

IDENTYFIKACJA SUBSTANCJI



Punkt Konsultacyjny
ds. REACH
Ministerstwa Gospodarki

Andrzej Krześlak
Marcela Palczewska-Tulińska

Punkt Konsultacyjny ds. REACH Ministerstwa Gospodarki

<http://www.reach-info.pl>; reach@reach-info.pl

Instytut Chemii Przemysłowej

im. Prof. Ignacego Mościckiego, Warszawa



Punkt Konsultacyjny
ds. REACH
Ministerstwa Gospodarki

Konferencja REACH
organizowana przez BMP Sp. z o. o.
22 października 2008 roku, Warszawa, Hotel Gromada, Pl. Powstańców Warszawy 2



1

CO TO JEST SUBSTANCJA

- Substancja oznacza pierwiastek chemiczny lub jego związki w stanie, w jakim występują w przyrodzie albo są otrzymywane w procesie produkcyjnym, wraz z wszelkimi dodatkami koniecznymi w celu zachowania ich trwałości oraz wszelkimi zanieczyszczeniami powstałymi w wyniku zastosowanego procesu produkcyjnego, z wyłączeniem rozpuszczalników, których odseparowanie bez wpływu na stabilność i skład substancji nie jest możliwe.



SUBSTANCJE

- Substancje, których dotyczy rozporządzenie REACH, to na ogół produkty reakcji chemicznej lub innych procesów chemicznych, mogące zawierać wiele różnych składników. Do substancji, zgodnie z definicją stosowaną w rozporządzeniu REACH, zaliczamy również substancje otrzymywane w wyniku reakcji chemicznych z minerałów i kopalin oraz produktów roślinnych, które mogą zawierać pojedynczy pierwiastek lub pojedynczą cząsteczkę (np. czyste metale i niektóre minerały) lub kilka składników (np. olejki eteryczne).



Rejestr substancji w REACH

- Po wejściu w życie rozporządzenia REACH, Europejska Agencja Chemikaliów będzie prowadziła wykaz rejestrowanych substancji. Przy każdej rejestracji substancji, zostanie nadany numer rejestracyjny. Europejska Agencja Chemikaliów przyporządkuje również numer WE (EINECS, ELINCS lub NLP) substancjom, które go nie posiadają.



Identyfikacja substancji

Czasami opis substancji w wykazie EINECS jest stosunkowo szeroki. W takich przypadkach rejestrujący powinien opisać daną substancję w sposób bardziej szczegółowy (np. za pomocą nazwy IUPAC lub innych parametrów identyfikacyjnych). Osoba rejestrująca powinna zaproponować nr EINECS, dla rejestrowanej substancji. W takich przypadkach Europejska Agencja Chemikaliów podejmuje decyzję, czy danej substancji należy przyporządkować nowy numer WE.



Rejestracja w systemie REACH

Osoba rejestrująca substancję powinna uwzględnić zanieczyszczenia obecne w danej substancji w stężeniu $\geq 1\%$. Jednak w każdym przypadku musi ona określić zanieczyszczenia istotne dla klasyfikacji danej substancji. Informacje dotyczące składu substancji powinny sumować się do 100%.



UWAGA!!!

Wykaz EINECS został opublikowany 15 czerwca 1990 r i zawiera spis ponad 100 000 substancji. Błędy, wykryte od opublikowania listy (błędy w druku, błędne nazwy substancji chemicznej, wzór, numer CAS), poprawiono w marcu 2002 r.

Jednak w wykazie wciąż znajdowane są kolejne niezgodności.



UWAGA!!!!

Zgodnie z definicją stosowaną w REACH preparaty to celowe mieszaniny substancji, których w konsekwencji nie można uznawać za substancje wieloskładnikowe



JAKIE MOGĄ BYĆ SUBSTANCJE ZGODNIE Z REACH

- *„Substancje o dobrze określonym składzie”*
to substancje o określonym składzie jakościowym i ilościowym, które można w pełni zidentyfikować na podstawie parametrów identyfikacji substancji
- *„Substancje o słabo określonym lub zmiennym składzie”*
to substancje, których nie można w pełni zidentyfikować. Należą one do niejednorodnej grupy tzw. „substancji UVCB” czyli substancji o nieznanym lub zmiennym składzie, złożonych produktów reakcji lub surowców biologicznych.



