



Bundesanstalt für Arbeitsschutz
und Arbeitsmedizin

REACH 2018 Seminar

Bielefeld, 02. Juni 2016

**Fokus: Stoffidentität – was unbedingt beachtet
werden muss**

Raimund Weiß, Bundesstelle für Chemikalien

Inhalt

Warum liegt der Fokus auf der Stoffidentität?

Wie ist ein Stoff definiert?

Welche Arten von Stoffen gibt es?

Abgrenzung Stoff und Gemisch

Was ist das SIP?

Die Stoffidentität – das A und O



Was ist ein Stoff – Artikel 3 Nr. 1 REACH

Stoff

- Chemisches Element und seine Verbindungen
- In natürlicher Form oder gewonnen durch ein Herstellungsverfahren
- Einschließlich der zur Wahrung seiner Stabilität notwendigen Zusatzstoffe
- Einschließlich der bedingten Verunreinigungen
- Aber mit Ausnahme von Lösungsmitteln, die von dem Stoff ohne Beeinträchtigung seiner Stabilität und ohne Änderung seiner Zusammensetzung abgetrennt werden können

Realstoff

Grundlage der Identifizierung unter REACH

Leitlinien zur Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen gemäß REACH und CLP



*http://echa.europa.eu/documents/10162/13643/substance_id_de.pdf

Welche Arten von Stoffen gibt es

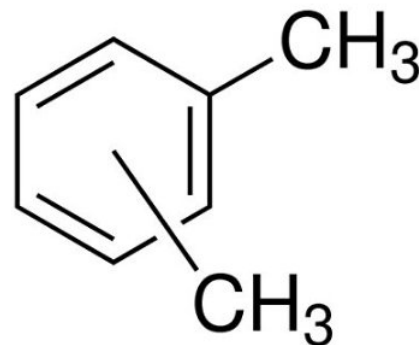
Definierte Stoffe

Stoffe mit einem
Hauptbestandteil
(mono-constituent substance)



Bsp.: KMnO_4

Stoffe mit mehreren
Hauptbestandteilen
(multi-constituent substance)



Bsp.: Xylol-Isomere

UVCB*-Stoffe

Qualitative oder quantitative
Zusammensetzung mehr oder
weniger unbekannt



Bsp.: Öl-basierte Stoffe

*Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials

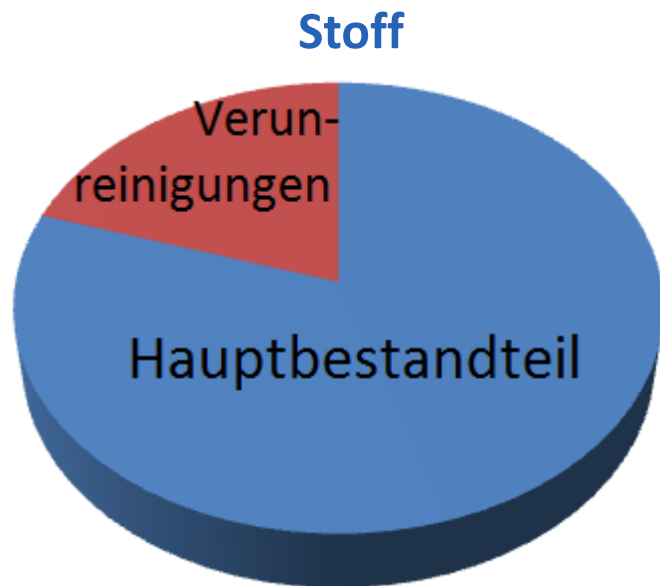
EG- vs. Listen-Nummer

EG Nummer	Quelle	Rechtlicher Status
2xx-xxx-x	EINECS (European INventory of Existing Commercial chemical Substances) List	offiziell
3xx-xxx-x	EINECS (European INventory of Existing Commercial chemical Substances) List	offiziell
4xx-xxx-x	ELINCS (European List of Notified Chemical Substances) List	offiziell
5xx-xxx-x	NLP (No-Longer Polymers) List	offiziell
Listen-Nummer	Quelle	Rechtlicher Status
6xx-xxx-x	Für Stoffe, die anhand CAS-Nr. identifiziert werden, automatisch zugeordnet	nicht offiziell
7xx-xxx-x	Für Stoffe, die nach Erkundigung validiert wurden, manuell von ECHA vergeben	nicht offiziell
8xx-xxx-x	Für Stoffe, die anhand CAS-Nr. identifiziert werden, automatisch zugeordnet (Fortsetzung 6xx-xxx-x Serie)	nicht offiziell
9xx-xxx-x	Für Stoffe, die ohne Nummer (CAS o. ä.) identifiziert werden, automatisch zugeordnet	nicht offiziell

