



Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin

Wann sind Stoffe identisch?

Dortmund, 18. September 2007

Dr. Claus Haas

Fachbereich 5 Chemikalien, Anmeldung und Zulassung

Identität von Stoffen

- **Warum Regeln?**
- **Welche Regeln?**
- **Anwendung der Regeln**

Warum Regeln?

- Massenimport von Stoffen in eine Datenbank
- Keine durchgängige Expertenkontrolle
- Reproduzierbar wiederfindbar
- Fehlerminimierung
- Alle z.B. am SIEF (Substance Information Exchange Forum) Beteiligten müssen dasselbe unter einem Stoff verstehen
- Probleme bei der Festlegung von Regeln: an den „Rändern“, an den Grenzflächen der Kategorien

Fragen:

- Ist ein Stoff noch ein Stoff mit einem Hauptbestandteil oder nicht?
- Ist ein UVCB-Stoff mit einem „ähnlich“ zusammengesetzten Stoff identisch?
- Gibt es verschiedene Optionen einen Stoff zu beschreiben und ergeben sich daraus Konsequenzen für die SIEF-Teilnahme?

Warum Regeln - EINECS?

EINECS-Eintrag

- EC-Nr.
- CAS-Nr.
- Name
- Summenformel
- Beschreibung

Problem

- EINECS soll sein Realstoffverzeichnis mit Stoffen, die zwischen 1.1.1971 und dem 18.9.1981 auf dem Markt waren
- CAS-Nr.: Hinweis auf einen theoretischen 100% reinen Stoff
- CAS keine Aussage zu
Reinheitsgrad
Verunreinigungen
Abgrenzung Hauptkomponente/Verunreinigung usw.

Diskrepanz zwischen dem Realstoffverzeichnis EINECS und den Stoffdefinitionen über CAS-Einträge z.B. in Bezug auf

- Verunreinigungsprofil
- Mono- oder multi-constituent substances
- Interpretation von UVCB-Stoffen

Anwendung der Regeln

Einführung von Identitätsregeln:

- Rahmen für die Bezeichnung von Stoffen
- Gemeinsame Grundlage für alle Registranten
- Verringerung der Zahl der Freiheitsgrade bei der Vergabe von Namen
- Vergleichbarkeit von Daten zu einem sehr frühen Zeitpunkt, SIEF-Bildung

Wie werden die Regeln angewendet?

- Raster über alle registrierungspflichtigen Stoffe
- Stoffe an Hand dieses Rasters in Gruppen einteilen und nach einheitlichen Regeln benannt
- Ein Parameter, aber zwangsläufig **nicht der einzige**, ist die **CAS-Nr.:** Definition von **Strukturen** der einzelnen Bestandteile
- RIP 3.10

Regeln zur Benennung von Stoffen

Einführung von REACH unterstützt, präzisiert und interpretiert durch die REACH Implementation Projekts (RIP)

Leitfaden für die Identifizierung und Benennung von Stoffen

RIP 3.10 Guidance for identification and naming of substances under REACH

Schaffung eines Rahmens, um die reinen Strukturinformationen eines CAS-Eintrages in einen „rechtlichen“ Zusammenhang zu bringen

Grundlage für die Regeln in RIP 3.10

- Melderegeln für EINECS
- Behandlung von Stoffen unter 67/548/EWG

Ziel RIP 3.10

Flächendeckende Anwendung der Regeln zur Benennung von Stoffen

Begründete Abweichungen im Einzelfall

Stoffdefinition

Artikel 3

Stoff

chemisches Element und seine Verbindungen in natürlicher Form oder gewonnen durch ein Herstellungsverfahren, einschließlich der zur Wahrung seiner Stabilität notwendigen Zusatzstoffe und der durch das angewandte Verfahren bedingten Verunreinigungen, aber mit Ausnahme von Lösungsmitteln, die von dem Stoff ohne Beeinträchtigung seiner Stabilität und ohne Änderung seiner Zusammensetzung abgetrennt werden können;

