



Bundesanstalt für Arbeitsschutz  
und Arbeitsmedizin

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

Kristof Seubert,  
Bundesstelle für Chemikalien  
Leipzig, 13. Juni 2016

# Inhalt

Warum liegt der Fokus auf der Stoffidentität?

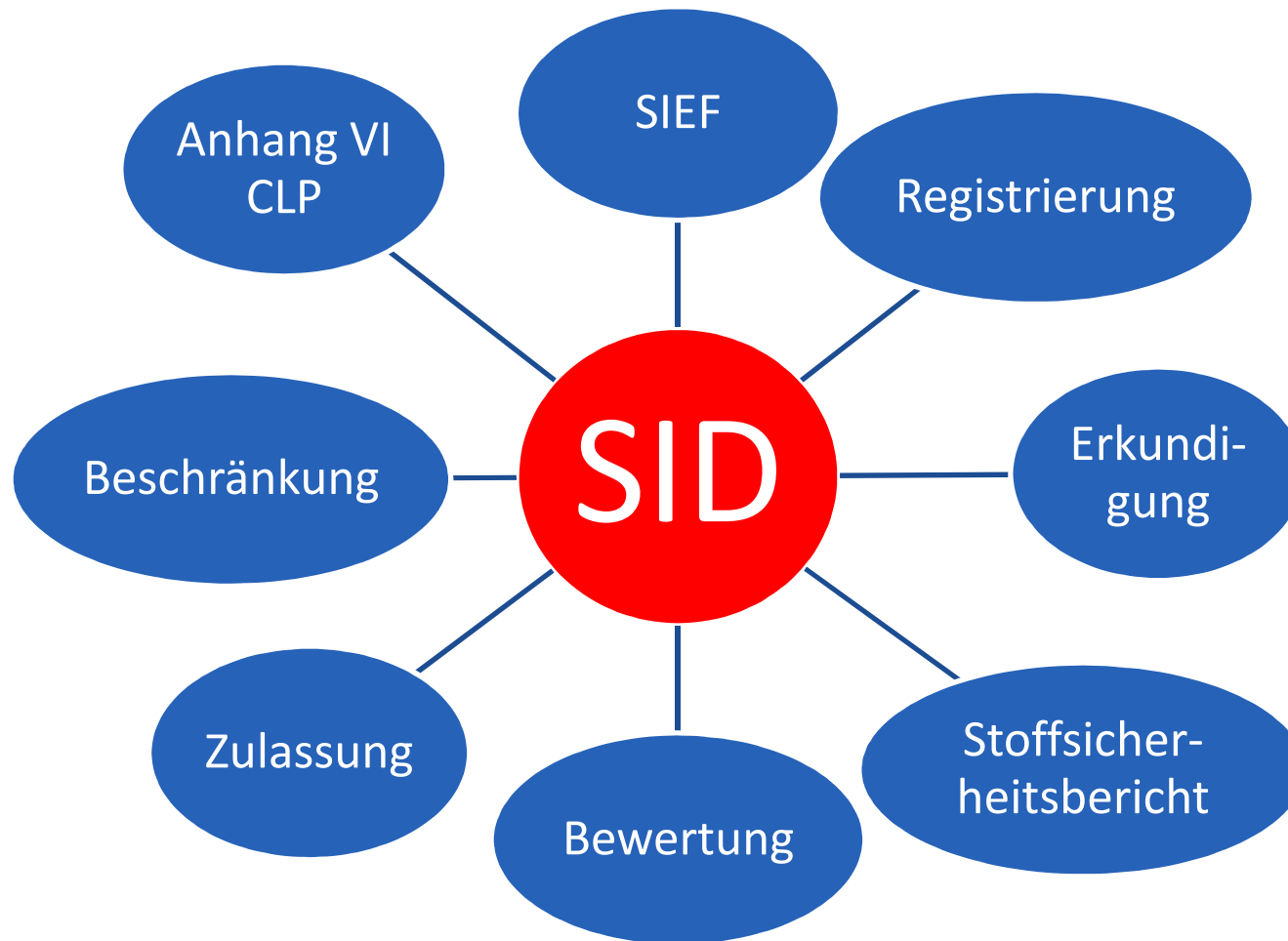
Wie ist ein Stoff definiert?