EINECS: Stoffe auf europäischem Markt zwischen 01. Jan 1971 und 18. Sep 1981
 Unter REACH: Phase-in-Stoffe

Definierte Stoffe

Stoff mit einem Hauptbestandteil



- Hauptbestandteil $\geq 80\%$
- Verunreinigungen insgesamt $\leq 20\%$
 - $\geq 1\%$ identifizieren
 - Relevant für Einstufung und/oder PBT*
Bewertung, unabhängig von Konzentration
identifizieren

Name des Stoffs: Name des Hauptbestandteils

Hauptbestandteil	2-Chlortoluol	87%
Verunreinigung	4-Chlortoluol	10%
Verunreinigung	3-Chlortoluol	3%

*PBT: Persistent, bioakkumulierend, toxisch

Definierte Stoffe

Stoff mit mehreren Hauptbestandteilen



- Hauptbestandteile zwischen $\geq 10\%$ und $< 80\%$
 - Summe $\geq 80\%$
- Verunreinigungen insgesamt $\leq 20\%$
 - $\geq 1\%$ identifizieren
 - Relevant für Einstufung und/oder PBT Bewertung, unabhängig von Konzentration identifizieren

Name des Stoffs: „Reaction mass of A and B and C“

Hauptbestandteil	2-Chlortoluol	45%
Hauptbestandteil	4-Chlortoluol	35%
Hauptbestandteil	3-Chlortoluol	15%
Verunreinigung	Toluol	5%

Multi-constituenter Stoff vs. Gemisch



Chemische Reaktion
Von 2 oder mehr Stoffen
Herstellungsprozess



Stoff

Ein Stoff kann mit einem
Gemisch
identisch sein; wichtig ist,
wie es hergestellt wird



Beabsichtigte Mischung
Keine chemische Reaktion



Gemisch

UVCB Stoffe – Definition

Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials

- Unbekannte Zusammensetzung
 - Variable Zusammensetzung (hohe Schwankung oder schwer vorhersehbar)
 - Komplexe Reaktionsprodukte
 - Biologische Materialien (Extrakte, Enzyme)
-
- UVCB haben keine Verunreinigungen
 - Man spricht von Bestandteilen der Zusammensetzung

UVCB Stoffe – Beispiele in den ECHA Leitlinien

Spezifische Arten von UVCB-Stoffen :

- Variation in Kohlenstoffkettenlänge
- Stoff aus Öl oder ölähnlichen Quellen
- Enzyme
- Minerale
- Duftstoffe
- Quaternäre Ammoniumverbindungen

UVCB Stoffe – Bezeichnung

Bezeichnung von UVCB-Stoffen

- Keine allgemeingültigen Kriterien für alle Arten UVCB-Stoffe
- IUPAC-Regeln meist nicht anwendbar
- Empfehlung:
 - Strukturbezogene Bezeichnung (Zusammensetzung)
 - Quelle (Ursprungsorganismus)
 - Verfahren
 - Ausgangsstoffe
 - Weitere Parameter (Stoffeigenschaften wie z.B. Siedepunkte)
 - Kombination der genannten Parameter

Letztlich Einzelfallbetrachtung

UVCB Stoffe – Bezeichnung

Strukturbezogene Bezeichnung (Zusammensetzung)

- ECHA Leitfaden:
 - Alle Bestandteile $\geq 10\%$ angeben
 - Typ. Konz. und Konz.-bereiche der bekannten Bestandteile angeben
 - Bestandteile relevant für Einstufung und/oder PBT Bewertung, unabhängig von Konzentration identifizieren
 - Unbekannte Bestandteile soweit möglich nach chemischer Beschaffenheit beschreiben
- Sektorspezifische Leitfäden*
 - Oleochemikalien, Kohlenwasserstoff-Lösungsmittel, Erdölerzeugnisse, ätherische Öle, Metalle und Komplexe anorganische Pigmente