Registrierung von Stoffen

Für die heute bereits vermarkteten **Phase-in-Stoffe** werden die Bestimmungen schrittweise eingeführt

- **Vorregistrierung**
- **Registrierung**

Non-Phase-in-Stoffe müssen registriert werden **bevor** sie produziert oder importiert werden

Vorregistrierung von Phase-in-Stoffen

Artikel 28 Vorregistrierung

„Zur Inanspruchnahme der in Artikel 23 vorgesehenen Übergangsregelungen übermittelt jeder potentielle Registrant eines Phase-in-Stoffes ... der Agentur folgende Informationen“:

- 1. Juni 2008 bis 1. Dezember 2008: 6 Monate → **kostenlos**
- 1. Januar 2009: Veröffentlichung der Stoffliste durch die Agentur (1 Monat)

Informationen:

- Identität des Phase-in-Stoffes (Bezeichnung, CAS-Nr., EC-Nr.)
- Anschrift des (Vor)registrierers
- Vorgesehener Mengenbereich
- Identität der Stoffe für Anwendung von Anhang XI, 1.3. und 1.5

„Primärschlüssel“ : chemische Identität

Vorregistrierung von Phase-in-Stoffen

Ziel der Vorregistrierung von Phase-in-Stoffen:

- Zusammenfinden von Herstellern und Importeuren identischer Stoffe in einem **SIEF** (Substance Information Exchange Forum)
- Erstellung eines gemeinsamen Datensatzes
- Vermeidung unnötiger und doppelter Tierversuche
- Harmonisierte Einstufung und Kennzeichnung
- Kostenersparnis

Vorregistrierung von Phase-in-Stoffen

- 30.000 Phase-in-Stoffe über 1 t pro Jahr
- 4- bis 5-fache Zahl an Dossiers
- Einreichung der Daten zur Vorregistrierung: u.a mit IUCLID 5
- Datensammlung automatisch bei ECHA (keine weitere Kontrolle durch Experten)
- Verantwortung für den Stoff trägt der Hersteller/ Importeur
- Er muss auf Grundlage der analytischen Daten nach bestimmten Regeln seinen Stoff bezeichnen und damit definieren

Vorregistrierung von Phase-in-Stoffen (Art. 28)

Fazit

- Sehr hohe Zahl von Meldungen
- Sehr kurze Fristen (SIEF)
- Keine zentrale Überprüfung durch Experten
- Registrierungspflichtige aus unterschiedlichen Bereichen
- Einzige Information: Stoffidentität