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

## Definitionen – Artikel 3 Nr. 2 und 3 REACH

### Gemisch

- Gemenge, Gemische oder Lösungen, die aus zwei oder mehr Stoffen bestehen
- Registrierung von Stoffen im Gemisch erforderlich, wenn nicht ausgenommen und in  $\geq 1$  t/a hergestellt oder importiert

### Erzeugnis

- Gegenstand, der bei der Herstellung eine spezifische Form, Oberfläche oder Gestalt erhält, die in größerem Maße als die chemische Zusammensetzung seine Funktion bestimmt
- Erzeugnisse selbst unterliegen keiner Registrierungsfrist.

# 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](http://echa.europa.eu/documents/10162/13643/substance_id_de.pdf)

# 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 LList 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

# Welche Arten von Stoffen gibt es

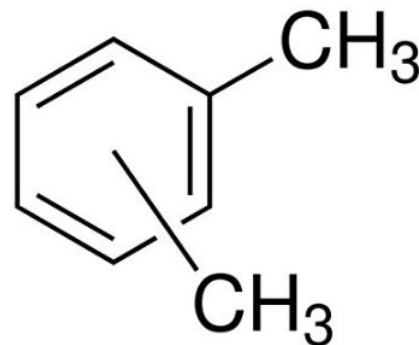
## Definierte Stoffe

Stoffe mit einem  
Hauptbestandteil  
(mono-constituent substance)



Bsp.:  $\text{KMnO}_4$

Stoffe mit mehreren  
Hauptbestandteilen  
(multi-constituent substance)



Bsp.: Xylol-Isomere

## UVCB\*-Stoffe

Qualitative oder quantitative  
Zusammensetzung mehr oder  
weniger unbekannt



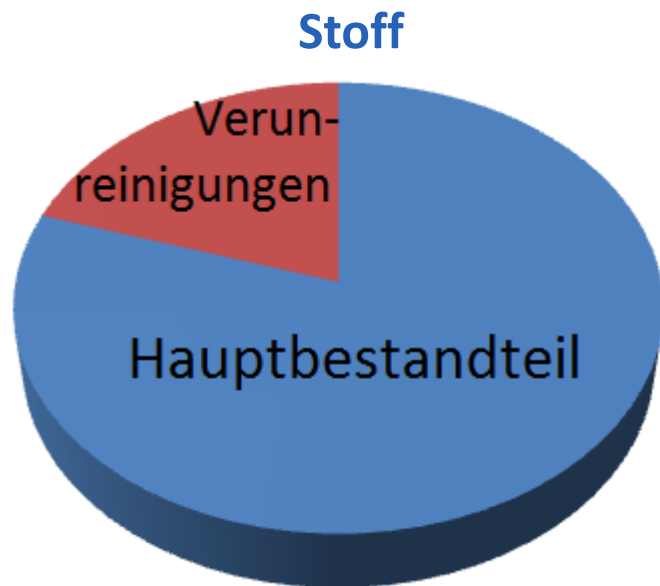
Bsp.: Öl-basierte Stoffe

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



# 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 produziert wird



Beabsichtigte Mischung  
Keine chemische Reaktion



Gemisch

Formulieren eines Gemisch:  
keine Registrierungspflicht

## 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

## 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

## 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

# 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.*



# Gleichheit von Stoffen - Datenteilung

# Definierte Stoffe – Gleichheit – Datenumfang

## 1. mono-constituent substances:

- Hauptbestandteil  $\geq 80\%$

## 2. multi-constituent substances:

- Hauptbestandteile  $\geq 10\%$  und  $< 80\%$

Einfache Regeln für Gleichheit: Stoffe identisch, wenn Hauptbestandteil(e) **gleich** (i.d.R. gleiche CAS-Nr.)

## Datenumfang (gemeinsames Dossier), abhängig von Diversität der Realstoffe

- Unterschiedliche Reinheiten
- Unterschiedliche Verunreinigungsprofile
- Verhältnis der Hauptbestandteile (multi-constituent) unterschiedlich

Vergleichsweise einfach, erste Näherung: Hauptbestandteile bestimmen die Eigenschaften eines Realstoffes

## Definierte Stoffe – Gleichheit – Datenumfang – Beispiel

Hersteller A: Registrierung von 4-Chlortoluol (85%)

- Verunreinigungen: 2-, 3-Chlortoluol
- Vollständiger Datensatz

Hersteller B: Registrierung von 4-Chlortoluol (95%)

- Verunreinigungen: 2-, 3-Chlortoluol und 1% 2-Methylanilin
- Bezugnahme auf Daten von A?

