.3	<i>EINECS vagy ELINCS szám (ha létezik és érvényes)</i>
2.1.4	<i>CAS név és CAS szám (ha létezik)</i>
2.1.5	<i>Egyéb azonosító (ha létezik)</i>
<b>2.2</b>	<b>Az anyagokra vonatkozó molekuláris és szerkezeti adatok</b>
2.2.1	<i>Összegképlet és szerkezeti képlet (a SMILES jelölés is megadandó, ha ismert)</i>
2.2.2	<i>Az optikai aktivitásra és a (sztereo) izomerekre vonatkozó adatok (ha alkalmazható)</i>
2.2.3	<i>Molekulásúly és molekulásúly tartomány</i>
<b>2.3.</b>	<b>Az anyagok összetétele</b>
2.3.1	<i>Tisztaság (%)</i>
2.3.2	<i>A szennyezők, például izomerek és melléktermékek jellege</i>
2.3.3	<i>A (jelentős) fő szennyezők aránya</i>
2.3.4	<i>Az adalékok (például stabilizátorok, inhibitorok) jellege és koncentrációjuk nagyságrendje (.....ppm, .....%)</i>
2.3.5	<i>Spektrumok adatai (ultraibolya, infravörös, mágneses magrezonancia vagy tömegspektrum)</i>
2.3.6	<i>Nagyteljesítményű folyadék kromatográfia, gázkromatográfia</i>
2.3.7	<i>Az analitikai módszerek leírása vagy megfelelő irodalmi hivatkozás az anyagok azonosítására, vagy ahol szükséges, a szennyeződések és az adalékok azonosítására. Az adatoknak elegendőnek kell lenni a módszerek reprodukálásához</i>

## 4 TÁJÉKOZTATÓ AZ ANYAGOK AZONOSÍTÁSÁHOZ ÉS ELNEVEZÉSÉHEZ A REACH-BEN

### 4.1 BEVEZETÉS

Az azonosítás és az elnevezés szabályai az anyagok egyes típusainál eltérőek. Gyakorlati okokból ezt az útmutató dokumentumot úgy szerkesztettük, hogy az olvasót közvetlenül ahhoz a fejezethez irányítjuk, ahol a szükséges tájékoztatást megkapja. Ezért a következőkben vázlatosan ismertetjük az egyes anyag típusokat és végül megadjuk, hogy hogyan lehet megtalálni a megfelelő fejezetet.

Az anyagokat legalább a REACH IV. mellékletének 2. pontjában felsorolt paraméterekkel kell azonosítani (lásd a **3.1. táblázatot**). Ezért az anyagokat a megfelelő azonosító paraméterek kombinációjával kell azonosítani:

- A IUPAC szerinti és/vagy más név, vagy más azonosító, például a CAS szám, EK szám (IV. melléklet, 2.1 pont);
- Összegképlet és szerkezeti képlet (IV. melléklet, 2.2 pont );
- Kémiai összetétel (IV. melléklet, 2.3 pont);

Egy anyagot teljes mértékben azonosít a kémiai összetétele, a kémiai azonossága és az egyes összetevők aránya az anyagban. Ilyen közvetlen azonosítás az anyagok többségénél lehetséges lenne, de néhány anyagnál ez nem kivitelezhető vagy nem elegendő a REACH rendszerében. Ezekben az esetekben más vagy további azonosító adatokra van szükség.

Az anyagokat két csoportba oszthatjuk:

1. “Jól azonosítható anyagok”: Meghatározott minőségi és mennyiségi összetételű anyagok, amelyeket a REACH IV. mellékletének 2. pontjában megadott paraméterekkel kielégítő módon lehet azonosítani.
2. “UVCB anyagok”: Azok az anyagok, amelyeket nem lehet a fenti paraméterekkel azonosítani. Ezek a nagyon sokféle anyagot tartalmazó úgynevezett UVCB anyagok csoportjába tartoznak. Az UVCB az „Ismeretlen vagy Változó összetételű anyagok, Komplex reakciótermékek vagy Biológiai anyagok” jelentésű kifejezés betűrövidítése (substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials).

A jól azonosítható anyagok összetételének megengedett változását a főbb összetevő(k) koncentráció tartomány(ai)nak alsó és felső határértékével adják meg. Az UCVB anyagoknál a változás viszonylag nagy és/vagy nem ismerhető előre.

Ismeretes, hogy vannak határesetek, ahol nehéz különbséget tenni egyrészt a meghatározott kémiai összetételű, de sok és egyenként széles tartományba eső összetevőt tartalmazó reakcióelegyek, másrészt a változó és rosszul azonosítható összetételű reakcióelegyek között. A regisztráló felelős azért, hogy az anyagot a leginkább megfelelő módon azonosítsa.

Az azonosítás és a megnevezés szabályai eltérőek az egyetlen főbb összetevőt és az egynél több főbb összetevőt tartalmazó, „jól azonosítható anyagoknál”. Az „UVCB” anyagok alá tartozó különböző típusú anyagoknál pedig különböző azonosítási és megnevezési szabályokat írtunk le.

**A 4.1. és 4.2. táblázatokban** felsoroljuk különböző típusú anyagok néhány példájára a fő azonosítókat. A példákat úgy csoportosítottuk, hogy az anyagok azonosításának eltérései és hasonlóságai szembeűnők legyenek.

**A 4.1. és 4.2. táblázatok** nem tartalmazzák minden előforduló anyagtípus átfogó listáját. Az anyagoknak ezt a csoportosítását az azonosítási és megnevezési szabályokkal nem szabad az anyagok Ügynökségi besorolási rendszerének tekinteni, céljuk a gyakorlati segítség jelentenek a speciális szabályok megfelelő használatához, és tájékoztatás nyújtása ebben a műszaki útmutató dokumentumban.

**4.1. táblázat** A fő azonosítók csoportosítása jól meghatározható, hasonló anyagok típusainak példáin

Általános tulajdonságok	Példák	Fő azonosítók
Kémiai összetételük alapján jól azonosítható anyagok [4.2.fejezet]	Egy-összetevőjű anyagok, például: - benzol (95%) - nikkel (99%) [4.2.1 fejezet]	Kémiai összetétel: egy főbb összetevő $\geq 80\%$ : - A főbb összetevő kémiai azonosítása (kémiai név, CAS-szám, EK-szám, stb) - Tipikus koncentráció és az alsó és felső határérték
	Több-összetevőjű anyagok, például: definiált reakcióelegyek; erre példa: 2-, 3-, és 4-klórtoluol elegye (30% mindegyik) [4.2.2 fejezet]	Kémiai összetétel: a főbb összetevők elegye, mindegyik $\geq 10 - < 80\%$ között: - A főbb összetevők kémiai azonosítása - Jellemző koncentrációk és az alsó és felső határértékek, mindegyik összetevőre és magára az elegyre.
	Nem csak a kémiai összetétellel meghatározott anyagok, például: grafit és gyémánt [4.2.3. fejezet]	A kémiai összetétel mint az egy vagy több-összetevőjű anyagoknál ÉS Más fizikai vagy jellemző paraméterek például kristálmorfológia, (geológiai) ásványi összetétel, stb.

## 4.2. táblázat A fő azonosítók csoportosítása UVCB anyagok különböző típusainak példáin

Általános tulajdonságok	Példák	Fő azonosítók			
		Eredet	Eljárás	Más azonosítók	
Kémiai összetétele alapján rosszul azonosítható vagy változó anyagok (UVCB anyagok vagy biológiai anyagok) [ 4.3 fejezet]	Biológiai anyagok (B)	Biológiai anyagok extraktumai, például természetes illatanyagok, illóolajok, természetes színezékek és pigmentek	<ul style="list-style-type: none"> <li>Növény- vagy állatfajok és családok</li> <li>Növények/állatok részei</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Extrakció</li> <li>Frakcionálás, bepárlás, izolálás, tisztítás stb..</li> <li><u>Származtatás*</u></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Ismert vagy generikus összetétel</li> <li>Kromatográfia vagy más ujjlenyomat</li> <li>Hivatkozás standardokra</li> <li>Szín index</li> </ul>
		Komplex biológiai makromolekulák, például enzimek, fehérjék, DNS vagy RNS darabok, hormonok, antibiotikumok			<ul style="list-style-type: none"> <li>Standard enzim index</li> <li>Genetikus kód</li> <li>Sztereo-konfiguráció</li> <li>Fizikai tulajdonságok</li> <li>Funkció/aktivitás</li> <li>Szerkezet</li> <li>Aminosav szekvencia</li> </ul>
		Fermentációs termékek antibiotikumok, biopolimerek, enzimkeverékek, cefre (cukor erjesztési terméke), stb.	<ul style="list-style-type: none"> <li>Táptalaj</li> <li>Alkalmazott mikroorganizmus</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Fermentálás</li> <li>A termékek izolálása</li> <li>Tisztítási lépések</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Terméktípusok például: antibiotikumok, biopolimerek, fehérjék stb.</li> <li>Ismert összetétel</li> </ul>
	Vegyis és ásványi anyagok, rosszul azonosítható, komplex vagy változó összetétellel (UVC)	Reakcióelegyek rosszul megjósolható és/vagy változó összetétellel	<ul style="list-style-type: none"> <li>Kiindulási anyagok</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li><u>A kémiai reakció típusa</u>, például észterezés, alkilezés, hidrogénezés</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Ismert összetétel</li> <li>Kromatográfias vagy más ujjlenyomat</li> <li>Hivatkozás standardokra</li> </ul>
		<ul style="list-style-type: none"> <li>Frakciók vagy párlatok, például olajtermékek</li> <li>Agyag, például bentonit</li> <li>Kátrányok</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Nyersolajok</li> <li>Szén és tőzeg</li> <li>Ásványi gázok</li> <li>Ásványok</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Frakcionálás, desztillálás</li> <li><u>A frakciók átalakítása</u></li> <li>Fizikai feldolgozás</li> <li>Maradékok</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>Forráspont tartomány</li> <li>Lánchossz tartomány</li> <li>aromás/ alifás arány</li> <li>Ismert összetétel</li> <li>Standard index</li> </ul>

		Koncentrátumok vagy olvadékok, például fémes ásványok, vagy különböző olvasztási metallurgiai eljárások maradékai, például salak	<ul style="list-style-type: none"><li>• Érc</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Ömlesztés</li><li>• Hőkezelés</li><li>• Különböző metallurgiai eljárások</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Ismert vagy generikus összetétel</li><li>• A fémek koncentrációja</li></ul>
--	--	--	---	--	---

\* Az aláhúzott eljárások új molekulák szintézisét jelzik

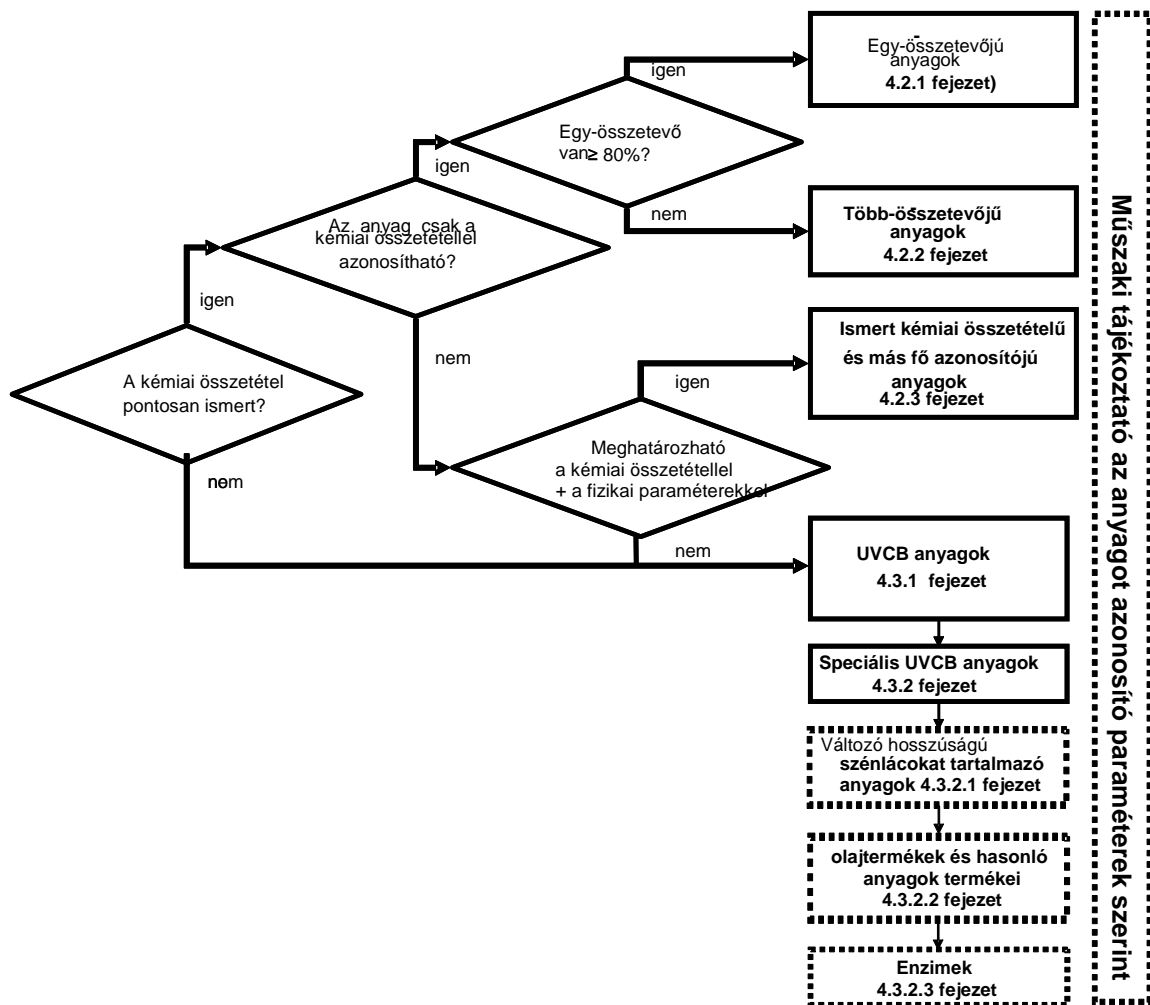
Ezt a fejezet alfejezetekre osztottuk, amelyek különböző típusú anyagok azonosításához nyújtanak tájékoztatást. A **4.1. ábra** tartalmaz utalást arra, hogy az egyes anyagok melyik fejezetben található.

A **4.1. ábra** alapvető szabályok szerinti kritériumokon alapul. A regisztráló felelős azért, hogy kiválassza a leginkább megfelelő fejezetet, és azonosítsa az anyagot az adott anyag típusra vonatkozó szabályok és kritériumok figyelembe vételével.

Az alapszabály az, hogy az anyagokat a lehető legnagyobb mértékben meghatározza a kémiai összetételük és az összetevők teljes azonosítása. Más fő azonosítót csak akkor kell használni, ha ennek meghatározása műszakilag nem lehetséges, ahogy azt a különböző típusú UVCB anyagoknál megadtuk.

Ha a regisztráló eltér az anyagok azonosításának ebben a műszaki útmutató dokumentumban leírt szabályaitól és kritériumaitól, akkor azt indokolnia kell. Az anyag azonosítása legyen egyértelmű, követhető és következetes.

**4.1. ábra** Tájékoztató a dokumentum fejezeteinek és függelékeinek összefüggéseiről, egy adott anyag típushoz tartozó tájékoztatás megtalálásához.



Össze kell foglalni az anyagok és, adott esetben, a szennyeződések és az adalékok azonosításához használt analitikai módszereket és /vagy meg kell adni az irodalmi

hivatkozásokat (REACH IV. melléklet, 2.3.5, 2.3.6 és 2.3.7 pontok). Ezek az információk legyenek elegendőek a módszerek reprodukálására.

## 4.2 JÓL AZONOSÍTHATÓ ÖSSZETÉTELŰ ANYAGOK

A jól azonosítható kémiai összetételű anyagokat a főbb összetevő(k) alapján kell megnevezni. Egyes anyagtípusoknál a kémiai összetétel önmagában nem elegendő az anyag jellemzésére. Ezekben az esetekben további fizikai paramétereket is meg kell adni a kémiai szerkezetről az anyag azonosításához..

Általános szabály, hogy igyekezni kell az összetételt 100%-ra megadni, és mindegyik összetevőt kémiailag teljesen meg kell határozni, beleértve a szerkezetét is. Azoknál az anyagoknál, amelyeket a kémiai összetételükkel határoznak meg, meg kell különböztetni a következőket:

- Főbb összetevő: az anyagnak az az összetevője, amely nem szennyeződés vagy adalék, és amely az anyag egy jelentős részét teszi ki, ezért szerepel az anyag megnevezésében és az anyag részletes azonosításában.
- Szennyeződés: olyan összetevő, amelyik nem szándékosan került az anyagba a gyártás során. Származhat a kiindulási anyagból, lehet a gyártást kísérő mellékreakció vagy nem teljes reakciók terméke. A szennyeződések a végtermékben jelen vannak, de nem szándékosan kerültek bele.
- Adalék: Az anyaghoz szándékosan, a stabilizálása érdekében adott anyag.

Az adalékok kivételével minden olyan anyag, amelyik nem a főbb összetevő az egy – komponensű anyagokban vagy amelyek nem a fő-összetevők a több-összetevőjű anyagokban, szennyeződésnek tekintendő. Egyes szektorokban általános gyakorlat a „nyomokban” fogalom használata, de ebben a műszaki útmutató dokumentumban csak a „szennyeződés” kifejezést használjuk.

A kémiai összetételnek ezeket az alcsoportjait eltérően kell kezelni az azonosításkor:

- A főbb összetevőknek szerepelniük kell az anyag nevében, és minden egyes főbb összetevőt jellemezni kell az összes rendelkezésre álló azonosító módszerrel.
- A szennyeződéseknek nem kell szerepelni a termék nevében, azoknak csak a nevüket, a CAS számukat, EK számukat és/vagy az összegképletüket kell megadni.
- Az adalékok részei az anyag összetételének (de nem a megnevezésüknek), és minden esetben teljeskörűen azonosítani kell őket.

Használatos néhány konvenció az egy-összetevőjű és a több-összetevőjű (keverék) anyagok megkülönböztetésére:

- Az egy-összetevőjű anyag olyan anyag, amelyben egy-összetevő legalább 80 tömeg%-ban van jelen, és amely legfeljebb 20 tömeg% szennyeződést tartalmaz.

Az egy-összetevőjű anyagot a főbb összetevő szerint nevezik meg.

- A több-összetevőjű anyagok több főbb összetevőt tartalmaznak, ezek koncentrációja rendszerint legalább 10 tömeg % és kisebb, mint 80 tömeg %.

A több-összetevőjű anyagokat két vagy több anyag keverékeként nevezik meg.

A fenti szabályok tájékoztató jellegűek. Ésszerűen megindokolt esetekben el lehet térni tőlük.

Általában azokat a szennyeződések kell megadni, amelyek legalább 1% koncentrációban vannak jelen. Az olyan szennyeződések azonban, amelyek osztályba sorolás alá tartoznak, minden esetben meg kell adni. Általános szabály, hogy az összetételre vonatkozó információt 100%-ig meg kell adni.

Az adalékok a REACH rendelet és ezen műszaki útmutató dokumentum szerint stabilizátorok, az anyag stabilitásának megőrzésére valók. Ezért ezek az adalékok az anyag lényeges összetevői, és figyelembe kell venni őket a tömegmérlegben. Azonban a REACH rendelet és ezen műszaki útmutató dokumentum meghatározásától eltérően az „adalék” fogalmat használják más funkciójú, szándékosan hozzáadott anyagokra is, például a pH beállító anyagokra vagy színező anyagokra. Ezek a szándékosan az anyaghoz adott adalékanyagok nem részei az adott anyagnak, és ezért a tömegmérlegben nem kell figyelembe venni őket.

A készítmények a REACH meghatározása értelmében szándékosan összekevert anyagok, ezek tehát nem tekinthetők több-összetevőjű anyagnak.<sup>5</sup>

Az egy-összetevőjű anyagokra vonatkozó tájékoztatót a 4.2.1 fejezet tartalmazza, a több-összetevőjű anyagokra vonatkozó tájékoztató a 4.2.2 fejezetben található. A 4.2.3 fejezet tartalmazza a tájékoztatót azokra az anyagokra, amelyeknél további adatokra van szükség (például ásványok).

#### **4.2.1 Egy-összetevőjű anyagok**

Az egy-összetevőjű anyagok olyan anyagok, amelyet a mennyiségi összetétele határoz meg, és amelyben egy főbb összetevő aránya legalább 80 tömeg%.

##### **4.2.1.1 Megnevezés**

Az egy-összetevőjű anyagokat a főbb összetevő után kell megnevezni. Elvileg a nevet angolul kell megadni, a IUPAC nomenklatura szabályai szerint (lásd I. függelék). Ezt ki lehet egészíteni más, nemzetközileg elfogadott megjelöléssel.

##### **4.2.1.2 Azonosítók**

Az egy-összetevőjű anyagokat a főbb összetevő nevével és más azonosítóival határozzák meg (például az összegképlettel és a szerkezeti képlettel), valamint szennyeződések és/vagy az adalékok kémiai összetételével (kémiai azonosításával), jellemző koncentrációikkal és koncentráció tartományaikkal, igazolásképpen pedig megadják az analitikai információkat.

---

<sup>5</sup> A osztályozásra és címkére vonatkozó, a jövőben létrehozandó GHS-ben a “készítmények” megnevezése “keverék” lesz.



Példák				
Főbb összetevő	Tartalom (%)	Szennyeződés	Tartalom (%)	Bejegyzett anyag
m-xilol	91	o- xilol	5	m- xilol
o- xilol	87	m- xilol	10	o- xilol

Általában a főbb összetevő legalább 80 %-ban jelen van, és teljeskörűen meg kell határozni a fenti paraméterekkel. Az 1 %-nál nagyobb koncentrációban jelenlévő szennyeződések meg kell adni, a következő azonosítóknak legalább az egyikével: kémiai név, CAS szám és EK szám és/vagy az összegképlet. Az osztályba sorolás alá tartozó szennyeződések hasonlóképpen mindig meg kell adni, függetlenül azok koncentrációjától.

A 80%-os szabály helyes alkalmazása érdekében az egyéb adalékok, például a pH beállítók vagy a színezékek nem veendő figyelembe a tömegmérésben.

A “80%-os szabályt” alkalmazták az új anyagok törzskönyvezésénél (67/548/EGK irányelv). Ez alapszabálynak tekintendő. A 80%-os szabálytól való eltérést meg kell indokolni. Az eltérés lehetséges indokai lehetnek például:

- Ha egy-összetevő 80% alatti koncentrációban van jelen, de igazolható, hogy az anyag fizikai-kémiai tulajdonságai hasonlóak és veszélyességi profilja azonos más egy-összetevőjű anyagokéval, amelyekkel azonos és azok teljesítik a 80%-os szabályt.
- A főbb összetevő és a szennyeződések koncentráció tartományai átfedik a 80%-os feltételt, és a főbb összetevő csak esetenként van 80% alatt.

Példák									
Anyag	Főbb összetevő	Felső határ (%)	Jellemző konc. (%)	Alsó határ (%)	Szennyező dős	Felső határ (%)	Jellemző konc. (%)	Alsó határ (%)	Bejegyzett anyag
1	o-xilol	90	> 80	65	m-xilol	35	15	10	o-xilol
2	o-xilol m-xilol	90 35	85 15	65 10	p-xilol	5	4	1	o-xilol

A főbb összetevő és a szennyeződés koncentráció tartományai alapján az 1 és 2 jelű anyag tekinthető két főbb összetevő, m-xilol és o-xilol keverékének, vagy tekinthetők egy-összetevőjű anyagnak. Mind a két anyagot egy-összetevőjűnek kell meghatározni, azon az alapon, hogy az o-xilol rendszerint 80% fölötti koncentrációban van jelen.

Az egy-összetevőjű anyagok leírását a IUCLID 5 rendszer számára a 8.2.1. fejezetben tárgyaljuk.

#### 4.2.1.3 Analitikai adatok

Az egy-összetevőjű anyagoknak tulajdonított szerkezetet megfelelő spektrális adatokkal kell igazolni. Több spektroszkópiai módszert kell használni, amely az adott anyagcsoporthoz megfelelő, így ultraviola és látható abszorpciós spektroszkópia (UV/VIS), infravörös spektroszkópia (IR), mágneses magrezonancia (NMR) és tömegspektroszkópia (MS). A szeretlen anyagokhoz röntgendiffrakció (XRD) vagy röntgenfluoreszcencia (XRF) vagy pedig atomabszorpciós spektroszkópia még inkább megfelelő lehet.

A kromatográfia, mint például a gázkromatográfia (GC) vagy a magasnyomású folyadékkromatográfia (HPLC) ugyancsak szükségessé válhat az anyag komponenseinek megerősítéséhez. Amennyiben szükséges, egyéb elfogadott elválasztási technikák is használhatóak.

A módszerek és alkalmazásaik folyamatosan változnak. Ezért a regisztráló felelőssége, hogy megfelelő spektroszkópiai adatokat szolgáltatson.

#### **4.2.2 Több-összetevőjű anyagok**

A több-összetevőjű anyagok olyan anyagok, amelyeket a mennyiségi összetételük határoz meg, és amelyekben az egynél több főbb összetevő aránya legalább 10 tömeg % és kisebb mint 80 tömeg %.

A több-összetevőjű anyag („reakció terméke”) mesterséges folyamat eredménye<sup>6</sup>. A REACH rendszerben az anyagot úgy regisztrálják, ahogy előállították. Amennyiben a több-összetevőjű anyagot gyártották, a több-összetevőjű anyagot regisztrálni kell. Azonban az eseti döntés kérdése, hogy az előállítás különböző lépcsőfokai milyen mértékig tartoznak a 'gyártás' meghatározásába. Azonban az összes EINECS anyag (pl. több-összetevőjű anyagokat is beleértették, ha az összes egyedi összetevő felsorolásra került az EINECS-ben) bevezetettnek számít, és anyag tesztelésére nincs szükség, ha az anyag veszélyprofilja kielégítően leírható az egyedi összetevők információi alapján.

##### **4.2.2.1 Megnevezés**

A több-összetevőjű anyagokat a főbb összetevők keverékeként kell megnevezni. Az általános formátum: “[a főbb összetevők nevei] keveréke”. A nevek a jellemző koncentrációk sorrendjében vannak feltüntetve, a legmagasabbal kezdve. Csak a főbb összetevőket, jellemzően 10% fölöttieket kell a névben említeni. Elvileg a nevet angolul kell megadni a IUPAC nomenklatura szabályai szerint. Ezt ki lehet egészíteni más, nemzetközileg elfogadott megjelöléssel.

##### **4.2.2.2 Azonosítók**

A több-összetevőjű anyagokat az anyag kémiai nevével és azonosítóival azonosítják, valamint a mennyiségi és minőségi összetétellel (kémiai azonosítás, összegképlettel és szerkezeti képlettel), és igazolásképpen megadják az analitikai információkat.

---

<sup>6</sup> Elkülönítendő az olyan készítménytől, amelyek két- vagy több anyag összekeveréséből keletkeznek.

<b>Példa</b>				
<b>Főbb összetevők</b>	<b>Tartalom (%)</b>	<b>Szennyeződés</b>	<b>Tartalom (%)</b>	<b>Bejegyzett anyag</b>
m-xilol o-xilol	50 45	p-xilol	5	m-xilol és o-xilol keveréke

A több-összetevőjű anyagoknál a kémiai összetétel ismert, és az anyag azonosításához egynél több főbb összetevőt kell megadni. További kritérium, hogy az anyag kémiai összetétele megjósolható legyen tipikus értékek és tartományok formájában. A főbb összetevőket teljes körűen meg kell adni az összes vonatkozó paraméterrel. A főbb összetevők (10%-nál nagyobb) jellemző koncentrációinak és a szennyeződések (10% alatti) koncentrációinak az összege 100% legyen.

A 10% és 80%-os szabály helyes alkalmazása érdekében az egyéb adalékok, például a pH beállítók vagy a színezékek nem veendőek figyelembe a tömegmérlegben.

Az 1%-nál nagyobb koncentrációban jelenlévő szennyeződések meg kell adni, a következő azonosítóknak legalább az egyikével: kémiai név, CAS szám és EK szám és/vagy az összegképlet. Az osztályba sorolás alá tartozó szennyeződések minden esetben meg kell adni azok azonosítójával, függetlenül azok koncentrációjától.

<b>Példák</b>								
<b>Főbb összetevő</b>	<b>Felső határ (%)</b>	<b>Jellemző konc. (%)</b>	<b>Alsó határ (%)</b>	<b>Szennyeződés</b>	<b>Felső határ (%)</b>	<b>Jellemző konc. (%)</b>	<b>Alsó határ (%)</b>	<b>Bejegyzett anyag</b>
anilin naftalin	90 35	75 20	65 10	fenantrén	5	4	1	anilin és naftalin keveréke

Az ebben a műszaki útmutató dokumentumban foglalt szabályok szerint ez az anyag több-összetevőjű. Bár az egyik összetevő koncentráció tartományának felső határa 80% fölött van, ez csak időként fordul elő, a jellemző koncentráció 80% alatti.

Néha hasznos, ha egy anyagot több-összetevőjűnek tekintünk akkor is, ha egy komponens 80% vagy annál nagyobb koncentrációban van jelen. Például, egy anyag két összetevőt tartalmaz, az egyik 85%, a másik 10%, a többi szennyeződés. Mindkét összetevő szükséges és hozzájárul az anyag által kiváltani kívánt műszaki hatáshoz. Ilyen esetekben az anyagok két-összetevőjűként lehet megadni annak ellenére, hogy az egyik összetevő 80%-nál nagyobb arányban van jelen.