Substancje o określonym składzie chemicznym - identyfikacja

- Pełna i jednoznaczna identyfikacja niektórych substancji (np. minerałów nieorganicznych), które można określić na podstawie składu chemicznego, wymaga zastosowania dodatkowych parametrów.
- W celu jednoznacznej identyfikacji niektórych minerałów niemetalicznych (występujących w przyrodzie lub sztucznych) o unikalnych strukturach **konieczne jest określenie ich morfologii oraz składu chemicznego.**
- Przykładem takiego minerału jest kaolin (CAS 1332-58-7) składający się z kaolinu, krzemianu potasowo-glinowego, skalenia oraz kwarcu.



SUBSTANCJA JEDNOSKŁADNIKOWA

- Substancja, w której jeden składnik osiąga stężenie **co najmniej 80% wagowych** i która zawiera **do 20% wagowych zanieczyszczeń**.
- Nazwa substancji jednoskładnikowej jest tworzona na podstawie nazwy głównego składnika, zgodnie z zasadami stosowanymi przez IUPAC.
- Ponadto możliwe jest podanie innych uznanych nazw międzynarodowych.



Substancja jednoskładnikowa

Przykład

<i>Gł.składnik (%)</i>	<i>Zanieczyszcz. (%)</i>	<i>Subst. zarejestr.</i>
<i>m-ksylen 91</i>	<i>o-ksylen 5</i>	<i>m-ksylen</i>
<i>o-ksylen 87</i>	<i>m-ksylen 10</i>	<i>o-ksylen</i>

W celu właściwego stosowania reguły 80%, nie należy uwzględniać w bilansie masowym substancji dodanych celowo takich jak regulatory pH lub środki koloryzujące.



SUBSTANCJA WIELOSKŁADNIKOWA

- Substancja składająca się z kilku składników osiągających **stężenie $\geq 10\%$ i $< 80\%$ wagowych.**
- Nazwa:
„Mieszanina [nazwy głównych składników]”.
- Nazwy substancji wymieniane są w kolejności od najwyższego do najniższego stężenia.
- Nazwa jest tworzona jedynie na podstawie nazw głównych składników występujących w stężeniu $\geq 10\%$.

Substancja wieloskładnikowa

Przykład

<i>Gł.skł.</i>	<i>(%)</i>	<i>Zaniecz.</i>	<i>(%)</i>	<i>Subst. zarejest.</i>
<i>m-ksylen</i>	<i>50</i>	<i>p-ksylen</i>	<i>5</i>	<i>Mieszanina m- i</i>
<i>o-ksylen</i>	<i>45</i>			<i>o-ksylenu</i>

Aby właściwie stosować regułę 10% i 80%, nie należy uwzględniać w bilansie masowym substancji dodanych celowo takich jak regulatory pH lub środki koloryzujące.



Substancje o słabo określonym (lub zmiennym) składzie

- Pełna identyfikacja substancji o słabo określonym lub zmiennym składzie (zwanymi również substancjami UVCB) na podstawie ich składu chemicznego nie jest możliwa z następujących przyczyn:
- Liczba składników jest względnie duża oraz/lub
- Skład jest w znacznej części nieznaną oraz/ lub
- Zmienność składu jest względnie duża lub trudno przewidywalna.
- **W celu identyfikacji substancji UVCB należy zatem uwzględnić, poza informacjami dotyczącymi ich składu chemicznego, również inne parametry.**



SUBSTANCJE UVCB

- Substancji UVCB nie można określić jedynie na podstawie nazw IUPAC jej składników - identyfikacja wszystkich składników nie jest możliwa lub
- substancję taką można scharakteryzować tylko w sposób ogólny ze względu na jej zmienny skład chemiczny.
- **Z powodu trudności zdefiniowania składników i zanieczyszczeń, w odniesieniu do substancji UVCB nie należy stosować pojęć „główne składniki” oraz „zanieczyszczenia”.**



SUBSTANCJE UVCB

- Nie każdy produkt reakcji powinien zostać automatycznie uznany za substancję UVCB.
- Jeśli produkt reakcji można zdefiniować w sposób wystarczający na podstawie składu chemicznego (przy uwzględnieniu pewnej zmienności składu), zalecana jest identyfikacja produktu jako substancji wieloskładnikowej.
- Tylko w przypadku gdy skład produktu reakcji nie jest wystarczająco znany lub słabo przewidywalny, substancję należy zidentyfikować jako substancję UVCB. Produkt reakcji identyfikowany jest w oparciu o surowce wyjściowe zastosowane w reakcji lub proces reakcji (bio)chemicznej, w wyniku którego powstaje dana substancja.



OPIS SKŁADU substancji UVCB

- „liniowe kwasy tłuszczowe C_8-C_{16} ”, „alkohole etoksylowane C_{10-14} ”.
- Dane dotyczące składu chemicznego można podać w oparciu o znane próbki odniesienia lub wzorce.
- Inne ogólne informacje dotyczące składu substancji – np. chromatogramy typu fingerprint – chromatograficzne lub spektralne.