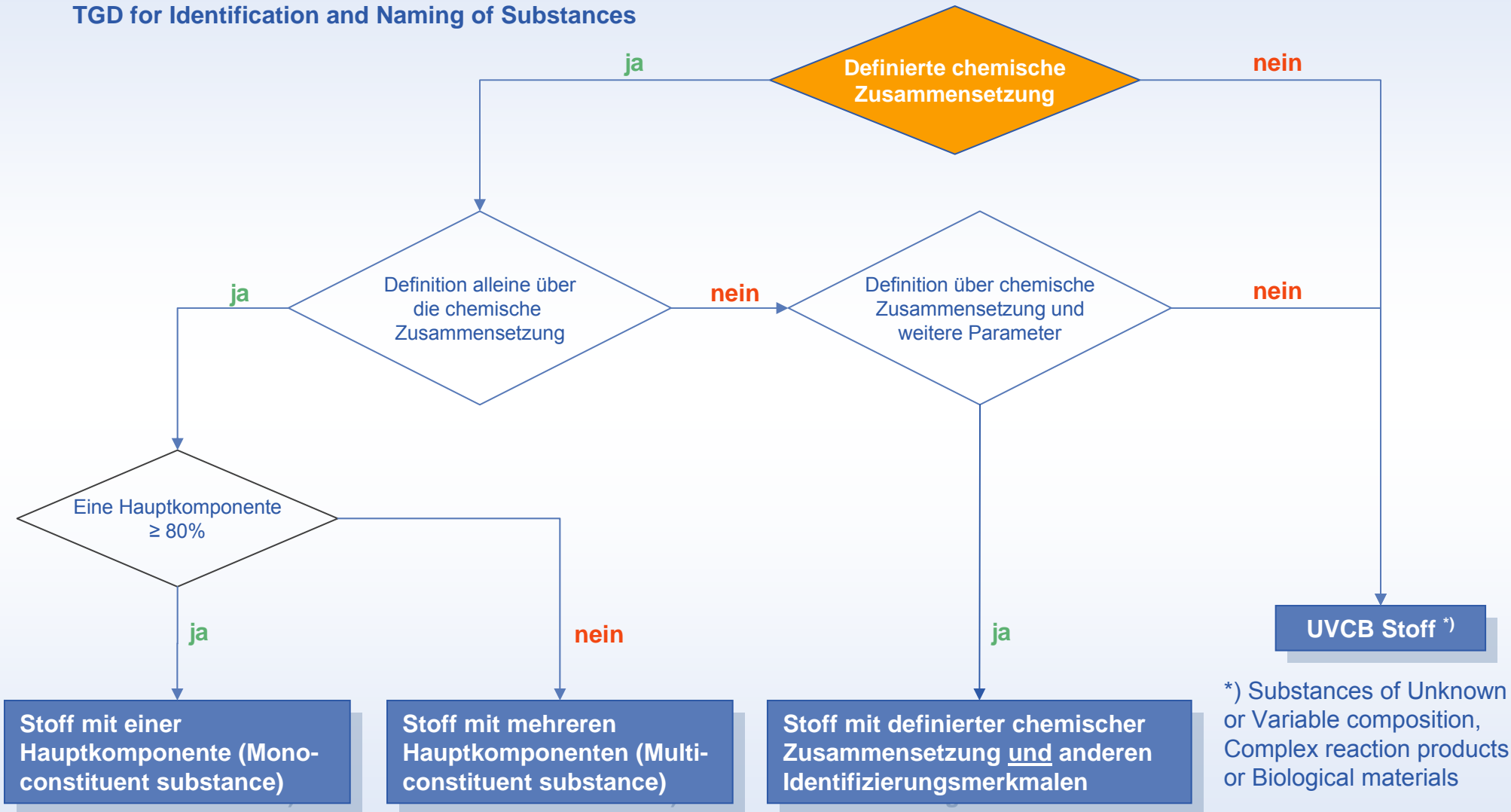


Regeln zur Bezeichnung der Stoffe

- Umfassend anzuwenden
- Nachvollziehbar
- Einfach in der Anwendung
- Möglichst wenig Freiheitsgrade

Stoffidentität: RIP 3.10

TGD for Identification and Naming of Substances



Weitere Identitätsregeln

Neben der Anwendung der 80/20 bzw. 80/10-Regel sollen bei der Benennung von Stoffen auch folgende Regeln beachtet werden (siehe auch EINECS-Melderegeln):

- **Hydrate und wasserfreie Stoffe** werden über einen Eintrag abgedeckt
- **Freie Säuren/Basen** sowie deren Salze sind unterschiedliche Stoffe
- **Salze** mit unterschiedlichen Gegenionen, z.B. Alkalisalze sind unterschiedliche Stoffe
- **Geradkettige und verzweigte Alkylgruppen** sind nicht identisch
- **Gesättigte und ungesättigte Alkylgruppen** sind nicht identisch

Weitere Identitätsregeln

- Ein **Isomerengemisch** deckt nicht ein einzelnes Isomer ab und umgekehrt, z.B. Gemisch aus o-, m- und p-Xylol kann nicht unter o- oder m- oder p-Xylol registriert werden
- Ein „breites“ **Alkyl-Gemisch** deckt nicht ein „enges“ Gemisch ab und umgekehrt, z.B. C12-C18-Alkyl nicht identisch mit C14-C16-Alkyl
- UVCB-Stoff isoliert aus einer **Spezies** ist nicht identisch mit dem Stoff aus einer anderen Spezies, z.B. linseed oil, oxidized ist nicht identisch mit castor oil, oxidized
- Ein Extrakt ist nicht identisch mit einer weiter **aufgereinigten Fraktion** dieses Extraktes, z.B. Extrakt aus Rapsöl ist nicht identisch mit einem weiter aufgereinigten Öl dieses Extraktes