A több-összetevőjű anyagok leírását a IUCLID 5 rendszer számára a 8.2.2. fejezetben tárgyaljuk.

A több-összetevőjű anyagot meghatározza a kémiai neve és az anyag azonosítói mint olyanok, az összetevők mennyisége és minősége (kémiai hovatartozás, beleértve a molekuláris és szerkezeti formát) és az analitikai bizonyítások.

#### 4.2.2.3 Analitikai adatok

Ha spektrális adatok informatívak a több-összetevőjű anyagok összetételével kapcsolatban, akkor azt meg kell adni. Több spektroszkópiai módszer is elfogadható lehet, amely az adott

anyagcsoporthoz megfelelő (UV/VIS, infravörös, magmágneses rezonancia vagy tömegspektroszkópia). Szervetlen anyagok esetén a röntgendiffrakció (XRD) vagy a röntgenfluoreszcencia (XRF) vagy az atomabszorpciós spektroszkópia (AAS) megfelelőbb lehet.

Az anyag összetételét kromatográfiával /gázkromatográfia (GC), magasnyomású folyadék-kromatográfia (HPLC)/ is meg kell erősíteni. Más elfogadott elválasztási technikát is lehet alkalmazni

A spektroszkópai és analitikai módszerek és alkalmazásaik folyamatosan változnak. Ezért a regisztráló felelőssége, hogy megfelelő spektroszkópai adatokat szolgáltatasson.

### 4.2.3 Ismert kémiai összetételű és más főbb azonosítójú anyagok

Bizonyos anyagoknál (például a szervetlen ásványok), amelyek a kémiai összetételükkel azonosíthatóak, további azonosítókat kell használni. Ezek az anyagok lehetnek egy-összetevőjűek vagy több-összetevőjűek, de az előző fejezetben leírt anyag azonosító paramétereken kívül más paramétereket is kell használni az anyag egyértelmű azonosításához.

Példák
Bizonyos (természetes vagy mesterséges) nemfémes ásványoknak egyedi szerkezete van, és a morfológiai vagy kristálytani szerkezetet is meg kell adni az anyag egyértelmű azonosításához. Erre példa a kaolin (CAS 1332-58-7) amely kaolinból, kálium alumínium szilikátból, földpátból és kvarcból áll.

A nanotechnológia jelenlegi fejlődése és az előre látható lehetőségek új adatokat szolgáltathatnak majd az anyagok további megismerése terén a jövőben. Jelenleg azonban a nanoforma fejlődése még nem jutott arra a szintre, hogy ez az anyagok azonosításához szükséges útmutatóba bekerülhessen.

#### 4.2.3.1 Megnevezés

Elvileg ugyanazt a megnevezési rendszert kell alkalmazni mind az egy-összetevőjű anyagokra (4.2.1 fejezet) mind a több-összetevőjű anyagokra (4.2.2 fejezet).

Szervetlen ásványok esetében az ásvány nevét lehet az összetevőkre használni. Például, az apatit több-összetevőjű anyag, összetevői foszfát ásványok, amelyeket rendszerint hidroxilapatitnak, flourapatitnak és klórapatitnak neveznek, a kristályrácsban lévő nagy OH<sup>-</sup>, F<sup>-</sup>, illetve Cl<sup>-</sup> ion tartalomra utalva. A három leggyakrabban előforduló összetevő keverékének összegképlete Ca<sub>5</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>(OH, F, Cl). Egy másik példa az aragonit, amely a kalcium karbonát egyik kristálymódosulata.

#### 4.2.3.2 Azonosítók

Ezeket az anyagokat az egy-összetevőjű anyagokra (4.2.1. fejezet) vagy a több-összetevőjű anyagokra (4.2.2. fejezet) megadott szabályok szerint kell azonosítani és megnevezni. Az anyag függően ehhez hozzá kell tenni a többi fő azonosító paramétert. Az egyéb fő azonosítók lehetnek például az elemi összetétel spektrális adatokkal, a kristályszerkezet a röntgendiffrakció alapján, infravörös abszorpciós csúcsok, expanziós index, kationcserélő kapacitás vagy más fizikai és kémiai tulajdonságok.

Ásványok esetében fontos az elemi összetétel és a spektrális adatok együttes vizsgálata, hogy az ásványtani szerkezetet és a kristályszerkezetet azonosíthassuk, amelyet aztán alátámasztanak a jellemző fizikai-kémiai tulajdonságok, például a kristályszerkezet (a röntgendiffrakció alapján), az alak, a keménység, az expanziós index, a sűrűség és/vagy a fajlagos felület.

Lehet példákat adni egyes kristályok esetében a fő azonosítókra, mivel a kristályoknak jellemző fizikai-kémiai tulajdonságaik vannak, amelyek alapján ki lehet egészíteni az azonosításukat; például a talkum keménysége nagyon alacsony, a bentonit duzzadásképesége nagyon nagy, a kovaföld alakja jellegzetes, a barit sűrűsége és fajlagos felülete (nitrogén adszorpció alapján) nagyon nagy.

Az ismert kémiai összetételű és más azonosítójú anyagok leírását a IUCLID 5 rendszer számára a 8.2.3. fejezetben tárgyaljuk.

#### 4.2.3.3 Analitikai adatok

Ugyanazokat az analitikai adatokat kell megadni, mint az egy-összetevőjű anyagoknál (4.2.1. fejezet) vagy mint a több-összetevőjű anyagoknál (4.2.2. fejezet). Azoknál az anyagoknál, amelyeknél a spektrális adatok, a GC és a HPLC kromatogramok nem elegendőek az azonosításhoz, meg kell adni más analitikai módszerekkel kapott eredményeket is, például ásványoknál a röntgendiffraktogramot, az elemi analízist, stb. A kritérium az, hogy elegendő adatot kell szolgáltatni az anyag szerkezetének igazolásához.

### 4.3 ROSSZUL AZONOSÍTHATÓ VAGY VÁLTOZÓ ÖSSZETÉTELŰ ANYAGOK

A rosszul azonosítható vagy változó összetételű anyagokat UVCB anyagoknak is hívják (Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials; ismeretlen vagy változó összetételű anyagok, komplex reakciótermékek vagy biológiai anyagok), és kémiai összetételükkel nem lehet őket kielégítő módon azonosítani, mert:

- Az összetevők száma viszonylag nagy, és/vagy
- Az összetétel jelentős mértékben ismeretlen, és/vagy
- Az összetétel viszonylag tág határok között változik vagy rosszul jósolható.

Mindebből az következik, hogy az UVCB anyagok azonosításához másféle adatokat is meg kell adni azon kívül, amely az összetételükről tudható.

A **4.2 táblázatból** látszik, hogy a különböző típusú UVCB anyagok fő azonosítói függenek az anyag eredetétől és az alkalmazott eljárástól; vagy az „egyéb fő azonosító” csoportba tartoznak (például „kromatográfiás vagy más ujjlenyomat”). A **4.2 táblázatban** megadott azonosítók száma és fajtája jelzi, hogy milyen sokféle azonosító használata lehetséges, és nem szabad átfogó összefoglalásnak tekinteni. Ha például egy komplex reakciótermék vagy egy biológiai eredetű anyag kémiai összetétele ismert, akkor az anyag azonosítását az egy illetve több-összetevőjű anyagoknál leírt módon kell végezni. Ha egy anyagot UVCB anyagként határozzunk meg, az azzal jár, hogy a eredetben vagy az eljárásban bekövetkező minden jelentős változás valószínűleg egy másik anyagot fog eredményezni, amelyet újra regisztrálni kell. Ha egy reakcióelegyet „több-összetevőjű anyagként” határozzunk meg, akkor az anyag lehet eltérő

eredetű és készülhet eltérő eljárással, amíg a végtermék összetétele a megadott határok között marad. Ezért ilyen esetekben nincs szükség új regisztrációra.

Az UVCB anyagokkal kapcsolatban a 4.3.1 fejezetben adunk általános tájékoztatást, a 4.3.2 fejezetben pedig az UVCB anyagok néhány speciális típusát ismertetjük: az egymástól a szénlánc hosszában különböző anyagokat, az olajból vagy olajhoz hasonló anyagokból származó termékeket, és az enzimeket.

### **4.3.1 UVCB anyagok**

A műszaki útmutató dokumentumnak ebben a fejezetében általános tájékoztatást adunk arról, hogy a REACH IV. melléklete 2. pontjában felsorolt fő azonosítókon kívül hogyan kell más fő azonosítókat is használni az UVCB anyagok azonosítására.

#### **4.3.1.1 A kémiai összetételre vonatkozó adatok**

Az UVCB anyagokat vagy nem lehet egyértelműen meghatározni az összetevők IUPAC neveivel, mivel nem lehet minden összetevőt azonosítani, vagy csak általánosan lehet meghatározni őket, mert a pontos összetétel változik. Mivel az összetevők és a szennyeződések nincsenek megkülönböztetve, a „főbb összetevő” és a „szennyeződés” fogalmak nem alkalmazhatók az UVCB anyagoknál.

Meg kell azonban adni minden adatot, amely a kémiai összetételről és az összetevők azonosításáról tudható. Az összetételt gyakran általános megfogalmazással lehet megadni, például “egyenes láncú zsírsavak C8-C16” vagy “alkohol etoxilátok C10-C14 alkohol és 4-10 etoxilált egységekkel”. Továbbá, a kémiai összetételre vonatkozó adatokat meg lehet adni jól ismert referencia mintákra vagy szabványokra hivatkozva; sok esetben ezek mellett indexeket és meglévő kódokat is lehet használni. Az összetételre vonatkozó további általános információ az úgynevezett „ujjlenyomat”, vagyis egy olyan kromatográfiás vagy spektrális kép, amely jellemző csúcs-kombinációt tartalmaz.

Az UVCB anyagoknál meg kell adni minden ismert összetevőt, amelyek 10 %-nál nagyobb koncentrációban vannak jelen, legálabb az angol IUPAC megnevezésével és előnyösen a CAS számával; meg kell adni az ismert összetevők jellemző koncentrációit és koncentráció tartományait is. Az osztályba sorolás alá tartozó összetevőket minden esetben azonosítani kell.

Az ismeretlen összetevők, ha lehetséges, kémiai jellegük általános leírásával azonosítandók. Az adalékokat teljes körűen azonosítani kell, hasonlóan a jól azonosítható anyagokhoz.

#### **4.3.1.2 A fő azonosító paraméterek – név, eredet és eljárás**

Mivel a kémiai összetétel önmagában nem elegendő az anyagok azonosítására, az anyagokat nevükkel, az eredetükkel vagy az alapanyaggal és a feldolgozás leginkább releváns lépéseivel kell azonosítani. Az anyag más tulajdonságai szintén fontos azonosítók lehetnek (például a forráspon) vagy az anyag adott csoportjára jellemző nagyon fontos tulajdonság (például enzimeknél a katalitikus aktivitás).

## 1. Megnevezésre vonatkozó konvenciók

Az UVCB anyagok neve általában tartalmazza az eredetet és az eljárást, az általános formátum: először az eredetet nevezzük meg, és utána az eljárás(oka)t.

- A biológiai eredetet a faj nevével adjuk meg.
- A nem biológiai eredetet a kiindulási anyagokkal adjuk meg.
- Az eljárásokat új molekulák szintézise esetén a kémiai reakció típusával adjuk meg, vagy a finomítás lépéseinek a megnevezésével, például extrakció, frakcionálás, töményítés vagy maradék.

Példák	
EK szám	EK név
296-358-2	Levendula. Lavandula hybrida, extraktum, acetilezett
307-507-9	Levendula, Lavandula latifolia, extraktum, szulfurált, palládium só

Reakciótermékek esetében ettől eltérő formátumot használtak az EK listákban, például

- EINECS: A fő kiindulási anyag, a többi kiindulási anyag reakcióterméke(i).
- ELINCS: A kiindulási anyag(ok) reakcióterméke(i).

Példák	
EK szám	EK név
232-341-8	Salétromos sav, reakció termékek 4-metil-1,3-feniléndiamin hidrokloriddal
263-151-3	Zsírsavak, kókusz, reakció termékek dietiléntriamin
400-160-5	reakciótermékek: tallolaj zsírsavak, dietanolamin és bórsav
428-190-4	Reakciótermék: 2,4-diamino-6-[2-(2-metil-1H-imidazol-1-yl)etil]-1,3,5-triazine és cianursav

Ebben a műszaki útmutató dokumentumban a reakciótermékek nevének általános formátuma: '[a kiindulási anyagok neve]' reakcióterméke. Elvileg a nevet angolul kell megadni, a IUPAC nomenklátúra szabályai szerint. Ezt ki lehet egészíteni más, nemzetközileg elfogadott megjelöléssel. Javasoljuk a „reakció” szó helyettesítését a reakció típusának általános megnevezésével, például észterezés vagy sóképzés (lásd a specifikus UVCB anyagokra vonatkozó tájékoztatót a következő fejezetben).

## 2. Eredet

Az eredetet két csoportra lehet osztani:

### 2.1. Biológiai eredet

A biológiai eredetű anyagokat a nemzetség, a faj és a család megnevezésével kell megadni, például. *Pinus cembra*, *Pinaceae* jelentése *Pinus* (nemzetség), *cembra* (faj), *Pinaceae* (család), valamint adott esetben a tenyészetet vagy a genotípust. Szükség esetén meg kell adni az anyag extrahálásához használt szövetet vagy szerv-részt, például csontvelő, hasnyálmirigy; vagy szár, mag vagy gyökér.

Példák	
EK szám	EK név
283-294-5	Saccharomyces cerevisiae (élesztő), extraktum
	<b>EK leírás</b>
	Az extraktumok és azok fizikai eszközökkel nyert származékai, úgy mint a tinktúrák, szilárd fázisok, az anyagon kívül egyebet nem tartalmazó minták, illóolajok, oleorezinek, terpének, terpénmentes frakciók, párlatok, maradékok, stb. amelyek az élesztőből (Saccharomyces cerevisie, Saccharomycelaceae) származnak.
296-350-9	Arnica mexicana, extaktum.
	<b>EK leírás</b>
	Arnica mexicana, Compositae extraktumai és az azokból fizikai módosítással nyert származékok, például tinktúrák, alkohol, illóolajok, gyantatartalmú illóolajok, terpének, terpénmentes frakciók, párlatok, maradékok, stb.

## 2.2. Kémiai vagy ásványi eredet

Kémiai reakciótermékek esetén a kiindulási anyagokat a IUPAC szerinti nevükkel kell megadni angolul. Az ásványi alapanyagokat általános kifejezésekkel kell megadni, például foszfát ércek, bauxit, porcelánföld, földgáz, szén, tőzeg.

## 3. Eljárás

Az eljárást a kémiai reakció típusával kell megadni, ha új molekulák szintéziséről van szó, vagy a finomítási lépések típusával, például extrakció, frakcionálás, töményítés; vagy valamilyen finomítási eljárás maradéka.

Egyes anyagoknál, például a kémiai származékoknál, az eljárásnál meg kell adni a finomítási lépéseket és a szintézis eljárását is.

### – Szintézis

A kiindulási anyagok között lejátszódik egy bizonyos kémiai vagy biokémiai reakció, és ennek eredményeképpen keletkezik az anyag. Például Grignard-reakció, szulfonálás, enzimatis hasítás proteázzal vagy lipázzal, stb. Sok derivatív reakciói is ebbe a típusba tartozik.

Az olyan újonnan szintetizált anyagok esetében, amelyekre nem lehet kémiai összetételt megadni, a kiindulási anyagok jelentik a fő azonosítót, a kémiai reakció specifikációjával, például típusával együtt. A kémiai reakció típusa jelzi, hogy milyen fajta molekulák jelenléte várható az anyagban. Van néhány befejező kémiai reakció típus: hidrolízis, alkilezés, klórozás, stb. Mivel ez csak általános információt nyújt a lehetséges képződött anyagokról, sok esetben a kromatográfiás ujjlenyomat is szükséges az anyag teljeskörű jellemzésére és azonosítására.



Példák	
EK szám	EK név
294-801-4	Lenolaj, epoxidált, reakciótermékek tetraetilénpentaminnal
401-530-9	(2-hidroxi-4-(3-propenoxi)-benzofenon és tri-etoxiszilán) valamint (szilícium-dioxid és metil-tri-metoxiszilán hidrolízis termékének) reakcióterméke

– Finomítás

A természetes vagy ásványi eredetű anyagok sokféleképpen finomíthatók, amelynek során az összetevők kémiai azonossága nem változik, de az anyag összetevőinek koncentrációja megváltozik, például a növényi szövetek hideg feldolgozása után alkoholos extrakciót alkalmaznak.

A finomítást a továbbiakban az eljárásokkal lehet meghatározni, például extrakcióval. Az anyag azonosítása az eljárás típusától függ:

- A fizikai módszerekkel, például finomítással vagy frakcionálással gyártott anyagoknál a forráspont határokat és a frakció paramétereit kell megadni (például: molekula méret, lánc hossz, forráspont, illékonysági tartomány, stb.);
- A töményítéssel gyártott anyagoknál (például metallurgiai eljárások, centrifugált csapadékok, szűrési maradékok, stb.) meg kell adni a töményítési lépést a keletkező anyag általános összetételére vonatkozó adatokkal, a kiindulási anyaggal összevetve;

Példák	
EK szám	EK név
408-250-6	Szerves wolframvegyület koncentrátum (wolfram hexaklorid és 2-metil-2-propanol, nonilfenol és 2,4-pentándion reakciótermékei)

- Egy reakció maradékai, például a salak, a kátrány és a lepárlási maradékok esetében a folyamatot kell leírni és megadni a keletkezett anyag összetételét, általánosságban;

Példák	
EK szám	EK név
283-659-9	Ón, olvasztási maradék
	<b>EK leírás</b> Az ón és ötvözeteinek használata és gyártása során keletkező anyag, elsődleges és másodlagos forrásokból nyerik, és tartalmaz visszanyert intermediereket. Főleg ónvegyületeket tartalmaz, és tartalmazhat más nemfémes maradékokat és vegyületeiket.
293-693-6	Szója liszt, fehérje extrahálási maradék
	<b>EK leírás</b> Melléktermék, főleg szénhidrátokat tartalmaz, zsírmentesített szója etanolos extrakciójakor keletkezik.

- Extraktumok esetében meg kell adni az extrakció módszerét, az extrakcióhoz használt oldószert és más releváns körülményeket, például a hőmérsékletet vagy a hőmérséklet tartományt.

- Többlépéses feldolgozás esetén mindegyik feldolgozási lépést meg kell adni (általánosságban), és információt kell adni az alapanyagról. A többlépéses feldolgozás nagyon fontos a kémiai származékok készítésénél.

Példák
<p>A növényt először extrahálják, az extraktumot desztillálják és a növényi kivonat desztillált frakcióját használják kémiai származék készítésére. A kapott anyagot további tisztításnak lehet alávetni. A tisztított termék esetenként lehet jól azonosítható kémiai összetételű, és az anyagot nem szükséges UVCB anyagnak tekinteni. Amikor a terméket UVCB anyagnak kell tekinteni, akkor a többlépéses feldolgozást úgy lehet megadni, hogy „, egy növényi extraktum desztillált frakciójának tisztított kémiai származéka”.</p> <p>Ha egy extraktum további feldolgozása során csak fizikai módszereket használnak, az összetétel megváltozik, de nem keletkeznek új molekulák. Az összetétel megváltozása mindazonáltal új anyagot eredményez, például egy növényi extraktum párlatát vagy csapadékát.</p>
<p>Az olajtermékek gyártásánál gyakran alkalmazzák együtt a kémiai származék-készítést és a frakcionálást. Például az olaj desztillálása után végzett krakkolás után a kiindulási anyag egy frakciója keletkezik, és új molekulák is. Ezért ebben az esetben mind a két eljárást meg kell adni, vagy a desztillátumot kell a krakkolás kiindulási anyagaként megadni. Az elmondottak az olajtermékekre vonatkoznak, amelyek gyakran több eljárás termékei. Az olajtermékek azonosítására azonban egy külön specifikus rendszer használható (4.3.2.2 fejezet).</p>

Egy extraktum kémiai származéka nem ugyanazokat az összetevőket tartalmazza, mint az eredeti extraktum, ezért attól különböző anyagnak kell tekinteni. Ennek a szabálynak az lehet a következménye, hogy a név szerinti azonosítás és a leírás eltér a korábbi EINECS névtől és leírástól. Az EINECS lista összeállításakor a különböző eljárásokból különböző oldószerekkel származó extraktumok, sőt a fizikai és kémiai származékok is gyakran egyetlen címszó alatt szerepeltek. Ezeket az anyagokat a REACH rendszerben akkor lehet egy anyagként regisztráltatni, ha a veszélyességi tulajdonságaik nem térnek el, és a veszélyességi besorolásuk ezért ugyanaz. Az EINECS tágran értelmezhető anyag leírásai azonban indokoltá tehetik néhány egymástól különböző anyag azonosítását egyazon EINECS szám alatt.

#### 4. Egyéb anyag azonosító paraméterek

A kémiai név, az eredet és az eljárás megadásán kívül az UVCB anyagokról további adatokat is meg kell adni, a REACH VI. mellékletének 2. pontja szerint.

Különösképpen a specifikus UVCB anyagoknál lehet szükség más azonosító paraméterekre. Ezek az azonosító paraméterek a következők lehetnek:

- A kémiai összetétel általános leírása;
- Kromatográfiás ujjlenyomat és más típusú ujjlenyomat;
- Referencia anyag (például ISO);
- Fizikai-kémiai paraméterek (például forráspont);
- Szín index szám;
- AISE szám.

A továbbiakban tájékoztatást adunk annak szabályairól és kritériumairól, hogy hogyan kell a megnevezést, az eredetet és az eljárást az UVCB anyagok azonosítására használni, különböző eredetű alapanyagokra és különböző eljárásokra. A következő fejezetekben az UVCB anyagok négy csoportjára írjuk le a biológiai és kémiai/ásványi eredetet és a folyamatokat (szintézis vagy finomítás).

A 8.2.4. fejezetben tájékoztatunk arról, hogy hogyan kell a leírni az UVCB anyagokat a IUCLID 5 rendszer számára.

### **UVCB 1. altípus: ahol az eredet biológiai, a feldolgozás szintézis**

A biológiai jellegű anyagok (bio)kémiai eljárással módosíthatók, és olyan összetevőket lehet előállítani, amelyek a kiindulási anyagban nem voltak jelen, például növényi extraktumok kémiai származékait vagy az extraktumok enzimikus kezelésének a termékeit. Például a fehérjéket lehet proteázzal hidrolizálni, amikor is oligopeptidek keletkeznek, vagy a fából származó cellulózt lehet karboxilezni, és karboxi-metil-cellulózt (CMC) gyártani.

A fermentálások termékei is tartozhatnak ebbe az UVCB altípusba. Például a cefre a cukor fermentálásának a terméke, amely a cukorhoz képest sok eltérő összetevőt tartalmaz. Ha a fermentálás termékeit tovább tisztítják, az anyagok adott esetben teljeskörűen azonosíthatóvá válhatnak a kémiai összetételük alapján, és ezután már nem UVCB anyagnak kell tekinteni őket.

Az enzimek az anyagok egy speciális csoportja, ezeket biológiai alapanyagból extrakcióval és azt követő finomítással állítják elő. Bár az alapanyagot és az eljárást részletesen meg lehetne adni, ez nem hordoz az enzimre nézve specifikus információt. Ezekre az anyagokra egy nagyon speciális besorolási rendszert, megnevezést és azonosítást kell alkalmazni (lásd 4.3.2.3 fejezet).

Az anyagok azonosításánál az utolsó feldolgozási lépést kell megadni és/vagy azokat a lépéseket, amelyek az anyag azonosítása szempontjából relevánsak.

A kémiai eljárás leírásakor meg lehet adni általában az eljárás típusát (észterezés, lúgos hidrolízis, alkilezés, klórozás, szubsztitúció, stb.), a folyamat releváns körülményeivel együtt.

A biokémiai eljárás leírásakor meg lehet adni általában a katalizált reakció leírását a reakciót katalizáló enzim nevével.

A fermentálással vagy szövet tenyésztéssel előállított anyagoknál meg kell adni a fermentáló fajt és a fermentálás típusát és általános körülményeit (szakaszos vagy folyamatos, aerob, anaerob, anoxikus, hőmérséklet, pH stb.), valamint a folyamat további lépéseit, amellyel a fermentáció termékét kinyerik, például centrifugálás, kicsapás, extrakció stb. Ha ezeket az anyagokat tovább finomítják, keletkezhet egy frakció, koncentrátum vagy maradék. Ezeknél az anyagoknál azonosítóként meg kell adni a feldolgozás további lépéseit.

### **UVCB 2. altípus: ahol az eredet kémiai vagy ásványi, a feldolgozás szintézis**

Azokat az UVCB anyagokat, amelyek kémiai vagy ásványi alapanyagokból keletkeznek, és a feldolgozás során új molekulákat szintetizálódnak, „reakcióterméknek nevezzük”. A kémiai reakciótermékek lehetnek például észterezés, alkilezés vagy klórozás termékei. Az izolált enzimekkel végzett biokémiai reakciók a kémiai reakciók speciális típusai. Ha egy-összetett biokémiai szintézissorról van szó teljes mikroorganizmus használatával, akkor jobb a keletkezett terméket egy fermentálás termékének tekinteni és a fermentálási folyamattal és a fermentáló fajjal azonosítani, mint a kiindulási anyagokkal (lásd UVCB, 4. altípus).

Nem minden reakcióterméket kell automatikusan UVCB anyagnak meghatározni. Ha egy reakcióterméket kielégítő módon lehet azonosítani a kémiai összetételével (bizonyos változatosságot figyelembe véve), akkor helyesebb azt több-összetevőjű anyagként azonosítani (lásd 4.2.2 fejezet). Az anyagot csak akkor kell UVCB anyagként („reakció termék”) azonosítani, ha az összetétele nem ismert kielégítő módon vagy rosszul jósolható. A reakciótermék

azonosításának az alapja a reakció kiindulási anyaga és a (bio)kémiai eljárás, amelynek során az anyag keletkezik.

Példák		
EK szám	EINECS név	CAS-szám
294-006-2	Nonán-dikarbonsav, reakciótermékek 2-amino-2-metil-1-propanollal	91672-02-5
294-148-5	Formaldehid, reakciótermékek dietilén-glikollal és fenollal	91673-32-4

A reakciótermékek egyik fő azonosítója a gyártási folyamat leírása. Az anyagok azonosításához az utolsó végső lépést vagy a leginkább jellemző lépést kell megadni. A kémiai folyamat típusát általánosságban kell megadni (például észterezés, lúgos hidrolízis, alkilezés, klórozás, szubsztitúció stb.) a releváns reakciókörülményekkel együtt. A biokémiai eljárásokat a reakció típusával és a reakciót katalizáló enzim nevével kell megadni.

### UVCB 3. altípus, ahol az alapanyag biológiai, a folyamat finomítás

Azok a biológiai eredetű UVCB anyagok, amelyek egy finomítási folyamatban keletkeznek, amikor is új molekulák nem jönnek létre, lehetnek például extraktumok, extraktumok frakciói, extraktumok koncentrátumai, tisztított extraktumok vagy biológiai eredetű anyagok feldolgozásának maradékai.

Ha az extraktumot további feldolgozásnak vetik alá, akkor az anyag már nem azonos az extraktummal, hanem egy másik anyagnak számít, amely egy UVCB altípusba tartozik, például az extraktum frakciója vagy maradéka. Ezeket az anyagokat a további feldolgozás paramétereivel kell specifikálni. Ha az extraktumot kémiai vagy biokémiai reakciókkal módosítják, amelyek során új molekulák (származékok) keletkeznek, az anyag azonosítását a UVCB 2. altípusára, vagy a jól azonosítható anyagokra (4.2. fejezet) vonatkozó előírások szerint kell elvégezni.

A további feldolgozásnak alávetett extraktumok ezen megkülönböztetése azzal a következménnyel járhat, hogy az anyag új neve és leírása eltér az EINECS listában szereplő névtől és leírástól. A lista összeállításakor nem tettek ilyen különbséget, és különböző oldószerekkel kapott és tovább feldolgozott mindenfajta extraktum szerepelhet egy címszó alatt.

Az UVCB anyagok ezen altípusának fő azonosítója annak az élőlénynek a családja, nemzetsége és faja, amelyből az anyagot előállították. Adott esetben meg kell nevezni az extrakcióhoz használt szövetet vagy szervet, például csontvelő, hasnyálmirigy; vagy szár, magvak vagy gyökér. Mikrobiológiai eredetű anyagoknál meg kell adni a tenyészetet és a faj genotípusát.

Ha az UVCB anyag egy másik fajból származik, akkor másik anyagnak kell tekinteni, még akkor is, ha a kémiai összetétel hasonló.

Példák	
EK szám	EINECS név
290-977-1	Oxidált börszőnyfa ( <i>Haematoxylon campechianum</i> ) extraktum
	<b>EK leírás</b> Ezt az anyagot a színindexben a C.I. 75290 oxidált számú tétel azonosítja
282-014-9	Hasnyálmirigy extraktumok, fehérjementesített

A második fő azonosító az anyag feldolgozási folyamata, például extrakció, frakcionálás, tisztítás vagy töményítés, vagy az az eljárás, amellyel a maradék összetétele befolyásolható. Tehát a különböző eljárásokkal finomított extraktumok, például különböző oldószerek használatával és különböző tisztítási lépések után nyert anyagok egymástól különbözőek.