Nazwa substancji UVCB

Nazwa powstaje z kombinacji:

- Źródła pochodzenia
- Procesu (ów).
- Źródła biologiczne identyfikuje się na podstawie nazwy gatunkowej.
- Źródła nie biologiczne identyfikuje się na podstawie użytych surowców wyjściowych.
- Procesy identyfikuje się na podstawie rodzaju reakcji chemicznej w przypadku syntezy lub rodzaju procesu (np. ekstrakcja, frakcjonowanie, zateżanie).



Surowce biologiczne

- Substancje pochodzenia biologicznego należy definiować na podstawie rodzaju, gatunku oraz rodziny np. *Pinus cembra*, *Pinaceae* to *Pinus* (rodzaj), *cembra* (gatunek), *Pinaceae* (rodzina), a w stosownych przypadkach odmiany lub typu genetycznego danego organizmu źródłowego.
- W określonych sytuacjach należy również podać tkankę lub część organizmu wykorzystane do ekstrakcji substancji np. szpik kostny, trzustka; łodyga, nasiona lub korzenie.



Przykłady

Numer WE	Nazwa WE
296-358-2	Lavender, Lavandula hybryda, ekstrakt, acetylowany
307-507-9	Lavender, Lavandula latifolia, ekstrakt, sulfonowany, sól palladu



Surowce chemiczne lub mineralne

W przypadku produktów otrzymanych w procesie reakcji chemicznej surowce należy opisać za pomocą nazwy IUPAC. Surowce mineralne należy opisać w sposób ogólny np. rudy fosforytu, boksyt, glinika biała, gaz mineralny, węgiel, torf.



Przykład substancji – produktu reakcji

Numer WE	Nazwa WE
232-341-8	Produkt reakcji kwasu azotowego z chlorowodorkiem 4-metylo-1,3-benzenodiaminy
412-780-3	Produkt reakcji molibdenianu(VI) amonu i C12-C14-dioksyetylowanej alkiloaminy (1:5-1:3)
408-250-6	Produkt reakcji heksachlorku wolframu z 2-metylopropan-2-olem, nonylofenolem i pentano-2,4-dionem



Substancje otrzymywane z ropy naftowej

Substancje pozyskiwane z ropy (substancje ropopochodne) są to substancje posiadający złożony, zróżnicowany lub częściowo nieokreślony skład chemiczny. Surowcem wyjściowym używanym w przemyśle rafineryjnym może być np. ropa naftowa. Skład produktów końcowych jest uzależniony od ropy naftowej wykorzystanej do produkcji (jej skład różni się w zależności od miejsca pochodzenia) oraz kolejnych procesów rafinacji. Zróżnicowanie składu substancji ropopochodnych jest zatem zjawiskiem naturalnym, niezależnym od zastosowanego procesu



Nazewnictwo

W przypadku identyfikacji substancji ropopochodnych wskazane jest podanie nazwy zgodnej z ustalonym systemem nomenklatury [stosowanym także przez US EPA – Amerykańską Agencję Ochrony Środowiska]. Nazwa taka wskazuje zazwyczaj na proces rafinacji, źródło produktu oraz ogólny skład lub właściwości substancji. Jeśli substancja zawiera > 5 % wag. węglowodorów aromatycznych o 4-6 pierścieniach skondensowanych, taka informacja powinna zostać uwzględniona w opisie. W przypadku substancji ropopochodnych posiadających numer EINECS, należy zastosować nazwę podaną w wykazie WE.



Substancje o zróżnicowanych długościach łańcuchów węglowych

- **Długo łańcuchowe substancje alkilowe. Substancje te są pozyskiwane z naturalnych tłuszczów lub olejów, bądź produkowane w sposób syntetyczny. Substancje o długich łańcuchach węglowych pochodzenia roślinnego mają na ogół jedynie parzystą liczbę atomów węgla, podczas gdy substancje o długich łańcuchach węglowych pochodzenia zwierzęcego posiadają (niektóre z nich) także nieparzystą liczbę atomów węgla. Produkowane w sposób syntetyczny substancje o długich łańcuchach węglowych mogą więc zawierać różne łańcuchy węglowe – o parzystych lub nieparzystych liczbach atomów węgla.**



PRZYKŁAD

Numer WE	Nazwa
306-791-1	Kwasy tłuszczowe, C ₁₂₋₁₆
279-420-3	Alkohole, C ₁₂₋₁₄
288-454-8	Aminy, pochodne C ₁₂₋₁₈ - alkilometylowe

Uwaga!!!