* <http://echa.europa.eu/de/support/substance-identification/sector-specific-support-for-substance-identification/oleochemicals>

UVCB Stoffe – Bezeichnung

Quelle und Verfahren

Reihenfolge im Stoffnamen: erst Quelle, dann Verfahren

- Biologische Quelle
 - Name der Gattung, Spezies und Familie
- Nicht-biologische Quelle
 - Name der Ausgangsstoffe
 - **Name des Stoffs:** „Reaction product of (Ausgangsmaterialien)“
- Verfahren
 - Name der chem. Reaktion
 - Raffinationsschritt (z.B. Extraktion, Fraktionierung, ...)
 - Rückstand (einer Raffination)

Nachteil: Sobald sich Quelle oder Verfahren ändert, ändert sich SID

Multi-constituenter Stoff vs. UVCB

Grenzfälle zwischen multi-constituentem Stoff und UVCB-Stoff

Beispiel I	Bestandteil	Bestandteil	Bestandteil	Bestandteil
<u>Typ</u>	UVCB	definiert	definiert	definiert
<u>Konzentration</u>	>30 – <75% (38%)	>10 – <40% (20%)	> 5% – < 45% (40%)	>1 – <10% (2%)

- Wenn ein Bestandteil UVCB, dann ist der Stoff UVCB

Multi-constituenter Stoff vs. UVCB

Grenzfälle zwischen multi-constituenter Stoff und UVCB-Stoff

Beispiel II	Bestandteil	Bestandteil	Bestandteil	Bestandteil
Typ	definiert	definiert	definiert	definiert
Konzentration	>30 – <75% (38%)	>10 – <40% (17%)	> 5% - < 45% (40%)	>1 – <10% (2%)

- Alle Bestandteile definiert, aber Variabilität sehr hoch
- Gibt es Kriterien zur Abgrenzung?
 - SID-Leitlinien Kapitel 4.1:

Es gibt Grenzfälle bei der Entscheidung, ob ein Stoff ein genau definierter Stoff oder ein UVCB-Stoff ist. Daher ist der Registrant dafür zuständig, seinen Stoff auf die geeignetste Weise zu identifizieren.

SIP – Substance identity profile (Stoffidentitätsprofil)

Bedeutung

- Grenze/Rahmen-Zusammensetzung einer gemeinsamen Einreichung
- Stoffe innerhalb der Grenze teilen sich einen Datensatz

Wieso?

- Gewährt Transparenz zu Zusammensetzungen, die in Registrierungsdatensatz vereinbart wurde
- Stärkt das OSOR-Prinzip (ein Stoff – eine Registrierung)

Wie?

- Das SIEF legt ein SIP fest
- Der federführende Registrant muss die SIP-Zusammensetzung in IUCLID 6 anlegen

SIP – Substance identity profile (Stoffidentitätsprofil)

Darstellung in IUCLID 6

The screenshot displays the IUCLID 6 software interface for editing a Substance Identity Profile (SIP). The main window title is "CORE / Composition / Composition.001 / Test Ethanol / ethanol / ethanol / 64-17-5 IUCLID".

Navigation Panel (Left): Shows a tree structure of the REACH Complete table of contents. The "Composition" section (1.2) is expanded, and "Composition.001" is selected.

Main Data Entry Area: The "General Information" section is active. Fields include:

- Name: [Empty]
- Type of composition: boundary composition of the substance (dropdown menu)
- State / form: [Empty] (dropdown menu)
- Description of composition: [Empty]
- Attached description: [Empty]
- Attached document: [Empty]
- Remarks: [Empty]

Pick list Dialog Box: A dialog box titled "Pick list" is open, showing a list of options for the "Type of composition" field:

- Select a value
- legal entity composition of the substance
- boundary composition of the substance (highlighted)
- composition of the substance generated upon use
- other:

Buttons for "OK" and "Cancel" are visible at the bottom of the dialog.

Fragen?



Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!