Minél több lépése van a finomításnak, annál könnyebbé válik az anyag azonosítása a kémiai összetétele alapján. Ebben az esetben az eltérő kiindulási anyag vagy az eltérő eljárás nem vezet automatikusan különböző anyaghoz.

A biológiai eredetű anyagok egyik fő azonosító paramétere a megfelelő folyamatok leírása. Az extraktumok esetében az extrakciós eljárást olyan részletességgel kell megadni, amely az anyag azonosításához szükséges. Legalább az alkalmazott oldószert kell megadni.

Amikor további lépéseket használnak az anyagok gyártásánál, például frakcionálást vagy töményítést, akkor a feldolgozási folyamat releváns lépéseit kell megadni, például az extrakciót és frakcionálást a forrpon-tartománnyal.

#### **UVCB 4. altípus, ahol az eredet kémiai vagy ásványi, a feldolgozás finomítás**

A nem biológiai eredetű anyagok, amelyek tehát ásványok, ércek, szén, földgáz vagy nyersolaj vagy ezek származékai, vagy más vegyipari alapanyagok, és amelyek olyan feldolgozás termékei, ahol nem volt cél kémiai reakciók kiváltása, lehetnek (tisztított) frakciók, koncentrátumok, vagy ezen folyamatok maradékai.

A szenet és a nyersolajat desztillációs és gázosítási reakciókban használják, és sokféle anyagot gyártanak belőlük, például olajtermékeket, fűtőgázokat stb., és vannak maradékait, például a kátrány és a salak. Nagyon gyakran a desztillált vagy más módon frakcionált terméket azonnal további feldolgozásnak vetik alá, ez lehet kémiai reakció is. Ezekben az esetekben az anyagot az UVCB 2. altípusára leírt szabályok szerint kell azonosítani, mert az eljárás inkább jellemző az anyagra, mint az alapanyag.

Az olajtermékeknél egy speciális azonosító rendszert kell használni (lásd 4.3.2.2 fejezet). Ebbe a rendszerbe tartoznak frakciók és kémiai reakciótermékek is, mint anyagok.

Az UVCB anyagok 4. altípusába tartozó egyéb anyagok az ércek, amelyek fémtartalma elegendő ahhoz, hogy közvetlenül vagy extrakció után felhasználják. Sokféle metallurgiai eljárásban használják az érceket, például ömledékeket állítanak elő olvasztással, és vannak maradékok, például salak.

Az ásványokat, például a bentonitot vagy a kalcium karbonátot fel lehet dolgozni például savas oldással és/vagy kémiai kicsapással vagy ioncserélő oszlopon. Ha a kémiai összetétel teljeskörűen azonosítható, akkor az ásványok azonosítást a 4.2. fejezet megfelelő részében leírt tájékoztatás szerint kell végezni. Ha az ásványokat csak mechanikus eszközökkel dolgozzák fel, például őrléssel, szitálással, centrifugálással, flotációval stb., a termékeket ezután még

ugyanannak az anyagnak kell tekinteni.

A nem biológiai eredetű anyagok fő azonosító paramétere a megfelelő feldolgozási lépés(ek) leírása.

Frakciók esetében meg kell adni a frakcionálási eljárást, az izolált frakció forráspont-tartományával együtt, valamint szükség esetén a feldolgozás előző lépéseit.

A töményítésnél meg kell adni a folyamat típusát, például bepárlás, kicsapás stb., és meg kell adni továbbá a kiindulási koncentráció és a végső koncentráció arányát a főbb összetevőkre, valamint szükség esetén a feldolgozás előző lépéseit.

A nem biológiai eredetű maradékok fő azonosítója annak a folyamatnak a leírása, amelyből a maradék származik. A folyamat lehet bármilyen fizikai reakció, aminek maradéka van, például tisztítás, frakcionálás, töményítés.

### **4.3.1.3 Analitikai adatok**

Ha a spektrális adatok információt nyújtanak az UVCB anyagok összetételére, akkor ezeket az adatokat meg kell adni. Több spektroszkópiai módszert lehet használni (UV/VIS, infravörös, magmágneses rezonancia vagy tömegspektrum). A módszerek és alkalmazásaik folyamatosan változnak. Ezért a regisztráló felelőssége, hogy megfelelő spektroszkópiai adatokat szolgáltatasson.

Mellékelni kell egy ujjlenyomatként használható kromatogramot, amely jellemző az anyag összetételére. Az összetevők elválasztására más hiteles technikákat is lehet alkalmazni.

### **4.3.2 Az UVCB anyagok specifikus típusai**

Ebben a fejezetben az UVCB anyagok speciális csoportjairól adunk tájékoztatást: a különböző hosszúságú szénláncokat tartalmazó anyagokról (4.3.2.1); az olajból vagy ahhoz hasonló kiindulási anyagokból nyert termékekről (4.3.2.2); és az enzimekről (4.3.2.3).

#### **4.3.2.1 Különböző hosszúságú szénláncokat tartalmazó anyagok**

Ebbe az UVCB anyagcsoportba hosszú szénláncú alkilcsoportokat tartalmazó anyagokat sorolunk, például paraffinokat vagy olefineket. Ezek az anyagok származhatnak természetes zsírokból vagy olajokból, vagy szintetikusán állítják elő őket. A természetes zsírok növényekből vagy állatokból származnak. A növényekből származó hosszú szénláncú anyagokban rendszerint csak páros számú szénatomot tartalmazó szénláncok vannak, az állati eredetű hosszú szénláncú anyagok tartalmaznak (valamennyi) páratlan számú szénatomos láncot is. A szintetikusán előállított hosszú szénláncú anyagok páros és páratlan számú szénláncot egyaránt tartalmaznak.

#### **Azonosítók és megnevezési konvenciók**

Ebbe a csoportba olyan anyagok tartoznak, amelyeknek egyedi összetevői rendelkeznek egy közös tulajdonsággal: tartalmaznak egy vagy több hosszú láncú alkilcsoportot egy hozzá csatlakozó funkciós csoporttal. Az összetevők egymástól az alkilánc alább felsorolt tulajdonságai közül legalább az egyikben különböznek:

- A szénlánc hossza (a szénatomok száma)
- Telítettség
- Szerkezet (egyenes vagy elágazó)
- A funkciós csoport helyzete

Az alábbi leíró elemek használata lehetővé teszi az összetevők kielégítő kémiai azonosítását és szisztematikus megnevezését:

- **Alkil deszkriptor** amely megadja a szénatomok számát az alkilláncban, az csoport(ok) hosszát.
- **Funkciós deszkriptor**, azonosítja az anyag funkciós csoportját, például amin, ammónium, karbonsav.
- **Só deszkriptor**, azonosítja a sók kationját vagy anionját, például nátrium ( $\text{Na}^+$ ), karbonát ( $\text{CO}_3^{2-}$ ), klorid ( $\text{Cl}^-$ ).

### Alkil deszkriptor

- Az alkil deszkriptor  $\text{C}_{x-y}$  általában telített, egyenes alkilláncot jelent, amely minden lánc hosszát tartalmaz az x és y közötti szénatomszám tartományban, például  $\text{C}_{8-12}$  a  $\text{C}_8$ ,  $\text{C}_9$ ,  $\text{C}_{10}$ ,  $\text{C}_{11}$  and  $\text{C}_{12}$  szénhidrogénekre vonatkozik.
- Jelölni kell, ha az alkil deszkriptor csak páros vagy csak páratlan szénatomszámú alkil láncra vonatkozik, .  $\text{C}_{8-12}$  (páros számú)
- Jelölni kell, ha az alkil deszkriptor elágazó láncú alkil csoportokra (is) vonatkozik, például  $\text{C}_{8-12}$  (elágazó) or  $\text{C}_{8-12}$  (egyenes láncú vagy elágazó)
- Jelölni kell, ha az alkil deszkriptor telítetlen alkil csoportokra (is) vonatkozik, például  $\text{C}_{12-22}$  ( $\text{C}_{18}$  telítetlen)
- Egy szűk alkil lánc hossz eloszlás nem része egy szélesnek, és megfordítva, például  $\text{C}_{10-14}$  nem felel meg  $\text{C}_{8-18}$ -nak.
- Az alkil deszkriptor utalhat az alkil láncok eredetére is, például kókusz vagy faggyú. A szénláncok hosszának eloszlása ilyenkor felel meg az alapanyag eloszlásának.

Ezt a rendszert kell használni a változó hosszúságú szénláncokat tartalmazó anyagok leírására. A rendszer nem használható jól azonosítható anyagoknál, amelyek egy meghatározott kémiai szerkezettel azonosíthatók.

Az UVCB anyagok ezen típusának megnevezése az alkil deszkriptor, a funkciós deszkriptor és a só deszkriptor adatain alapul. Hasznosak lehetnek továbbá az eredetre és az eljárásra vonatkozó adatok az anyag azonosításának pontosításában.

Példák		
Deszkriptorok		Név
<b>Alkil deszkriptor</b>	alkil lánchossz C <sub>10-18</sub>	Zsírsavak (C10-18) kadmium sók
<b>Funkciós deszkriptor</b>	zsírsavak (karbonsav)	
<b>Só deszkriptor</b>	kadmium sók	
<b>Alkil deszkriptor</b>	di-C <sub>10-18</sub> -alkil-dimetil	di-C10-18-alkil-dimetilammónium klorid
<b>Funkciós deszkriptor</b>	ammónium	
<b>Só deszkriptor</b>	klorid	
<b>Alkil deszkriptor</b>	trimetil faggyú-alkil	trimetil-faggyúalkil-ammónium klorid
<b>Funkciós deszkriptor</b>	ammónium	
<b>Só deszkriptor</b>	klorid	

#### 4.3.2.2 Olajból vagy ahhoz hasonló kiindulási anyagokból nyert termékek

Az olajból vagy az olajhoz hasonló anyagokból, például szénből nyert anyagok (például olajtermékek) nagymértékben komplex és változó, vagy részben nem meghatározott összetételűek. Ebben a fejezetben az olajtermékeken mutatjuk be, hogy az UVCB anyagoknak ezt a speciális csoportját hogyan kell azonosítani. Ugyanezt a módszert kell alkalmazni az olajhoz hasonló alapanyagokból, például szénből származó termékekre is.

Az olajfinomító iparban az alapanyag lehet nyersolaj, vagy olyan finomítói anyagáram, amely egy vagy több feldolgozási folyamatban keletkezett. A végtermék összetétele függ az alapanyagként használt nyersolajtól (mivel a nyersolaj összetétele a származási hely függvényében változik) és a finomítási eljárásoktól. Ezért van egy természetes eredetű, a feldolgozási folyamatoktól független változatosság az olajtermékek összetételében [Rasmussen és munkatársai, 1999]

##### 1. Megnevezési konvenciók

Az olajtermékek azonosítására javasoljuk a megnevezésüket a meglévő nomenklatura szerint (ezt használja a US EPA is). Ez a név rendszerint tartalmazza a finomítási eljárás megnevezését, az anyagáram eredetét és az általános összetételt vagy jellemzőket. Ha az anyag 5 tömeg %-nál nagyobb arányban tartalmaz a 4-6 tagú kondenzált gyűrűn aromás hidrokarbonátokat, ezt az adatot a leírásban fel kell tüntetni. Az EINECS számmal rendelkező olajtermékek esetében az EINECS listán szereplő nevet kell használni.

##### 2. Azonosítók

Az olajtermékeket azonosító fogalmak és meghatározások általában tartalmazzák az anyagáram eredetét, a finomítási eljárást, az általános összetételt, a szénatomszámot, a forrási tartományt vagy más alkalmas fizikai jellemzőt, valamint a legnagyobb arányban jelen lévő szénhidrogén fajtát. [US EPA].

Meg kell adni a REACH IV. melléklet, 2. pont szerinti azonosítókat. Ismert tény, hogy az olajtermékek gyártásánál felhasználási specifikációk teljesítésére törekednek, és nem összetételbeli specifikációk teljesítésére. Ezért az olyan jellemzők, mint például a név, a szénlánc hossza, a forráspont, viszkozitás, a forrási tartományhatárok és más fizikai tulajdonságok



általában hasznosabbak, mint az összetételre vonatkozó adatok, az olajtermékek lehető leginkább egyértelmű azonosításához.

Bár a kémiai összetétel nem az elsődleges azonosítója az UVCB anyagoknak, az ismert főbb összetevőket (10% fölött) meg kell adni, és le kell írni olyan általános fogalmakkal, mint például a molekulásúly-tartomány, aromás vagy alifás jelleg, a hidrogénezettség foka vagy más lényeges információ. Azonosítani kell továbbá a nevével és a jellemző koncentrációjával minden olyan kisebb koncentrációjú összetevőt, amelyik befolyásolja a veszélyességi besorolást.

#### **4.3.2.3           Enzimek**

*JELLENLEG TÁRGYALÁS ALATT VAN A TÉMA, A JAVASLATOK KÉSŐBB ÉRKEZNEK*

## 5 KRITÉRIUMOK AZ ANYAGOK AZONOSSÁGÁNAK ELLENŐRZÉSÉRE

Amikor azt ellenőrizzük, hogy különböző gyártóktól és importőröktől származó anyagok azonosnak tekinthetők-e vagy sem, be kell tartani bizonyos szabályokat. Ezeket a szabályokat az EINECS létrehozásakor alkalmazták [Határozatok Kézikönyve, Anyagok EINECS bejelentésének kritériumai, ECB web-oldal; Geiss és munkatársai. 1992, Vollmer és munkatársai. 1998, Rasmussen és munkatársai. 1999], az anyagok azonosításának és megnevezésének közös alapjaként kell kezelni őket, és ezen az alapon kell keresni egy esetleges regisztráló-társat a szóban forgó anyaghoz. A következő bekezdésekben tájékoztatást adunk az anyagok azonosításáról és megnevezéséről. Azok az anyagok, amelyeket nem lehet azonosnak tekinteni, esetleg tekinthetők szerkezetileg hasonlóknak szakértői vélemények alapján. Az adatok megosztása ezekre az anyagokra lehetséges, ha az tudományosan indokolt. Ez azonban ennek a műszaki útmutató dokumentumnak nem témája, ezzel a RIP 3.4 foglalkozik.

- A “ $\geq 80\%$ ” szabály az egy-összetevőjű anyagoknál valamint a “ $< 80\%/\geq 10\%$ ” szabály a több-összetevőjű anyagoknál alkalmazandó.

Nem teszünk különbséget az ipari, tiszta és analitikai tisztaságú anyagok között. „Ugyanannak” az anyagnak lehet mind a három tisztasági fokozata valamilyen gyártási eljárásból, különböző mennyiségű szennyeződésekkel. A jól azonosítható anyagoknak azonban a főbb összetevő(ke)t kell tartalmazniuk, és csak a gyártási folyamatból származó szennyeződések jelenléte megengedett (a részleteket lásd a 4.2. fejezetben) valamint azoké az adalékoké, amelyek az anyag stabilizálásához szükségesek.

Ha egy jól azonosítható anyag két különböző gyártási eljárásból származó mintáinak szennyeződési profilja jelentős mértékben eltérő, akkor szakértőnek kell megítélni, hogy ezeknek a különbségeknek a figyelembe vételével az egyik anyaggal kapott vizsgálati eredmények átadhatók-e a többi SIEF tagnak.

- A vegyületek hidrátjai és vízmentes formái (anhidrátok) azonos anyagnak tekintendők.

Példák		
Név és összegképlet	CAS szám	Szabály
Rézsulfát ( $\text{Cu.H}_2\text{O}_4\text{S}$ )	7758-98-7	231-847-6
Kénsav réz (2+) só (1:1), pentahidrát ( $\text{Cu.H}_2\text{O}_4 \text{S} \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ )	7758-99-8	Ezt az anyagot leírja a saját vízmentes formája (EINECS 231-847-6)

A hidrátok és az anhidrátok kémiai neve eltérő és a CAS számuk sem ugyanaz. Ennek ellenére csak egy regisztrációs dossziét kell benyújtani. Regisztrálni a vízmentes formát kell. Ez a regisztráció a hidrátokra is vonatkozik.

- A savak vagy bázisok és sóik különböző anyagoknak tekintendők.

Példák		
EK szám	Név	Szabály
201-186-8	Perecetsav $C_2H_4O_3$	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak például a nátrium sójával. (EINECS 220-624-9)
220-624-9	Nátrium glikolát $C_2H_4O_3 \cdot Na$	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak a glikolsavval (EINECS 201-186-8)
202-426-4	2-Klóranilin $C_6H_6ClN$	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak például a 2-klóranilin hidrogénbromiddal ( $C_6H_6ClN \cdot HBr$ )

- Az egyes sók, (például nátrium, kálium) különböző anyagoknak tekintendők.

Példák		
EK szám	Név	Szabály
208-534-8	Nátrium benzoát $C_7H_5O_2 \cdot Na$	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak például a kálium sóval (EINECS 209-481-3)
209-481-3	Kálium benzoát $C_7H_5O_2 \cdot K$	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak például a nátrium sóval (EINECS 208-534-8)

- Az elágazó és egyenes alkil láncok különböző anyagoknak tekintendők

Példák		
EK szám	Név	Szabály
295-083-5	Foszforsav, dipentil észter, elágazó és egyenes láncú	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak a foszforsav, dipentil észter, elágazó láncú és a foszforsav, n-dipentil észter megnevezésű anyagokkal.

- Az elágazó csoportokat meg kell nevezni a IUPAC nevükkel. A további információ nélküli alkil csoportot tartalmazó anyagok csak az egyenes láncú származékot tartalmazzák.

Példák		
EK szám	Név	Szabály
306-791-1	Zsírsavak, C12-16	Csak az egyenes láncú, elágazás nélküli alkil csoportok tekintendők ugyanannak az anyagnak.
279-420-3	Alkoholok, C12-14	
288-454-8	Aminok, C12-18-alkilmetil	

- Azok az anyagok, amelyeknél az alkil csoport nevében más fogalom is szerepel, például izo, neo, elágazó nem tekinthetők azonosnak az ezeket a kifejezéseket a nevükben nem tartalmazó anyagokkal..

Példák		
EK szám	Név	Szabály
266-944-2	Gliceridek , C <sub>12-18</sub> Ennek az anyagnak az anyag neve: C12-C18 trialkil glicerid és SDA bejelentési száma: 16-001-00	Ez az anyag nem azonos C <sub>12-18-iso</sub> -val Az anyag telített alkilcsoportot tartalmaz, amely bárhol elágazhat

- Külön megjelölés hiányában az alkilcsoportok a savakban vagy alkoholokban stb. csak a telített láncokra vonatkoznak. A telítetlen láncokat meg kell nevezni, és külön anyagnak tekinteni.

Példák		
EK szám	Név	Szabály
200-313-4	Sztearinsav, tiszta C <sub>18</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>	Ez az anyag nem ugyanaz, mint Olajsav, tiszta, C <sub>18</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub> (EINECS 204-007-1)

- Királis centrummal rendelkező anyagok

Az egy királis centrummal rendelkező anyagnak van balra és jobbra forgató formája (enantiomerek). Ha nincs külön megjelölés, akkor az anyag a két forma azonos arányban jelen lévő (racém) elegye.

Példák		
EK szám	Név	Szabály
201-154-3	2-klór-1-propanol	Az egyedi enantiomerek: (R)-2-klór-1-propanol és (S)-2-klór-1-propanol nem tartoznak ezen címszó alá

Ha az anyag az egyik enantiomer formában dúsított, akkor a több-összetevőjű anyagokra vonatkozó szabályok szerint kell eljárni.

A több királis centrumot tartalmazó anyagoknak 2n formája létezik (ahol n a királis centrumok száma). Ezek különböző formák, eltérőek lehetnek a fizikai-kémiai, toxikológiai és ökotoxikológiai tulajdonságaik. Külön anyagoknak kell azokat tekinteni.

- Szervetlen katalizátorok

A szervetlen katalizátorok vegyes képet alkotnak. A célkitűzés meghatározása céljából a fémeket vagy nemesfém anyagokat egyedi anyagként kell kezelni (előírási utasítás nélkül).

Példák		
	Név	Szabály
	Kobalt oxid-alumínium oxid katalizátor	Különállóan kell azonosítani:  Kobalt (II) oxid  Kobalt (III) oxid  Alumínium oxid  Alumínium kobalt oxid

### Több-összetevőjű anyagok

A 67/548/EGK irányelv szabályozta az anyagok forgalomba hozatalát. Az anyag gyártási eljárásának nem volt jelentősége. Ezért a forgalmazott több-összetevőjű anyagokra akkor vonatkozott az EINECS, ha az összes egyedi komponens szerepelt az EINECS listáján. Például, a difluor-benzolok izomerjeinek elegyét az 1,2-difluor-benzol (206-680-7), 1,3-difluor-benzol (206-746-5) és 1,4-difluor-benzol (208-742-9) EINECS címszavak írták le, maga az izomer elegy nem szerepelt az EINECS listán.

Ezzel szemben a REACH a gyártott anyagok regisztrációját írja elő. Esetenként kell eldönteni, hogy az anyag előállításának különböző lépései közül melyek foglalják magukba a „gyártás” meghatározása (például a különböző tisztítási és desztillációs lépések). Ha egy több-összetevőjű anyagot állítanak elő, akkor azt kell regisztráltatni (és arra nem terjed ki az egyedi összetevők regisztrációja); például, ha a difluor-benzol izomerjeinek elegyét állítják elő, akkor a „difluor-benzolt” kell regisztráltatni, az izomerek elegyeként. A több-összetevőjű anyagok esetén azonban meg kell vizsgálni, hogy az anyag veszélyességi profilja kellőképpen leírható-e az egyedi összetevők adataival. Ha 1,2-difluor-benzolt, 1,3-difluor-benzolt és 1,4-difluor-benzolt egyedi izomereket állítanak elő és ezeket utólag összekeverik, akkor az egyedi izomereket kell regisztráltatni, és az izomerek elegyét készítménynek kell tekinteni.

Egy több-összetevőjű anyagot A, B és C főbb összetevőkkel nem tekinthetünk azonosnak egy másik több-összetevőjű anyaggal, amelynek főbb összetevői A és B, és nem tekinthetjük A, B, C és D keverékének sem.

- Egy több-összetevőjű anyagot nem tekinthetünk azonosnak egy olyan anyaggal, amely az egyedi összetevők egy kisebb csoportját tartalmazza

Példák		
EK szám	Név	Szabály
207-205-6	2,5-Difluor-toluol	Ez a két anyag nem azonos a difluor-toluol izomerjeinek elegyével, mert ez a két anyag csak az összes lehetséges izomer közül egy-egy.
207-211-9	2,4-Difluor-toluol	

A több-összetevőjű anyag regisztrációja nem jelenti egyúttal az egyedi összetevők regisztrációját.

Példák		
EK szám	Név	Szabály
208-747-6	1,2-Dibróm-etilén	Ez az anyag a cisz és transz izomerek eleyére vonatkozik. Az izomerek keverékének regisztrációja nem vonatkozik az egyedi izomerekre: "(1Z)-1,2-Dibrómo-etén és (1E)-1,2-Dibrómetén.

## UVCB anyagok

- Egy szűk összetevő-eloszlású, több-összetevőjű anyag nem tekintendő azonosnak egy szélesebb összetételű több-összetevőjű anyaggal, és ez megfordítva is igaz.

Példák		
EK szám	Név	Szabály
288-450-6	Aminok, C <sub>12-18-alkil</sub> , acetátok	Az "aminok, C <sub>12-14-alkil</sub> , acetátok" vagy "aminok, C <sub>12-20-alkil</sub> , acetátok" vagy "aminok, dodecil (C <sub>12-alkil</sub> ), acetátok" vagy a csak páros számú alkiláncot tartalmazó anyagok nem tekintendők azonosnak ezzel az anyaggal

- Egy fajjal/nemzetséggel jellemzett anyag nem azonos azzal az anyaggal, amelyet egy fajból/nemzetségből nyertek ki.

Példák		
EK szám	Név	Szabály
296-286-1	Gliceridek, napraforgó olaj, di-	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak a következőkkel: gliceridek, szója di- (EINECS: 271-386-8) vagy gliceridek, faggyú di- (EINECS: 271-388-9)
232-401-3	Lenolaj, epoxidált	Ez az anyag nem tekintendő azonosnak a következőkkel: lenolaj, oxidált, (EINECS: 272-038-8), vagy lenolaj, maleát, (EINECS: 268-897-3), vagy ricinusolaj, epoxidált (nem szerepel az EINECS-ben).

- A tisztított extraktum vagy a koncentrátum az extraktumtól eltérő anyagnak tekintendő.

<b>Példák</b>		
<b>EK szám</b>	<b>Név</b>	<b>Szabály</b>
232-299-0	Repceolaj Extrahált anyagok és fizikailag módosított származékai. Elsősorban zsírsavak, és pedig erukasav linolénsav és olajsav gliceridjeit tartalmazza (Brassica napus, Cruciferae)	A “(Z)-Dokoz-13-én karbonsav (erukasav)” nevű anyag a „repceolaj” nevű anyag összetevője. Az erukasav nem tekintendő azonosnak a repceolajjal, tiszta anyagként a repceolajból izolálják; Az erukasav maga szintén szerepel az EINECS listán. (204-011-3).  A palmitinsav, olajsav, linolsav, linolénsav, erukasav és eikozánsav izolált keveréke nem tekintendő azonosnak a repceolajjal, mert ezek az összetevők nem teszik ki a repceolaj egészét..

## 6 AZ ANYAGOK AZONOSSÁGA AZ ELŐZETES REGISZTRÁCIÓKOR ÉS A TÁJÉKOZÓDÁSKOR

Az anyagok azonosításának a módját ezen műszaki útmutató dokumentum 4. fejezetében adjuk meg. Az itt leírtak szerint kell eljárni, amikor eldöntjük, hogy egyes anyagok a REACH szempontjából azonosnak tekinthetők-e. A továbbiakban ismertetjük ezeknek a módszereknek a használatát a bevezetett anyagok előzetes regisztrációjánál és nem bevezetett anyagokkal kapcsolatos tájékozódásnál.

A 4. cikk értelmében a gyártó vagy az importőr viseli a teljes felelősséget a REACH Rendelet szerinti kötelezettségek teljesítéséért, de kijelölhet egy külső megbízottat a III. részben leírt minden eljárás véghezvitelére, például más gyártókkal és importőrökkel folytatott tárgyalásokra. Mivel a III. rész tartalmazza a nem bevezetett anyagokra, az előzetesen nem regisztrált, bevezetett anyagokra, valamint az előzetesen regisztrált, bevezetett anyagokra vonatkozó szabályokat, ebben a fejezetben a „potenciális regisztráló” kifejezés értelmezése: „potenciális gyártó”, „potenciális importőr”, „a potenciális gyártó vagy a potenciális importőr képviselőre kijelölt külső megbízott”.

### 6.1 ELŐZETES REGISZTRÁCIÓ

Az előzetes regisztrációs eljárásnak az a célja, hogy egyazon anyag potenciális regisztrálóit összehozza egymással, hogy el lehessen kerülni a vizsgálatok többszörös elvégzését, különösen a gerinces állatokon végzett vizsgálatokat. Az előzetes regisztrációt csak bevezetett anyagoknál lehet alkalmazni.

Az előzetes regisztráció a következő lépéseket tartalmazza:

1. A potenciális regisztrálónak be kell nyújtani egy korlátozott számú azonosító paramétert az Európai Vegyianyag Ügynökségnek;
2. A korlátozott számú azonosító paraméter alapján az Ügynökség készít egy listát az anyagokról, és a listát nyilvánosságra hozza a weblapján;
3. A lista alapján más adattulajdonosok benyújthatnak további, az anyagra vonatkozó információkat az Ügynökségnek;
4. A Ügynökség a listán szereplő és megegyező azonosító paraméterekkel rendelkező anyagok potenciális regisztrálóit összehozza egymással és segíti a kapcsolat létrehozását az adattulajdonosokkal. A potenciális regisztrálónak kell bizonyítaniuk, hogy az anyaguk azonos egy, a listán szereplő másik anyaggal. Ezt ezen műszaki útmutató dokumentum 4. fejezetében leírt szabályok szerint kell megtenni;
5. Azok a potenciális regisztrálók, akik ugyanarról az anyagról adatokat adtak meg a Ügynökségnek, résztvevői lesznek az Anyaginformációs csereforumnak (Substance Information Exchange Forum, SIEF) az azonosság megállapítása után.

Az első lépésben a potenciális regisztrálónak egy korlátozott számú azonosító paramétert kell benyújtania (26. cikk):

- EK szám;
- CAS szám és név;
- a IUPAC nomenklatura szerinti kémiai név vagy más nemzetközi kémiai név;



- egyéb nevek;

Az adatok benyújtását egy IT rendszer fogja segíteni. A REACH-IT weboldalon potenciális regisztráló lépésenként haladhat végig, úgy adhatja meg az anyagát azonosító, fent megnevezett adatokat.

Az anyagot azonosító további adatok (például a szennyeződések azonosítása) nem része ennek a lépésnek. A potenciális regisztráló megadhat ezen kívül néhány, más anyagokra vonatkozó azonosító paramétert, amelyekre kvantitatív szerkezet-hatás vagy kategória összefüggések vonatkoznak.

## 6.2 TÁJÉKOZÓDÁS

A nem bevezetett anyagoknál, vagy a bevezetett, de előzetesen nem regisztrált anyagoknál, a potenciális regisztráló kötelessége, hogy tájékozódjon a regisztráció előtt a Ügynökségnél, hogy ugyanezt az anyagot regisztrálták-e már (24. cikk). A tájékozódásnak a következőket kell tartalmaznia:

- A potenciális regisztráló azonosítása, a IV. melléklet 1. pontja szerint, a felhasználási helyek kivételével;
- az anyag azonosítása, a IV. melléklet 2. pontja szerint;
- melyik megkívánt adat megszerzése igényel új vizsgálatokat, beleértve a gerinces állatokon végzett vizsgálatokat, amelyeket a potenciális regisztrálónak kell elvégeznie;
- melyik megkívánt adat megszerzése igényel egyéb új vizsgálatokat, amelyeket a potenciális regisztrálónak kell elvégeznie.