Mono-constituent substance

Hauptkomponente	1,1'-Biphenyl, 2-chloro- EINECS-Nr. 2181256	85%
Verunreinigung	1,1'-Biphenyl, 3-chloro- EINECS-Nr. 2181261	10%
Verunreinigung	Toluol	5%



Registrierung des Stoffes als **1,1'-Biphenyl, 2-chloro-**

Multi-constituent substance

Hauptkomponente	1,1'-Biphenyl, 2-chloro- EINECS-Nr. 2181256	63%
Hauptkomponente	1,1'-Biphenyl, 3-chloro- EINECS-Nr. 2181261	31%
Verunreinigung	Toluol	6%



Registrierung des Stoffes als
Gemisch aus
1,1'-Biphenyl, 2-chloro- und 1,1'-Biphenyl, 3-chloro-

Mono- versus Multi-constituent substance

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

2-Chlortoluol EC-Nr. 2024243

⇒ (Vor)registrierung 1

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

Chlortoluol EINECS-Nr. 2466982

Gemisch aus

2-Chlortoluol (EINECS-Nr. 2024243)

3-Chlortoluol (EINECS-Nr. 2035805) und

4-Chlortoluol (EINECS-Nr. 2033970)

⇒ (Vor)registrierung 2

Hauptkomponente	2-Chlortoluol	55%
Hauptkomponente	4-Chlortoluol	35%
Verunreinigung	3-Chlortoluol	5%
Verunreinigung	Toluol	5%

Gemisch aus

2-Chlortoluol (EINECS-Nr. 2024243) und

4-Chlortoluol (EINECS-Nr. 2033970)

⇒ (Vor)registrierung 3

UVCB-Stoffe

Definition von **UVCB-Stoffen** über

- den **Herkunftsorganismus** (Spezies, Organ), z.B. Lavendel, Lavandula latifolia, Extrakt
- den **Herstellungs-/Reaktionsprozess** wie Carboxymethylierung, Veresterung, Epoxidierung usw., z.B. Fettsäuren, Leinsamenöl-, epoxidiert, Methylester
- den **Raffinationprozess**, z.B. Destillate (Kohle), Verflüssigung, schwere (zusätzliche Angaben: Destillationsbereich 300 °C bis 550 °C)
- die **Ausgangsprodukte**, z.B.
 - Nonandisäure, Reaktionsprodukte mit Triethanolamin
 - Pankreatische Extrakte, deproteiniert

UVCB-Stoffe können sein

- Komplexe biologische Makromoleküle, z.B. Enzyme, Kohlehydrate
- Stoffe aus metallurgischen Prozessen, z.B. Zinn, Schmelzrückstände

UVCB-Stoff versus definierter Stoff

EINECS-Eintrag

Leichtöl (Kohle), Koksofen- EINECS-Nr. 2660125

Flüchtige organische Flüssigkeit, extrahiert aus dem Gas, das bei der Hochtemperatur- (größer als 700 °C)-Entgasung von Kohle anfällt. Besteht in erster Linie aus Benzol, Toluol und Xylolen. Kann andere kleine Kohlenwasserstoffbestandteile enthalten.