**Einstufung: 4-Chlortoluol**

Acute Tox. 4; H332

Aquatic Chronic 2; H411

Skin Sens. 1; H317

Flam. Liq. 3; H226

**Einstufung: 2-Methylanilin**

**Carc. 1B; H350**

Acute Tox. 3; H331

Acute Tox. 3; H301

Eye Irrit. 2; H319

Aquatic Acute 1; H400

# Definierte Stoffe – Gleichheit – Datenumfang – Beispiel

## Schritt 1 (Gleichheit):

- Beide Stoffe sind gleich (4-Chlortoluol  $\geq 80\%$ ), d.h.
- Gemeinsames Dossier

## Schritt 2 (Datenumfang):

- Hersteller B kann auf Daten von A Bezug nehmen, aber muss 2-Methylanilin berücksichtigen bei
  - Einstufung und Kennzeichnung des Realstoffes 4-Chlortoluol
  - Stoffsicherheitsbeurteilung
  - Expositionsbeurteilung
  - Risikobewertung
  - Risikomanagementmaßnahmen für den Realstoff
  - Beschränkung
- ...

# UVCB\* – Gleichheit

## Gleichheit von UVCB-Stoffen

- Grundlage: EINECS, CAS, Name, Prozess, Ausgangsstoffe usw.
- Vorregistranten mit gleicher EC-/CAS-Nr. im selben SIEF = **gleiche Stoffe**
- Sehr viel schwieriger: Datenumfang, Bezugnahme auf Daten

**Möglich im Einzelfall:** "Aufspaltung" eines SIEFs, d.h. **unterschiedliche Stoffe**  
Bezugnahme auf einen "breiten" CAS-/EC-Eintrag

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

## UVCB – Gleichheit – Datenumfang – Beispiel

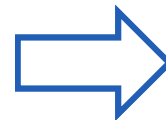
CAS no 68990-11-4, Arnica montana, Extrakt

Extrakte und ihre physikalisch modifizierten Derivate wie Tinkturen, Essenzen, etherische Öle, Oleoresine, Terpene, Terpen-freie Fraktionen, Destillate, Rückstände usw. aus Arnica montana, Ericaceae.

- Keine Aussage zur genauen Zusammensetzung
- Keine Aussage zum genauen Prozess

3 Hersteller mit unterschiedlichen Extraktionsprozessen:

- Hersteller A: Lösungsmittel Ethanol
- Hersteller B: überkritisches CO<sub>2</sub>
- Hersteller C: pH 2



ID: Alle Prozesse sind durch CAS-Nr. abgedeckt

- Sind die Stoffe A und B gleich, obwohl unterschiedliche Prozesse?
- Gemeinsames Dossier?
- Reicht CAS-Nr. um über den Umfang des Dossiers zu entscheiden?