Az adatok benyújtását egy IT rendszer és a IUCLID 5 fogja segíteni. A potenciális regisztrálónak meg kell adnia az anyag azonosítóit és a nevét az ezen műszaki útmutató dokumentum 4. fejezetében előírt szabályoknak megfelelően.

Az Ügynökség eldönti, hogy ugyanezt az anyagot regisztrálták-e eddig. Ezt is az ezen műszaki útmutató dokumentum 4. fejezetében előírt szabályoknak megfelelően kell végezni. Az eredményről tájékoztatni kell a potenciális regisztrálót.

## 7 PÉLDÁK

Az alábbiakban szereplő példákon be szeretnénk mutatni, hogy a felhasználók hogyan tudják az ezen műszaki útmutató dokumentumban leírtakat alkalmazni. Nem jelentenek viszont semmiféle precedenst a REACH-ben előírt kötelezettségekkel kapcsolatban.

Ahogy a műszaki útmutató dokumentum egésze, ezek a példák is a Tanács 2005. december 19-i keltű REACH javaslatán alapulnak. Amikor majd a REACH rendelet végleges szövegét elfogadják, akkor a példákat is át kell újra nézni.

Az ismertetett példák a következők:

- „Dietyl-peroxidikarbonát” példa az olyan egy-összetevőjű anyagra, amely tartalmaz egy oldószert, és ez egyúttal stabilizáló adalékként is szolgál (7.1. fejezet);
- „Zolimidin” példa egy olyan anyagra, amelyet egy-összetevőjűként és több-összetevőjűként is lehet azonosítani (7.2. fejezet);
- A gyártási reakció közben keletkező „izomer elegy” a több-összetevőjű anyagok példája (7.3. fejezet);. Ezt az anyagok ezelőtt az egyedi izomerek külön EINECS címszava írta le;
- „AH Illatanyag” olyan anyag példája, amelyet többféle minőségben állítanak elő, és amelyet öt összetevő keverékeként lehet leírni, az egyes összetevők koncentráció tartományaival (7.4. fejezet). Ez egyben példa arra az esetre is, amikor indokolt az eltérés a 80%-os és a 10%-os szabálytól;
- Nem fémes „ásványok” a montmorillonit a példa a jól azonosítható anyagokra, amelyhez további fizikai adatokat kell megadni (7.5. fejezet);
- Egy „levendulaolaj” szolgál példaként a növényekből előállított UVCB anyagokra (7.6. fejezet).
- „Krizantémolaj és az abból izolált izomerek” példái a további feldolgozásnak alávetett biológiai eredetű UVCB anyagoknak (7.7. fejezet);
- „Fenol, izopropilénezett, foszfát” példa a változó UVCB anyagokra, amelyeket nem lehet teljes mértékben meghatározni (7.8. fejezet);
- „Kvaterner ammónium vegyületek” a példák azokra az anyagokra, amelyekben a szénláncok hossza változik (7.9. fejezet);
- Két példa az „olajtermékekre” a 7.10. fejezetben: egy benzinkeverék és gázolajok;
- Két példa arra a 7.11. fejezetben, hogy hogyan kell az enzimeket azonosítani: lakkáz és amidáz.

### 7.1 DIETIL-PEROXI-DIKARBONÁT

A „Dietyl-peroxi-dikarbonát” nevű anyagot (EK 238-707-3, CAS 14666-78-5,  $C_6H_{10}O_6$ ) 18%-os izododekános (EK 250-816-8, CAS 31807-55-3) oldatban állítják elő. Az izododekán egyúttal a robbanóképességet szabályozó stabilizáló szerként is működik. 27% a legnagyobb koncentráció, amely mellett az anyagot biztonságosan lehet kezelni.

Hogyan kell ezt az anyagot azonosítani és megnevezni a regisztrációhoz?

Az anyagok REACH-beli meghatározása értelmében kizárandók azok az oldószerek, amelyeket el lehet távolítani anélkül, hogy az anyag stabilitása megváltozna vagy az összetétele

megváltozna. A fenti esetben az izododekán stabilizáló szerként is működik, és nem lehet teljes mértékben eltávolítani az anyag robbanóképessége miatt, ezért az izododekánt adaléknak is kell tekinteni, nemcsak oldószernek. Az anyagot azonban továbbra is egy-összetevőjű anyagnak kell tekinteni. Ezért az anyagot oldatként kell regisztráltatni, abban a legmagasabb koncentrációban, amely még lehetővé teszi biztonságos kezelését:

Dietil-peroxi-dikarbonát (felső határ: 27%; jellemző koncentráció: 22%).

## 7.2 ZOLIMIDIN

A gyártott metanolos oldat ‘zolimidint’ (EK 214-947-4; CAS 1222-57-7,  $C_{14}H_{12}N_2O_2S$ ) és ‘imidazolt’ (EK 206-019-2; CAS 288-32-4,  $C_3H_4N_2$ ) tartalmaz. A “metanol” oldószer eltávolítása és a gyártási eljárás optimalizálása után az anyag tisztasági még széles tartományban változik: 74 – 86% zolimidin és 4-12% imidazol.

Hogyan kell ezt az anyagot azonosítani és megnevezni a regisztrációhoz?

Az anyagok REACH-beli meghatározása értelmében kizárandók azok az oldószerek, amelyeket el lehet távolítani anélkül, hogy az anyag stabilitása megváltozna, vagy az összetétele megváltozna. A fenti esetben a metanol nehézség nélkül eltávolítható, ezért az oldószer-mentes anyagot kell regisztráltatni.

Egy anyagot általában akkor tekintünk egy-összetevőjűnek, ha egy főbb összetevő legalább 80%-ban van jelen. Egy anyagot akkor tekintünk több-összetevőjűnek, egynél több főbb összetevő van jelen legalább 10%-os de 80%-nál kisebb koncentrációban. A fenti példa határeset, mivel a küszöbértéket a koncentrációk egyszer elérik, máskor nem. Ezért az anyagot tekinthetjük egy-összetevőjű “zolimidinnek”, vagy több-összetevőjű anyagnak, “zolimidin” és “imidazol” keverékének.

Az ilyen határesetekben a főbb összetevők jellemző koncentrációi alapján lehet eldönteni, hogy hogyan lehet ezt az anyagot a legjobban leírni, például:

- (1) Ha a zolimidin jellemző koncentrációja = 77% és az imidazolé = 11%, akkor az anyagot célszerű az anyagot több-összetevőjű anyagnak, a zolimidin és az imidazol keverékének tekinteni;
- (2) Ha a zolimidin jellemző koncentrációja = 85% és az imidazolé = 5%, akkor az anyagot célszerű egy-összetevőjű anyagnak, “zolimidinnek” tekinteni.
- (3) Ha nem lehet a jellemző koncentrációt megállapítani, mert a gyártási folyamatban ellenőrizhetetlenül széles koncentráció-tartományok fordulnak elő, akkor célszerű az anyagot több-összetevőjű anyagnak tekinteni.

## 7.3 IZOMEREK KEVERÉKE

A kérdéses anyag két izomer keveréke, amely a gyártási folyamat során keletkezik. Az egyedi izomerek szerepeltek az EINECS-ben. A 67/548/EGK irányelv az anyagok forgalomba helyezését szabályozta. Mivel a gyártás módjának nem volt jelentősége, a keveréket az EINECS-ben a két egyedi izomerre vonatkozó címszó írta le. A REACH a gyártott anyagok regisztrációját írja elő. Esetenként kell eldönteni, hogy az anyag előállításának különböző lépéseire milyen mértékben a „gyártás” fogalma. Ha az izomer elegyet több-összetevőjű anyagnaként jegyeztetjük be (a 4.2.2. fejezetben leírtak szerint), akkor nem kell az anyagot vizsgálatnak alávetni, ha a

veszélyességi profilja kielégítő módon leírható az egyedi összetevőkre vonatkozó adatokkal. Hivatkozni kell azonban az egyedi izomerek EINECS címszavaira, a bevezetett jelleg bemutatására.

## 1. Név és más azonosítók

<b>IUPAC név vagy (az anyag) más nemzetközi kémiai neve</b>	Keverék: 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]biszetanol és 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]biszetanol
<b>(Az anyag) más nevei)</b>	2,2'-[[[metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]biszetanol Etanol, 2,2'-[[[metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]bisz- és víz reakcióelegye Etanol, 2,2'-[[[metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]bisz- (9CI) izomer vegyület
<b>(Az anyag) EK száma EK név EK leírás</b>	A keverékre nem létezik EK szám, mivel a keveréket nem jelentették be az EINECS-be. Az anyagot azonban az összetevők (279-502-9, 279-501-3) EINECS címszavai együtt leírták. Ezért a keveréket bevezetett anyagnak kell tekinteni.
<b>(Az anyag) CAS száma CAS név</b>	nincs nincs
<b>(A összetevő) EK szám EK név EK leírás</b>	279-502-9 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]biszetanol /
<b>(B összetevő) EK szám EK név EK leírás</b>	279-501-3 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]biszetanol /
<b>(A összetevő) CAS szám CAS név</b>	80584-89-0 Etanol, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]bisz-
<b>(B összetevő) CAS szám CAS név</b>	80584-88-9 Etanol, 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]bisz-
<b>Egyéb azonosító kód Hivatkozás</b>	ENCS szám 5-5917

## 2. Összetétel – főbb összetevők

Főbb összetevők						
	IUPAC név	CAS szám	EK szám	Összegképlet Hill módszer	Jellemző konc. (tömeg %)	Konc. tartomány (tömeg %)
<b>A</b>	Etanol, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]bis-	80584-89-0	279-502-9	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	60	50-70
<b>B</b>	Etanol, 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]bis-	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

Főbb összetevők	
	Egyéb nevek:
<b>A</b>	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]biszetanol
<b>B</b>	2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]biszetanol

Főbb összetevők		
	EK név	EK leírás
<b>A</b>	2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]biszetanol	/
<b>B</b>	2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]biszetanol	/

Főbb összetevők		
	CAS név	CAS számok
<b>A</b>	Etanol, 2,2'-[[[4-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]bisz-	80584-89-0
<b>B</b>	Etanol, 2,2'-[[[5-metil-1H-benzotriazol-1-yl)metil]imino]bisz-	80584-88-9

Főbb összetevők			
	Összegképlet CAS módszer	Szerkezeti képlet	SMILES kód
<b>A</b>	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1cc(C)ccc12</chem>
<b>B</b>	/		<chem>OCCN(CCO)Cn2nnc1c(C)cccc12</chem>

Főbb összetevők		
	Molekulasúly [g mol <sup>-1</sup> ]	Molekulasúly-tartomány
<b>A</b>	250	/
<b>B</b>	250	/

## 7.4 AH ILLATANYAG

Az AH Illatanyag gamma (izo-alfa) metil jonont és annak izomerjeit tartalmazza. Három különböző minőségben állítják elő (A, B és C minőség), ezek az izomerek arányában különböznek egymástól.

A különböző termékminőségeket a következő táblázatban foglaltuk össze:

AH Illatanyag, a különböző termékminőségek összetétele

Koncentráció tartomány [%]	A minőség	B minőség	C minőség	Teljes tartomány
gamma (izo-alfa) metil jonon	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
delta (izo-béta) metil jonon	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
alfa n-metil jonon	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
gamma n-metil jonon	0.5 - 1.5	2 - 4	2 - 4	0.5 - 4
béta n-metil jonon	0.5 - 1.5	4 - 6	5 - 15	0.5 - 15
pszeudo metil jononok	0.5 - 1.5	1 - 3	1 - 3	0.5 - 3

Az anyag azonosítására több lehetőség van:

- Az A minőség legalább 80% gamma (izo-alfa) metil jonont izomert tartalmaz és ezért egy-összetevőjű anyagnak lehet tekinteni gamma (izo-alfa) metil jonon izomer alapján, a többi izomer pedig szennyeződésnek számít..
- A B és C minőség 80%-nál kevesebb gamma (izo-alfa) metil jonon izomert és legalább 10% egyéb izomert tartalmaz. Ezért ezeket több-összetevőjű anyagoknak lehet tekinteni:
  - B minőség: gamma(izo-alfa) metil jonon (65–75%) és alfa-n metil jonon (10-20%) keveréke, a többi izomer szennyeződés.
  - C minőség: gamma(izo-alfa) metil jonon (50-60%) és alfa-n metil jonon (20-30%) keveréke [és lehet béta n-metil jonon (5-15%)], a többi izomer szennyeződés.

Az összetétel változó és néha egy komponens 10% vagy azt meghaladó koncentrációban van jelen (ezért főbb összetevőnek tekintik a szabály szerint), másszor pedig 10% alatti koncentrációban (ezért szennyeződésnek tekintik a szabály szerint).

Az egyes minőségeket külön is be lehet jegyeztetni. Ez három regisztrációt jelent. Az adatok egyeztetése azonban indokolt.

További lehetőségek:

- Egy regisztráció egy-összetevőjű anyagként két alminőséggel. Ebben az esetben az alminőségek eltérnek a 80%-os szabálytól (lásd 4.2.1 fejezet);
- Egy regisztráció meghatározott reakcióelegyként 5 izomerrel (több-összetevőjű anyag). Ebben az esetben egyes izomerek (főbb összetevők) eltérnek a 10%-os szabálytól, amely szerint a főbb összetevőket és a szennyeződéseket megkülönböztetik (lásd 4.2.2. fejezet).
- Egy regisztráció meghatározott reakcióelegyként ahol az összetétel változásai megfelelnek az egyes izomerek teljes tartományainak.

Fontos lehet annak figyelembe vétele, hogy

- A három minőség ugyanolyan vagy nagyon hasonló fizikai-kémiai tulajdonságokkal rendelkezik.
- A három minőség hasonló felhasználási és expozíciós forgatókönyvvel rendelkezik.
- Az összes minőséget veszélyesség szerint egyformán kell besorolni és címkézni, a biztonsági adatlapok és a biztonsági jelentések tartalma azonos.
- A rendelkezésre álló vizsgálati adatok (és a jövőben végzendő vizsgálatok) tartalmazzák a háromféle minőség változatait.

Ebben a példában az anyagnak a 5 izomer reakcióelegyeként való azonosítását (több-összetevőjű anyag) írjuk le. Indokolásra szükség van, mert eltérünk a 80%-os szabálytól (lásd a 4.2.1 fejezetet) és a 10%-os szabálytól 10% (lásd a 4.2.2 fejezetet). Mivel mindegyik minőségét mint olyat állítják elő, a három minőség mindegyikének az összetételét meg kell adni a regisztrációs dossziében. Formai feltételek miatt azonban legalább két regisztrációra lehet szükség: (1) Gamma (izo-alfa) metil jonon és (2) Gamma (izo-alfa) metil jonon és alfa-n-metil jonon keveréke.

### Az anyag azonosítása

Az AH Illatanyag három különböző minőségben készül (A, B és C) azonos minőségi és különböző mennyiségi összetételben. Mind a három minőség egy regisztrációs dossziében szerepel, több-összetevőjű anyagként. Ez azt is jelenti, hogy nem érvényesül szigorúan a 80%-os és a 10%-os szabály, a regisztráció ennek ellenére indokolt, mert (1) a rendelkezésre álló vizsgálati adatok leírják mind a három minőség változatait, (2) a három minőség fizikai-kémiai tulajdonságai nagyon hasonlóak, (3) a három minőség veszélyességi besorolása és címkézése azonos (ezért a biztonsági adatlapok azonosak), és (4) a három minőség azonos használati és expozíciós forgatókönyvvel rendelkezik (tehát a kémiai biztonsági jelentések azonosak).

### 1. Nevek és más azonosítók

IUPAC név és más nemzetközi kémiai név	keverék: 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cyclohexén-1-yl)but-3-en-2-on; 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cyclohexén-1-yl)but-3-en-2-on; [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cyclohexén-1-yl)pent-1-en-3-on; 1-(6,6-metil-2-metilenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-on; 1-(2,6,6-trimetil-1-cyclohexén-1-yl)pent-1-en-3-on
Egyéb nevek	Metil Jonon Gamma A Minőség Metil Jonon Gamma B Minőség Metil Jonon Gamma C Minőség
EK szám	nincs
EK név	/
EK leírás	/
CAS szám	nincs
CAS név	/

## 2. Összetétel – főbb összetevők

Elméletileg léteznek további enantiomerek. A következő izomerek lettek analizálva:

Főbb összetevők						
	IUPAC név	CAS szám	EK szám	Összegképlet Hill módszer	Min. konc. (tömeg %)	Max. konc. (tömeg %)
<b>A</b>	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cyclohexén-1-yl)but-3-en-2-on	127-51-5	204-846-3	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	50	85
<b>B</b>	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cyclohexén-1-yl)but-3-en-2-on	79-89-0	201-231-1	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	3	10
<b>C</b>	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cyclohexén-1-yl)pent-1-en-3-one	127-42-4	204-842-1	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	3	30
<b>D</b>	1-(6,6-metil-2-metilenecyclohex-1-yl)pent-1-en-3-on	nincs	nincs	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	0.5	4
<b>E</b>	1-(2,6,6-trimetil-1-cyclohexén-1-yl)pent-1-en-3-on	127-43-5	204-843-7	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	0.5	15

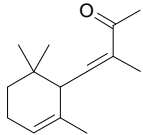
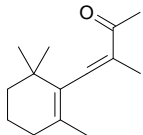
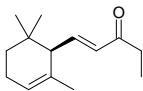
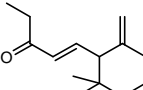
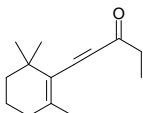
Főbb összetevők	
	Egyéb nevek:
<b>A</b>	alfa-izo-metil jonon; gamma metil jonon
<b>B</b>	béta-izo-metil jonon; delta metil jonon
<b>C</b>	alfa-n-metil jonon
<b>D</b>	gamma-n-metil jonon
<b>E</b>	béta-n-metil jonon

Főbb összetevők		
	EK név	EK leírás
<b>A</b>	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cyclohexén-1-yl)-3-buten-2-on	/
<b>B</b>	3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cyclohexén-1-yl)-3-buten-2-on	/
<b>C</b>	[R-(E)]-1-(2,6,6-trimetil-2-cyclohexén-1-yl)pent-1-en-3-on	/
<b>D</b>	1-(2,6,6-trimetil-2-cyclohexén-1-yl)pent-1-en-3-on	/
<b>E</b>	1-(2,6,6-trimetil-1-cyclohexén-1-yl)pent-1-en-3-on	/



Főbb összetevők		
	CAS név	CAS szám
<b>A</b>	3-Butén-2-on, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-2-cyclohexén-1-yl)-	127-51-5
<b>B</b>	3-Butén-2-on, 3-metil-4-(2,6,6-trimetil-1-cyclohexén-1-yl)-	79-89-0
<b>C</b>	1-Pentén-3-on, 1-[(1R)-2,6,6-trimetil-2-cyclohexén-1-yl]-, (1E)-	127-42-4
<b>D</b>	nincs	nincs
<b>E</b>	1-Pentén-3-on, 1-(2,6,6-trimetil-1-cyclohexén-1-yl)-	127-43-5

Főbb összetevők		
	Egyéb azonosító kódok	Hivatkozás
<b>A</b>	2714 07.036	FEMA EU Illatanyag Jegyzék
<b>B</b>	07.041	EU Illatanyag Jegyzék
<b>C</b>	2711 07.009	FEMA EU Illatanyag Jegyzék
<b>D</b>	nincs	nincs
<b>E</b>	2712 07.010	FEMA EU Illatanyag Jegyzék

Főbb összetevők			
	Összegképlet CAS módszer	Szerkezeti képlet	SMILES kód
<b>A</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		O=C(C(=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)C)C
<b>B</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		O=C(C(=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)C)C
<b>C</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		O=C(C=CC(C(=CCC1)C)C1(C)C)CC
<b>D</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		C=C1CCCC(C)(C)C1/C=C/C(=O)CC
<b>E</b>	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O		O=C(C=CC(=C(CCC1)C)C1(C)C)CC

Főbb összetevők		
	Molekulasúly / g mol <sup>-1</sup>	Molekulasúly tartomány
<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. Összetétel – szennyeződések és adalékok

Szennyeződések						
	IUPAC név	CAS szám	EK szám	Összegképlet	Jellemző konc. (tömeg%)	Konc. tartomány (tömeg %)
<b>F</b>						
meg nem nevezett szennyeződések száma: a meg nem nevezett szennyeződések összes koncentrációja:				11 (pszeudo metil jononok) 0.5 – 3 tömeg %		
Adalékok						
	IUPAC név	CAS szám	EK szám	Összegképlet	Jellemző konc. (tömeg%)	Konc. tartomány (tömeg %)
<b>G</b>	Butilezett hidroxitoluol (BHT)	128-37-0	204-881-4	C15H24O	0.1	0.05 – 0.15

### 4. A különböző minőségek adatai

A következő táblázatban megadjuk az öt főbb összetevő koncentráció-tartományait a három különböző minőségben:

Koncentráció tartomány [%]	A minőség	B minőség	C minőség
gamma (izo-alfa) metil jonon	80 - 85	65 - 75	50 - 60
delta (izo-béta) metil jonon	6 - 10	3 - 7	3 - 7
alfa n-metil jonon	3 - 11	10 - 20	20 - 30
gamma n-metil jonon	0.5 - 1.5	2 - 4	2 - 4
béta n-metil jonon	0.5 - 1.5	4 - 6	5 - 15
pszeudo metil jonon	0.5 - 1.5	1 - 3	1 - 3

## 7.5 ÁSVÁNYOK

### 7.5.1 Bevezetés

Az ásványok, definíció szerint szervesen összetevőkkel rendelkező anyagok a Föld kérgében, jellemző a kémiai összetételük, a kristályformájuk (erősen kristályostól az amorfig), és fizikai-kémiai tulajdonságaik.

Az ásványokat nem kell regisztráltatni, ha azokat csak mechanikus módszerekkel bányászták ki, tehát nem módosították kémiaileg, sem a kémiai összetételüket, sem a kristályszerkezetüket. A feldolgozott ásványokat, például a tisztított ásványi összetevőket, regisztráltatni kell.

Egyes ásványokat egyértelműen le lehet írni a kémiai összetételükkel (lásd a 4.2.1. és 4.2.2. fejezeteket az egy-összetevőjű és a több-összetevőjű anyagokra), más esetekben a kémiai összetétel önmagában nem elegendő az anyag egyértelmű azonosítására (lásd a 4.2.3 fejezetet).

Ellentétben más egy-összetevőjű és több-összetevőjű anyagokkal, sok ásvány azonosítása a kémiai összetétel és a (például röntgendiffrakcióval megállapított) belső szerkezeten alapul, mert ezek együttesen jellemzik az ásványt, és határozzák meg annak fizikai-kémiai tulajdonságait.

Hasonlóan más több-összetevőjű anyagokhoz, az ásványok CAS számát használni kell a regisztrált anyag (például a szervesen összetevők kombinációja) azonosításának részeként. Az (ásványtanilag meghatározott) szervesen összetevők CAS számait kell használni a különböző összetevők leírására. Ha egy egyedi szervesen összetevőt állítanak elő (egy-összetevőjű anyagot), akkor ennek a CAS számát kell használni a regisztrált anyagra. Például:

- A kaolin ásvány (EINECS: 310-194-1, CAS: 1332-58-7) alap összetevője a primer és szekunder kaolinit (EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7), amely egy hidratált alumíniumszilikát agyag.

Ha a kaolint finomítási eljárásnak vetik alá, a kaolon egyedi összetevőinek, például a kaoliniteknek az előállítására, akkor a regisztrált anyag CAS- / EINECS-számai a következők lesznek: EINECS: 215-286-4, CAS: 1318-74-7.

- A bentonit ásvány (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9), az EINECS leírása szerint "Kolloid agyag. Főleg montmorillonitot tartalmaz", nagy koncentrációban tartalmaz Montmorillonit szervesen összetevőt (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) de nem kizárólag ezt.

Abban az esetben, ha tiszta montmorillonitot (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) állítanak elő, akkor a montmorillonit CAS számát kell használni a bejegyeztendő anyag azonosítására.

Hangsúlyozzuk, hogy a bentonit (EINECS: 215-108-5, CAS: 1302-78-9) és a montmorillonit (EINECS: 215-288-5, CAS: 1318-93-0) nem tekintendő egy anyagnak.

Tehát az ásványokat általában a szervesen összetevő(i) kombinációjaként nevezik meg. Tekinthetők egy-összetevőjű és több-összetevőjű anyagoknak (erről az általános tájékoztató 4.2.1 és 4.2.2 fejezetekben található). Egyes ásványokat nem lehet egyértelműen leírni a kémiai összetételükkel, hanem további fizikai adatokat vagy feldolgozási paramétereket kell megadni a kielégítő azonosításhoz (lásd 4.2.3 fejezet). Az alábbi táblázatban bemutatunk néhány példát.

Ásványok példái

Név	CAS	EINECS	Kiegészítő leírás <sup>7</sup>
Krisztoballit	14464-46-1	238-455-4	O <sub>2</sub> Si (Kristályszerkezet: köbös szimmetria)
Kvarc	14808-60-7	238-878-4	O <sub>2</sub> Si (Kristályszerkezet: romboéderes szimmetria)
Kieselguhr	61790-53-2	-	Más nevei: Diatomit, Kieselgur and Celite Leírás: Lágy, szilícium tartalmú szilárd anyag, kisméretű prehisztorikus vízi növények vázai alkotják. Főleg szilíciumdioxidot tartalmaz..
Dolomit	16389-88-1	240-440-2	CH <sub>2</sub> O <sub>3</sub> .1/2Ca.1/2Mg
A földpát csoport ásványai	68476-25-5	270-666-7	Szervetlen anyag, magas hőmérsékleten végzett égetés reakcióterméke, amelynek során alumínium oxid, bárium oxid, kalcium oxid, magnézium oxid, szilícium dioxid and stroncium oxid változó mennyiségben homogén módon és ionosan egymásba hatol és kristályos mátrixot képez.
Talkum	14807-96-6	238-877-9	Mg <sub>3</sub> H <sub>2</sub> (SiO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>
Vermikulit	1318-00-9	-	(Mg <sub>0,33</sub> [Mg <sub>2,3</sub> (Al <sub>0,1</sub> Fe <sub>0,1</sub> ) <sub>0,1</sub> ](Si <sub>2,33-3,33</sub> Al <sub>0,67-1,67</sub> )(OH) <sub>2</sub> O <sub>10</sub> .4H <sub>2</sub> O)

Ásványokhoz szükséges analitikai adatok

<b>Elemi összetétel</b>	A kémiai összetétel általános áttekintést nyújt az ásvány összetételéről, függetlenül az összetevők számától és arányaiktól az ásványban. A kémiai összetételt egyezményesen oxidokban adják meg.
<b>Spektrális adatok (röntgendiffrakció vagy azzal egyenértékű módszer)</b>	A röntgendiffrakció vagy más módszer az ásványokat krisztallográfiai szerkezetük alapján azonosítja. Az ásványt azonosító jellemző röntgendiffrakciós vagy infravörös csúcsokat meg kell adni, az analitikai módszer rövid leírásával vagy irodalmi hivatkozással.
<b>Jellemző fizikai-kémiai tulajdonságok</b>	Az ásványok jellemző fizikai-kémiai tulajdonságokkal rendelkeznek, amelyek alapján az azonosításuk teljessé tehető, például: - Nagyon kis keménység - Duzzadóképeség - Diatomit alakja (optikai mikroszkóp) - Nagyon nagy sűrűség - Fajlagos felület (nitrogén adszorpció)

<sup>7</sup>

Meghatározása a 2001/30/EK bizottsági irányelv szerint (OJ L 146, 31.05.2001, p.1)

## 7.5.2 Montmorillonit

A bentonit példa az olyan természetes eredetű több-összetevőjű anyagokra, amelyet azonosítani lehet a kémiai összetételével és néhány fizikai jellemzőjének a megadásával. Ha a bentonit ásványt (EINECS 215-108-5, CAS 1302-78-9) csak kibányásszák mechanikus eszközökkel, akkor azt nem kell regisztráltatni. Ha azonban a bentonitot feldolgozzák és ennek eredményeképpen a montmorillonit összetevő (EINECS 215-288-5, CAS 1318-93-0) lesz jelen főbb összetevőként, akkor montmorillonitot kell regisztráltatni. Egy-összetevőjű anyagként kell azonosítani további azonosítókkal (lásd 4.2.1. és 4.2.3. fejezet).