Za substancje tożsame uznawane są jedynie substancje z liniowymi oraz nierozgałęzionymi grupami alkilowymi



SUBSTANCJE WIELOSKŁADNIKOWE

Dyrektywa 67/548/EWG określiła zasady dotyczące wprowadzania substancji do obrotu. Ponieważ w świetle tych zasad sposób produkcji substancji był nieistotny, spis EINECS objął określoną substancję wieloskładnikową wprowadzaną do obrotu, jeśli wszystkie jej składniki figurowały w EINECS.

Na przykład izomeryczna mieszanina difluorobenzenów objęta została w wykazie wpisami: 1,2-difluorobenzen (206-680-7), 1,3-difluorobenzen (206-746-5) oraz 1,4-difluorobenzen (208-742-9), natomiast ona sama nie została w nim wymieniona.



Substancja, a rejestracja w systemie REACH

System REACH wymaga rejestracji substancji wyprodukowanej. Decyzja do jakiego stopnia różne etapy wytwarzania substancji są zgodne z definicją „produkcji” (np. różne etapy oczyszczania lub destylacji) jest podejmowana na podstawie każdego indywidualnie analizowanego przypadku. Jeśli w wyniku procesu produkcji wytwarzana jest substancja wieloskładnikowa, to substancja ta podlega rejestracji (***poszczególne składniki NIE SĄ OBJĘTE REJESTRACJĄ***).



Substancja wieloskładnikowa a rejestracja w systemie REACH

W przypadku produkcji mieszaniny izomerów difluorobenzenu, rejestracji podlega „difluorobenzen” jako mieszanina izomeryczna. Testowanie danej substancji wieloskładnikowej nie jest jednakże konieczne, jeśli ocenę zagrożenia tej substancji wieloskładnikowej można w pełni określić na podstawie danych o poszczególnych składnikach.

Izomery 1,2-difluorobenzenu, 1,3-difluorobenzenu oraz 1,4-difluorobenzenu produkowane oddzielnie, a następnie mieszane, należy zarejestrować jako odrębne izomery, a mieszanina izomeryczna jest wówczas uznawana za preparat.



Substancja wieloskładnikowa, a rejestracja w systemie REACH

PAMIĘTAJ

**Rejestracja wyprodukowanej
substancji wieloskładnikowej nie
obejmuje rejestracji
poszczególnych składników.**



DLACZEGO IDENTYFIKACJA JEST WAŻNA?

1. *W etapie rejestracji wstępnej, potencjalni rejestrujący muszą przedłożyć Europejskiej Agencji Chemikaliów określone parametry identyfikujące substancję;*
2. *W oparciu o przedłożone, określone parametry, Agencja tworzy listę substancji i publikuje ją na swojej stronie internetowej;*
3. *W oparciu o utworzoną listę inne osoby będące w posiadaniu określonych danych mogą przedłożyć Agencji stosowne informacje;*
4. *Agencja kontaktuje ze sobą potencjalne osoby rejestrujące substancje o podobnych parametrach umieszczone na liście oraz pomaga im nawiązać kontakt z osobami będącymi w posiadaniu określonych danych. Zadaniem osób rejestrujących substancję jest weryfikacja, czy ich substancja może być uznana za tożsamą z inną substancją figurującą na liście.*





Dziękujemy za uwagę



Punkt Konsultacyjny
ds. REACH

Ministerstwa Gospodarki



Punkt Konsultacyjny
ds. REACH

Ministerstwa Gospodarki

Kontakt:

Andrzej Krześlak

Tel. +48 22 568-20-33,

Tel. kom. +48 505 140 899

E-mail: Andrzej.Krzeslak@ichp.pl

Marcela Palczewska-Tulińska

Tel. +48 22 568-20-32 lub +48 22 568-20-39

E-mail: Marcela.Palczewska-Tulinska@ichp.pl

Izabela Ostrowska

Tel. +48 22 568-20-32 lub +48 22 568-20-39

E-mail: Izabela.Ostrowska@ichp.pl

Anna Bańkowska

Tel./Fax: +48-22-568-26-67

E-mail: Anna.Bankowska@ichp.pl

Agnieszka Chojnacka-Grochala

Tel./Fax: +48-22-568-26-67

E-mail: agnieszka.chojnacka-grochala@ichp.pl

Fax: +48 22 568 25 22, +48 22 568 26 67



Punkt Konsultacyjny
ds. REACH
Ministerstwa Gospodarki

Konferencja REACH

organizowana przez BMP Sp. z o. o.

22 października 2008 roku, Warszawa, Hotel Gromada, Pl. Powstańców Warszawy 2



33