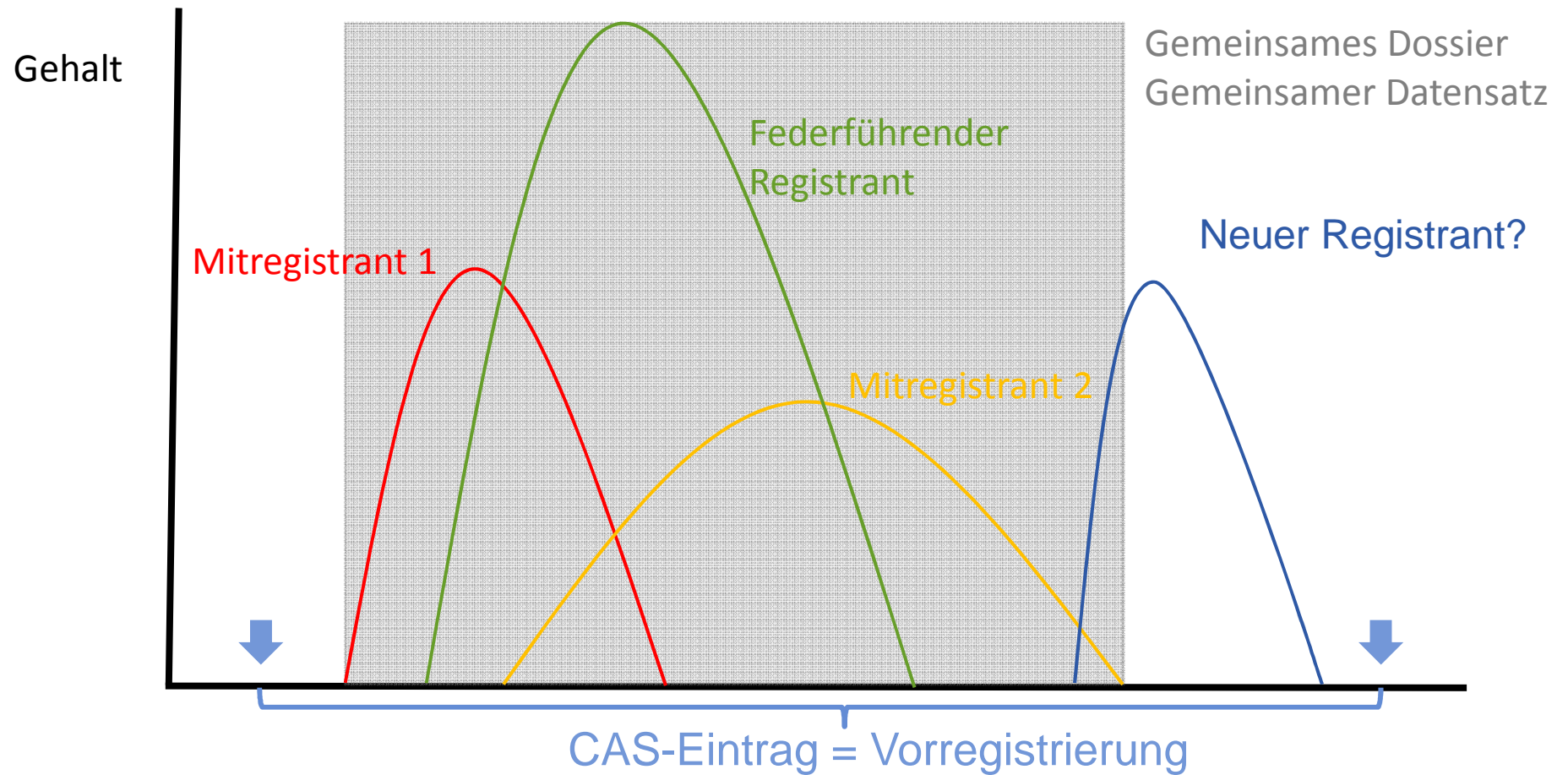
Ja\*

Ja\*

nein

\* in der Regel

# UVCB – Gleichheit – Datenumfang – Beispiel



Z: Zusammensetzung



# SIP – Substance identity profile (Stoffidentitätsprofil)

## Bedeutung

- Grenze/Rahmen-Zusammensetzung, auf die sich das SIEF geeinigt hat
- Stoffe innerhalb der Grenze teilen sich einen Datensatz

## Wieso?

- Gewährt Transparenz zu Zusammensetzungen, die in Registrierungsdatensatz vereinbart wurde. Insbesondere bei komplexen Stoffen hilfreich.
- 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. On the left is the 'Navigation Panel' showing a tree structure of sections: 0 Related information, 1 General information (expanded), 1.1 Identification, 1.2 Composition (expanded), 1.3 Identifiers, 1.4 Analytical information, 1.5 Joint submission, 1.6 Sponsors, 1.7 Suppliers, 1.8 Recipients, 1.9 Product and process orientated res, 2 Classification & Labelling and PBT asses, 3 Manufacture, use and exposure, 4 Physical and chemical properties, 5 Environmental fate and pathways, 6 Ecotoxicological information, and 7 Toxicological information. The 'Composition.001' section is selected.

The main window shows the 'General Information' section for 'Composition.001'. Fields include: Name (empty), Type of composition (boundary composition of the substance), State / form (empty), Description of composition (A, X), Attached description, Attached document, and Remarks. A 'Pick list' dialog box is open over the 'Type of composition' field, showing a list of options: 'legal entity composition of the substance', 'boundary composition of the substance' (highlighted), 'composition of the substance generated upon use', and 'other:'. The dialog has 'OK' and 'Cancel' buttons.

At the bottom of the main window, there are buttons for '+ Add...', 'Edit...', 'Delete', 'Move up', and 'Move down'. Below these is the 'Justification for deviations' section.

Fragen?



Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!