### 1. Név és más azonosítók

<b>IUPAC név és más nemzetközi kémiai név</b>	Montmorillonit
<b>Egyéb nevek</b>	/
<b>EK szám</b>	215-288-5
<b>EK név</b>	Montmorillonit
<b>EK leírás</b>	/
<b>CAS szám</b>	1318-93-0
<b>CAS név</b>	Montmorillonit

### 2. Összetétel – főbb összetevő

Főbb összetevők			
Név	CAS szám	EK szám	Koncentráció tartomány tömeg %
Montmorillonit	1318-93-0	215-288-5	85-95
<b>Az anyag jellemző szerkezete vagy összegképlete</b>			
Hidratált nátrium kalcium alumínium magnézium szilikát hidroxid (Na,Ca) <sub>0.3</sub> (Al,Mg) <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub> x 4H <sub>2</sub> O			
<b>Összetétel:</b>			
Nátrium: 0.84% (1.13 % Na <sub>2</sub> O)			
Kalcium: 0.73% (1.02% CaO)			
Alumínium: 9.83% (18.57% Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> )			
Hidrogén: 4.04% (36.09% H <sub>2</sub> O)			
Oxigén: 64.11%			
<b>Molekulásúly:</b> 549.07 g/mol (elméleti érték)			

### 3. Összetétel - szennyeződések

	IUPAC név	CAS szám	EK szám	Koncentráció tartomány tömeg %
<b>A</b>	Kvarc	14808-60-7	238-878-4	0.5-1
<b>B</b>	Geotit	/	/	0.5-1
<b>C</b>	Illit	12173-60-3	/	0.5-1
<b>D</b>	Krisztoballit	14464-46-1	238-455-4	0.5-1
<b>E</b>	Opál	7631-86-9	231-545-4	1-2
<b>F</b>	Kalcit (Ca(CO <sub>3</sub> ))	13397-26-7	nincs	1-10
<b>G</b>	Dolomit	16389-88-1	240-440-2	1-5
<b>H</b>	Földpát csoport	68476-25-5	270-666-7	1-5
<b>I</b>	Kaolinit	1318-74-7	215-286-4	1-5

### 4. További fő azonosítók

Elemi összetétel	Si és Al elemek aránya 2 és 5 között legyen
<b>Fizikai és kémiai tulajdonságok például:</b> - Alak - Keménység - Duzzadóképesség - Sűrűség - Fajlagos felület	1.5 – 2 Talkum-gipsz  2 – 2.7 g/cm <sup>3</sup>

## 7.6 A LAVANDIN GROSSO ILLÓOLAJA

Az illóolajok növényekből nyert anyagok. Ezért az illóolajokat növényi eredetű anyagoknak nevezhetjük.

Általában a növényi eredetű anyagok összetett természetes anyagok, növények vagy azok részeinek feldolgozásával készítik őket, például extrakcióval, desztillációval, sajtolással, frakcionálással, tisztítással, töményítéssel vagy fermentálással. Ezeknek az anyagoknak az összetétele függ a nemzetségtől, a fajtól, a termesztés körülményeitől és a betakarítási időszaktól, valamint az alkalmazott feldolgozási technikától.

Az illóolajokat lehet a főbb összetevői alapján azonosítani, ahogyan az a több-összetevőjű anyagoknál szokás. Az illóolajoknak azonban lehet akár több száz összetevője is, amelyek nagymértékben változhatnak sok tényező következtében (nemzetség, faj, termesztés körülményei, betakarítási időszak, alkalmazott feldolgozás). Ezért a főbb összetevők leírása gyakran nem elég ezeknek az UVCB anyagoknak az azonosításához. Az illóolajoknál meg kell adni a növényi alapanyagot és a feldolgozási folyamatot a 4.3.1. fejezet szerint (az UVCB 3. altípus alkalmazásával).

Sok esetben vannak ipari szabványok az illóolajokra (és sok illóolajra ISO szabvány is). A szabványokra is lehet utalni. Az anyag azonosítása annak gyártott formájára vonatkozzon.

A következő példa a "Lavandin grosso illóolaját" írja le, amelyre van ISO szabvány is. (ISO 8902-1999).

### 1. Név és egyéb azonosítók

#### Eredet

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

#### Eljárás

<p><b>Az anyag gyártásakor használt (bio)kémiai eljárások leírása:</b></p> <p><i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) virágzó csúcsainak vízgőzdesztillációja, majd a víz elválasztása az illóolajtól;</p> <p>A következő elválasztás egy spontán fizikai folyamat, amelyet rendszerint egy szeparátorban végeznek (úgynevezett „firenzei palackban”), amelyben az elvált olaj elkülönítése egyszerű. Ebben a lépésben a hőmérséklet körülbelül 40°C.</p>
---

## Név

<b>IUPAC név és más nemzetközi kémiai név</b>	<i>Lavandula hybrida grosso</i> (Lamiaceae) illóolaja
<b>EK szám</b> <b>EK név</b> <b>EK leírás</b>	297-385-2 Levendula, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , ext. Extrahált anyagok és fizikailag módosított származékaik tinktúrák, szilárd masszák, alkohol, illóolajok, gyantatartalmú illóolajok, terpének, terpénmentes frakciók, párlatok, maradékok stb., amelyek <i>Lavandula hybrida grosso</i> , Labiatae <sup>8</sup> -ből állítanak elő.
<b>CAS szám</b> <b>CAS név</b>	93455-97-1 Levendula, <i>Lavandula hybrida grosso</i> , extraktum

## 2. Összetétel – ismert összetevők

Ismert összetevők					
	<b>Kémiai név</b> <b>EK</b> <b>CAS</b> <b>IUPAC</b> <b>egyéb</b>	<b>Szám</b> <b>EK</b> <b>CAS</b>	<b>Összegképlet</b> <b>Hill módszer</b>	<b>Jellemző konc. tömeg%</b>	<b>Konc. tartomány tömeg %</b>
<b>A</b>	<b>EK</b> linalil acetát <b>CAS</b> 1,6-Octadién-3-ol, 3,7-dimetil-, acetát <b>IUPAC</b> 3,7-Dimetil octa-1,6-dién-3-yl acetát	<b>EK</b> 204-116-4 <b>CAS</b> 115-95-7	$C_{12}H_{20}O_2$	33	28 – 38
<b>B</b>	<b>EK</b> linalool <b>CAS</b> 1,6-octadién-3-ol, 3,7-dimetil- <b>IUPAC</b> 3,7-dimetil octa-1,6-dién-3-ol	<b>EK</b> 201-134-4 <b>CAS</b> 78-70-6	$C_{10}H_{18}O$	29,5	24 – 35
<b>C</b>	<b>EK</b> Bornan-2-on <b>CAS</b> Biciklo[2.2.1] heptán-2-on, 1,7,7-trimetil- <b>IUPAC</b> 1,7,7-Trimetilbiciklo[2.2.1]-2-heptanone <b>Egyéb</b> Kámfor	<b>EK</b> 200-945-0 <b>CAS</b> 76-22-2	$C_{10}H_{16}O$	7	6 – 8

<sup>8</sup> "Labiatae" és "Lamiaceae" szinonimák



<b>D</b>	<p><b>EK</b> Cineol</p> <p><b>CAS</b> 2-oxabiciklo [2.2.2]oktán, 1,3,3-trimetil-</p> <p><b>IUPAC</b> 1,3,3-trimetil-2-oxabiciklo[2.2.2]oktán</p> <p><b>Egyéb</b> 1,8-cineol</p>	<p><b>EK</b> 207-431-5</p> <p><b>CAS</b> 470-82-6</p>	$C_{10}H_{18}O$	5,5	4 – 7
<b>E</b>	<p><b>EK</b> P-menth-1-en-4-ol</p> <p><b>CAS</b> 3-Ciklohexén-1-ol, 4-metil-1-(1-metiletil)-</p> <p><b>IUPAC</b> 1-(1-Metiletil)-4-metil-3-ciklohexén-1-ol</p> <p><b>Egyéb</b> terpinene-4-ol</p>	<p><b>EK</b> 209-235-5</p> <p><b>CAS</b> 562-74-3</p>	$C_{10}H_{18}O$	3,25	1,5 – 5
<b>F</b>	<p><b>EK</b> P-menth-1-en-4-ol</p> <p><b>CAS</b> 3-Ciklohexén-1-ol, 4-metil-1-(1-metiletil)-</p> <p><b>IUPAC</b> 1-(1-Metiletil)-4-metil-3-ciklohexén-1-ol</p> <p><b>Egyéb</b> terpinene-4-ol</p>	<p><b>EK</b> 247-327-7</p> <p><b>CAS</b> 25905-14-0</p>	$C_{12}H_{20}O_2$	2,25	1,5 – 3
<b>G</b>	<p><b>EK</b> DL-borneol</p> <p><b>CAS</b> Biciklo[2.2.1]heptán-2-ol, 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]heptán-2-ol</p> <p><b>Egyéb</b> borneol</p>	<p><b>EK</b> 208-080-0</p> <p><b>CAS</b> 507-70-0</p>	$C_{10}H_{18}O$	2,25	1,5 – 3
<b>H</b>	<p><b>EK</b> Kariofillén</p> <p><b>CAS</b> Biciklo[7.2.0]undec-4-en, 4,11,11-trimetil-8-metilén-, (1R,4E,9S)-</p> <p><b>IUPAC</b> (1R,4E,9S)-4,11,11-trimetil-8-metilén biciklo[7.2.0]undec-4-en</p> <p><b>Egyéb</b> transz-béta-kariofillén</p>	<p><b>EK</b> 201-746-1</p> <p><b>CAS</b> 87-44-5</p>	$C_{15}H_{24}$	1,75	1 – 2,5
<b>I</b>	<b>EK</b>	<b>EK</b>	$C_{15}H_{24}$	1,1	0,2 – 2

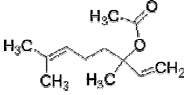
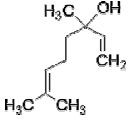
	2-(etil szulfonil)-6-nitrobenzothiazole <b>CAS</b> 1,6,10-Dodekatriéne, 7,11-dimetil-3-metilén-, (6E)- <b>IUPAC</b> (E)-7,11-Dimetil-3-metilén-1,6,10-dodekatrién <b>Egyéb</b> transz-béta-farnezén	242-582-0 <b>CAS</b> 18794-84-8			
<b>J</b>	<b>EK</b> (R)-p-menta-1,8-dién <b>CAS</b> ciklohexén, 1-metil-4-(1-metiletenil)-, (4R)- <b>IUPAC</b> (4R)-1-metil-4-(1-metiletenil)ciklohexén <b>Egyéb</b> limonén	<b>EK</b> 227-813-5 <b>CAS</b> 5989-27-5	$C_{10}H_{16}$	1	0,5 – 1,5
<b>K</b>	<b>EK</b> 3,7-dimetilocta-1,3,6-trién <b>CAS</b> 1,3,6-Octatrién, 3,7-dimetil- <b>IUPAC</b> 3,7-Dimetilocta-1,3,6-trién <b>Egyéb</b> cisz-béta-ocimén	<b>EK</b> 237-641-2 <b>CAS</b> 13877-91-3	$C_{10}H_{16}$	1	0,5 – 1,5

**Ismert összetevők  $\geq 10\%$**

Ismert összetevők		
	EK név	EK leírás
<b>A</b>	linalil acetát $C_{12}H_{20}O_2$	
<b>B</b>	linalool $C_{10}H_{18}O$	

Ismert összetevők		
	CAS név	hasonló CAS számok
<b>A</b>	linalil acetát $C_{12}H_{20}O_2$	115-95-7
<b>B</b>	linalool $C_{10}H_{18}O$	78-70-6

Ismert összetevők			
	Összegképlet CAS módszer	Szerkezeti képlet	SMILES kód

<b>A</b>	$C_{12}H_{20}O_2$		
<b>B</b>	$C_{10}H_{18}O$		

Ismert összetevők		
	Molekulasúly	Molekulasúly tartomány
A	196.2888	/
B	154.2516	/

## 7.7 KRIZANTÉM OLAJ ÉS IZOLÁLT IZOMERJEI

Egy vállalat krizantémolajat állít elő a *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae virágainak és leveleinek az összetörésével majd extrahálásával víz/etanol (1:10) oldószerkeleggyel. Az extrakció után az oldószert eltávolítják és a „tisztá” extraktumot tovább finomítják, és nyerik végül a krizantémolaj végterméket.

Továbbá két izomert izoláltak az extraktumból, a következő két összetevő keverékeként:

### Jazmolin I

(Ciklopropánkarbonsav, 2,2-dimetil-3-(2-metil-1-propenil)-, (1S)-2-metil-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciklopenten-1-yl ester, (1R,3R)-; CAS szám 4466-14-2), és

### Jazmolin II

(Ciklopropánkarbonsav, 3-[(1E)-3-metoxi-2-metil-3-oxo-1-propenil]-2,2-dimetil-, (1S)-2-metil-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenil-2-ciklopenten-1-ylester, (1R,3R)-; CAS szám 1172-63-0

Ezenkívül a vállalat úgy döntött, hogy szintetikus úton is előállítja a Jazmolin I és II izomer elegyét.

A vállalat a következő kérdéseket tette fel:

1. Hogyan kell azonosítani a krizantém olajat a regisztrációjához?
2. Az izolált Jazmolin I és II izomer elegyre vonatkozik-e az olaj regisztrációja?
3. A két izomer szintézissel előállított elegye tekinthető-e azonosnak a krizantém olajból izolált izomer-eleggyel?

### 1. Hogyan kell azonosítani a krizantém olajat a regisztrációjához?

A krizantém olaj UVCB anyagnak tekintendő, amelyet nem lehet kielégítően azonosítani a kémiai összetételével (a részletes tájékoztatást lásd a 4.3 fejezetben). Egyéb azonosító paramétereket kell használni, például az eredetet és az eljárást. A krizantém olaj biológiai

eredetű anyag, ezért az azonosításához meg kell adni a fajt vagy az organizmusnak az előállításához felhasznált részét, valamint a finomítási eljárást (oldószeres extrakció). Meg kell azonban adni mindazt, ami a kémiai összetételről és az összetevők azonosításáról tudható.

A következő adatokat tekintjük szükségesnek az anyag kielégítő azonosításához:

<b>Az anyag neve</b>	<i>Chrysanthemum cinerariaefolium</i> , Compositae; az összetört virágokból és levelekből víz:etanol (1:10) eleggyel valló extrakcióval nyert olaj.			
<b>Eredet</b>				
Nemzetség, faj, alfaj	Chrysanthemum, cinerariaefolium, Compositae			
A növénynek az olaj előállításához felhasznált része	Virágok és levelek			
<b>Eljárás</b>				
Gyártási eljárás	Aprítás, majd extrakció			
Az extrakcióhoz használt oldószer	Víz:etanol (1:10)			
<b>Összetétel – Ismert összetevők, tömeg %</b>				
<b>Az összetevő neve</b>	<b>EK szám</b>	<b>CAS szám</b>	<b>Min %</b>	<b>Max %</b>
<b>Piretrin I:</b> 2-metil-4-oxo-3-(penta-2,4-dienil) ciklopent-2-enil [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-krizantemát	204-455-8	121-21-1	30	38
<b>Piretrin II:</b> 2-metil-4-oxo-3-(penta-2,4-dienil) ciklopent-2-enil [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)-2,2-dimetilciklopropánkarboxilát	204-462-6	121-29-9	27	35
<b>Cinerin I:</b> 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oxociklopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklopropánkarboxilát	246-948-0	25402-06-6	5	10
<b>Cinerin II:</b> 3-(but-2-enil)-2-metil-4-oxociklopent-2-enil 2,2-dimetil-3-(3-methoxy-2-metil-3-oxoprop-1-enil)ciklopropán karboxilát	204-454-2	121-20-0	8	15
<b>Jazmolín I:</b> 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-2,2-di metil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklo propánkarboxilát	nincs	4466-14-2	4	10
<b>Jazmolín II:</b> 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-enil [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-metoxi-2-metil-3-oxoprop-1-enil)ciklopropánkarboxilát	nincs	1172-63-0	4	10
Az anyag még legfeljebb 40 összetevőt tartalmaz 1% koncentráció alatt.				

Az anyagot lehet jól azonosítható több-összetevőjű anyagnak is tekinteni, hat főbb összetevővel (Piretrin I, Piretrin II, Cinerin I, Cinerin II, Jazmolín I és Jazmolín II keveréke).

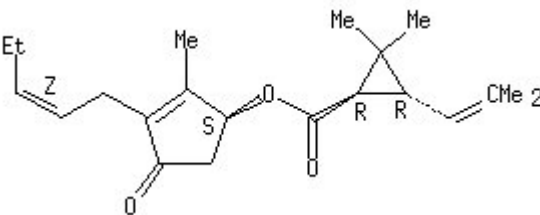
Az anyagot akkor kellene „természetben előforduló anyagnak” tekinteni, ha a gyártási folyamat csak „aprításból” állna; ezek mentesítve vannak regisztrációs kötelezettség alól, kivéve, ha teljesülnek a veszélyességi besorolás kritériumai és a 67/548/EGK irányelv értelmében veszélyes anyagnak számítanak.

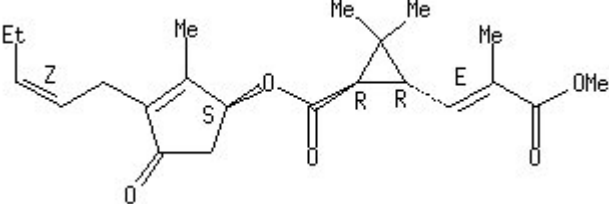
## 2. Az izolált Jazmolín I és II izomer elegyre vonatkozik-e az olaj regisztrációja?

Az izolált Jazmolín I és II izomer elegyre nem vonatkozik a *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae olajának regisztrációja, mert egy teljes UVCB anyag nem terjed ki egy egyedi összetevőre, és megfordítva. A Jazmolín I és II elegye az olajtól különböző anyagnak tekintendő.

A Jazmolín I és Jazmolín II elegyét több-összetevőjű anyagnak lehet tekinteni (a részletes tájékoztató a 4.2.3 fejezetben található), két főbb összetevővel.

A következő adatokat tekintjük szükségesnek az anyag kielégítő azonosításához:

<b>Az anyag IUPAC neve</b>	<b>Keverék:</b> (2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciklopent -2-enil [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-2,2-di metil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklo propánkarboxilát) és (2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciklopent-2-en-1-yl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-methoxy-2-metil-3-oxoprop-1-enil)ciklopropánkarboxilát)				
<b>Egyéb név</b>	Jazmolín I és Jazmolín II keveréke				
<b>A keverék tisztasága</b>	95 – 98 tömeg %				
<b>Összetétel – főbb összetevők, tömeg %</b>					
<b>Az összetevő neve</b>	<b>EK szám</b>	<b>CAS szám</b>	<b>Min %</b>	<b>Max %</b>	
<b>Jazmolín I:</b> 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciklopent -2-enil [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ ]]-2,2-di metil-3-(2-metilprop-1-enil)ciklo propánkarboxilát	nincs	4466-14-2	40	60	
<b>Szerkezeti képlet</b>					
<b>Összegképlet</b> <b>Molekulásúly</b>	$C_{22}H_{30}O_5$ $M = 374 \text{ g/mol}$				
<b>Jazmolín II:</b> 2-metil-4-oxo-3-(pent-2-enil)ciklo pent-2-en-1-yl [1R-[1 $\alpha$ [S*(Z)],3 $\beta$ (E)]]-2,2-dimetil-3-(3-methoxy-2-metil-3-oxoprop-1-enil)ciklopropánkarboxilát	nincs	1172-63-0	35	65	

Szerkezeti képlet		
Összegképlet	C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>3</sub>	
Molekulasúly	M = 330 g/mol	

### 3. A két izomer szintézissel előállított elegye tekinthető-e azonosnak a krizantém olajból izolált izomer-eleggyel?

A kémiaailag jól azonosítható anyagok esetében, amelyeket kielégítő módon le lehet írni az összetevőikkel, érdektelen, hogy az anyagot kémiai szintézissel állították elő, vagy egy extraktumból izolálták. Ezért a Jazmolin I és Jazmolin II szintézissel előállított elegyét azonosnak kell tekinteni a krizantémből extrahált eleggyel, akkor is, ha a gyártási eljárás eltérő, feltéve, hogy az anyag tisztasága és a főbb összetevők koncentráció tartománya azonos.

### 4. Következtetések

Két anyagot azonosítottunk:

1. *Chrysanthemum cinerariaefolium*, Compositae; olaj, amelyet az összetört virágokból és levelekből állítottak elő víz:etanol (1:10) eleggyel extrahálva.
2. Jazmolin I és Jazmolin II izomerek keveréke, a keverék gyártási eljárásától függetlenül.

Ha az anyagokat csak növényvédőszerként és biocid anyagként használják, akkor azokat a REACH-ben regisztrálniuk kell tekinteni (15. cikk).

## 7.8 FENOL, IZOPROPILEZETT, FOSZFÁT

Fenol, izopropilezett, foszfát (3:1) UVCB anyag, amelyben az izopropilezett rész változásait nem lehet teljeskörűen azonosítani.

### 1. Név és egyéb azonosítók

<b>IUPAC név vagy egyéb nemzetközi kémiai név</b>	Fenol, izopropilezett, foszfát (3:1)
<b>Egyéb nevek</b>	Fenol, izopropilezett, foszfát Fenol, izopropilezett, foszfát (3:1) (propilén és fenol 1:1 mólarányban)
<b>EK szám</b>	273-066-3
<b>EK név</b>	Fenol, izopropilezett, foszfát (3:1)
<b>EK leírás</b>	/
<b>CAS szám</b>	68937-41-7
<b>CAS név</b>	Fenol, izopropilezett, foszfát (3:1)

### 2. Összetétel – főbb összetevők

Főbb összetevők					
IUPAC név	CAS szám	EK szám	Összegképlet Hill módszer	Jellemző konc. (tömeg %)	Konc. tartomány (tömeg %)
Fenol, izopropilezett, foszfát (3:1)	68937-41-7	273-066-3	nem meghatározott		

Főbb összetevők	
EK név	EK leírás
Fenol, izopropilezett, foszfát (3:1)	/
CAS név	CAS szám
Fenol, izopropilezett, foszfát (3:1)	68937-41-7

## 7.9 KVATERNER AMMÓNIUM VEGYÜLETEK

Egy vállalat a következő anyagokat állítja elő szintézissel:

### A anyag

Kvaterner ammónium vegyületek, di-C<sub>10-18</sub>-alkildimetil, kloridok

EK szám 294-392-2

CAS szám 91721-91-4

Szénlánc-hossz eloszlás:

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 anyag

Kvaterner ammónium vegyületek, dikókus-alkildimetil, kloridok

EK szám 263-087-6

CAS szám 61789-77-3

A vállalat nem ismeri az anyag pontos összetételét.

### C anyag

Didodecil-dimetilammónium bromid

### D anyag

Didodecil-dimetilammónium klorid

### E anyag

Az E anyagot Didodecil-dimetilammónium bromid és didodecil-dimetilammónium klorid elegyeként gyártják (C és D anyagok keveréke)

### F anyag

Kvaterner ammónium vegyületek, di-C<sub>14-18</sub>-alkildimetilammónium, kloridok

EK szám 268-072-8

CAS szám 68002-59-5



Szénlánc-hossz eloszlás:

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 anyag

Kvaterner ammónium vegyületek, di-C<sub>4-22</sub>-alkildimetil, kloridok

Szénlánc-hossz eloszlás (egy vessző egy kettős kötést, két vessző egy hármass kötetst jelent):

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%

Eddig a vállalat csak a B anyagot (kvaterner ammónium vegyületek, di-kókuszk alkildimetil, kloridok, EK szám 263-087-6, CAS szám 61789-77-3) használta megnevezésre, mert ez írja le a legjobban a többi anyagot (A-tól G-ig). A vállalat tudni szeretné, hogy elég-e egy regisztráció az összes anyagra (A-tól G-ig) a B anyag regisztrációja alapján.

### 1. Általános megjegyzések

A szénhidrogének (paraffinok és olefinek) a zsírokból és az olajokból származnak, vagy szintetikus úton állítják elő őket; azonosításuk alapja a szénlánc-hossz eloszlás, az eredet (alkil deszkriptor), a funkciós csoport (funkciós deszkriptor) például ammónium és az anion/kation (só deszkriptor) (például klorid). A szénlánc-hossz eloszlás, például C<sub>8-18</sub>, a következőket jelenti:

- telített
- nem elágazó és egyenes láncú
- minden szénatom számra vonatkozik (C<sub>8</sub>, C<sub>9</sub>, C<sub>10</sub>, C<sub>11</sub>, ..., C<sub>18</sub>) amikor is a szűkebb eloszlás nem vonatkozik a szélesebbre és megfordítva.

Különben a jelölés ez lenne:

- telítetlen (C<sub>16</sub> telítetlen)
- elágazó (C<sub>10</sub> elágazó)
- páros számú (C<sub>12-18</sub> páros számú)

Az alapanyaggal leírt szénláncok feleljenek meg az alapanyag szénlánc-hossz eloszlásának, például faggyú alkilaminok:

A faggyú alkilaminok 99%-ban lineáris alkilancú primer aminok, a szénlánc-hossz eloszlásuk a következő (Ullmann, 1985) (egy vessző egy kettős kötést, két vessző egy hármass kötetést jelent):

C <sub>12</sub>	1%
C <sub>14</sub>	3%
C <sub>14'</sub>	1%
C <sub>15</sub>	0.5%
C <sub>16</sub>	29%
C <sub>16'</sub>	3%
C <sub>17</sub>	1%
C <sub>18</sub>	23%
C <sub>18'</sub>	37%
C <sub>18''</sub>	1.5%

## 2. Hogyan kell az anyagokat azonosítani a regisztrációjukhoz?

A következőkben minden anyagot összehasonlítunk a B anyaggal (amelyet eddig a megnevezéshez használtak) hogy el lehessen dönteni, azonosnak tekinthető-e a két anyag. I

### A és B anyag összehasonlítása

A B „kókusz” anyagban a következő szénlánc-hossz eloszlás található (Ullmann, 1985) (egy vessző egy kettős kötést, két vessző egy hármass kötetést jelent):

C <sub>6</sub>	0.5%
C <sub>8</sub>	8%
C <sub>10</sub>	7%
C <sub>12</sub>	50%
C <sub>14</sub>	18%
C <sub>16</sub>	8%
C <sub>18</sub>	1.5%
C <sub>18'</sub>	6%
C <sub>18''</sub>	1%

Az A anyag szénlánc-hossz eloszlása tehát eltér a B „kókusz” anyag szénlánc-hossz eloszlásától. Mivel a két anyag minőségi és mennyiségi összetétele jelentős mértékben eltérő, nem tekinthetők egy anyagnak.

### B és C anyag összehasonlítása

A B anyag “ Kvaterner ammónium vegyületek, dikókusz-alkildimetil, kloridok” különböző hosszúságú szénlánccal rendelkező összetevők elegyét tartalmazza (C<sub>6</sub> - C<sub>18</sub> páros számú, egyenes láncú, telített és telítetlen), míg a C anyag csak egy-összetevőt tartalmaz egyetlen meghatározott és telített szénlánccal (C<sub>12</sub>), más anionnal (bromid). Ezért a C anyagot nem lehet B anyaggal azonosnak tekinteni.

### B és D anyag összehasonlítása

A B anyag “ Kvaterner ammónium vegyületek, di-kókusz alkildimetil, kloridok” különböző hosszúságú szénlánccal rendelkező összetevők elegyét tartalmazza (C<sub>6</sub> - C<sub>18</sub> páros számú, egyenes láncú, telített és telítetlen), míg a C anyag csak egy-összetevőt tartalmaz egyetlen meghatározott és telített szénlánccal (C<sub>12</sub>) ugyanazzal az anionnal (klorid). A B és D anyag nevei különböznek, és nem tekinthetők azonos anyagnak, mert egy egyedi összetevőre nem vonatkozik a keverék, és megfordítva.

### **B és E anyag összehasonlítása**

Az E anyag C és D anyagok keveréke. Mind a kettő telített de az anion eltérő (bromid és klorid). A B anyag “Kvaterner ammónium vegyületek, dikókusz-alkildimetil, kloridok” különböző hosszúságú szénlánccal rendelkező összetevők elegyét tartalmazza ( $C_6 - C_{18}$  páros számú, egyenes láncú, telített és telítetlen), és klorid az anion. Az E anyag azonban csak  $C_{12}$  szénláncot tartalmaz és bromid a további anion. Ezért B és E anyagok nem tekinthetők azonosnak. Következésképpen E anyagot regisztráltatni kell.

### **B és F anyag összehasonlítása**

Az F anyag “Kvaterner ammónium vegyületek, di- $C_{14-18}$ -alkildimetilammónium, kloridok” különböző hosszúságú szénlánccal rendelkező összetevők elegyét tartalmazza ( $C_{14-18}$  páros és páratlan számú, egyenes láncú, telített). Az F anyag összetétele és szénlánc-hossz eloszlás tartománya eltér B anyagétól. F anyag szénlánc-hossz eloszlása szűk, és tartalmaz  $C_{15}$  és  $C_{17}$ -szénláncokat. Ezért B és F anyagok nem tekinthetők azonosnak.

### **B és G anyag összehasonlítása**

B és G anyagok nagyon hasonlítanak egymásra, mert szénlánc-hossz eloszlásuk tartománya majdnem azonos. A G anyag azonban tartalmaz  $C_4$ ,  $C_{20}$  és  $C_{22}$  szénláncú összetevőket is. A G anyag szénlánc-hossz eloszlása szélesebb tartományú, mint B anyagé. Ezért B és G anyagok nem tekinthetők azonosnak.

### **3. Következtetés**

A szénhidrogének (paraffinok, olefinek) csak akkor tekinthetők azonos anyagnak, ha minden deszkriptoruk (alkil, funkciós és só) azonos.

A bemutatott példában a deszkriptorok minden esetben különbözőek voltak. Ezért a B anyag regisztrációja nem vonatkozik a többi anyagra.

## 7.10 KŐOLAJTERMÉKEK

A specifikus UVCB anyagokra vonatkozó 4.3.3.2 fejezet útmutatása szerint két példát mutatunk be:

### 7.10.1 Benzin keverő komponens (C<sub>4</sub>-C<sub>12</sub>)

#### 1. Név és egyéb azonosítók

##### Név

IUPAC név vagy egyéb nemzetközi kémiai név	Benzin (olajtermék), katalitikusan reformált
--	--

##### Eredet

Az anyagáram forrásának azonosítása vagy leírása	Nyersolaj
--	-----------

#### Eljárás

A finomítási eljárás leírása	Katalitikus reformálás
Szénatomszám tartomány	C4-C12
Forráspont tartomány	30°C - 220°C
Egyéb fizikai tulajdonságok, például viszkozitás	7 mm <sup>2</sup> /s alatti 40°C-on (Viszkozitás)
EK szám	273-271-8
CAS szám	68955-35-1
EK név/CAS név	Benzin (olajtermék), katalitikusan reformált
EK leírás/CAS leírás	Szénhidrogének komplex elegye, a katalitikus reformálási eljárás termékeinek desztillációjával állítják elő. Főleg C4 - C12 tartományba eső szénhidrogéneket tartalmaz és körülbelül a 30°C és 220°C közötti hőfok-tartományban forr. (90°F - 430°F). Viszonylag nagy mennyiségben tartalmaz aromás és elágazó láncú szénhidrogéneket. Ez az anyagáram 10 térfogat % vagy még több benzolt tartalmazhat.

#### 2. Összetétel

Ismert összetevők			
IUPAC név	CAS szám	EK szám	Konc. tartomány (tömeg %)
Benzol	71-43-2	200-753-7	1-10
Toluol	108-88-3	203-625-9	20-25
Xilol	1330-20-7	215-535-7	15-20

## 7.10.2 Gázolaj (olajtermék)

### 1. Név és egyéb azonosítók

IUPAC név vagy egyéb nemzetközi kémiai név	Gázolaj (olajtermék), nehéz atmoszferikus
--	---

### Eredet

Az anyagáram eredetének azonosítása vagy leírása	Nyersolaj
--	-----------

### Eljárás

A finomítási eljárás leírása	Atmoszférikus desztilláció
Szénatomszám tartomány	C7 - C35
Forráspont tartomány	121°C - 510°C
Egyéb fizikai tulajdonságok, például viszkozitás	20 mm <sup>2</sup> /s 40°C-on (viszkozitás)
EK szám	272-184-2
CAS szám	68783-08-4
EK név/CAS név	Gázolaj (olajtermék), nehéz atmoszférikus
EK leírás/CAS leírás	Szénhidrogének komplex elegye, amelyet a nyersolaj desztillációjával nyernek. Főleg C7 - C35 tartományba eső szénhidrogéneket tartalmaz és körülbelül a 121°C és 510°C közötti hőfok tartományban forr (250°F - 950°F).

### 2. Kémiai összetétel

Nincs adat.

## 7.11 ENZIMEK

*A TÉMA JELENLEG TÁRGYALÁS ALATT VAN – TÁJÉKOZTATÁS KÉSŐBB VÁRHATÓ*

## 8 AZ ANYAGOK LEÍRÁSA A IUCLID 5 RENDSZERBEN

Ebben a fejezetben azt mutatjuk be, hogy hogyan lehet a különböző anyagokat – az egy-összetevőjű, több-összetevőjű, a kémiai összetételükkel és más azonosítóikkal meghatározott anyagok és az UVCB anyagok – a IUCLID 5 rendszerében leírni.

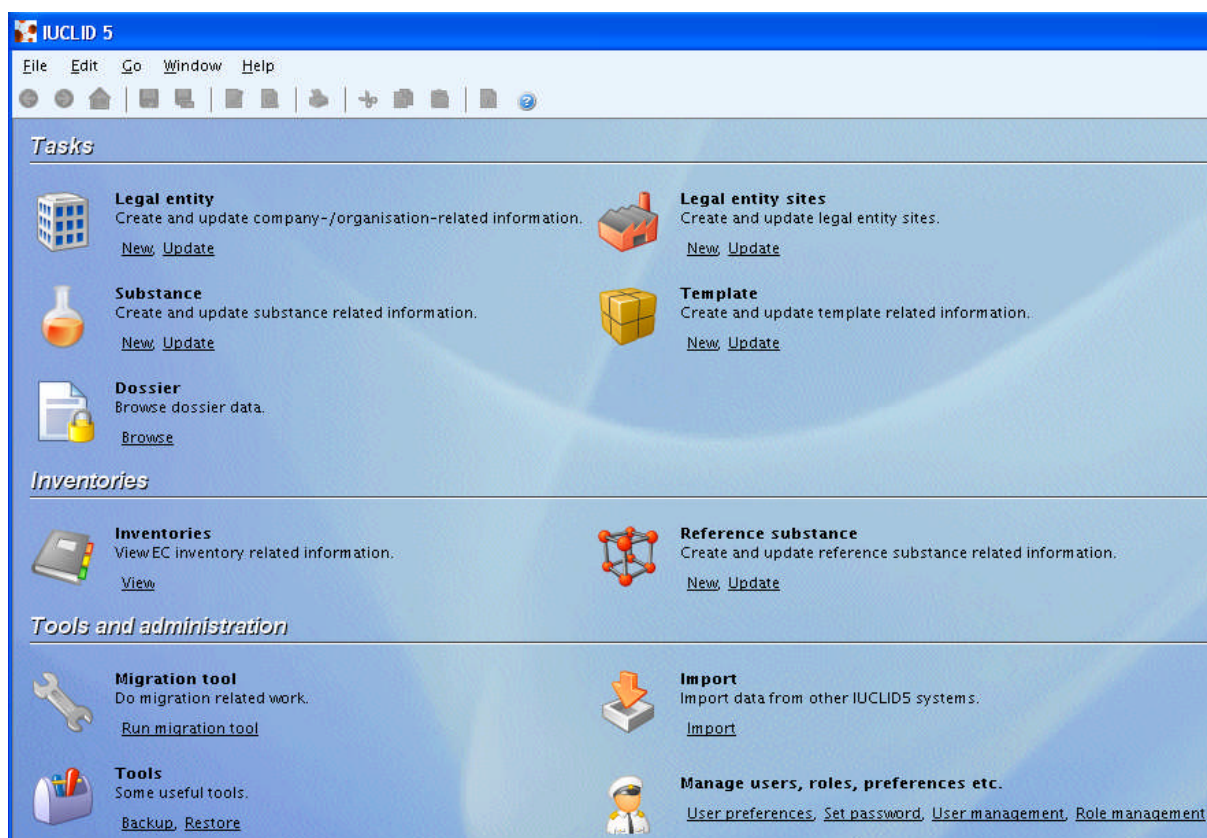
### 8.1 ÁLTALÁNOS ALAPELVEK

A IUCLID 5-ben három fontos rész függ össze az anyagok azonosításával:

az EC lista <sup>9</sup> a „Listák” (“**Inventories**”) menüpontban;

A „Referencia anyag” (“**Reference Substance**”) lista, a „Listák” (“**Inventories**”) almenüje;

Egy „Anyag” (“**Substance**”) adatkészlet 1.1 és 1.2 részei.



#### 8.1.1 Listák

A Lista (Inventory) rész tartalmazza az EK listát (a magyarázatot lásd a 3.3. pontban), ezt központilag kezeli és szolgáltatja az Európai Bizottság / Európai Vegyianyag Ügynökség, valamint a Referencia Anyag lista (Reference Substance Inventory), amely egy helyi lista, és a felhasználók kezelik és frissítik a saját munkahelyükön.

<sup>9</sup> Jelenleg csak az EK lista van telepítve. Később más listákat, például a TSCA-t is hozzá lehet majd adni ehhez a fejezethez.

Az EC lista táblázatát kijelölve a felhasználó keresheti és megjelenítheti a lista adatait (például EK szám, CAS szám, EC nevek, stb.). Ezek csak olvasható adatok.

A Referencia Anyag (Reference Substance) táblázat lehetővé teszi a hozzáférést a felhasználó számára az összetevők helyi listájához, ezt fogja használni az anyag azonosításához, ahogy az a gyártásból kikerült, vagyis a szennyeződésekkel és az adalékokkal.

Más szavakkal, létrehozzák az anyagokat felépítő alapelemeket, és ezeket központilag kezelik a Referencia Anyag listán. A Referencia Anyagok újra használhatók szükség szerint más anyagoknál.

#### Példa

Ha egy anyag 91% 1,2-dimetilbenzolt (o-xilol) tartalmaz és 5% 1,3-dimetilbenzolt (m-xilol) szennyeződésként, akkor mindkét összetevőt, az 1,2-dimetilbenzolt és az 1,3-dimetilbenzolt meg kell határozni a Referencia Anyag listán. A kitöltött adatokat ezután a rendszer tárolja és karbantartja. Ha ugyanezek az összetevők más anyagokban más arányban megjelennek, akkor már rajta lesznek a helyi listán és az adatokat könnyen fel lehet újra használni.

Az alábbi ábrák a IUCLID 5 Referencia Anyag (Reference Substance) menüjét mutatják be. Több képre bontottuk, a IUCLID-ban ez egy képernyő.

#### Referencia anyag (Reference substance) –I. rész

The screenshot shows a web form titled "Reference substance: 95-47-6 / o-xylene". It is divided into several sections:

- General information:** Reference substance name: 95-47-6 / o-xylene
- EC inventory:**
  - EC number: 202-422-2
  - CAS number: 95-47-6
  - EC name: o-xylene
  - Molecular formula: C8H10
  - Description: (empty field)
- No EC information available:** Justification: (empty field)

“Referencia anyag- I. rész” ábra a következőket tartalmazza:

- A referencia anyag neve  
Ezt a nevet szabadon meg lehet választani (ebben az esetben 95-47-6 / 1,2-dimetilbenzol).
- EC lista (EC Inventory)  
Link a csak olvasható EC listához, amely beépített adatokat is tartalmaz, például az EK számot.
- Nem áll rendelkezésre EC adat  
Egy kiegészíthető lista, ahol meg lehet adni annak indoklását, hogy miért nem lehet EC lista adatot megadni (például: nem alkalmazható az anyagra, még nincs hozzárendelve).

## Referencia anyag – II. rész

**CAS information**

CAS number: 95-47-6

CAS name: o-Xylene

**IUPAC name**

1,2-dimethylbenzene

**Description**

**Synonyms**

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

Add... Edit... Delete

**Related CAS information**

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

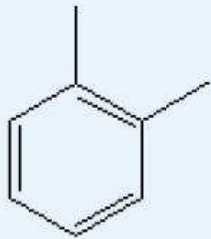
Add... Edit... Delete

A “Referencia anyag – II. rész” ábra a következőket tartalmazza :

- CAS adatok (CAS szám és CAS név), a hasonló CAS adatokkal.  
Általános szabály, hogy az EK számhoz tartozó CAS számot kell megadni. Ha egynél több CAS szám létezik (például törölt CAS számok, vagy ugyanennek az anyagnak a CAS számai, amelyeket különböző jogszabályi rendszerekben használnak az anyag leírására, az adott rendszerek elvárásaitól függően), akkor a többi CAS számo(ka)t hasonló CAS számként kell megadni;
- IUPAC név;  
A “IUPAC név” mezőben az anyag (kémiai) nevét kell megadni angolul. Az UVCB anyagok esetében is ezt a mezőt kell használni, amikor is az anyagokat az eredetükkel és a gyártási eljárással írják le;
- A további adatok leírásának mezője („Description”)  
Az anyag leírásához szükséges minden további információt ebben a mezőben kell megadni, például UVCB anyagoknál vagy ásványoknál;
- Szinonimák;  
Itt megadhatóak IUPAC nevek más nyelveken is.



## Referencia anyag – III. rész

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

A “Referencia anyag – III. rész” ábra a következőket tartalmazza:

- Összegképlet;  
Az összegképletet a Hill módszer szerint kell megadni..
- Molekulasúly, molekulasúly tartomány;
- SMILES kód;
- InChI kód;
- Szerkezeti képlet képként.

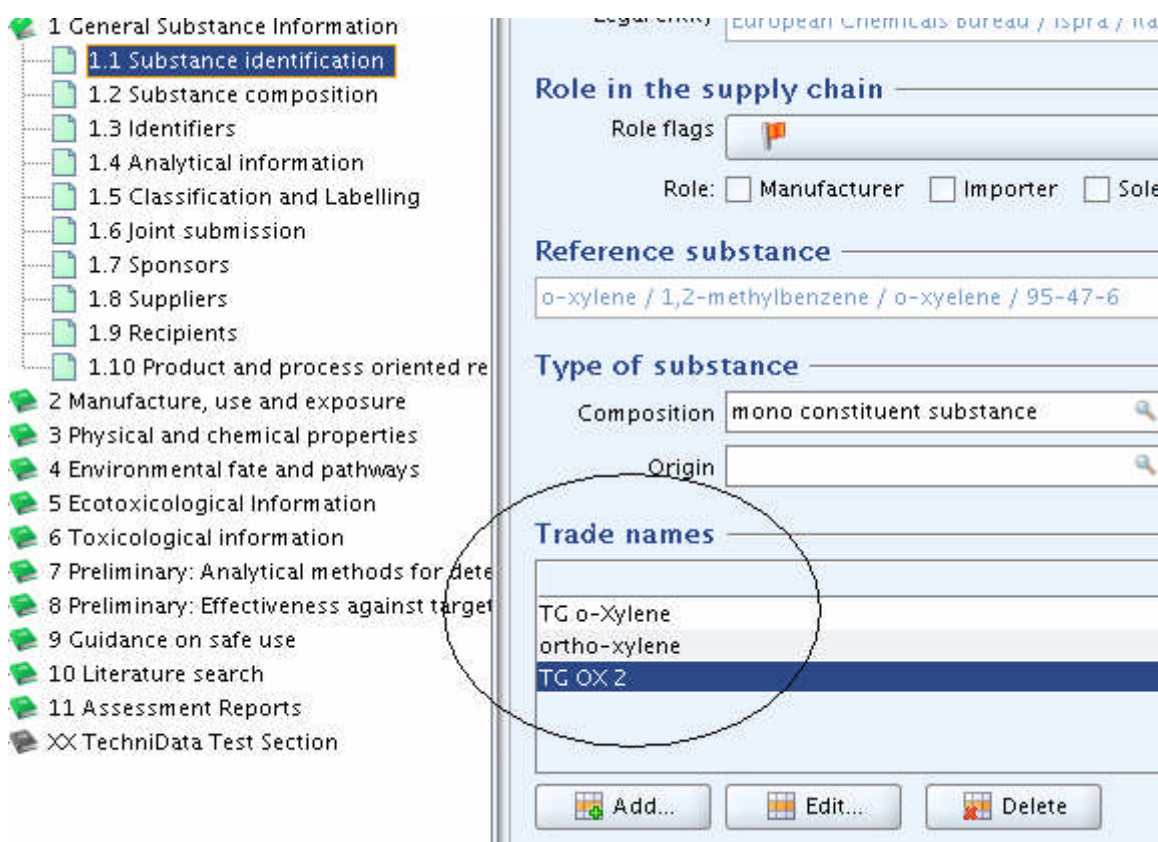
### 8.1.2 Anyag adatkészlet (IUCLID 1.1., 1.2., 1.3. és 1.4. részek)

A IUCLID 5 adatkészlet az anyag minden adatát tartalmazza, például a célvizsgálatok jegyzőkönyveit, az osztályozásra és a címkézésre vonatkozó adatokat és a kémiai azonosítást, amely tartalmazza az anyag összetételét. Az adatok 11 fejezetbe vannak csoportosítva.

Az Anyag (Substance) adatkészletet az „Anyag” (“Substance”) nevű táblázatban lehet létrehozni, keresni, megnézni és frissíteni.

Az 1.1. és 1.2. fejezetek írják le annak az anyagnak az azonosítását, amelyikre az adatkészlet készült.

### Anyag azonosítása –I. rész



**Az 1.1. menüpont (Anyag azonosítása, Substance identification)** a következőket tartalmazza:

- Referencia Anyag
 

Itt kell létrehozni a linket ahhoz a Referencia Anyaghoz (Reference Substance), amely az anyagra vonatkozik. Az anyagot ennek megfelelően kell megnevezni.
- Az anyag típusa
 

Egy listáról ki kell választani az anyag típusát, például egy-összetevőjű anyagot lehet választani..
- Kereskedelmi nevek
 

Itt fel lehet sorolni minden nemzetközi nevet és más vállalatok által használt neveket.

**Az 1.2. menüpont (Anyag összetétele, Substance composition)** tartalmazza az anyag összetételének a leírását, és megadja a linkeket a vonatkozó, építőkönek tekintett Referencia Anyagokhoz a linkeket. Itt az anyag minden összetevőjét (például főbb összetevők, szennyeződések) meg kell adni úgy, ahogyan az anyagot gyártották, és meg kell adni az adalékokat is. A 8.2. fejezetben részletes példákkal adunk tájékoztatást arról, hogy hogyan kell a IUCLID 5 1.2. menüpontját kitölteni.

**Az 1.3 menüpont (Azonosítók, Identifiers)** tartalmazza az anyag azonosításához egy IT szempontjából szükséges adatokat, például a felhasználó megadhatja azt az azonosítót, amit ugyanehhez az anyaghoz fog használni egy másik IT rendszerben, például egy SDS (Safety Data

Sheet) rendszerben. Ez javítja az adatcserét a IUCLID 5 és más rendszerek között. Nem része az anyag azonosításának, ahogyan ezt a fogalmat ebben a műszaki útmutató dokumentumban használjuk

Az 1.3. menüpont lehetőséget ad az a különböző szabályozási programok által adott azonosító számok (például a REACH regisztrációs szám) tárolására. Ez az adat nem része az anyagok ezen műszaki útmutató dokumentum szerinti azonosításának.

## Anyag azonosítása –II. rész

The screenshot displays the IUCLID 5 user interface. On the left, a 'Section tree' shows a hierarchical list of categories, with '1.4 Analytical information' highlighted. The main workspace is divided into two primary sections:

- Analytical information:** This section contains two text input areas. The first is labeled 'Analytical methods' with the instruction 'Describe here the possible analytical methods'. Below it is a note 'A document can be attached in the field below' followed by a document upload icon. The second area is labeled 'Optical activity' with the instruction 'Describe the optical activity here'.
- Results of analysis:** This section contains four input fields:
  - 'Analysis type' with a dropdown menu showing 'For instance GC-MS Purge and trap for impurity'.
  - 'Tested substance' with a text input field and a search icon, containing the instruction 'Describe the tested substance (including composition)'.
  - 'Method used' with a text input field and a search icon, containing the instruction 'Refer to the method used (results to be attached below)'.
  - 'Remarks' with a large text area containing the instruction 'Any remarks go here'.

**1.4 menüpont (Analitikai adatok, Analytical information)** tartalmazza az anyagra vonatkozó analitikai adatokat<sup>10</sup>, az optikai aktivitásra vonatkozó adatokkal együtt.

## 8.2 PÉLDÁK A IUCLID 5 KITÖLTÉSÉRE

A 8.2.1. fejezetben bemutatunk egy példát arra, hogy hogyan kell a IUCLID 5-öt kitölteni egy-összetevőjű anyagok esetében, a 8.2.2. fejezetben a több-összetevőjű anyagokra mutatunk be példát, a 8.2.3. fejezetben a kémiai összetétellel és más azonosítókkal azonosítható anyagokra, a 8.2.4. fejezetben pedig az UVCB anyagokra adunk példát.

<sup>10</sup> Lehet, hogy ezt a részt át kell szerkeszteni a IUCLID 5 béta tesztje után.

## 8.2.1 Egy-összetevőjű anyagok

Példa: Egy-összetevőjű anyagok			
Név	1,2-dimetilbenzol		
Főbb összetevő	Jellemző koncentráció tömeg %	Legkisebb koncentráció tömeg %	Legnagyobb koncentráció tömeg %
1,2-dimetilbenzol	91	88	93
Szennyeződések			
1,3-dimetilbenzol	5	2	7
1,4-dimetilbenzol	2	0.5	3
víz	2	0.5	3

Az 1.1. menüpontban az anyag nevét kell megadni. Eszerint a műszaki útmutató dokumentum szerint az anyag egy-összetevőjű, a neve "1,2-dimetilbenzol". A IUCLID 5-ben ez azt jelenti, hogy az anyag adatkészletét össze kell kapcsolni az 1.1. menüpontban lévő 1,2-dimetilbenzol Referencia anyaggal.

Az 1.2. menüpontban az anyag összetételét kell megadni:

- A tisztasági foka (Degree of purity)

Egy-összetevőjű anyagnál itt a főbb összetevőre vonatkoztatott tisztasági fokot kell megadni (általában  $\geq 80\%$ ) (alsó és felső koncentráció határértékekkel).

- Összetevők (Constituents)

Egy-összetevőjű anyagoknál itt a kémiai azonosítókat (EK szám és EK név, CAS szám és CAS név, IUPAC név) kell megadni. A kémiai azonosságot a Referencia anyaghoz létrehozott link határozza meg.

A „megjegyzések” (“remarks”) mezőt lehet használni minden más információ bevételére. Itt kell megindokolni a 80%-os szabálytól való esetleges eltérést is (lásd a 4.2.2. fejezetet).

### – Szennyeződések

Az 1%-nál nagyobb koncentrációban (vagy az anyag veszélyességi besorolását szükségessé tevő bármilyen, ennél kisebb határértéknél nagyobb koncentrációban) jelenlévő szennyeződések legalább a kémiai azonosítók egyikével kell azonosítani (EK szám és EK név, CAS szám és CAS név, IUPAC név). A kémiai azonosságot a Referencia anyaghoz létrehozott link határozza meg. Minden szennyeződésre meg kell adni a koncentrációt (a jellemző értéket és a tartományt) tömeg %-ban.

Ha ismert a nem azonosított szennyeződések száma és összes koncentrációja, akkor azt meg kell adni úgy, hogy a teljes koncentráció 100% legyen.

### – Adalékok

Minden jelen lévő adalékot meg kell adni a kémiai azonosítóival (EK szám és EK név, CAS szám és CAS név, IUPAC név). A kémiai azonosságot a Referencia anyaghoz létrehozott link határozza meg. Minden adalékra meg kell adni a koncentrációt (a jellemző értéket és a tartományt) tömeg %-ban.

## 8.2.2 Több-összetevőjű anyagok

Példa: több-összetevőjű anyagok			
Név	1,2-dimetilbenzol, 1,3-dimetilbenzol és 1,4-dimetilbenzol keveréke		
Főbb összetevők	Jellemző koncentráció tömeg %	Legkisebb koncentráció tömeg %	Legnagyobb koncentráció tömeg %
1,4-dimetilbenzol	35	30	40
1,2-dimetilbenzol	30	25	35
1,3-dimetilbenzol	25	20	30
Szennyeződés			
víz	10	5	12



Ennek a műszaki útmutató dokumentumnak a meghatározása szerint ez az anyag többszertevőjű, három főbb összetevővel, a neve “1,4-dimetilbenzol, 1,2-dimetilbenzol és 1,3-dimetilbenzol keveréke”. A víz maradék oldószer, amelyet nem lehet már eltávolítani az anyagból, és szennyeződésnek kell tekinteni, és nem tekinthető főbb összetevőnek.

A IUCLID 5-ben ez azt jelenti, hogy az anyag adatkészletét össze kell kötni az “1,4-dimetilbenzol, 1,2-dimetilbenzol és 1,3-dimetilbenzol keveréke” Referencia anyaggal (lásd az 1.1 menüpontot).

The screenshot shows the IUCLID 5 interface for a substance. The left sidebar shows a navigation tree with '1.1 Substance identification' selected. The main panel displays the following information:

- Substance identification**
  - Chemical name: xylene mixture of isomers
  - Legal entity flags: [Flag]
  - Legal entity: European Chemicals Bureau / Ispra / Italy
- Role in the supply chain**
  - Role flags: [Flag]
  - Role:  Manufacturer  Importer  Sole representative  Downstream user
- Reference substance** (circled in red)
  - Mixture of xylene / Mixture of 1,3-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,4-dimethylbenzene / xylene / 1330-20-7

Minden összetevőre, adalékra és szennyeződésre meg van adva az 1.2. menüpontban a kémiai azonosság, a jellemző koncentráció és a koncentráció tartomány. A kémiai azonosságot a Referencia anyaghoz létrehozott link határozza meg.

The screenshot shows the IUCLID 5 interface for a substance. The left sidebar shows a navigation tree with '1.2 Substance composition' selected. The main panel displays the following information:

- Constituents**
  - p-xylene / 1,4-dimethylbenzene / p-xylene / 106-42-3
    - Reference substance: p-xylene / 1,4-dimethylbenzene / p-xylene / 106-42-3
    - EC number: 203-396-5, EC name: p-xylene
    - CAS number: 106-42-3, CAS name: p-xylene
    - IUPAC name: 1,4-dimethylbenzene
    - Proportion (typical): 35 % (w/w)
    - Proportion (real): > 30, < 40 % (w/w)
    - Remarks: [Empty field]
  - m-xylene / 1,3-dimethylbenzene / m-xylene / 108-38-3
    - Reference substance: m-xylene / 1,3-dimethylbenzene / m-xylene / 108-38-3
    - EC number: 203-576-3, EC name: m-xylene

### 8.2.3 Kémiai összetételével és más azonosítókkal meghatározott anyag

Egyes esetekben más fő azonosítók is szükségesek ahhoz, hogy az anyag egyértelműen azonosítható legyen (lásd a 4.2.4. fejezetet). Ezek a további paraméterek az ezen a típuson belüli anyagtípusoknál eltérőek. A további azonosító paraméter azonban alapvető jelentőségű az anyag azonosításában. Például ásványok esetében az elemi összetételre vonatkozó adatokat együtt kell kezelni a spektrális adatokkal az ásványi összetétel és a kristályszerkezet azonosításához, amelyet azután a fizikai és kémiai tulajdonságok támasztanak alá (lásd még a példát a 6.3 fejezetben).

Fizikai-kémiai tulajdonságok, például:

- Kristályszerkezet (röntgendiffrakció alapján)
- Alak
- Keménység
- Duzzadóképeség
- Sűrűség
- Fajlagos felület
- Stb.

**Példa:** kémiai összetételével és más azonosítókkal meghatározott anyag

További specifikus azonosítókat lehet megadni ásványokra, mivel az ásványok olyan jellemző fizikai-kémiai tulajdonságokkal rendelkeznek, amelyek alapján ki lehet egészíteni az azonosításukat, például:

- a talkum nagyon kis keménysége
- a bentonit duzzadóképesége
- a kovaföld alakja (optikai mikroszkóp)
- a barit nagyon nagy sűrűsége
- fajlagos felület (nitrogén adszorpció)

Ezeket az adatokat kell megadni a referencia anyag leírás (description) mezőjében, ahová az adatkészlet kapcsolódik (IUCLID 5, 1.1. menüpont).

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

## 8.2.4 UVCB anyag

Az UVCB anyagokat vagy nem lehet egyértelműen meghatározni az összetevők IUPAC neveivel, mert nem minden összetevőt lehet azonosítani, vagy általában meg lehet őket határozni, de a pontos összetétel változásai miatt ezt nem lehet specifikusan egy adott esetre megtenni. Az UVCB anyagok fő azonosítói az anyag eredetéhez és a feldolgozási eljárásához kapcsolódnak. Mivel az összetevők és a szennyeződések nincsenek megkülönböztetve, a “főbb összetevők” and “szennyeződések” kifejezések az UVCB anyagokkal kapcsolatban nem használandók.

Meg kell azonban adni minden adatot, amely a kémiai összetételről és az összetevők azonosságáról tudható. Az összetételt néha általános módon lehet megadni, például “egyenes láncú zsírsavak C8-C16” vagy “alkohol etoxilátok C10-C14 alkohol és 4-10 etoxilát egységekkel”.

Az UVCB anyagok specifikálásához ugyanazt a rendszert kell használni, mint amelyet az egy és több-összetevőjű anyagokra leírtunk. Magát az anyagok, valamint az ismert összetevőket egy Referencia anyaggal kell megadni.

Fontos, hogy amikor egy anyagot Referencia anyagként definiálunk, az UVCB anyag (kémiai) nevét meg kell adni a “IUPAC név” mezőben (annak ellenére, hogy az UVCB anyagoknak ritkán van “klasszikus” IUPAC nevük). A „leírás” (description) mezőt kell használni a további információk (például a reakciókörülmények) közlésére.

<b>Példa:</b> UVCB anyag	
<b>Név</b>	párlat (szén), magas hőmérsékletű, benzol frakció
<b>Leírás</b>	Szén magas hőmérsékletű frakcionált desztillációjából származó párlat, hozzávetőleges desztillációs tartománya 30°C és 180°C között van (86°F - 356°F). Főleg C4 - C6 alifás és aromás szénhidrogéneket tartalmaz, valamint széndiszulfidot, ciklopentadiént és kevés kénhidrogént.



**EC inventory**

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

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

Molecular formula:

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

**No EC information available**

Justification:

**Reference substance information**

**CAS information**

CAS number: 185323-42-6

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

**IUPAC name**

The name of the UVCB should be reported in this field. In this case "distillates (coal), high-temperature, benzole fraction".  
Also when no IUPAC name can be derived, the name of the substance should be reported in this field

**Description**

The description of any additional information should go into this field, in this case.:  
The distillate from the fractional distillation of high-temperature coal having an approximate distillation range of 30°C to 138°C (86°F to 356°F). Composed primarily of C4 to C6 alifatic and aromatic hydrocarbons with carbon disulfide, cyclopentadiene and some hydrogen sulfide.

Az anyag adatkészletére ugyanaz vonatkozik, mint amit az egy és több-összetevőjű anyagokra leírtunk. Az adatkészlet az anyagot az 1.1. menüpontban meghatározó Referencia anyaghoz van kapcsolva.