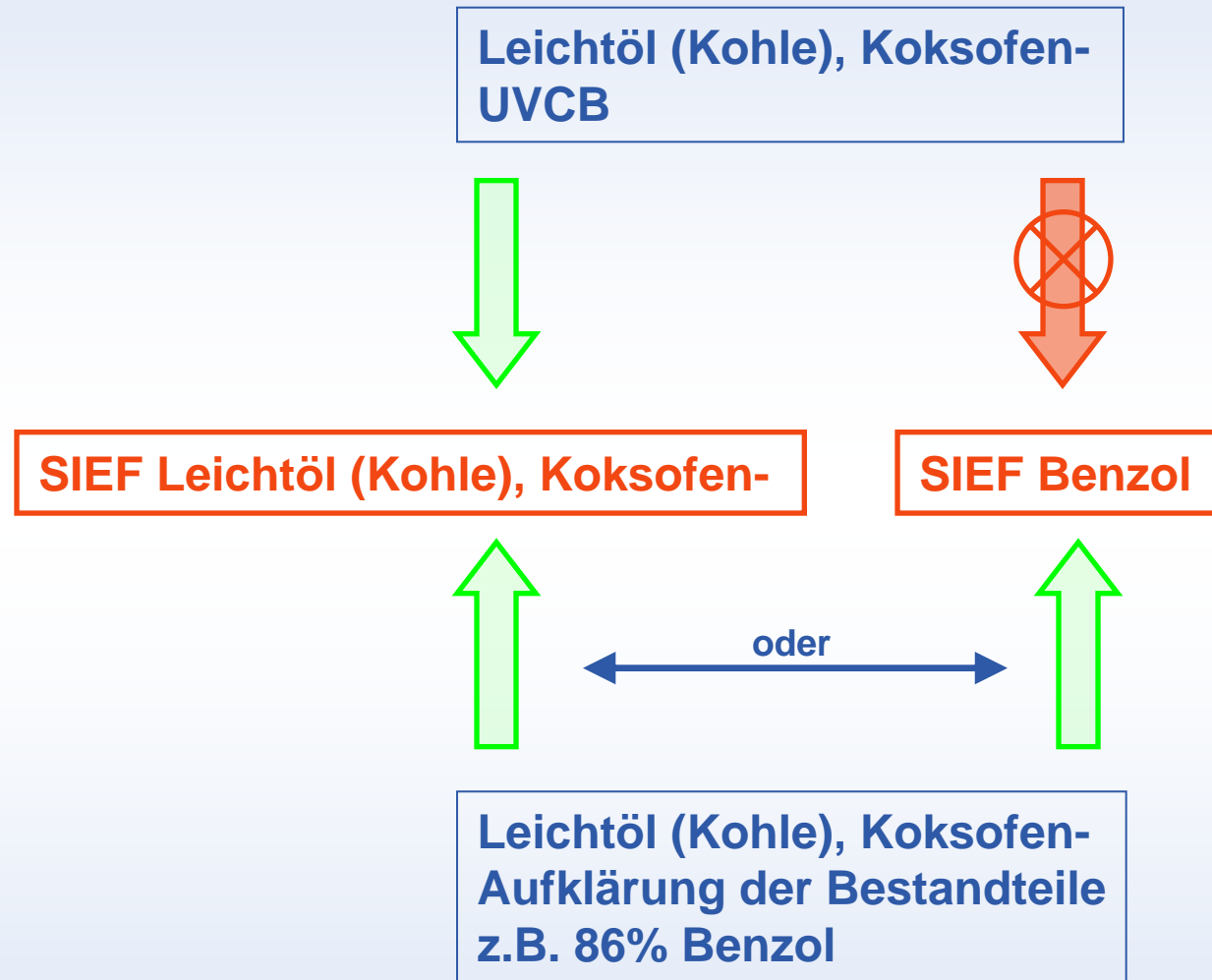
- Kann dieser Stoff identisch sein mit dem EINECS-Stoff **Benzol**, EINECS-Nr. 2007537?
- Konsequenzen?

Leichtöl (Kohle), Koksofen: UVCB-Stoff, definiert über den Herstellungsprozess

Vorteil dieser Definition: Zusammensetzung muss nicht aufgeklärt werden

Nachteil dieser Definition: Nur der so beschriebene Stoff ist über den Eintrag abgedeckt

UVCB-Stoff versus definierter Stoff



Stoffidentität und Anhang V (Naturstoffe)

Wann fällt ein Stoff unter den Eintrag der natürlich vorkommenden Stoffe?