1 General Substance Information

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

Legal entity: European Chemicals Bureau / Ispra / Italy

**Role in the supply chain**

Role flags:

Role:  Manufacturer  Importer  Sole representative

**Reference substance**

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

Az ismert összetevőket meghatározzák a megfelelő Referencia anyagok, amint azt az egy- és több-összetevőjű anyagokra leírtuk.

### 8.3.ANALITIKAI ADATOK

Az analitikai adatok a 1.4. fejezetben találhatóak. Ez a fejezet két részből áll:

- Analitikai adatok
- Az analízis eredményei

The screenshot displays the IUCLID 5 software interface for a substance named 'Example Multi Constituent Substance / Mixture of 1,3-dimethylbenzene, 1,2-dimethylbenzene and 1,4-dimethylbenzene / JRC Test Company'. The interface is divided into two main sections: 'Analytical information' and 'Results of analysis'.

**Analytical information:** This section contains two large text input fields. The first is labeled 'Analytical methods' and the second is labeled 'Optical activity'. Both fields are currently empty.

**Results of analysis:** This section contains several input fields and a large text area. It includes:

- 'Analysis type' with a search icon.
- 'Tested substance' with a search icon.
- 'Method used' with a search icon.
- A large empty text area labeled 'Remarks'.

Ez az alfejezet kifejezetten a REACH igényeihez igazodik (IV. melléklet).

- Analitikai módszerek: az analitikai módszereinek leírását a REACH VI. 2.3.7. melléklete tartalmazza. A hosszabb terjedelmű szövegek csatolásához külön dokumentum áll rendelkezésre.
- Optikai aktivitás: az optikai aktivitás és a sztereoizoméria tipikus arányairól szóló információk találhatóak ebben a mellékletben, amelyek értelemszerűen alkalmazhatóak. (REACH, VI. 2.2.2. melléklet).

Analitikai eredmények:

Az analitikai blokk eredményeinek felhasználásával lehetőség nyílik az információk alátámasztására azáltal, hogy mellékletként csatolja a felhasználó az analitikai adatokat, mint például a kromatogramokat. Bizonyításul a spektrális adatok ugyancsak felhasználhatóak (REACH, VI. melléklet 2.3.5.), hasonlóan a kromatográfiai adatokhoz (REACH, VI. 2.3.6.).

## 9 HIVATKOZÁSOK

Az Európai Unió Tanácsa (2006) Az Európai Parlament és a Tanács javaslata Vegyianyagok Regisztrációjára, Értékelésére, Engedélyezésére és Korlátozására (REACH) vonatkozó Rendelet kidolgozására, létrehozva egy Európai Vegyianyag Ügynökséget és módosítva az 1999/45/EK irányelvet valamint az Perzisztens Szerves Szennyezőkre vonatkozó (EK) rendeletét. (2006) Június 12. 7524/06

Az Európai Unió Tanácsa (2005) Az Európai Parlament és a Tanács javaslata Vegyianyagok Regisztrációjára, Értékelésére, Engedélyezésére és Korlátozására (REACH) vonatkozó Rendelet kidolgozására, létrehozva egy Európai Vegyianyag Ügynökséget és módosítva az 1999/45/EK irányelvet valamint az Perzisztens Szerves Szennyezőkre vonatkozó (EK) rendeletét. (2005) December 19. 15921/05

EC (2003-A) Javaslata Vegyianyagok Regisztrációjára, Értékelésére, Engedélyezésére és Korlátozására (REACH), létrehozva egy Európai Vegyianyag Ügynökséget és módosítva az 1999/45/EK irányelvet valamint az Perzisztens Szerves Szennyezőkre vonatkozó (EK) rendeletét. 2003. október 29. COM (2003) 644 végleges: I. kötet

EC (2003-B) Javaslata Vegyianyagok Regisztrációjára, Értékelésére, Engedélyezésére és Korlátozására (REACH), létrehozva egy Európai Vegyianyag Ügynökséget és módosítva az 1999/45/EK irányelvet valamint az Perzisztens Szerves Szennyezőkre vonatkozó (EK) rendeletét. 2003. október 29. COM (2003) 644 végleges: II kötet – a Rendreletre vonatkozó javaslat I - IX melléklete.

EC (2003-C) Javaslata Vegyianyagok Regisztrációjára, Értékelésére, Engedélyezésére és Korlátozására (REACH), létrehozva egy Európai Vegyianyag Ügynökséget és módosítva az 1999/45/EK irányelvet valamint az Perzisztens Szerves Szennyezőkre vonatkozó (EK) rendeletét. 2003. október 29. COM (2003) 644 ideiglenes verzió; III. kötet - a Rendreletre vonatkozó javaslat X melléklete, A rész

EC (2003-D) Javaslata Vegyianyagok Regisztrációjára, Értékelésére, Engedélyezésére és Korlátozására (REACH), létrehozva egy Európai Vegyianyag Ügynökséget és módosítva az 1999/45/EK irányelvet valamint az Perzisztens Szerves Szennyezőkre vonatkozó (EK) rendeletét. 2003. október 29. COM (2003) 644 ideiglenes verzió; IV kötet - a Rendreletre vonatkozó javaslat X melléklete, B rész.

EC (2003-E) Javaslata Vegyianyagok Regisztrációjára, Értékelésére, Engedélyezésére és Korlátozására (REACH), létrehozva egy Európai Vegyianyag Ügynökséget és módosítva az 1999/45/EK irányelvet valamint az Perzisztens Szerves Szennyezőkre vonatkozó (EK) rendeletét. 2003. október 29. COM (2003) 644 ideiglenes verzió; V kötet - a Rendreletre vonatkozó javaslat X melléklete, C rész.

EC (2003-F) Javaslata Vegyianyagok Regisztrációjára, Értékelésére, Engedélyezésére és Korlátozására (REACH), létrehozva egy Európai Vegyianyag Ügynökséget és módosítva az 1999/45/EK irányelvet valamint az Perzisztens Szerves Szennyezőkre vonatkozó (EK) rendeletét. 2003. október 29. COM (2003) 644 végleges: VI kötet– a Rendreletre vonatkozó javaslat XI – XVII. melléklete (tartalmazza a módosított Pénzügyi Nyilatkozatot a 247. és az azt követő oldalakon).

ECB (2003) Az új vegyianyagok bejelentése az a veszélyes anyagok osztályozására, csomagolására és címkézésére vonatkozó 67/548/EGK direktívának megfelelően. Már nem polimer lista. EUR 20853 EN (elérhető az ECB weboldaltól).

ECB (2005) A 67/548/EGK irányelv hatodik és hetedik módosításának (79/831/EGK és 92/32/EGK irányelv) megvalósítására vonatkozó határozatok kézikönyve. Nem bizalmas verzió. EUR 20519 EN. Frissített verzió: 2005. június.

Európai Parlament (2005) Az Európai Parlament törvényerejű határozata Az Európai Parlament és a Tanács javaslatáról a Vegyianyagok Regisztrációjára, Értékelésére, Engedélyezésére és Korlátozására (REACH), létrehozva egy Európai Vegyianyag Ügynökséget és módosítva az 1999/45/EK irányelvet valamint az Perzisztens Szerves Szennyezőkre vonatkozó (EK) rendeletét. (2005) november 17. P6\_TA-PROV(2005)11-17

Geiss F, Del Bino G, Blech G, és munkatársai. (1992) Az EC piacon forgalmazott vegyianyagok EINECS listája. Tox Env Chem Vol. 37, p. 21-33.

Rasmussen K, Christ G and Davis JB (1998) Polimerek regisztrációja 67/548/EGK irányelv szerint. Tox Env Chem Vol. 67, pp. 251-261.

Rasmussen K, Pettauer D, Vollmer G és munkatársai. (1999) Az EINECS összeállítás: az UVCB anyagok leírása és meghatározása. Tox Env Chem Vol. 69, pp. 403-416.

US EPA (1978) TSCA PL 94-469 Vegyianyagok listája. Addendum I. Finomítói anyagáramokra vonatkozó általános fogalmak. US EPA, Mérgező anyagok Hivatala, Washington DC 20460.

US EPA (2005-A) Mérgező anyagokra vonatkozó törvény listája: két vagy több anyagot tartalmazó termékek regisztrációja: formulázott és a törvénynek megfelelő keverékek..  
[Http://www.epa.gov/opptintr/newchems/mixtures.txt](http://www.epa.gov/opptintr/newchems/mixtures.txt).

US EPA (2005-B) Mérgező anyagokra vonatkozó törvény listája: két vagy több anyagot tartalmazó termékek regisztrációja: komplex reakciótermékek. [Http://www.epa.gov/opptintr/newchems/rxnprods.txt](http://www.epa.gov/opptintr/newchems/rxnprods.txt).

US EPA (2005-C) Mérgező anyagokra vonatkozó törvény listája: egyes, változó hosszúságú szénláncokat tartalmazó anyagok (az alkil tartomány CX-Y jelzéssel adandó meg) regisztrációja  
[Http://www.epa.gov/opptintr/newchems/alkyl-rg.txt](http://www.epa.gov/opptintr/newchems/alkyl-rg.txt).

US EPA (2005-D) Mérgező anyagokra vonatkozó törvény listája: Ismeretlen vagy Változó összetételű anyagok, Komplex reakciótermékek és Biológiai anyagok regisztrációja: UVCB anyagok.  
[Http://www.epa.gov/opptintr/newchems/uvcb.txt](http://www.epa.gov/opptintr/newchems/uvcb.txt).

UBA (2000) Umweltbundesamt (Szövetségi Környezetvédelmi Ügynökség) Ausztria. Információk gyűjtése enzimekről. Zárójelentés. Az Osztrák Szövetségi Környezetvédelmi Ügynökség és az Egyetemek közötti Technológiai, Munkaügyi és Kulturális Kutató Központ (IFF/IFZ) közötti együttműködés. Szerződés száma B4-3040/2000/278245/MAR/E2.

Vollmer és munkatársai (1998) Az EINECS összeállítása: Anyagok, szennyeződések és keverékek leírása és meghatározása. *Tox Env Chem Vol. 65*, p. 113-122.

Weininger (1988) SMILES, egy kémiai nyelv és információs rendszer. 1. A módszer és a jelölési szabályok ismertetése; *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*; 1988; 28(1); 31-36.

## I. FÜGGELÉK - TÁJÉKOZATÓ ESZKÖZÖK

Ez a függelék olyan weboldalakat, adatbázisokat és kézikönyveket sorol fel, amelyek hasznosak lehetnek a megfelelő IUPAC, CAS és EC nevek, CAS és EK számok, összegképletek és szerkezeti képletek, SMILES kódok és az anyagok azonosításához szükséges egyéb paraméterek megtalálásában. Ipari adatbázisokat és tájékoztatókat nem adunk meg..

Általános ismeretek		
Anyag azonosító paraméter	Forrás	A forrás leírása
Általános	<a href="http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html">http://sis.nlm.nih.gov/chemical.html</a>	Adatbázis és eszköz család, a felhasználót segíti kémiai adatok keresésében.
	<a href="http://chemfinder.cambridgesoft.com/">http://chemfinder.cambridgesoft.com/</a>	Ingyenes adatbázis, kémiai szerkezeteket, fizikai tulajdonságokat, valamint a tárgyhoz tartozó ismeretekhez hiperhivatkozásokat tartalmaz.
	<a href="http://www.accelrys.com/accord/productlisting.html">http://www.accelrys.com/accord/productlisting.html</a>	Kémiai szoftver; Betűrendes terméklista
	<a href="http://www.syrres.com/esc/free_demos.htm">http://www.syrres.com/esc/free_demos.htm</a>	Ingyenes online keresés a következő adatbázisokban: Környezeti sors adatbázis; KOW (online Log P) ; PHYSPROP (fizikai tulajdonságok)

Név és más azonosítók		
Anyag azonosító paraméter	Forrás	A forrás leírása
IUPAC név	<a href="http://www.iupac.org">http://www.iupac.org</a> vagy specifikusabb weboldalak: <a href="http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html#inorganic">http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html#inorganic</a> (szervetlen) <a href="http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html">http://www.iupac.org/publications/books/seriestitles/nomenclature.html</a> (általános)	A IUPAC hivatalos weboldala
	<a href="http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac">http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac</a>	A IUPAC kémiai nevezéktana és javaslatai (A IUPAC irányítása alatt)
	Nevezéktan a szerves kémiában (Kék könyv) Pergamon, 1979 [ISBN 0-08022-3699]	A IUPAC nomenklatura alap kiadványai, frissítés várható 2006-ban.
	Tájékoztató szerves vegyületek IUPAC szerinti megnevezéséről (javaslatok, 1993) (kiegészítő Kék könyv) Blackwell Science, 1993 [ISBN 0-63203-4882]	A IUPAC nomenklatura alap kiadványai, frissítés várható 2006-ban..
	Nevezéktan a szervetlen kémiában (javaslatok, 1990) (Piros könyv); Blackwell Science, 1990 [ISBN 0-63202-4941]	A IUPAC nomenklatura alap kiadványai, frissítés várható 2005 júliusában.

Név és más azonosítók		
Anyag azonosító paraméter	Forrás	A forrás leírása
IUPAC név	Biokémiai nevezéktan és egyéb dokumentumok (Fehér könyv) Portland Press, 1992 [ISBN 1-85578-005-4]	A IUPAC nomenklatura alap kiadványai
	A kémiai nevezéktan alapelvei: tájékoztató a IUPAC javaslatokról Blackwell Science, 1998 [ISBN 0-86542-6856]	Bevezető kötet, minden vegyületfajttal foglalkozik.
IUPAC név	<a href="http://www.acdlabs.com/products/name_lab">http://www.acdlabs.com/products/name_lab</a>	Kereskedelmi forgalomban lévő számítógépes program, amely nagyon hasznos lehet közepesen bonyolult szerkezetek megnevezéséhez. Kis molekulára is kapható ingyenes szoftver (IUPAC által javasolt)
	<a href="http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature">http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature</a>	IUPAC szerves kémiai nomenklatúrája (IUPAC által javasolt)
	<a href="http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm">http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/93/r93_671.htm</a>	Szerves vegyületek jóváhagyott triviális és részben szisztematikus neveinek teljes listája.
	<a href="http://www.chemexper.com/">http://www.chemexper.com/</a>	A ChemExper célja közös és ingyenes hozzáférésű internetes kémiai adatbázis létrehozása. Ez az adatbázis a vegyianyagokat a fizikai jellemzőikkel együtt tartalmazza. Mindenki feltehet kémiai információt és kereshet információt egy webes kereső használatával.
IUBMB nomenklatura	<a href="http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/">http://www.chem.qmul.ac.uk/iubmb/</a> or <a href="http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb">http://www.chem.qmw.ac.uk/iubmb</a>	IUBMB biokémiai nomenklatura adatbázis (az IUBMB irányítása alatt)
Egyéb nevek	<a href="http://www.colour-index.org">http://www.colour-index.org</a>	Színindex, általános nevek; Nemzetközi Színindex, negyedik online kiadás
	<a href="http://pharmacos.eudra.org/F3/cosmetic/cosm_inci_index.htm">http://pharmacos.eudra.org/F3/cosmetic/cosm_inci_index.htm</a>	INCI (Kozmetikai komponensek Nemzetközi Nevezéktana, International Nomenclature Cosmetic Ingredients), hivatalos INCI weboldal
Egyéb azonosítók	<a href="http://www.cenorm.be">http://www.cenorm.be</a>	CE szabványok, Hivatalos európai CE-oldal
EK szám	<a href="http://ecb.jrc.it/">http://ecb.jrc.it/</a>	Az Európai Vegyianyag Ügynökség Hivatalos weboldala. ESIS: keresés az EINECS-ben, ELINCS-ben, NLP-ben és 67/548/EGK I. mellékletében.
CAS szám	<a href="http://www.cas.org">http://www.cas.org</a>	A CAS regisztráló szolgálat hivatalos weboldala
	<a href="http://www.chemistry.org">http://www.chemistry.org</a>	Az American Chemical Society hivatalos weboldala

Összegképlet és szerkezeti képlet		
Anyag azonosító paraméter	Forrás	A forrás leírása
SMILES	<a href="http://cactus.nci.nih.gov/services/translate/">http://cactus.nci.nih.gov/services/translate/</a>	Ingyenes SMILES generátor
	<a href="http://www.daylight.com/smiles/f_smiles.html">http://www.daylight.com/smiles/f_smiles.html</a>	Tények és ingyenes SMILES generátor
Molekulasúly és SMILES	<a href="http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html">http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html</a>	ACDChemsketch, ingyenes szoftver (kereskedelemben is kapható)
Néhány fizikai-kémiai paraméter	<a href="http://www.epa.gov/opptintr/exposure/docs/episuite.htm">http://www.epa.gov/opptintr/exposure/docs/episuite.htm</a>	Az EPI (Értékelő program interfész, Estimation Programs Interface) Suite™ egy Windows® alapú programcsomag, fizikai-kémiai tulajdonságok és környezeti sors becslésére szolgáló modellekkel, kifejlesztője az EPA Környezetszennyeződést Megelőző Hivatala (Office of Pollution Prevention Toxics) és a Syracuse Research Corporation (SRC).





## II. FÜGGELÉK MŰSZAKI TÁJÉKOZTATÓ ANYAG AZONOSÍTÓ PARAMÉTEREK SZERINT

Az ebben a függelékben található információt a műszaki útmutató dokumentum azoknak a felhasználóinak szánjuk, akik számára nem ismerősek a megnevezés technikai szabályai, a különböző regiszter-számok használata, az összegképletek és a szerkezeti képletek jelölési szabályai, a spektrális adatok stb.

Egy általános bevezetőben összefoglaljuk az alapelveket, és tájékoztatjuk a felhasználót a teljeskörű információ forrásáról.

Ez az áttekintés egy egyszerűsített anyag, nem teljes és minden részletre kiterjedő, és a professzionális felhasználó számára nem eléggé részletes. Semmi esetre sem tekinthető a Hivatalos forrással egyenértékűnek.

### 1 Név (nevek) IUPAC-ban vagy más nemzetközi nomenklatúrában

A regisztrációkor meg kell adni az anyag nevét angolul a IUPAC nevet, vagy más egyértelműen meghatározott, nemzetközileg elfogadott nevet.

A IUPAC név a nemzetközi szabványos kémiai nomenklatúrán alapul, amelyet a IUPAC nemzetközi szervezet alakított ki. A IUPAC rövidítés jelentése: International Union of Pure and Applied Chemistry (Tiszta és alkalmazott kémia nemzetközi szervezete, hivatkozások az 1. függelékben találhatóak). A IUPAC nomenklatúra a kémiai anyagok megnevezésének szisztematikus módja, szerves és szervetlen anyagoké egyaránt. A IUPAC nomenklatúrában előtagokat, utótagokat és közti tagokat használunk az anyag funkciós csoportjai típusának és helyzetének megnevezésére.

**penta-1,3-dien-1-ol**, ebben a példában:

az előtag **penta-1,3-**

a közti tag **-di** és

az utótag **-ol**

**en-** a név alapja, a gyökér név.

A szabályokat néhány év alatt alakították ki, és folyamatosan változtatják a változatos molekulákkal rendelkező új komponensek, az adódott ellentmondások és zavarok kezelésére. A IUPAC szabályait csak jól azonosítható anyagokra lehet használni.

A következőkben általános tájékoztatást adunk egy IUPAC név felépítéséről. A részleteket a műszaki útmutató dokumentum 4. fejezetében találja.

#### 1.1 Szerves anyag

1. lépés Azonosítsa a C-atomok számát a leghosszabb folytonos szénláncban; Ez a szám határozza meg a gyökér név előtagját, a név első részét:

Szénatomok száma	gyökér
1	meth-
2	eth-
3	prop-
4	but-
5	pent-
6	hex-
7	hept-
8	oct-
N	....

2. lépés Határozza meg a lánc telítettségét; a lánc telítettsége határozza meg a gyökér név utótagját, a második részt::

Telítettség	Kötések	Utótag
Telítetlen	Kettős	-én
	Hármas	-in
Telített	-	-án

Több kettős vagy hármas kötés esetén a kötések 'mono', 'di', 'tri', stb. szavak jelzik az utótag előtt:

### **Pentén 2 kettős kötéssel: pentadién**

3. lépés Szerkessze egybe a gyökér névvel az előtagot, az utótagot és a kiegészítéseket.

NB: Gyökér névként használhatók a IUPAC által jóváhagyott triviális és szemi-szisztematikus nevek:

### **Benzene (benzol), toluene (toluol), stb.**

4. lépés Használja a következő táblázatot:

- Azonosítsa a szubsztituenseket és/vagy funkciós csoportokat: szénatomokat tartalmazó vagy azokat nem tartalmazó csoportok, amelyek az 1. lépésben meghatározott szénlánchoz kapcsolódnak;
- Határozza meg a szubsztituensek és/vagy funkciós csoportok elsőbbségét;
- Adja hozzá az első szubsztituenshez/funciós csoport utótagját, majd a többiét is az elsőbbségnek megfelelően;
- Adja hozzá a többi szubsztituens és funkciós csoport előtagját betűrendben .

Elsőbbség	Csoport	Képlet	Utótag	Előtag
1	Karbonsav	R-COOH	-oxilsav	Karboxil
2	Észter	R-CO-O-R	-oát	-
3	Amid	R-CONH <sub>2</sub>	-amid	Carbamoil
4	Cianid	R-CN	-nitril	Ciano
5	Aldehyd	R-CHO	-al	Oxo
6	Keton	R-CO-R	-on	Oxo
7	Alkohol	R-OH	-ol	Hidroxil
8	Tiol	R-SH	-tiol	Szulfanil
9	Amin	R-NH <sub>2</sub>	-amin	Amino

## 1.2 Szervetlen anyagok

### 1.2.1 Egyszerű szervetlen anyagok megnevezése

A szervetlen anyagok megnevezése egy szabály-rendszeren alapul (IUPAC piros könyv, lásd 7.1. hivatkozás) ennek az alapjait alább ismertetjük:

- 1 Az egy atomos anionokat -ide (-id) utótaggal nevezzük meg:

**O<sup>2-</sup> oxide (oxid)**

- 2 Az egyszerű ionos vegyületekben a kation nevét az anion neve követi. Az 1-nél nagyobb töltésű kationok töltését római számokkal írjuk zárójelben, közvetlenül az elem neve után::

**Cu<sup>2+</sup>: copper (II) [réz(II)]**

- 3 A hidratokat úgy nevezzük meg, mint az ionos vegyületeket, majd egy számot jelölő előtag következik, és a -hydrate (hidrát) szó. A számot jelölő előtagok: mono-, di-, tri-, tetra-, penta-, hexa-, hepta-, octa-, nona-, deca-:

**CuSO<sub>4</sub> · 5H<sub>2</sub>O : "copper(II) sulphate pentahydrate" („réz (II) szulfát pentahidrát)**

NB egy adott fém só hidratjai és a kristályvizet nem tartalmazó anhidrátok „azonos anyagnak” tekintendők.

- 4 A molekuláris szervetlen vegyületeket az egyes elemek előtti, számot jelentő előtaggal (lásd a hidratoknál) kell megnevezni. A nagyobb elektronegativitású elem van hátrébb, -ide (-id) utótaggal:

**CO<sub>2</sub> carbon dioxide (széndioxid), és CCl<sub>4</sub> carbon tetrachloride (széntetraklorid).**

- 5 A savakat aszerint az anion szerint kell megnevezni, amelyik vízben való oldásukkor képződik. Több lehetőség van:

- a Ha vízben oldva a sav disszociál, és az anion angol neve "x"-ide („x"-id), akkor a sav angol neve hydro-"x"-ic acid (hidrogén- „x"-id) :

**hydrochloric acid (hidrogén-klorid) képezi a chloride (klorid) aniont.**

- b Ha vízben oldva a sav disszociál, és az anion angol neve “x”-ate („x”-át), akkor a sav angol neve “x”-ic acid:

**chloric acid (klórsav) vízben disszociálva chlorate (klorát) aniont képez.**

- c Ha vízben oldva a sav disszociál, és az anion angol neve “x”-ite („x”-it), akkor a sav angol neve “x”-ous acid („x”-os sav):

**chlorous acid (klóros sav) disszociálva chlorite (klorit) anionokat képez.**

### 1.2.2. Ásványi anyagok megnevezése

A komplex ásványok általában három vagy több elemet tartalmaznak. A legtöbb jelenlévő elem oxigénhez kapcsolódik, és az azonosítás egyszerűsítése érdekében ezeket a komplex vegyületeket a mineralógusok oxidokból felépített anyagoknak tekintik, vannak közöttük bázikus és vannak savas jellegűek is. Például szilikátoknál az a rendszer alakult ki, hogy vagy az oxidok számának összegével írják le őket, vagy a kovásvav sóiként vagy aluminoszilikátként. Tehát a kalcium ortoszilikát képlete lehet  $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ , mint különálló oxidok elegye, vagy  $\text{Ca}_2\text{SiO}_4$ , az ortokovasav  $\text{H}_4\text{SiO}_4$  kalcium sója. Ugyanez alkalmazható más komplex ásványi oxidra – minden oxid előtt egy előtaggal nevezik meg őket (például  $\text{Ca}_3\text{SiO}_5 = \text{Trikalcium szilikát} = 3\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$ ). Egyes iparágakban további egyszerűsítéseket vezettek be az összegképlet egyszerűsítésére. Például a Portland cement klinker,  $2\text{CaO}\cdot\text{SiO}_2$  (kalcium ortoszilikát vagy dikalcium szilikát) rövidítve  $\text{C}_2\text{S}$ , ahol  $\text{C} = \text{CaO}$  és  $\text{S} = \text{SiO}_2$ . További részletek az ásványtani vagy ipari szövegekben találhatóak, például a komplex ásványok megnevezésére vagy azonosítására.

### 1.3. Természetes anyagok és rokon vegyületek

A IUPAC kialakította a természetes anyagok szisztematikus megnevezésének a szabályait. Röviden, ez azt jelenti, hogy természetes eredetű anyagoknál a név, ha ez lehetséges, annak az organizmusnak a család, nemzetség és faj nevének alapul, amelyből az anyagot kivonták:

**Egy hipotetikus fehérje, *Hypothecalia Exemplare* esetén a nevek a *hypothecalia* és/vagy *exemplare* szavakon alapulnak, például *Horse Exemplare***

Ha lehetséges, a név fejezze ki a természetes eredetű termék ismert vagy valószínű eloszlását. Adott esetben az osztály vagy a rend is használható olyan anyag nevének alapjaként, amely több rokon családban is előfordul. Az ismeretlen szerkezetű természetes eredetű anyagok neve nem tartalmazhat előtagokat, utótagokat és/vagy közti tagokat, amelyeket a szerves anyagok nomenklatúrájában használnak.:

**Horse exemplare kondenzációs terméke, Valarine az N-terminushoz adva**

Sok természetes eredetű anyag jól definiált szerkezetű anyag-csoportba tartozik, amelyek mindegyikét jellemezni lehet egymáshoz nagyon hasonló alapszerkezetekkel, vagyis mindegyik levezethető egy alapszerkezetből. Ezeknek a természetes eredetű anyagoknak és származékaiknak a szisztematikus neve egy megfelelően kiválasztott alapszerkezeten alapul:

**Jól ismert alapszerkezetek az alkaloidok, szteroidok, terpenoidok és vitaminok**

Az alapszerkezet tartalmazza azt az alapvázat, amely az adott csoportba tartozó anyagok többségében közös. A természetes eredetű anyagokat és származékaikat az alapszerkezet után

nevezik meg, előtagok, utótag és közti-tagok alkalmazásával, amelyeknek a következő jelentése van:

- a szerkezet vázának módosítása
- a váz atomjainak helyettesítése
- az alapszerkezet nevével jelzett hidrogénezettségben bekövetkezett változás
- az alapszerkezet hidrogén atomjait helyettesítő atomok és csoportok
- azok a konfigurációk, amelyek még nincsenek benne az alapszerkezet nevében, vagy ami abban benne van, az megváltozott

### **A tiamin klorid B<sub>1</sub> vitaminként is ismert**

A természetes eredetű és az azokkal rokon anyagok szisztematikus megnevezésére vonatkozóan további, részletesebb információkért forduljon a IUPAC-hoz (lásd 1. melléklet).

#### **1.4. A IUPAC név nem vezethető le**

Ha egyes anyagokra a IUPAC név nem vezethető le, akkor használhatók más, nemzetközileg elismert nomenklatúrák, amelyek az adott anyagokra specifikusak, például:

- Ásványok és ércek; mineralógiai nevek;
- Olajtermékek
- Színindex általános nevek<sup>3</sup>;
- Olaj adalékok;
- INCI (International Nomenclature Cosmetic Ingredients, Kozmetikai komponensek nemzetközi nevezéktana)<sup>4</sup>;
- SDA (Soap and Detergent Association, Szappan és Mosószer Szövetség) nevek felületaktív anyagokra<sup>5</sup>;
- Satöbbi.

## **2. Egyéb nevek**

Minden nevet és/vagy nyilvános azonosítót, minden olyan nyelven, amelyen az anyagot forgalmazzák vagy forgalmazni fogják az EU-ban (például a kereskedelmi nevek) előnyös szerepeltetni a REACH keretében végzett regisztrációkor. Ide tartoznak a kereskedelmi nevek, szinonimák, rövidítések stb.

3. <http://www.colour-index.org>, Nemzetközi színindex, negyedik online kiadás

4. <http://dg3.eudra.org/F3/inci/index.htm>, Hivatalos INCI weboldal (International Nomenclature Cosmetic Ingredients, Kozmetikai komponensek nemzetközi nevezéktana)

5. <http://www.cleaning101.com>, Hivatalos SDA weboldal (Soap and Detergent Association, Szappan és Mosószer Szövetség)

## **3 EK szám EINECS, ELINCS vagy NLP listákról (EC listák)**

Az EK szám, vagyis az EINECS, ELINCS vagy NLP szám, az anyag hivatalos számjele az Európai Unióban. Az EK szám az EINECS, ELINCS és NLP, valamint az Európai Vegyianyag Ügynökség hivatalos kiadásáiban szerepel.

Az EK szám 7 számjegyű,  $x_1x_2x_3-x_4x_5x_6-x_7$  típusú. Az első számjegy azt a listát jelzi, amelyikbe az anyag tartozik:

Lista	Az EK szám első számjegye
EINECS	2 vagy 3
ELINCS	4
NLP	5

#### 4. CAS név és CAS szám

A Chemical Abstracts Service (CAS), az American Chemical Society (ACS) részlege, a regisztrációs adatbázisába kerülő minden vegyianyaghoz rendel egy a CAS nevet és számot. A neveket és számokat sorban rendelik hozzá a CAS tudósai által azonosított anyagokhoz. Minden, a Chemical Abstracts Service-nél regisztrált anyagnak van egy CAS nomenklatúra szerinti neve, amelyet az ACS az ACS nomenklatúra bizottságának a javaslatára elfogad (a hivatkozásokat lásd az 1. függelékben).

##### 4.1. CAS név

A Chemical Abstract Service által adott CAS név eltér a IUPAC névtől. A CAS nomenklatúrája korlátozott számú kritériumon alapul, amelyek nem minden esetben elegendőek ahhoz, hogy az anyag nevét le lehessen vezetni. Ezért általánosságban azt javasoljuk, hogy a pontos CAS névért forduljanak a Chemical Abstract Service-hez.

Röviden, a nomenklatúra alapszabályai a következők:

- Ki kell választani az anyagból egy „fő” részt, amely a címszó vagy az alapvegyület.
- A szubsztituenseket a címszó/ alapvegyület után kell felsorolni, erre mint fordított sorrendre hivatkoznak.
- Ha több szubsztituens van, akkor ezeket betűrendben kell felsorolni (az előtagokat is):

**CAS név: o-Xylen-3-ol; IUPAC név: Benzene, 1,2-dimetil, 3-hydroxy,**

##### 4.2. CAS szám

A CAS számokat Chemical Abstract Service-től lehet beszerezni.

A CAS szám legalább öt számjegyű, kötőjelekkel három részre osztva. A második rész mindig két számjegyet tartalmaz, a harmadik egy számjegyet.

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

A CAS-szám ellenőrzésére egy „ellenőrző összeg” használható:

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

A CAS számnak az ellenőrző összeg alapján helyesnek kell lennie.

### 4.3. Anyag regisztrációja a CAS-ban

A CAS regisztrációs szolgáltatása rendeli hozzá a CAS számokat a vegyi anyagok következő típusaihoz:

- Egy-összetevőjű anyagok, ide tartoznak:
  - Teljeskörűen meghatározható molekulaszervezetek (vagyis minden atom és minden hozzájuk tartozó kémiai kötés ismert). Figyelembe kell venni a helyzeti izomereket, a sztereoizomereket és a sókat is;
  - Olyan nevek, amelyek világosan mutatják az anyag kémiai szerkezetét;
- Specifikus arányok a sóknál és a kondenzációs termékeknel;
- Természetes ásványok;
- Specifikus ötvözetek, ionok, izotópok és elemi részek;
- Komplex anyagok, például:
  - Kémiaiilag módosított biológiai anyagok;
  - Komplex reakciótermékek;
  - Ipari eljárások anyagáramai.

A CAS regisztrációjához egy űrlapot kell kitölteni, amely a [www.cas.org](http://www.cas.org) weboldaltól tölthető le. Amint az az űrlapról is látható, a következő adatokra van szükség, a felsorolás szerinti preferencia sorrendjében:

- Jól azonosítható vegyi anyagok:
  - Szerkezeti képlet;
  - Szisztematikus kémiai név;
  - Általános név (nevek);
  - Összegképlet;
- Complex reakciótermékek
  - A reaktánsok felsorolása és a kémiai reakció megnevezése;
  - Reakcióegyenlet;
  - A termék jellemző összetétele;
- Növényi és állati termékek
  - Nemzetség/faj valamint az eredet egyéb egyértelmű általános megnevezései;
  - Az extrakció módszere;
  - A további kémiai feldolgozás leírása;
- Ipari eljárások termékei
  - Prekursorok és az előállítás módszere;
  - Az ipari eljárást bemutató diagram, megjelölve azt a pontot, ahol az anyagot izolálták;
  - Az eljárás leírása:

**Katalitikus krakk, parafinmentesített**

- Szénatomszám (alkil) tartomány :

**C4-től C12-ig**

- Fizikai tulajdonságok:

**Forrási tartomány, viszkozitás, szilárd, salak**

- A fő kémiai összetétel;
- Eredet:

**Olaj, szén**

- Biotechnológiai termékek:
  - Szekvencia adatok;
  - Biológiai alapanyag megnevezése, a nemzetség és a faj megnevezésével;
  - Enzim aktivitás.

## **5 Egyéb azonosító kódok**

Meg lehet adni más, nemzetközileg elismert azonosító kódokat, például:

- UN szám;
- Színindex Szám;
- Színezék szám;
- Satöbbi.



## 6. Összegképlet, szerkezeti képlet és SMILES

### 6.1. Összegképlet

Az összegképlet határozza meg az anyag egy különálló molekulájában a jelenlévő elemeket az atomjuk vegyjeleivel, és meghatározza, hogy az adott elemből hány található a molekulában.

Az összegképleteket a (hagyományos) Hill rendszerben kell megadni, és ezenkívül a CAS rendszere szerint, amely különbözik a Hill rendszer szerinti képlettől.

A Hill módszer alkalmazásakor a következő lépéseket kell végrehajtani:

1. Azonosítsa az elemeket és sorolja fel a vegyjeleket;
2. Rendezze az elemeket megfelelő sorrendbe:
  - a. Széntartalmú anyagok:  
A vegyjeleikkel feltüntetett elemeket a következő sorrendbe kell rendezni:
    - (1) Szén;
    - (2) Hidrogén;
    - (3) A többi elem betűrendben:

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

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

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

- b. Szenet nem tartalmazó anyagok:  
Az elemeket abc-rendben kell felsorolni :

**Sósav: ClH**

3. Minden olyan elem esetében, ahol az atomok száma egynél nagyobb, az atomok számát alsó indexben kell jelezni az elem vegyjele után;
4. Az olyan adatot, amely nem tartozik a fő szerkezethez, írja az összegképlet végére, ponttal vagy vesszővel elválasztva:

**Nátrium benzoát: C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>, nátrium só**

**Réz-szulfát dihidrát: CuO<sub>4</sub>S.2H<sub>2</sub>O**

Ha egy adott anyagra a Hill módszer nem alkalmazható, akkor az összegképletet más módszerrel kell megadni, például empirikus képletként, az ismert atomok és ismert arányaik egyszerű leírásával, vagy a Chemical Abstract Service által meghatározott képlettel (lásd a műszaki útmutató dokumentum 4. fejezetét).

### 6.2. Szerkezeti képlet

A szerkezeti képlet mutatja a molekulák helyzetét és egymással való kapcsolatukat az anyagon belül. A szerkezeti képletnek jeleznie kell az atomok, ionok vagy csoportok elhelyezkedését és a közöttük lévő kötések fajtáját. Jeleznie kell az izomereket is (cisz/transz), a kiralitást, az enantiomereket, stb.

A szerkezeti képletet különböző formátumokban lehet megadni: összegképlet formában és/vagy szerkezeti diagramként.

– *Szerkezeti képlet összegképlet formátumban*

1. Írja le az elemeket csoportonként, megjelenésük sorrendjében:

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

2. A szubsztituenseket zárójelben adja meg, közvetlenül az után az atom után, amelyhez kapcsolódik:

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

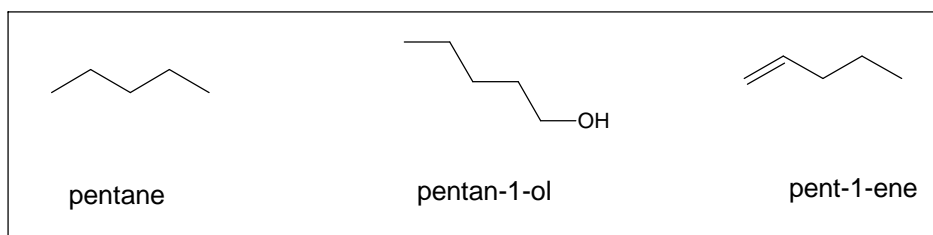
3. A kettős és hármas kötéseket a megfelelő csoportok között jelezze:

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

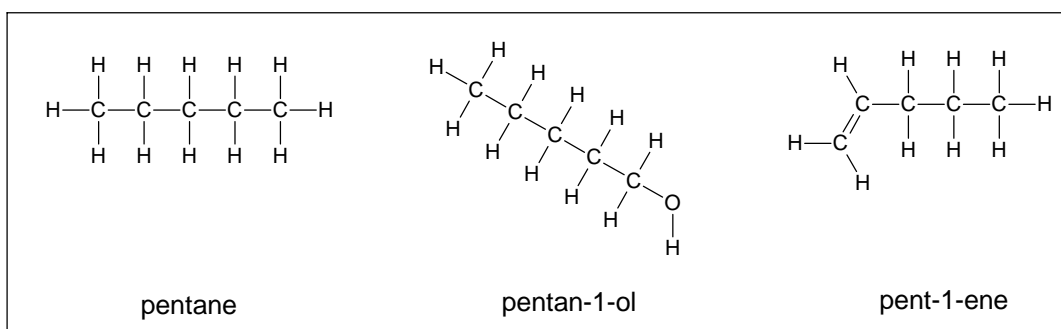
– *Szerkezeti képlet szerkezeti diagram formátumban*

A szerkezeti diagramban az elemeket és a közöttük lévő kötéseket két dimenziós vagy három dimenziós képen ábrázoljuk. Több módszer létezik:

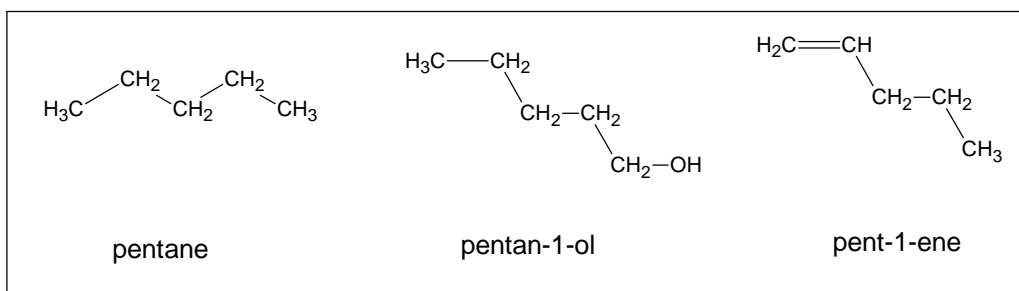
1. Feltüntetünk minden nem-szén elemet és az ezekhez kötődő hidrogéneket.



2. Minden elemet feltüntetünk a név alapján.



3. Feltüntetjük a szén és hidrogén atomokat csoportonként (például CH<sub>3</sub>), az összes nem-szén elemet, és az azokhoz kapcsolódó hidrogéneket.



### 6.3. SMILES jelölés

A SMILES betűrövidítés: Simplified Molecular Input Line Entry Specification (egyszerűsített molekuláris címszó specifikáció) (Weininger, 1988). Kémiai jelölési rendszer, amellyel a molekula szerkezete lineáris jelcsoporttal leírható. A standard SMILES rendszerben a molekula neve a szerkezetével rokon értelmű: közvetve a molekula kétdimenziós szerkezetét mutatja. Mivel a kétdimenziós kémiai szerkezeteket különböző módokon lehet lerajzolni, egy molekulának többféle helyes SMILES jelölése is lehet. A SMILES alapja a molekulák vegyérték modelljének jelölése; ezért nem alkalmazható olyan molekulákra, amelyeket nem lehet vegyérték modellel ábrázolni.

A SMILES jelölés az elemek vegyjeleivel jelölt atomokból, kötések, az elágazásokat jelző zárójelekből és a gyűrűs szerkezeteket jelző számokból áll. A SMILES jelölés a molekula gráfként jelöli, adott esetben jelzi a kiralitást. Azt SMILES jelölést, amely a szerkezetet csak az atomokkal és a kötésekkel írja le, általános SMILES-nak nevezzük; az izotópok és a kiralitás jelölésével kiegészített SMILES jelölést izomer SMILES-nak nevezzük.

A SMILES jelölésnek van néhány alapszabálya:

1. Az atomokat a vegyjelek jelölik;
2. Mindegyik atomot, a hidrogén kivételével, függetlenül kell megadni;
  - a. A “szerves csoport” elemeit: B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br és I zárójel nélkül és a hozzájuk tartozó hidrogének nélkül írjuk, ha a hidrogének száma megfelel a legkisebb normál vegyértéknek, összhangban a tényleges kötésekkel::

Elem “szerves csoportban”	“Legkisebb normál vegyérték”
B	3
C	4
N	3 és 5
O	2
P	3 és 5
S	2, 4 és 6
F	1
Cl	1
Br	1
I	1

- b. A “szerves csoport” elemeit zárójelbe kell tenni, ha a hidrogének száma nem egyezik meg a legkisebb normál vegyértékkel:

**Ammónium kation jelölése NH<sub>4</sub><sup>+</sup>**

- c. A nem a “szerves csoportba” tartozó elemeket zárójelben kell írni, és fel kell tüntetni a hozzájuk csatlakozó hidrogéneket.
3. Az alifás atomokat nagy betűvel írjuk, az aromás atomokat kis betűvel:

**a benzol jelölése: c1ccccc2 és a ciklohexán jelölése: C1CCCCC1**

4. A hidrogént csak a következő esetekben jelöljük:
- Elektromos töltésű hidrogén, vagyis proton [H<sup>+</sup>];
  - Másik hidrogénhez kapcsolódó hidrogén atom, például hidrogén molekula [H][H];
  - Egynél több más atomhoz kapcsolódó hidrogén atom, például hídképző hidrogén;
  - Izotóp hidrogén, például deutérium ([<sup>2</sup>H]);
  - Ha a hidrogén egy királis atomhoz kapcsolódik.
5. A kötések négy alapvető fajtáját a következőképpen jelöljük: s:

Kötés típusa	SMILES jelölés
Egyszeres	- (nem szükséges ábrázolni)
Kettős	=
Hármas	#
Aromás	kis betűk

6. A szubsztituenseket zárójelben adjuk meg, közvetlenül azután az atom után, amelyhez kapcsolódnak:

**2-metilbután jelölése: CC(C)CC**

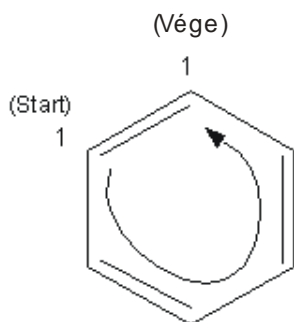
- a. A szubsztituenseket mindig közvetlenül az adott atom után tüntetjük fel; nem szerepelhetnek kettős kötés vagy hármass kötés jele után:

**n-Pentánsav (valeriánsav) jelölése: CCCCC(=O)O**

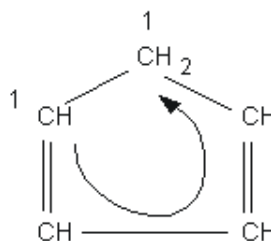
- b. A szubsztituenseken belüli szubsztituensek jelölése megengedett:

**2-(1-metiletil)bután jelölése: CC(C(C)C)CC**

7. A gyűrűs szerkezeteknél 1 és 9 számokat használunk a gyűrű induló és záró atomjának a jelölésére.
- Ugyanazt a számot használjuk egy gyűrű induló és záró atomjánál. Az induló és záró atomoknak kapcsolódnuk kell egymáshoz.
  - A számokat közvetlenül az induló és záró pozícióban lévő atomok jelei után kell írni.
  - Az induló és záró atomot lehet két egymást követő számmal jelölni.

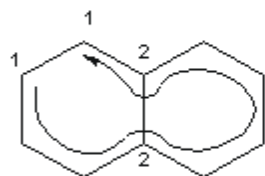


Benzol  
c1ccccc1

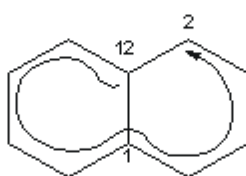


1,3-ciklopentadién  
C1=CC=CC1

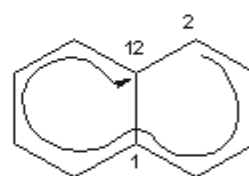
## A naftalin példája



c1ccc2ccccc2c1



c12ccccc1cccc2



c2ccccc1ccccc12

8. A több részből álló vegyületeket egyedi szerkezetekként vagy ionként ábrázoljuk, és ponttal választjuk el ("."). Az egymás melletti, ponttal (".") elválasztott atomok nem kapcsolódnak egymáshoz közvetlenül, hanem például Van der Waals kötéssel:

**Aminopropén hidroklorid jelölése: C=CC(N).HCl**

9. Az izomer konfigurációt dőlt vonallal jelöljük: "\" és "/". Ezek a jelek jelzik a két izomer kötés közötti irányt. (cisz = "/\" , transz = "/" /"). A SMILES a helyi kiralitást jelzi, ami azt jelenti, hogy a kiralitást teljes mértékben meg kell adni:

**cisz-1,2-dibróm-etén jelölése: Br/C=C\Br**

**transz-1,2- dibróm-etén jelölése Br/C=C/Br**

10. Az enantiomereket és a kiralitást a "@" jellel kell jelölni. A"@ " jel azt jelzi, hogy az királis atom a jel után felsorolt szomszédai az óramutató járásával ellenkező sorrendben vannak felsorolva. A"@@" jel azt jelzi, hogy a felsorolás az óramutató járása szerinti. A királis atomot és a "@" jelet szögletes zárójelbe kell tenni:

**2-klór-2-hidroxi-propionsav, jelölt kiralitással:**

**C[C@](Cl)(O)C(=O)(O)**

11. Az izotópokat úgy jelöljük, hogy az atom vegyjele elé írjuk az atomtömeggel azonos számot. Az atomtömeget csak szögletes zárójelben lehet megadni:

### **Szén-13 jelölése [13C] és Oxigén-18 jelölése [18O]**

A SMILES jelölés meghatározáshoz lehet néhány eszközt (SMILES generátorokat) használni (lásd az 1. függelék).

## **7. Az optikai aktivitásra vonatkozó adatok**

Az optikai aktivitás az aszimmetrikus anyagoknak az a képessége, hogy a síkban polározott fény síkját elforgatják. Ezeket az anyagokat a tükörképeikkel együtt enantiomereknek nevezzük, és van egy vagy több királis centrum a molekulájukban. Az enantiomerek geometriailag eltérően, de a kémiai és fizikai tulajdonságaik azonosak. Mivel az egyes enantiomerek másképpen hatnak a polarizált fényre, az optikai aktivitást fel lehet használni annak azonosítására, hogy melyik enantiomer van jelen a mintában, és ezáltal az anyag tisztasága is megítélhető. A forgatás mértéke a molekula egyedi jellemző tulajdonsága.

Az enantiomerek mindig egymással ellentétesen forgatnak a fényt: azonos mértékben polarizálják a fényt, de az ellenkező irányba. Az enantiomer keverékek optikai aktivitása ezért mutatja a két enantiomer arányát az anyagban. Az enantiomerek 50-50%-os keverékének az optikai aktivitása 0.

A mért forgatás függ a koncentrációtól, a mérőcső hosszától, a hőmérséklettől a fényforrás fényének hullámhosszától.

Az optikai aktivitás ezért az aszimmetrikus anyagok meghatározó paramétere, és ez az egyetlen paraméter, amely egy anyagot megkülönböztet a saját tükörképétől. Ezért, amikor arra van lehetőség, meg kell adni az anyag optikai aktivitását.

Az optikai aktivitás alapértékét fajlagos forgatásnak nevezik. A fajlagos forgatás az 5896 Ångström hullámhossznál 1 dm-es küvettában 1 g/ml koncentrációjú oldat forgatása. A fajlagos forgatás számításakor a mért forgatás értékét elosztják a küvetta hosszával (dm) és osztják a koncentrációval (g/ml).

Az optikai aktivitást többféle módszerrel lehet mérni. A legáltalánosabban használt módszerek:

- Optikai rotáció, amikor a mintán áthaladó polarizált fény síkjának az elfordulást mérik;
- Cirkuláris dikroizmus, amikor azt mérik, hogy a minta milyen mértékben abszorbeálja a jobbra és balra polarizált fényt.

Ha a minta a fényt jobbra forgatja (az óramutató járásával megegyezően), akkor azt jobbra forgató anyagnak nevezik és + jellel jelölik. Ha a fényt balra forgatja (az óramutató járásával ellentétesen), akkor balra forgató anyagnak nevezik és – jellel jelölik.

## **8. Molekulasúly vagy molekulasúly tartomány**

A molekulasúly az anyag egy molekulájának a súlya atomtömeg egységekben (atomic mass units, amu) vagy móltömegben (g/mol) kifejezve. A molekulasúlyt az anyag összegképletéből lehet kiszámítani: a molekulát alkotó atomok atomsúlyainak az összege. Egyes fehérjék vagy meghatározatlan reakcióelegyek esetében, amelyeknél nem lehet egy adott molekulasúlyt meghatározni, molekulasúly tartományt kell megadni.

Az anyagok molekulasúlyának meghatározására több módszert lehet használni:

- Gázok molekulásúlyának a meghatározására az Avogadro törvényt lehet alkalmazni, amely szerint adott hőmérsékleten és nyomáson bármelyik gáz azonos térfogata azonos számú molekulát tartalmaz.

$$PV = nRT = NkT$$

$n$  = a mólok száma

$R$  = univerzális gázállandó = 8.3145 J/mol K

$N$  = a molekulák száma

$k$  = Boltzmann állandó =  $1.38066 \times 10^{-23}$  J/K =  $8.617385 \times 10^{-5}$  eV/K

$k = R/NA$

$NA$  = Avogadro szám =  $6.0221 \times 10^{23}$  /mol

- Folyadékok és szilárd anyagok molekulásúlyának meghatározásához meg kell mérni a hatásukat egyes oldószerek olvadáspontjára, forráspontjára, gőznyomására vagy ozmózisnyomására;
- A tömegspektrometria nagyon pontos mérési módszer;
- Nagy molekulásúlyú komplex anyagok, például fehérjék vagy vírusok esetében a molekulásúlyt például az ülepedési sebességgel lehet meghatározni ultracentrifugában, vagy fényszórásos fotometriával;
- Van néhány olyan eszköz, amelyekkel ki lehet számítani a molekulásúlyt az anyag szerkezeti képletéből vagy az összegképletéből (lásd az 1. függelék).

## 9. Az anyag összetétele

Minden anyagra meg kell adni az összetételt a főbb összetevők, adalékok és szennyeződések megadásával, azoknak a szabályoknak és kritériumoknak megfelelően, amelyeket ezen műszaki útmutató dokumentum 4. fejezete tartalmaz.

Minden összetevőt, adalékot és szennyeződést megfelelően azonosítani kell a következőkkel:

- Megnevezés (IUPAC név vagy más nemzetközileg elfogadott név);
- CAS szám (ha van);
- EK szám (ha van).

Minden összetevő, adalék és szennyeződés koncentrációját meg kell adni (előnyösen súly százalékban vagy térfogat százalékban), és ha lehetséges, meg kell adni a kereskedelmi forgalomban lévő anyag koncentráció tartományát.

Az összetevőkre meg kell adni a jellemző tisztaságot százalékban az ipari sarzsok alsó és felső határértékeivel; az adalékokra és a szennyeződésekre a jellemző koncentrációkat vagy az alsó és felső határértékeket kell megadni. A megadott értékek összege általában legyen 100%.

## 10. Spektrális adatok

A spektrális adatok arra valók, hogy alátámasszák az egy-összetevőjű anyagokra megadott szerkezetet, vagy megerősítsék azt, hogy egy reakcióelegy nem készítmény. Többféle spektrumot lehet felvenni (ultraibolya, infravörös, magmágneses magrezonancia vagy tömegspektrum). Nem mindegyik módszer felel meg minden anyagnak. Ahol lehetséges, a műszaki útmutató dokumentum tájékoztatni fog arról, hogy az egyes anyagfajtákhoz milyen spektrumokat célszerű mellékelni (ECB, 2004; ECB, 2005).

Az egyes jól ismert módszerek használatánál a következő adatokat kell megadni magán a spektrumon, vagy a csatolt mellékletekben:

### *Ultraibolya-látható (UV-VIS) spektrum*

- Az anyag azonosítása;
- Az oldószer és koncentráció;
- Tartomány;
- A fő csúcsok helyzete és az abszorpció (az epszilon értékek);
- Sav hatása;
- Lúg hatása.

### *Infravörös (IR) spektrum*

- Az anyag azonosítása;
- Közeg;
- Tartomány;
- Eredmények (jelölje meg az azonosításhoz szükséges fő csúcsokat, például értékelje az ujjlenyomat tartományt).

### *Magmágneses rezonancia (Nuclear Magnetic Resonance, NMR) spektrum*

- Az anyag azonosítása;
- Atommag és frekvencia;
- Oldószer;
- Ha lehetséges, belső vagy külső referencia anyag;
- Eredmények (jelölje meg az azonosításhoz szükséges jeleket, valamint az oldószer és a szennyeződések jeleit);
- <sup>1</sup>H NMR spektrumok esetében meg kell adni az integrál görbét is;
- A gyenge NMR csúcsok intenzitását függőlegesen meg kell növelni, és az összetett jeleket értelmezni.

### *Tömegspektrum (Mass Spectroscopy, MS)*

- Az anyag azonosítása;
- Gyorsító feszültség;



- A minta bejuttatásának módja (közvetlenül, GC-n át stb.);
- Az ionizálás módja (elektronütközés, kémiai ionizálás, gerjesztés, stb)
- a molekulaion (M);
- az anyag azonosításában jelentős fragmensek;
- M/z értékek vagy a szerkezet azonosításához fontos csúcsok asszignációja;
- az összetett jeleket értelmezni kell.

Használhatók más, nemzetközileg elismert módszerek, ha a spektrumok adatai megerősítik az anyag azonosítását, például a belső szerkezetét. Erre példa a röntgendiffrakció alkalmazása összetett ásványi oxidok összetevőinek azonosításához és XRF a kémiai összetételük analízisére.

A következő általános követelményeket kell teljesíteni a spektrumok egyértelmű értékeléséhez:

- Jelölje meg a jelentős hullámhosszakat vagy más adatokat, értelemszerűen;
- Adjon meg kiegészítő adatokat, például a kiindulási anyagok spektrumait;
- Adja meg a használt oldószert és/vagy az egyes módszerek esetében lényegesnek számító részleteket;
- Jó másolatokat nyújtson be (ne az eredeti spektrumokat), helyesen jelölt léptékkal;
- Adja meg, hogy milyen koncentrációban használta az anyagot;
- Gondoskodjon arról, hogy az anyaghoz tartozó legintenzívebb csúcsok a legnagyobb skálaérték közelében legyenek.

## 11. Nagyteljesítményű folyadékkromatográfia, gázkromatográfia

Ha az anyag típusa ezt lehetővé teszi, az összetételét kromatogrammal kell megerősíteni. Például, egy megfelelő kromatogram alátámasztja a szennyeződések, adalékok és összetevők jelenlétét egy reakcióelegyben. Az anyagok elválasztásának és azonosításának legjobban ismert két módszere a gázkromatográfia (GC) és a nagyteljesítményű folyadékkromatográfia (high performance liquid chromatography, HPLC). A két módszer egy mobil fázis és egy stacionárius fázis kölcsönhatásán alapul, amelynek hatására egy keverék összetevői szétválnak.

A GC/HPLC kromatogramokon vagy a csatolt mellékleteken a következő adatokat kell megadni (ECB, 2004; ECB, 2005):

- *HPLC*
  - Az anyag azonosítása;
  - Az oszlop tulajdonságai (átmérő, töltet, hossz);
  - Hőmérséklet, vagy hőmérséklet tartomány, ha azt alkalmazták;
  - A mobil fázis összetétele, vagy összetétel tartománya, ha azt alkalmazták;
  - Az anyag koncentráció tartománya;
  - Detektálás módszere, például UV-VIS;
  - Eredmények (jelölje meg az anyag azonosítása szempontjából fontos csúcsokat);
- *GC*

- Az anyag azonosítása;
- Az oszlop tulajdonságai (átmérő, töltet, hossz);
- Hőmérséklet, vagy hőmérséklet tartomány, ha azt alkalmazták;
- Injektálás hőmérséklete;
- Vivőgáz, és a vivőgáz nyomása;
- Az anyag koncentráció tartománya;
- Detektálás módszere, például MS;
- A csúcsok azonosítása;
- Eredmények (jelölje meg az anyag azonosítása szempontjából fontos csúcsokat).

## **12. Az analitikai módszerek leírása**

A REACH IV. melléklete előírja, hogy a regisztráló írja le az analitikai módszereket és/vagy adja meg az anyag azonosításához használt módszerek irodalmi hivatkozásait, és adott esetben tegye meg ugyanezt a szennyeződések és az adalékok azonosításával kapcsolatban. Ezt az információt olyan részletességgel kell megadni, hogy a módszert reprodukálni lehessen.