Ein Naturstoff ist in Artikel 3 Nr. 39 folgendermaßen definiert:
"Naturstoff: natürlich vorkommender Stoff als solcher, unverarbeitet oder lediglich manuell, mechanisch oder durch Gravitationskraft, durch Auflösung in Wasser, durch Flotation, durch Extraktion mit Wasser, durch Dampfdestillation oder durch Erhitzung zum Wasserentzug verarbeitet oder durch beliebige Mittel aus der Luft entnommen".



- Einsatz von Lösungsmitteln nicht abgedeckt
- Registrierungspflicht

Stoffidentität und Anhang V (Naturstoffe)

Vergleich Naturstoff / synthetischer Stoff

Beispiel Gips:

Gips bergmännisch abgebaut



Naturstoff, wenn er nur mit genannten Methoden
gewonnen wird

Keine Registrierungsspflicht

Gips aus Rauchgasentschwefelungsanlage



Synthetischer Stoff
Nicht über den Naturstoff-Eintrag abgedeckt

Registrierungsspflicht

Stoffidentität und Anhang V (Koks)

Ist Koks (Erdöl) von einer Registrierungspflicht unter REACH ausgenommen?

Ausgenommen von einer Registrierungspflicht entsprechend Anhang V

*7. die folgenden Naturstoffe, soweit sie nicht chemisch verändert wurden:
Mineralien, Erze, Erzkonzentrate, Zementklinker, Erdgas, Flüssiggas,
Erdgaskondensat, Prozessgase und deren Bestandteile, Rohöl, Kohle und **Koks**;*

- **Koks (Erdoel)** , EINECS-Nr. 265-080-3, CAS-Nr. 64741-79-3
Fester Stoff, entsteht durch Hochtemperaturbehandlung von Erdölfraktionen. Besteht aus kohlenstoffhaltigem Stoff und enthält einige Kohlenwasserstoffe mit einem hohen Kohlenstoff-zu-Wasserstoff-Verhältnis.
- **Koks (Kohle)**, EINECS-Nr. 266-010-4, CAS-Nr. 65996-77-2
Die zelluläre kohlenstoffhaltige Masse, die bei der Hochtemperatur- (größer als 700°C)-Entgasung von Kohle anfällt. Besteht in erster Linie aus Kohlenstoff. Kann variierende Mengen Schwefel und Asche enthalten.
- **Koks (Erdoel), calcinierter**, EINECS-Nr. 265-210-9 , CAS-Nr. 64743-05-1
Komplexe Kombination von kohlenstoffhaltigem Stoff, einschließlich Kohlenwasserstoffen mit extrem hohem Molekulargewicht, erhalten als fester Stoff aus der Calcinierung von Erdölkoks bei Temperaturen erheblich über 1000°C. Die im calcinierten Koks vorhandenen Kohlenwasserstoffe haben ein sehr hohes Kohlenstoff-zu-Wasserstoff-Verhältnis.

Stoffidentität und Anhang V (Koks)

Ist Koks (Erdöl) von einer Registrierungspflicht unter REACH ausgenommen?

Koks ein Naturstoff?

- Die Herstellung von Koks ist nicht über die Definition des Naturstoffes abgedeckt.
- Widerspruch in Anhang V

Korrektur möglich

- Artikel 138 der REACH-Verordnung
Überarbeitung der Anhänge IV und V



Unabhängig davon ist Koks als Ausnahme genannt
Keine Spezifikation welcher Koks
d.h. Koks (Erdöl) nicht registrierungspflichtig

Wenn Sie dann noch weitere REACH Fragen haben...

Kontaktieren Sie uns:

reach-info@baua.bund.de

Tel.: 0180 3 24 36 43 – Fax 0180 3 24 36 44

(Montag bis Freitag von 8.00 – 16:30 Uhr; 0,09 Euro aus dem nationalen Festnetz der Deutschen Telecom AG)

www.reach-helpdesk.de



Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit