

Praxisanleitungen 6:

**Anleitung zum Melden von
Daten mit Analogie- und
Kategoriekonzepten**



RECHTLICHER HINWEIS

Die in diesen Praxisanleitungen enthaltenen Informationen stellen weder eine Rechtsberatung dar noch geben sie in rechtlichem Sinne die offizielle Haltung der Europäischen Chemikalienagentur wieder. Die Europäische Chemikalienagentur übernimmt keinerlei Haftung für den Inhalt dieses Dokuments.

HAFTUNGSAUSSCHLUSS

Hierbei handelt es sich um die Arbeitsübersetzung eines ursprünglich in Englisch veröffentlichten Dokuments. Das Originaldokument ist auf der ECHA-Website verfügbar.

Praxisanleitungen 6: Anleitung zum Melden von Daten mit Analogie- und Kategoriekonzepten

Referenz: ECHA-10-B-11-DE
ISBN-13: 978-92-9217-094-3
ISSN: 1831-6727
Datum: 24.3.2010
Sprache: DE

© Europäische Chemikalienagentur, 2009.

Titelbild © Europäische Chemikalienagentur

Nachdruck und Wiedergabe nur mit vollständiger Quellenangabe in der Form „Quelle: Europäische Chemikalienagentur, <http://echa.europa.eu/>“ und mit schriftlicher Mitteilung an die ECHA-Kommunikationsabteilung (publications@echa.europa.eu) gestattet.

Dieses Dokument wird in den folgenden 22 Sprachen verfügbar sein:

Bulgarisch, Dänisch, Deutsch, Englisch, Estnisch, Finnisch, Französisch, Griechisch, Italienisch, Lettisch, Litauisch, Maltesisch, Niederländisch, Polnisch, Portugiesisch, Rumänisch, Schwedisch, Slowakisch, Slowenisch, Spanisch, Tschechisch und Ungarisch

Wenn Sie Fragen oder Anmerkungen zu diesem Dokument haben, senden Sie uns diese bitte über das Anfrageformular zu (mit Nennung der Textstelle und des Veröffentlichungsdatums). Sie finden das Anfrageformular auf der Seite „Kontakt mit der ECHA“ unter http://echa.europa.eu/about/contact_de.asp

EUROPÄISCHE CHEMIKALIENAGENTUR

POSTANSCHRIFT: P.O. BOX 400, FI-00121 HELSINKI, FINNLAND
Anschrift für Besucher: Annankatu 18, Helsinki, Finnland

INHALTSVERZEICHNIS

1. EINLEITUNG	1
2. EINFÜHRUNG IN DIE VERWENDUNG DES ANALOGIE- UND KATEGORIEKONZEPTS	2
2.1. Was ist eine Analogie?	2
2.2. Was ist eine Stoffkategorie ((Stoffgruppe)?	2
2.3. Entwicklung einer Stoffgruppenhypothese	3
2.4. Stoffbeschreibung.....	3
2.5. Allgemeine Beurteilung der Eignung und Meldung	4
3. FRAGEN ZUM ANWENDEN UND MELDEN DES STOFFGRUPPENKONZEPTS	6
3.1 Welche REACH-Leitliniendokumente sind hilfreich?	6
3.2. Wie entwickle ich eine Stoffgruppe?.....	6
3.3. Wie sollte die Charakterisierung der Konsistenz der Stoffgruppe erfolgen?	10
3.4. Wie viele Mitglieder sollte eine Stoffgruppe haben?	12
3.5. Ist die Stoffgruppenabschätzung ausreichend, um den Stoff einzustufen, zu kennzeichnen und/oder sein Risiko zu beurteilen?	12
3.6. Wann ist eine Stoffgruppe angemessen dokumentiert?	12
4. FRAGEN ZUM ANWENDEN UND MELDEN DES STOFFGRUPPENKONZEPTS	13
4.1. Wie melde ich Daten mit einer 1:1-Analogie in IUCLID 5?	13
4.2 Wie erstelle ich in IUCLID 5 eine Stoffgruppe?	18
4.3. Wie erstelle ich Registrierungs dossiers für einen Stoff, der Mitglied einer Stoffgruppe ist?	22
4.3.1. Einzeleinreichung des Dossiers	22
4.3.2. Gemeinsame Einreichung der Dossiers (federführender Registrant und beteiligte Registranten)	22
4.3.2.1 Aufgaben des federführenden Registranten	23
4.3.2.2. Aufgaben der an einer gemeinsamen Einreichung beteiligten Registranten	29
4.4. Wie melde ich eine Stoffgruppe im Stoffsicherheitsbericht (CSR)?	30
WEITERFÜHRENDE INFORMATIONEN	32

1. EINLEITUNG

Die Ziele der Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 zur Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung von Chemikalien (REACH-Verordnung) sind in der Präambel mit den Erwägungsgründen aufgeführt. In Erwägungsgrund 1 heißt es u. a.:

„Diese Verordnung sollte auch die Entwicklung alternativer Beurteilungsmethoden für von Stoffen ausgehende Gefahren fördern“.

In diesem Sinne verlangt Artikel 13 der REACH-Verordnung Folgendes:

„Informationen über inhärente Stoffeigenschaften können durch andere Mittel als Versuche gewonnen werden, sofern die Bedingungen des Anhangs XI eingehalten werden. Insbesondere sind Informationen über die Toxizität für den Menschen, sofern irgend möglich, durch andere Mittel als Versuche mit Wirbeltieren zu gewinnen, also durch die Verwendung von alternativen Methoden, beispielsweise In-vitro-Methoden, oder von Modellen der qualitativen oder quantitativen Struktur-Wirkungs-Beziehung oder von Daten über strukturell verwandte Stoffe (Gruppierung oder Analogie).“ (Unterstreichungen hinzugefügt).

Darauf aufbauend kann, wie auch in Anhang XI der REACH-Verordnung beschrieben, zur Erfüllung der REACH-Informationsanforderungen ein Analogie- oder Kategoriekonzept verwendet werden, was einer Abweichung von den Standard-Prüfprogrammen gleichkommt. Dies ist aber nur möglich, wenn bestimmte Kriterien erfüllt werden. Wenn ein solches Konzept geeignet ist, können unnötige Versuche vermieden werden. Mithilfe von Kategorie- und Analogiekonzepten können auch weitere Prüfanforderungen in integrierten Prüfstrategien definiert werden, um so eine effiziente Zielsetzung in den Versuchen zu ermöglichen. Diese Konzepte können auch zur Untermauerung einer Schlussfolgerung für einen REACH-Endpunkt mit einem „Beweiskraft der Daten“-Ansatz herangezogen werden. Darüber hinaus ist die Beurteilung einer Reihe von Stoffen als Kategorie möglicherweise effizienter und genauer als die Beurteilung einzelner Verbindungen, sofern die Gruppenbewertung anhand einer größeren Anzahl geeigneter und relevanter Daten erfolgt als bei der Bewertung einer Einzelverbindung.

Diese Praxisanleitungen bieten einen Überblick über die wichtigen praktischen Aspekte, die in IUCLID 5 bei der Entwicklung und Meldung eines Analogie- und/oder Stoffgruppenkonzepts für Stoffe zu beachten sind, die laut REACH-Verordnung registriert werden müssen. Die in diesen Praxisanleitungen enthaltenen Informationen stellen jedoch keine Beschreibung der Anforderungen dar, die erfüllt werden müssen, um die technische Vollständigkeitsprüfung zu bestehen. Diese werden im Datenübermittlungshandbuch 5, „Anleitung zum Ausfüllen eines technischen Dossiers für Registrierungen und PPORD-Mitteilungen“, erläutert.

2. EINFÜHRUNG IN DIE VERWENDUNG DES ANALOGIE- UND KATEGRIEKONZEPTS

2.1. Was ist eine Analogie?

Der Rückgriff auf Analogien ist eine Möglichkeit, Datenlücken zu füllen. Dabei werden Endpunktinformationen eines Stoffes verwendet, um Aussagen zum selben Endpunkt eines anderen Stoffes zu treffen, der in einem wichtigen Aspekt hinsichtlich dieses Endpunktes, z. B. in der Wirkungsweise, in der Toxikokinetik, im Metabolismus usw., ähnliche Merkmale wie der Endpunkt des ersten Stoffes aufweist. Das Analogiekonzept kann für qualitative und quantitative Ergebnisse eingesetzt werden.

Für die Verwendung von Analogien zum Füllen von Datenlücken kommen die folgenden Möglichkeiten infrage:

- 1:1 (eine Analogie wird auf genau einen Stoff angewendet)
- 1:n (eine Analogie wird auf zwei oder mehr Stoffe angewendet)
- n:1 (zwei oder mehr Analogien werden auf einen Stoff angewendet)
- n:n (zwei oder mehr Analogien werden auf zwei oder mehr Stoffe angewendet)

Die in diesen Praxisanleitungen beschriebenen Prinzipien zur Gruppierung von Stoffen (Stoffgruppen oder Stoffkategorien) gelten auch für die Verwendung von Analogien. Dazu gehören z. B. die Notwendigkeit, die Strukturen und Reinheitsprofile beider Stoffe zu ermitteln, die Notwendigkeit, die Verwendung des Analogiekonzepts aufgrund der Stoffähnlichkeit zu begründen, und die Notwendigkeit, die Analogieinformationen zu dokumentieren.

2.2. Was ist eine Stoffkategorie ((Stoffgruppe)?)

Stoffe, bei denen infolge struktureller Ähnlichkeiten eine hohe Wahrscheinlichkeit besteht, dass deren physikalisch-chemische und/oder toxikologische und/oder ökotoxikologische Eigenschaften ähnlich sind oder einem regelmäßigen Muster folgen, können als Stoffgruppe (oder ‚StoffKategorie‘) betrachtet werden. Diese Ähnlichkeiten können auf Folgendem beruhen:

- auf einer gemeinsamen funktionellen Gruppe
- auf gemeinsamen Ausgangsstoffen oder Abbauprodukten
- auf einem festen Muster für die Änderung der Wirkungsstärke
- auf identischen Bestandteilen oder identischen chemischen Klassen

Eigenschaften innerhalb einer Stoffgruppe können durch Analogieschlüsse, eine Trendanalyse oder (Q)SARs abgeschätzt werden. Für einen konkreten quantitativen

Stoffgruppenendpunkt werden die Gruppenmitglieder häufig durch Trendinformationen zueinander in Beziehung gesetzt.

2.3. Entwicklung einer Stoffgruppenhypothese

Praktische Anleitungen zur Bildung einer Stoffgruppe sind in Abschnitt 3.2, „Wie entwickle ich eine Stoffgruppe?“, enthalten. Als Grundlage für die Gruppierung der betreffenden Chemikalien (hinsichtlich ihrer Ähnlichkeit) sollten die Kriterien für die Ähnlichkeit verwendet werden, die in Anhang XI der REACH-Verordnung genannt werden. Infrage kommen dabei die chemische Struktur, z. B. identische funktionelle Gruppen und/oder inkrementelle Änderungen in der Länge der Kohlenstoffkette in der gesamten Stoffgruppe, oder andere gemeinsame Eigenschaften, wie z. B. gemeinsame Ausgangsstoffe und/oder Abbauprodukte (Metaboliten oder Abbauprodukte in der Umwelt) oder ein festes Muster, nach dem sich die Wirkungsstärke der Eigenschaften innerhalb der gesamten Stoffgruppe ändert. Die Hypothese – die Grundlage der Stoffgruppierung – sollte verwendet werden, um zu definieren, welche Eigenschaften ein Stoff haben muss, um zu dieser Stoffgruppe zu gehören. Die Kriterien (oder Regeln bzw. Prinzipien) für die Ähnlichkeit können jedes für sich genommen angewendet werden. Die Begründung für eine Gruppierung (und Ähnlichkeit) kann aber möglicherweise auf mehreren Kriterien basieren, z. B. bei einer Gruppierung, die sowohl anhand der Kettenlänge als auch des Eintragsweges erfolgt. Mehrere Begründungen stärken in der Regel das Vertrauen in die Art der Stoffgruppenbildung.

Die Hypothese erleichtert es herauszufinden, ob sich die Gruppierung der Gruppenmitglieder auf deren Umwelt- oder toxikologische Endpunkte oder auf beides bezieht und ob sie für alle Expositionswege und Wirkungsauern geeignet ist.

2.4. Stoffbeschreibung

Wichtig ist, dass die chemischen Strukturen und Reinheitsprofile aller Stoffgruppenmitglieder gut definiert sind, um so die Gruppenhypothese aufstellen zu können, da sich Unterschiede in den Verunreinigungen oder in der Stereochemie auf die Aktivität und die chemischen Eigenschaften auswirken können. Darüber hinaus müssen die chemischen Strukturen aller Bestandteile der zu registrierenden Stoffe (einschließlich aller Verunreinigungen, sofern relevant) gut definiert sein. Wir empfehlen daher, für alle Stoffgruppenmitglieder und nicht nur für die zu registrierenden Stoffe die Leitlinien zur Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen nach REACH einzuhalten. UVCB-Stoffe sollten in jeder möglichen Hinsicht klar charakterisiert werden. Es ist im Interesse des Registranten, die Stoffzusammensetzung so klar wie möglich zu beschreiben, um so die Daten optimal zu nutzen.

In IUCLID 5 sollte für jeden Studieneintrag, der für ein Analogie- oder Stoffgruppenkonzept verwendete Daten enthält, die Identität des geprüften Stoffes angegeben werden, sofern es sich dabei um einen anderen Stoff handelt, als den, der in Abschnitt 1 des REACH-Dossiers angegeben ist. Als Identitätsangabe kommen z. B. Details des chemischen Namens, die CAS- oder EG-Nummer für den oder die Hauptbestandteil(e) sowie Verunreinigungen und die Chargennummer (falls vorhanden) infrage.

2.5. Allgemeine Beurteilung der Eignung und Meldung

Gemäß Anhang XI der REACH-Verordnung kann zum Füllen von Datenlücken ein Stoffgruppen- und Analogiekonzept verwendet werden, wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

1. Die Ergebnisse reichen aus, um den Stoff einzustufen, zu kennzeichnen und/oder sein Risiko zu beurteilen;
2. Die Ergebnisse erfassen in ausreichendem Maße die wichtigsten Parameter, die in den entsprechenden Prüfmethode aufgeführt sind;
3. Sofern die Expositionsdauer von Belang ist, ist sie mit der in der entsprechenden Prüfmethode vorgesehenen Dauer vergleichbar oder länger als diese;
4. Die angewandte Methode ist ausreichend und zuverlässig dokumentiert.

Mit Stoffgruppenkonzepten kann das Ergebnis für einen einzelnen oder für mehrere Endpunkte vorhergesagt werden, sofern entsprechende Daten vorhanden sind. Im Allgemeinen sind Analogiekonzepte, die auf mehrere Endpunkte anwendbar sind, robuster als die Analogiekonzepte, die sich nur auf einen einzelnen Endpunkt konzentrieren. Das Vertrauen in die Stoffgruppenhypothese kann auch durch die Einbeziehung von langfristigen und kurzfristigen Endpunkten gestärkt werden. Dabei sollte aber immer bedacht werden, dass die Robustheit einer Stoffgruppe von der Qualität und Quantität der Daten, die für die Mitglieder der Stoffgruppe vorhanden sind, und dem Grad der Ähnlichkeit der Mitglieder (in Struktur, Metabolismus, Wirkungsweise/Aktivität) abhängt.

Enthält ein Registrierungsdossier eine Stoffgruppe, muss das Dossier eine Beurteilung der Gültigkeit des Stoffgruppenkonzepts für Regulierungszwecke enthalten.

Dies kann mit den folgenden Optionen dokumentiert werden:

1. Verwenden Sie die IUCLID 5-Funktion „Category“, um die Beurteilung im Block „Justifications and discussions“ zu melden/anzuhängen (Anweisungen zum Erstellen einer Kategorie bzw. Stoffgruppe in IUCLID 5 finden Sie unter 4.2).
2. Ohne Verwendung der IUCLID 5-Funktion „Category“:
 - a. Wenn sich die Gültigkeitsbeurteilung auf alle Endpunkte bezieht, kann in Abschnitt 13 das Berichtsformat für das Stoffgruppenkonzept angehängt werden (siehe Kapitel R.6.2.6.2 in „Guidance on information requirements and chemical safety assessment“ (Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung)).
 - b. Wenn sich die Begründung nur auf einige Endpunkte bezieht, kann die Gültigkeitsbeurteilung entweder (unter „attached background material“) in Form des Kategorie-Berichtsformats angehängt oder (im Textbereich unter „overall remarks“) direkt für die Endpunktstudie eingegeben werden.

Wird in einem Registrierungsdossier mit einem Analogiekonzept gearbeitet, muss das Dossier eine Beurteilung der Gültigkeit des Konzepts für Regulierungszwecke enthalten. Dies kann mit den folgenden Optionen dokumentiert werden:

1. Verwenden Sie die IUCLID 5-Funktion „Category“, um die Beurteilung im Block „Justifications and discussions“ zu melden/anzuhängen (Anweisungen zum Erstellen einer Kategorie bzw. Stoffgruppe in IUCLID 5 finden Sie unter 4.2).
2. Ohne Verwendung der IUCLID 5-Funktion „Category“:
 - a. Wenn sich die Gültigkeitsbeurteilung auf alle Endpunkte bezieht, kann in Abschnitt 13 das Berichtsformat für das Analogiekonzept angehängt werden (siehe Kapitel R.6.2.6.1 in „Guidance on information requirements and chemical safety assessment“ (Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung)).
 - b. Wenn sich die Begründung nur auf einige Endpunkte bezieht, kann das Berichtsformat für das Analogiekonzept (siehe Kapitel R.6.2.6.1 in „Guidance on information requirements and chemical safety assessment“ (Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung)) (unter „attached background material“) angehängt oder (im Textbereich „overall remarks“) direkt für den Studieneintrag eingegeben werden.

In jedem Fall ist es möglich, eine Vorhersage aus einem Analogieschluss, einer (Q)SAR oder einer Trendanalyse als Teil eines breiter angelegten „Beweiskraft der Daten“-Ansatzes oder als unterstützende Information zu verwenden.

3. FRAGEN ZUM ANWENDEN UND MELDEN DES STOFFGRUPPENKONZEPTS

3.1 Welche REACH-Leitliniendokumente sind hilfreich?

Eine vierseitige Zusammenfassung zur Verwendung von Daten, die nicht aus Versuchen, sondern mithilfe von (Q)SARs gewonnen wurden, finden Sie in „Guidance on information requirements and chemical safety assessment“ (Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung) in:

[Kapitel R.4: Evaluation of available Information](#)
(Bewertung der vorhandenen Informationen):

- R.4.3.2.2 Data obtained by grouping approaches (Durch Stoffgruppenkonzepte gewonnene Daten)

Im Dokument „Guidance on information requirements and chemical safety assessment“ (Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung) gibt es einen eigenen Abschnitt zur Gruppierung von Stoffen:

[Kapitel R.6: „QSARs and grouping of chemicals“](#)
(QSARs und Gruppierung von Stoffen):

- R.6.2 Guidance on the Grouping of Chemicals (Leitlinien zur Gruppierung von Stoffen)

Geeignete Hilfsmittel und Ansätze für die einzelnen Endpunkte finden Sie in den endpunktspezifischen Leitliniendokumenten im Dokument „Guidance on information requirements and chemical safety assessment“ (Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung) in:

[Kapitel R.7: „Endpoint specific Guidance“](#)
(Endpunktspezifische Leitlinien)

3.2. Wie entwickle ich eine Stoffgruppe?

Schritt 0: Überprüfen Sie, ob der Stoff Mitglied einer passenden Stoffgruppe ist, die bereits definiert wurde.

Einige Stoffgruppen sind bereits von der OECD beschrieben und dokumentiert worden. Informationen dazu finden Sie unter folgenden Adressen:

<http://cs3-hq.oecd.org/scripts/hpv/>;
<http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/OECDSEIDS/sidspub.html>.

Die Suche kann mithilfe von Softwareinstrumenten, wie z. B. der (Q)SAR Application Toolbox erfolgen, die Sie unter folgender Adresse finden:

www.oecd.org/env/existingchemicals/qsar.

Es hat sich bewährt, vor der Entwicklung neuer Stoffgruppen zu prüfen, ob es bereits entsprechende Stoffgruppen gibt. Die Gültigkeit und der Abdeckungsbereich vorhandener Stoffgruppen sollten mit den REACH-Informationsanforderungen verglichen werden. Verwendet ein Registrant zu Registrierungszwecken Daten aus einer Stoffgruppe, sollte er außerdem sicherstellen, dass er in rechtmäßigem Besitz des umfassenden Studienberichts ist, den er in den (qualifizierten) Studienzusammenfassungen zusammenfasst, oder die Erlaubnis hat, darauf Bezug zu nehmen (Artikel 10 der REACH-Verordnung). Vorhandene Gruppen müssen nach Zusammenstellung zusätzlicher Beweise möglicherweise geändert oder um neue Mitglieder erweitert werden.

Schritt 1: Entwickeln Sie eine Stoffgruppenhypothese und -definition und ermitteln Sie die Gruppenmitglieder.

Definieren Sie die Grundlage für die Stoffgruppe. Die Stoffgruppenhypothese sollte auf die chemischen Ähnlichkeiten (Analogien) und die Trends bei den Eigenschaften und/oder Aktivitäten eingehen, die die Gruppenmitglieder untereinander eint. Beschreiben Sie die Analogien und Trendanalysen (Interpolationen und Extrapolationen) sowie sämtliche spezifischen Berechnungsmethoden, die Sie verwendet haben. Legen Sie den Anwendungsbereich für einen Endpunkt der Stoffgruppe fest. Dieser kann unter Einschluss und/oder Ausschluss der Regeln beschrieben werden.

Definieren Sie für den Anwendungsbereich der Stoffgruppe Grenzen für:

- funktionelle Gruppen
- strukturelle Ähnlichkeiten
- Wertebereiche der entsprechenden Parameter (z. B. Bereich der log Kow-Werte, die die Gruppenmitglieder haben sollen)
- Wirkungsweise oder -mechanismus und Metabolismus-Ähnlichkeiten jedes Endpunktes, die von der toxikokinetischen Beurteilung gestützt werden (Daten aus Veröffentlichungen, *In-vitro*-Daten), und einen Vergleich dieser Aspekte für jedes Stoffgruppenmitglied

Als Hilfe bei der Identifizierung passender Stoffgruppenmitglieder stehen eine Reihe von Softwareinstrumenten bereit, darunter die (Q)SAR Application Toolbox. Diese Softwareanwendung (Version 1.1) kann von der folgenden Website heruntergeladen werden:

<http://www.oecd.org/env/existingchemicals/qsar>,

Auf dieser Website stehen darüber hinaus noch weitere Informationsmaterialien und Anleitungen zum Installieren und Verwenden bereit. Die Softwareanwendung wird derzeit zusammen mit der OECD weiterentwickelt. Ziel dabei ist, das Stoffgruppenkonzept zum Füllen von Datenlücken einheitlich auf alle eigenständigen organischen Chemikalien und auf alle Regulierungsendpunkte anzuwenden. Die Veröffentlichung von Version 2.0 ist für Ende 2010 geplant. Zu den geplanten Verbesserungen in dieser Version gehören die

Erweiterung und Verfeinerung wichtiger mechanistischer Profiler sowie die Hinzufügung neuer Datenbanken.

Eine weitere nützliche Quelle für Informationen zu Chemikalien ist das OECD Global Portal to Information on Chemical Substances (eChemPortal), das unter folgender Adresse aufgerufen werden kann:

<http://webnet3.oecd.org/eChemPortal/Home.aspx>

Eine weitere Möglichkeit, potenzielle Stoffgruppenmitglieder/ähnliche Stoffe zu identifizieren, besteht darin, über REACH-IT nach Prä-SIEF-Mitgliedern zu suchen. Ausführliche Informationen dazu finden Sie im REACH-IT-Nutzerhandbuch für die Industrie, Teil 5, „Prä-SIEF“, das unter folgender Adresse zum Herunterladen bereitsteht:

http://echa.europa.eu/help/help_docs_en.asp

Weitere Informationen zur Methodologie finden Sie in Kapitel R.6 des Dokuments „Guidance on information requirements and chemical safety assessment“ (Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung)).

Schritt 2: Sammeln Sie Daten für jedes Stoffgruppenmitglied.

Informieren Sie sich über die Stoffgruppenmitglieder. Tragen Sie alle vorhandenen Daten für die einzelnen Gruppenmitglieder zusammen (einschließlich Reinheits- und Verunreinigungsprofile, Details zur Molekularstruktur der Bestandteile, Daten zu physikalisch-chemischen Eigenschaften, Angaben über den Verbleib des Stoffes in der Umwelt, toxikologische und ökotoxikologische Wirkungen). Nutzen Sie dabei Informationen, die allgemein zugänglich sind, Literaturquellen und internationale Beurteilungen zu den Stoffgruppenmitgliedern.

Schritt 3: Bewerten Sie die Eignung der vorhandenen Daten.

Bewerten Sie die vorhandenen Daten entsprechend den Leitlinien für den jeweiligen Endpunkt. Siehe dazu:

[Kapitel R.7: „Endpoint specific Guidance“](#) (Endpunktspezifische Leitlinien)

Erfüllen die Daten die REACH-Informationsanforderungen entweder einzeln oder im Rahmen eines „Beweiskraft der Daten“-Ansatzes? Sind die Daten geeignet, um den Stoff einzustufen, zu kennzeichnen und/oder sein Risiko zu beurteilen?

Wenn die zugrunde liegenden experimentellen Daten für einen Endpunkt variieren (wenn es sich z. B. um eine Mischung aus Screening- und höherstufigen Versuchen handelt), klären Sie den Geltungsbereich der vorhergesagten Ergebnisse für die Stoffgruppenmitglieder, für die keine Daten vorliegen. Suchen Sie nach möglichen Trends innerhalb der Stoffgruppe und nach Bruchstellen, an denen sich eine Wirkung oder Eigenschaft ändert. Erläutern Sie alle beobachteten Trends und Bruchstellen. Die Daten für das registrierte Stoffgruppenmitglied oder die registrierten Stoffgruppenmitglieder sollten vergleichbar mit den Daten sein, die laut REACH-

Verordnung zu den Kriterien Expositionsdauer (sofern relevant) und Methode verlangt werden. So ist es normalerweise nicht möglich, die REACH-Informationsanforderungen zu erfüllen, indem per Analogieschluss von den Ergebnissen einer Prüfung der akuten Kurzzeittoxizität auf die langfristige chronische Toxizität eines Stoffes geschlossen wird.

Schritt 4: Erstellen Sie eine Matrix der Datenverfügbarkeit.

Eine Matrix mit Angaben zu den Daten, die für die einzelnen Endpunkte und Stoffgruppenmitglieder verfügbar sind, hilft, die Stoffgruppe zu beschreiben und eventuelle Datenlücken herauszufinden. Diese Matrix, die später zum Füllen von Datenlücken verwendet werden kann, kann mithilfe von IUCLID 5 erstellt werden. Informationen dazu finden Sie in Kapitel 4.

Schritt 5: Nehmen Sie eine vorläufige Bewertung der Stoffgruppe vor und füllen Sie Datenlücken.

Analysieren und verifizieren Sie, dass die Stoffgruppe tatsächlich mindestens einen der in Schritt 1 formulierten Trends aufweist. Enthält die Stoffgruppe genügend relevante und zuverlässige Informationen zu den Gruppenmitgliedern, sodass eine Beurteilung möglich ist? Beurteilen Sie die Datenlage für jeden Endpunkt, da die Gruppenbegründung möglicherweise nur für einige Endpunkte, Expositionswege oder Expositionsdauern und nicht für alle relevant sein könnte.

Datenlücken können mithilfe von Analogieschlüssen, Trendanalysen oder unter Anwendung externer (Q)SARs gefüllt werden. Bei Verwendung von Analogieschlüssen ist in der Regel das Stoffgruppenkonzept (mit mehreren Gruppenmitgliedern, die Daten beisteuern) einer 1:1-Analogie mit Daten für einen einzigen analogen Stoff vorzuziehen, da einer Analogie im Allgemeinen mehr Vertrauen geschenkt wird, wenn sich deren Daten auf mehr als einen Stoff stützen. Bei Anwendung eines Analogiekonzepts ist die Auswirkung von Verunreinigungen/unterschiedlichen Reinheitsprofilen für die Stoffgruppenmitglieder zu berücksichtigen. In jedem Fall sollte die Identität des geprüften Stoffes klar sein. Bei bestimmten toxikologischen Endpunkten ist ein Vergleich der Wirkungen auf das Zielorgan und der Wirkungsweise der Gruppenmitglieder erforderlich und zu melden. Das Vertrauen in die Daten für einen bestimmten Endpunkt, die zum Füllen von Datenlücken verwendet wurden, kann durch den Rückgriff auf einen „Beweiskraft der Daten“-Ansatz gestärkt werden. Im Allgemeinen gilt, dass für physikalisch-chemische Endpunkte experimentelle Daten solchen Daten vorzuziehen sind, die abseits von Versuchen gewonnen wurden.

Wenn Sie die Datenlücken gefüllt haben, kontrollieren Sie, dass die REACH-Informationsanforderungen für den oder die zu registrierenden Stoff(e) erfüllt sind. Die Stoffgruppe muss sich für den Regulierungszweck eignen, d. h., die Daten, die auf den vorhergesagten Ergebnissen basieren, müssen eine Einstufung und Kennzeichnung und/oder Risikobeurteilung sowie PBT-Beurteilung zulassen (siehe Anhang XI der REACH-Verordnung).

Schritt 6: Machen Sie einen Versuchsvorschlag und führen Sie gegebenenfalls den Versuch durch.

Wenn die Daten nicht für eine Bewertung aller Stoffgruppenmitglieder ausreichen, ist es möglicherweise notwendig, Versuche vorzuschlagen oder durchzuführen. Erstellen Sie

einen Stoffgruppen-Versuchsplan, aus dem die wichtigsten zu prüfenden Stoffe hervorgehen. Dazu können auch toxikokinetische Daten oder *In-vitro*-Daten zur Untermauerung der Stoffgruppenhypothese gehören.

Für Versuche für in den Anhängen IX und X beschriebene Endpunkte muss bei der ECHA ein Prüfvorschlag eingereicht werden. Informationen dazu finden Sie in „Leitlinien zur Registrierung“ unter folgender Adresse:

http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/registration_de.htm?time=1256820369

Schritt 7: Überarbeiten Sie die Beurteilung der Stoffgruppe.

Wenn neue Daten gewonnen werden, sollten diese bewertet werden, und die Stoffgruppe sollte neu beurteilt werden, um festzustellen, ob die ursprüngliche Hypothese und die Definition aus Schritt 1 („1. Entwickeln Sie eine Stoffgruppenhypothese und -definition und ermitteln Sie die Gruppenmitglieder.“) noch richtig sind. Wenn die Ergebnisse die Stoffgruppierung stützen, kann das Füllen der Datenlücken damit abgeschlossen werden. Wenn die Ergebnisse die Stoffgruppierung nicht stützen, ist es möglicherweise erforderlich, weitere Versuche durchzuführen, die Stoffgruppe neu zu definieren oder die Hypothese ganz fallen zu lassen.

Schritt 8: Melden und dokumentieren Sie die endgültige Stoffgruppe.

Wichtig ist, im IUCLID 5-Dossier eine angemessene und dokumentierte Begründung des Stoffgruppenkonzepts bereitzustellen und dabei ausführlich zu erläutern, inwiefern die in Anhang XI der REACH-Verordnung genannten Kriterien (Ähnlichkeitsregeln) für Stoffgruppen (Stoffkategorien) erfüllt sind. Dabei sollte jedes zu registrierende Gruppenmitglied die REACH-Informationsanforderungen für seine konkrete Liefermenge erfüllen und dies unabhängig davon, ob prognostizierte oder experimentelle Daten verwendet wurden.

Für die vorhandenen Studien sind so umfangreiche Details bereitzustellen, dass eine rationale Bewertung der Stoffgruppe möglich ist. Wo möglich, sollten qualifizierte Studienzusammenfassungen vorgelegt werden. Verwendet ein Registrant jedoch zu Registrierungszwecken Daten von einem Mitglied der Stoffgruppe, sollte er außerdem sicherstellen, dass er in rechtmäßigem Besitz des umfassenden Studienberichts ist, den er in den (qualifizierten) Studienzusammenfassungen zusammenfasst, oder die Erlaubnis hat, darauf Bezug zu nehmen (Artikel 10 der REACH-Verordnung). Wenn die experimentellen Angaben unzureichend sind, können Sie erwägen, diese Informationen als unterstützende Studie zu dokumentieren. Weitere Richtlinien, wie Sie Stoffgruppen (Kategorien) in IUCLID 5 dokumentieren und melden, finden Sie in Kapitel 4 in diesen Praxisanleitungen.

3.3. Wie sollte die Charakterisierung der Konsistenz der Stoffgruppe erfolgen?

Eine Stoffgruppe ist konsistent, wenn alle Stoffgruppenmitglieder funktionelle Gruppen haben, die für die betrachteten Endpunkte eine ähnliche Wirkungsweise/einen ähnlichen

Wirkungsmechanismus¹, ein ähnliches toxikokinetisches Verhalten und/oder eine Ähnlichkeit bei den Abbauprodukten (d. h. das Nichtvorhandensein abweichender Wirkungen bei allen anwendbaren Endpunkten) erwarten lassen. Eine Stoffgruppe ist aber auch konsistent, wenn ein festes Muster zu beobachten ist, nach dem sich die Wirkungsstärke der Eigenschaften innerhalb der gesamten Stoffgruppe ändert.

Zu achten ist auf offensichtliche Ausreißer innerhalb einer Stoffgruppe, also auf Stoffe mit einem Verhalten, das für einen konkreten Endpunkt nicht denselben Trend wie die anderen Mitglieder aufweist. Die Begründung, warum Stoffgruppenmitglieder mit abweichendem Verhalten für bestimmte Endpunkte ein- oder ausgeschlossen wurden, ist im IUCLID 5-Dossier bereitzustellen. Die Beurteilung des abweichenden Verhaltens kann durch andere vorhandene Daten, wie z. B. *In-vitro*-Ergebnisse, (Q)SAR-Vorhersagen oder Ergebnisse für andere Endpunkte, untermauert werden.

Zur Beurteilung der Konsistenz einer Stoffgruppe können folgende Aspekte herangezogen werden:

- **Empirische (strukturelle) Ähnlichkeit**
 - chemische Funktionalitäten
 - statistische Ähnlichkeit oberhalb eines benutzerdefinierten Grenzwertes
- **Mechanistische Ähnlichkeit**
 - Interaktionsmechanismen
 - Wirkungsweise
 - Reaktivitätsprofile
- **Ähnliche Bioverfügbarkeit**
- **Toxikologische Wirkung (bei komplexen chronischen Endpunkten)**

Die Stoffgruppenkonsistenz kann mithilfe der (Q)SAR Application Toolbox unter Anwendung des folgenden Ansatzes bewertet werden:

- Überprüfen der empirischen (strukturellen) Konsistenz:
 - vordefinierte Stoffgruppen (US-EPA-Kategorisierung, OECD-Kategorisierung)
 - ECOSAR (US-EPA)-Kategorien
 - strukturelle (statistische) Ähnlichkeit
 - organische funktionelle Gruppen
- Überprüfen der mechanistischen Konsistenz:
 - DNA-Bindung
 - Proteinbindung
 - Klassifizierung nach Cramer
 - Klassifizierung nach Verhaar
 - elektronenreiche Fragmente (Superfragmente)
- Überprüfen auf konsistente Bioverfügbarkeit:
 - Lipinski-Regeln

¹ Die Wirkungsweise ist definiert als Abfolge biologischer Schlüsselereignisse, die zu einer beobachteten toxikologischen Wirkung führen. Der Wirkungsmechanismus beschreibt detailliert die Molekularbasis des Ereignisses (siehe IPCS WHO).

3.4. Wie viele Mitglieder sollte eine Stoffgruppe haben?

Idealerweise sollte die Stoffgruppe bereits zu Beginn, wenn die Hypothese für sie aufgestellt wird, so viele ähnliche Stoffe wie vorhanden enthalten. Auf diese Weise können die Datenverfügbarkeit und die Datenlücken für alle diese Mitglieder sowie die Trends und Ausreißer für ausgewählte Endpunkte vollständig analysiert werden. Wenn Datenlücken mit Prüfdaten gefüllt werden müssen, wäre eine objektive Auswahl der zu prüfenden Mitglieder möglich (rationales Prüfdesign). Aus praktischen Gründen ist es aber nicht immer machbar, alle Stoffgruppenmitglieder zusammenzutragen, und fehlende Daten erschweren oft die Interpolation der Daten zwischen den Mitgliedern. Die einfachste Stoffgruppe besteht daher aus zwei (2) Mitgliedern und entspricht damit einer 1:1-Analogie. Nach oben ist die mögliche Anzahl der Mitglieder in einer Stoffgruppe nicht begrenzt. Je mehr Stoffe aber zu einer Stoffgruppe zusammengefasst werden, desto stärker muss die Hypothese sein, desto detaillierter muss der Anwendungsbereich beschrieben werden und desto robuster muss die Begründung ausfallen. Die Begründung für die Stoffgruppe ist robuster, je mehr Analogien zusammengetragen werden und je mehr verbindende Daten vorhanden sind, die darauf hindeuten, dass die Stoffgruppenmitglieder ähnlich genug sind/ein festes Muster aufweisen.

3.5. Ist die Stoffgruppenabschätzung ausreichend, um den Stoff einzustufen, zu kennzeichnen und/oder sein Risiko zu beurteilen?

Ausreichend bedeutet, dass eine Stoffgruppenvorhersage für die Einstufung und Kennzeichnung und/oder die Risikobeurteilung geeignet ist und genügend Informationen bereitstellt, damit der Registrant alle notwendigen Risikomanagementmaßnahmen einleiten kann. Ob sich eine Modellvorhersage eignet, um einen Stoff einzustufen und zu kennzeichnen und/oder dessen Risiko zu beurteilen, hängt stark vom jeweiligen Endpunkt ab. Um die Eignung der gewonnenen Vorhersage für eine Regulierungsentscheidung zu beurteilen, werden u. U. zusätzliche Informationen benötigt. Aus diesem Grund können die Kriterien Gültigkeit, Anwendbarkeit und Relevanz nur für den jeweiligen Einzelfall betrachtet werden.

3.6. Wann ist eine Stoffgruppe angemessen dokumentiert?

Sämtliche Mitglieder einer Stoffgruppe, einschließlich der Bestandteile, sowie die Reinheits-/Verunreinigungsprofile sollten ausreichend identifiziert sein. Darüber hinaus sollte die Dokumentation auch eine ausführliche Beschreibung der Hypothese für das Stoffgruppen- und Analogiekonzept enthalten, darunter Überlegungen zur Toxikokinetik, sofern toxikologische Endpunkte betroffen sind. Die Begründung für die Stoffgruppe sollte einen Vergleich der experimentellen Daten für die Stoffgruppenmitglieder und eine verständliche Datenmatrix enthalten, aus der die Trends innerhalb der Daten hervorgehen. Zu beachten ist aber, dass eine gute Dokumentation einer Stoffgruppe zwar wichtig ist, damit eine angemessene Bewertung durch einen Sachverständigen erfolgen kann, aber nicht automatisch bedeutet, dass das Stoffgruppenkonzept robust ist. Ob ein Stoffgruppen- oder Analogiekonzept robust ist, hängt von der Gültigkeit der Hypothese und dessen wissenschaftlicher Grundlage ab.

4. FRAGEN ZUM ANWENDEN UND MELDEN DES STOFFGRUPPENKONZEPTS

4.1. Wie melde ich Daten mit einer 1:1-Analogie in IUCLID 5?

Physikalisch-chemische Eigenschaften, Wirkungen auf die menschliche Gesundheit und die Umwelt oder der Verbleib in der Umwelt können aus Daten von Bezugstoffen innerhalb einer Gruppe vorhergesagt werden, wenn die Stoffe ähnlich sind oder im Ergebnis solcher Ähnlichkeiten einem regelmäßigen Muster folgen.

Innerhalb einer Stoffgruppe verbindet die Stoffgruppenmitglieder häufig ein Trend. Wenn die Gruppierung anhand einer sehr begrenzten Zahl von Stoffen erfolgt und keine Trends offensichtlich sind, wird von einem „Analogiekonzept“ gesprochen. Die einfachste Form eines Analogiekonzepts ist (wie beim Stoffgruppenkonzept) ein 1:1-Analogiekonzept.

Ausführliche Informationen dazu, wie beim Melden von Daten mit einem Analogiekonzept vorzugehen ist, finden Sie in „Guidance on information requirements and chemical safety assessment“ (Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung), Kapitel R.6: „QSARs and grouping of chemicals“ (QSARs und Gruppierung von Stoffen, R.6.2.6.1). Kapitel R.6.2.6.2 enthält weitere Einzelheiten zum Berichtsformat für eine Stoffgruppe, die auch für das Melden analoger Informationen in IUCLID 5 verwendet werden können (siehe Kapitel 4 dieses Dokuments).

Die Informationen sind in den Endpunktstudieneinträgen in IUCLID 5 wie folgt zu melden:

Wählen Sie im Dropdown-Menü „Detail level“ die Option „all fields“.


Block „Administrative Data“

- Geben Sie im Feld „Purpose flag“ an, ob die Abschätzung als Schlüsselstudie („key study“), als „Beweiskraft der Daten“-Ansatz („weight-of-evidence“) oder als unterstützende Information („supporting information“) verwendet wird.
- Wählen Sie im Feld „Study result type“ die Option „read-across from supporting substance (structural analogue or surrogate)“ aus.

Endpoint study record: Short-term toxicity to fish.001

Detail level: **all fields** | [Administrative Data](#) | [Data source](#) | [Materials and methods](#)
[Results and discussions](#) | [Overall remarks, attachments](#) | [Applicant's summary and conclusion](#)

Administrative Data



Purpose flag: key study robust study summ

Data waiving:

Justification for data waiving:

Study result type: read-across from supporting substar study period:

Wählen Sie im Feld „Reliability“ die Zuverlässigkeit aus und geben Sie im Feld „Rationale for reliability incl. deficiencies“ die Hypothese für das Analogiekonzept ein (siehe unten). Wählen Sie einen angemessenen Wert für die Zuverlässigkeit („Reliability“) aus, denken Sie dabei aber daran, dass für Analogien maximal der Wert „2“ angegeben werden darf.

Reliability:

Rationale for reliability incl. deficiencies: enter the hypothesis for the analogue approach

Data source

Block „Test materials“

- Wählen Sie im Dropdown-Menü „Identity of test material same as for substance defined in section 1 (if not read across)“ die Option „no“ aus, wenn Sie ein Analogiekonzept verwenden.
- Machen Sie im Feld „Test material identity“ Angaben zum Ausgangsstoff.
- Geben Sie im Feld „Details on test material“ die Strukturdarstellung (z. B. SMILES-Notation, mol-Datei als Anhang usw.) sowie mögliche Deskriptorwerte an, die zur Ableitung der Vorhersage verwendet wurden. Beachten Sie dabei, dass die Struktur der in diesem Feld einzugebenden Informationen bereits durch die IUCLID 5-Textvorlage für frei formulierbaren Text vorgegeben sein kann.
- Unter „Confidential details on test material“ können vertrauliche Informationen eingegeben werden.

Test materials

Identity of test material same as for substance defined in section 1 (if not read-across)

no

Test material identity

Identifier	Identity
CAS number	
IUPAC name	

Add... Edit... Delete Move up Move down

Details on test material



1. Describe the source chemical(s) as comprehensible as possible. Include SMILES of the source chemical as well as any other identifiers
2. Provide purity/impurity profiles for the source chemicals, including the likely impact on the relevant endpoints....

Use the related "freetext template" as shown here below

- Name of test material (as cited in study report):
- Molecular formula (if other than submission substance):
- Molecular weight (if other than submission substance):
- Smiles notation (if other than submission substance):
- InChI (if other than submission substance):
- Structural formula attached as image file (if other than submission substance):
- Substance type:
- Physical state:
- Analytical purity:
- Impurities (identity and concentrations):
- Composition of test material, percentage of components:
- Isomers composition:
- Purity test date:
- Lot/batch No.:
- Expiration date of the lot/batch:
- Radiochemical purity (if radiolabelling):
- Specific activity (if radiolabelling):

Confidential details on test material



same as above in case of confidentiality on the source chemical

- Machen Sie im Feld „Details on properties of test surrogate or analogue material“ ausführliche Angaben zu den Eigenschaften des Ausgangsstoffs. Unter „Confidential details on test material“ können vertrauliche Informationen eingegeben werden. Die Struktur der in diesem Feld einzugebenden Informationen kann bereits durch die IUCLID 5-Textvorlage für frei formulierbaren Text vorgegeben sein.

Details on properties of test surrogate or analogue material



PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES

- Melting point:
- Boiling point:
- Vapour pressure:
- Water solubility (under test conditions):
- Henry's law constant:
- log Pow:
- pKa:
- Stability in water:
- Stability in light:
- pH dependance on stability:

OTHER PROPERTIES (if relevant for this endpoint)

- Results of test for ready biodegradability:
- Other:

Block „Results and discussions“

- Bei Standardfällen müssen Sie Ergebnisse in den vorgesehenen Feldern des Wiederholungsblocks „Effect concentrations“ bereitstellen. Mit dem IUCLID 5-Plug-in können Sie die Informationen in diesen Feldern automatisch in den Stoff-sicherheitsbericht (CSR) übertragen. Welche Felder im Block „Results and discussions“ ausgefüllt werden müssen, hängt vom jeweiligen Endpunkt ab. Anweisungen dazu, wie die Ergebnisse einzutragen sind, finden Sie im Daten-übermittlungshandbuch 5, „Anleitung zum Ausfüllen eines technischen Dossiers für Registrierungen und PPORD-Mitteilungen“, das auf der ECHA-Website unter folgender Adresse zum Herunterladen bereitsteht:

http://echa.europa.eu/help/help_docs_en.asp

Im Feld „Details on results“ oder im Feld „Any other information on materials and methods incl. tables“ müssen Sie die Beschreibung der Begründung für das Analogiekonzept eingeben. Als Grundlage dienen dabei die vorhandenen experimentellen Daten, einschließlich der physikalisch-chemischen Eigenschaften. Fassen Sie hier außerdem zusammen, wie diese Ergebnisse das Analogiekonzept rechtfertigen. Aus den Daten sollte außerdem hervorgehen, dass die funktionellen Gruppen, in denen sich die Ausgangs- und die Zielchemikalien unterscheiden, keine Auswirkung auf die voraussichtliche Toxizität haben (die Datenmatrix kann unten in diesem Endpunkt im Feld „Any other information on materials and methods incl. tables“ eingegeben werden). Die in der Datenmatrix gemeldeten vorhandenen experimentellen Ergebnisse sollten die Begründung für das Analogiekonzept stützen. In den entsprechenden Abschnitten im Beurteilungsbericht sind folgende Aspekte der vorhandenen Prüfergebnisse für die einzelnen Endpunkte (d. h. eine Diskussion der Auswahl der Schlüsselstudien, der Streuung der experimentellen Ergebnisse zwischen Ausgangs- und Zielchemikalien usw.) ausführlicher zu diskutieren: Beschreibung und Ergebnisse aller möglichen Strukturanalogien des Stoffes zur Beurteilung der Zuverlässigkeit der Vorhersage, Unsicherheit der Vorhersage und mechanistischer Bereich (für die Endpunkte Toxizität und Ökotoxizität, sofern möglich).

Zusätzlich empfiehlt es sich, eine Endpunktstudienzusammenfassung zu erstellen, wenn mehrere Endpunktstudieneinträge vorhanden sind, und im Feld „Discussion“ der Endpunktstudienzusammenfassung eine Begründung für die Verwendung des Analogie-/Stoffgruppenkonzepts sowie die Gesamtbeurteilung zum betreffenden Endpunkt einzugeben. Diese Angaben können so mit dem IUCLID 5-CSR-Plug-in automatisch in den Stoff-sicherheitsbericht (CSR) übertragen werden. Wenn bei einem Analogiekonzept nur ein einziger Endpunktstudieneintrag vorgelegt wird, können Sie aus den oben genannten Gründen dennoch die Begründung aus dem Endpunktstudieneintrag kopieren und in das Feld „Discussion“ der Endpunktstudienzusammenfassung einfügen.

Results and discussions

Effect concentrations

Duration	Endpoint	Effect conc.	Nominal/Measured	Conc. based on	Basis for effect	Remarks (e.g.
XXXX	XXXX	XXXX	XXXX	XXXX	XXXX	XXXX

Details on results

enter the analogue approach justification:

Based on available experimental data, including basic physico-chemical properties, summarise how these results verify that the read-across is justified. The data should also show that functional groups not common to source and target chemicals do not affect the anticipated toxicity (data matrix could be entered in the field "Any other information on results, incl. tables" below in this endpoint). The available experimental results in the data matrix reported should support the justification for the read-across.

More detailed discussion of available test results for individual endpoints (i.e. discussion of the selection of key studies, variability of experimental results between source and target chemicals etc.) should be provided in the corresponding sections of the assessment report

- Weitere vorhandene experimentelle Ergebnisse sowie die Datenmatrix sind im Feld „Any other information on materials and methods incl. tables“ zu melden.

Any other information on materials and methods incl. tables

Enter the experimental results and the data matrix.

Note that the available experimental result should support the justification for the read-across

Block „Overall remarks, attachments“ und/oder Block „Applicant’s summary and conclusion“

- Unter „Overall remarks“, „Conclusions“ und/oder „Executive summary“ ist das Ergebnis der Beurteilung der Eignung für Regulierungszwecke (Risikobeurteilung, Einstufung und Kennzeichnung, PBT-Analyse) zu melden.

Overall remarks, attachments

Overall remarks

Provide information on conclusion per endpoint for C&L, PBT/vPvB and dose descriptor:

For the regulatory purposes of REACH, it should additionally be listed and substantiated, per endpoint and substance, whether:

- C&L is similar to the source chemical;
- PBT/vPvB is similar to the source chemical;
- the dose descriptor is similar to the source chemical, or adaptations are necessary,

there are uncertainties in the read-across used that need to be addressed

Applicant's summary and conclusion

Validity criteria fulfilled

Conclusions

provide comments on the suitability of the results for the regulatory purposes of REACH

Sämtliche unterstützenden Dokumente (z. B. eine PDF-Datei eines bereits ausgefüllten Berichtsformats für ein Analogiekonzept) sind im Feld „Attached background material“ anzuhängen.

Attached background material

Attached document	Remarks
	any supporting document should be attached here

Add... Edit... Delete Move up Move down

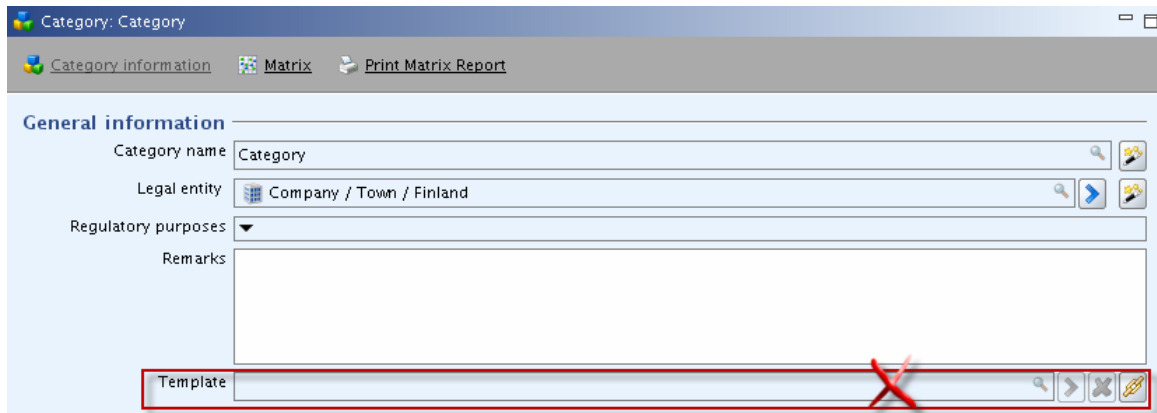
4.2 Wie erstelle ich in IUCLID 5 eine Stoffgruppe?

In IUCLID 5 können Sie eine Stoffgruppe für ein *REACH-Stoffregistrierungsdossier in REACH* für einen Stoff erstellen, der gemäß Anhang XI Absatz 1.5 der REACH-Verordnung zu einer Stoffgruppe gehört.

IUCLID 5 wurde mit dem Ziel entwickelt, die notwendige Flexibilität zu schaffen, um verschiedene Regulierungsanforderungen zu erfüllen. In einigen Programmen (z. B. OECD HPVC) kann für die gesamte Stoffgruppe nur ein Dossier erstellt werden, das alle Stoffgruppenmitglieder enthält. Die REACH-Verordnung verlangt aber, dass für jeden zu registrierenden Stoff (egal, ob Mitglied einer Stoffgruppe oder nicht) ein eigenes Dossier erstellt wird. Aufgrund dieser Pflicht muss ein Registrant, wenn er zwei Stoffe mit dem Analogiekonzept registrieren möchte, diese Argumente unabhängig voneinander (und wiederholt) in beiden Dossiers auführen. Alle Informationen dazu, wie Sie zum Erstellen eines Dossiers vorgehen müssen, finden Sie im IUCLID 5-Nutzerhandbuch im Abschnitt D.6.2.1., „Erstellen und Füllen von Stoffdatensätzen für alle Kategoriemitglieder“.

Zum Erstellen einer Stoffgruppe in IUCLID 5 ist im Einzelnen wie folgt vorzugehen:

Hinweis: Hängen Sie keine IUCLID 5-Vorlage über die IUCLID 5-Funktion „Category“ an (siehe Bildschirmabbildung unten), da dies zu einer nicht korrekten Darstellung der Matrix mit den Informationen führt, die für die verschiedenen Stoffe vorhanden sind.



- Gehen Sie in IUCLID 5 zum Abschnitt „Category“.

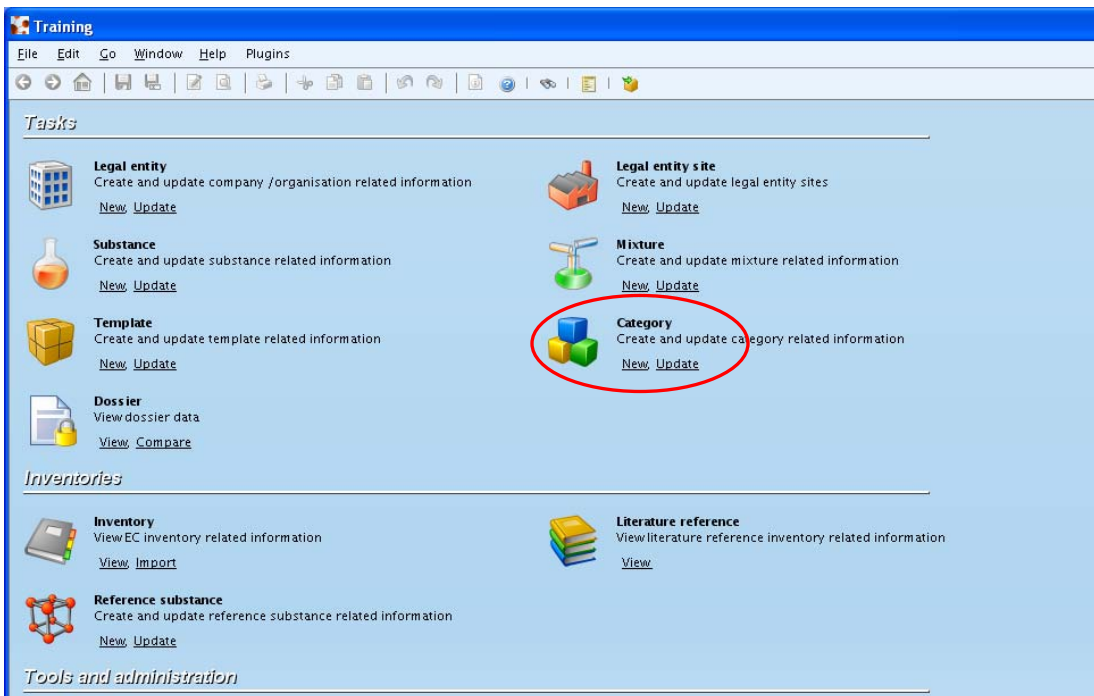


Abbildung 0: Abschnitt „Category“ in IUCLID 5

- Klicken Sie zum Erstellen einer Stoffgruppe auf „New“. Geben Sie im Popup-Fenster, das sich daraufhin öffnet, den Namen für die Stoffgruppe ein.
- Erstellen Sie im Wiederholungsblock „Category members“ Verknüpfungen zum Stoffdatensatz des Stoffes, den Sie nach REACH registrieren möchten, sowie zu allen anderen Stoffdatensätzen, die in der Stoffgruppe verwendet werden sollen. Wenn Sie der Stoffgruppe einen neuen Stoffdatensatz hinzufügen möchten, klicken

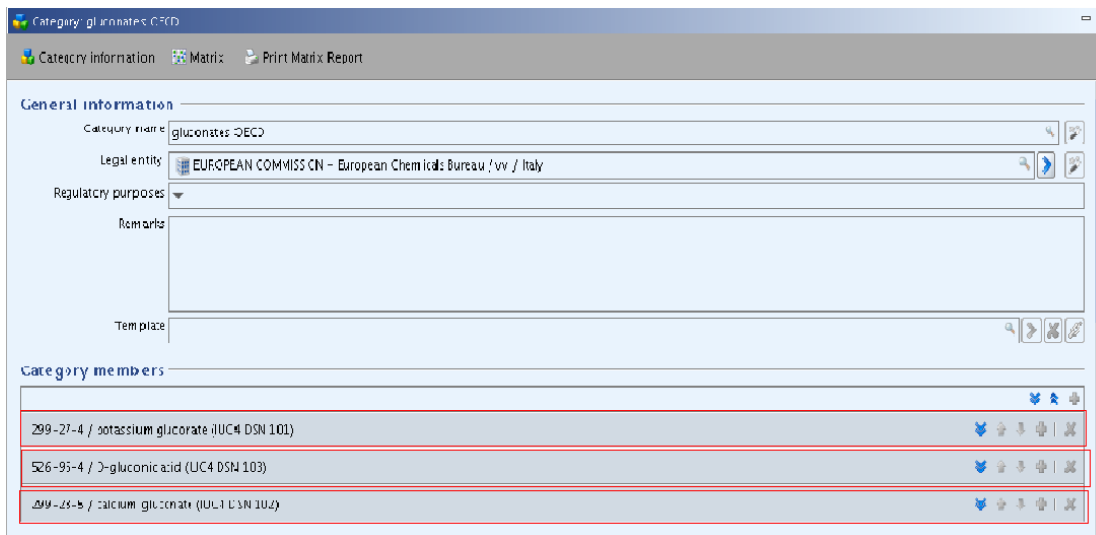



Abbildung 1: Wiederholungsblock „Category members“ (Stoffdatensätze aller in der Stoffgruppe verwendeten Stoffe)

- Wählen Sie unter „Category endpoint“ die Endpunkte aus, auf die Sie das Stoffgruppenkonzept anwenden möchten. Es können mehrere Endpunkte ausgewählt werden. Wenn Sie alle Endpunkte als relevant erachten, klicken Sie auf „Select all“. Beachten Sie bitte, dass nur die Endpunkte in der Matrix angezeigt werden, die hier ausgewählt werden.
- Fügen Sie die Begründung für die Stoffgruppe hinzu. Informationen dazu finden Sie in [„Guidance on Information requirements and Chemical Safety Assessment“](#) (Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung, Kapitel R.6.2.5)
- In der Matrix der Stoffgruppe werden alle Endpunkte aus den verschiedenen Stoffdatensätzen angezeigt (Abb. 2).

Category: gluconates OECD

Category information **Matrix** Print Matrix Report

 Matrix

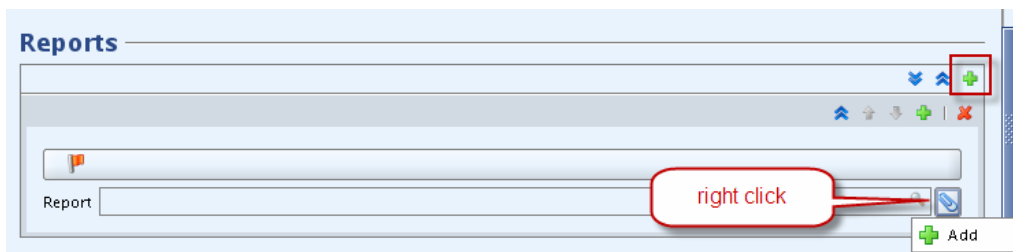
299-27-4 526-95-4 299-28-5

Property	299-27-4	526-95-4	299-28-5
4 Physical and chemical properties			
4.2 Melting point/freezing point	2 ●	2 ●	1 ●
4.3 Boiling point	1 ●	2 ●	1 ●
4.4 Density	1 ●	4 ●	1 ●
4.5 Particle size distribution (Granulometry)			
4.6 Vapour pressure	1 ●	1 ●	1 ●
4.7 Partition coefficient	1 ●	1 ●	1 ●
4.8 Water solubility	3 ●	5 ●	2 ●
4.9 Solubility in organic solvents / fat solubility		2 ●	1 ●
4.10 Surface tension			
4.11 Flash point			

Abbildung 2: Darstellung der in den verschiedenen Stoffdatensätzen vorhandenen Informationen in der Stoffgruppenmatrix

Wichtiger Hinweis: Wenn Sie Ihrem Stoffdatensatz für bestimmte Eigenschaften mehrere Stoffgruppen anhängen möchten, müssen Sie entsprechend viele Stoffgruppen erstellen. Wenn Sie z. B. unter „Category members“ mehrere Stoffgruppenmitglieder für die ökotoxikologischen Eigenschaften und mehrere andere Stoffgruppenmitglieder für die toxikologischen Eigenschaften definieren müssen, müssen Sie zwei verschiedene Stoffgruppen definieren und für jede Gruppe die zugehörigen Stoffdatensätze sowie die notwendigen Endpunkte angeben.

Das Berichtsformat für das Analogiekonzept (Kapitel R.6: „QSARs and grouping of chemicals“ (QSARs und Gruppierung von Chemikalien) - R.6.2.6.1), das Berichtsformat für eine chemische Stoffgruppe (Kapitel R.6.2.6.2) und alle anderen unterstützenden Dokumente können als eigenständige Dokumente unter der Überschrift „Reports“ auf der Seite „Category information“ angehängt werden. Klicken Sie zum Anhängen der Dokumente auf das grüne Pluszeichen (siehe folgende Abbildung).



4.3. Wie erstelle ich Registrierungs dossiers für einen Stoff, der Mitglied einer Stoffgruppe ist?

In den folgenden Anweisungen wird erläutert, wie Sie mit IUCLID 5 ein Registrierungs-dossier für einen Stoff erstellen, der (laut Definition Anhang XI Abschnitt 1.5 der REACH-Verordnung) Teil einer Stoffgruppe ist.

4.3.1. Einzeleinreichung des Dossiers

Bevor ein Registrant eine Einzeleinreichung für einen Stoff in einer Stoffgruppe vornimmt, sollte er zunächst sicherstellen, dass er damit die Pflichten zur gemeinsamen Nutzung von Daten für diesen Stoff erfüllt. Wenn keine anderen Registranten für den zu registrierenden Stoff vorhanden sind, ist keine gemeinsame Einreichung notwendig, und das Dossier, das die Stoffgruppe enthält, ist auf dieselbe Weise zu erstellen, wie dies unten für federführende Registranten beschrieben ist (siehe Abschnitt 4.3.2).

Da für jeden Stoff ein separates Registrierungs-dossier einzureichen ist, muss ein Registrant, der mehrere Stoffe herstellt/einführt, die Teil einer Stoffgruppe sind, möglicherweise für einige Mitglieder der Stoffgruppe (für die er der einzige Hersteller/Importeur ist) Einzeleinreichungen und für andere Mitglieder (für die mehrere Registranten vorhanden sind, siehe Abschnitt 4.3.2) gemeinsame Einreichungen vornehmen.

4.3.2. Gemeinsame Einreichung der Dossiers (federführender Registrant und beteiligte Registranten)

Um in IUCLID 5 korrekt mit der Erstellung des Dossiers einer gemeinsamen Einreichung für einen Stoff fortzufahren, der zu einer Stoffgruppe gehört, sollten vorab bereits einige Schritte ausgeführt worden sein. In den folgenden Anweisungen wird davon ausgegangen, dass die Stoffdatensätze der verschiedenen Stoffgruppenmitglieder bereits eingetragen und einsatzbereit sind (weitere Informationen dazu finden Sie im IUCLID 5-Nutzerhandbuch, Kapitel D.4, „Stoff (Erstellen und Aktualisieren stoffbezogener Angaben)“).

Hinweis: Bei einer gemeinsamen Einreichung muss zuerst der federführende Registrant sein Dossier bei der ECHA einreichen, bevor die beteiligten Registranten ihre Dossiers einreichen können.

4.3.2.1 Aufgaben des federführenden Registranten

Beim Erstellen eines Dossiers zu einem Stoff, der Mitglied einer Stoffgruppe ist, hat der federführende Registrant in IUCLID 5 die folgenden Aufgaben:

- Er muss für alle Stoffe, die in der Stoffgruppe verwendet werden, Datensätze mit allen relevanten Endpunktstudieneinträgen entwickeln.
- Er muss die Referenzstoffe (unter Meldung der Stoffidentifikation) aller in der Stoffgruppe verwendeten Stoffe bestimmen (jeder Datensatz sollte sich auf einen Referenzstoff beziehen).
- Er muss seine Rechtsperson (LEO) bereitstellen.
- Er muss eine IUCLID 5-Stoffgruppe entwickeln (mit allen zuvor ermittelten Stoffen, für die ein Datensatz vorhanden ist, als Mitglieder der Stoffgruppe („Category members“)).

Als federführender Registrant für den Stoff müssen Sie die folgenden Schritte ausführen:

Stellen Sie sicher, dass der Stoffdatensatz für den zu registrierenden Stoff die Informationsanforderungen nach REACH für den in der Registrierung angegebenen Mengbereich vollständig erfüllt. Dies ist eine Voraussetzung für das Bestehen der technischen Vollständigkeitsprüfung. Informationen dazu finden Sie im Datenübermittlungshandbuch 5, „Anleitung zum Ausfüllen eines technischen Dossiers für Registrierungen und PPORD-Mitteilungen“, das auf der ECHA-Website unter folgender Adresse zum Herunterladen bereitsteht:

http://echa.europa.eu/help/help_docs_en.asp.

Bei den Endpunkten, bei denen es eine Datenlücke gibt, die mit einem Analogieschluss von einem anderen Stoff in der Stoffgruppe gefüllt werden soll, können Sie als Nutzer Folgendes tun:

Gehen Sie zur Matrix der Stoffgruppe und wählen Sie die Zeile des betreffenden Endpunktes aus (z. B. „Solubility in organic solvents / fat solubility“).

Category: gluconates OECD

Category information Matrix Print Matrix Report

299-27-4 526-95-4 299-28-5

4 Physical and chemical properties	299-27-4	526-95-4	299-28-5
4.2 Melting point/freezing point	2 ●	2 ●	1 ●
4.3 Boiling point	1 ●	2 ●	1 ●
4.4 Density	1 ●	4 ●	1 ●
4.5 Particle size distribution (Granulometry)			
4.6 Vapour pressure	1 ●	1 ●	1 ●
4.7 Partition coefficient	1 ●	1 ●	1 ●
4.8 Water solubility	3 ●	5 ●	2 ●
4.9 Solubility in organic solvents / fat solubility		2 ●	1 ●
4.10 Surface tension			
4.11 Flash point			
4.12 Auto flammability	1 ●		
4.13 Flammability			
4.14 Explosiveness			
4.15 Oxidising properties			
4.16 Oxidation reduction potential			
4.17 Stability in organic solvents and identity ...			
4.21 Dissociation constant	1 ●	2 ●	2 ●
4.22 Viscosity			

Abbildung 3: Auswahl des Endpunktes „Solubility in organic solvents / fat solubility“ in der Stoffgruppenmatrix

Füllen Sie die Datenlücke, indem Sie anhand entsprechender Informationen zu einem anderen Mitglied der Stoffgruppe einen Analogieschluss ziehen.

Wir empfehlen, dazu den vollständigen Endpunktstudieneintrag der Analogie in die Zwischenablage zu kopieren, ihn in den Stoffdatensatz einzufügen und ihn dann wie folgt zu ändern:

- Wählen Sie im Abschnitt „Administrative Data“ in der Auswahlliste „Study result type“ die Option „read-across based on grouping of substances (category approach)“ aus.
- Geben Sie für „Reliability“ einen entsprechenden Zuverlässigkeitswert ein.
- Geben Sie an, dass das Prüfmateriale nicht mit dem in Abschnitt 1 definierten Stoff identisch ist, indem Sie im Dropdown-Menü „Identity of test material same as for substance defined in section 1 (if not read across)“ die Option „no“ auswählen, und geben Sie unter „Test material identity“ die Stoffidentifikatoren an.

Category: EXAMPLE - (PRINT CHAIN ALIAS, RETRACILATED)

Category information Matrix Print Matrix Report

Matrix

	67-43-2	67-43-2	67-43-2	67-43-2
4.2 Melting point/freezing point	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
4.3 Boiling point	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
4.4 Density	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
4.6 Vapour pressure	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
4.7 Partition coefficient	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
4.8 Water solubility	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
5.1.2 Hydrolysis	1 ●		1 ●	1 ●
5.2.1 Biodegradation in water: screening tests	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
5.3.1 Bioaccumulation: aquatic / sediment				1 ●
6.1.1 Short-term toxicity to fish	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
6.1.3 Short-term toxicity to aquatic invertebr...	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
6.1.4 Long-term toxicity to aquatic invertebr...	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
6.1.5 Toxicity to aquatic algae and cyanobact...	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
7.1.1 Basic toxicokinetics	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
7.2.1 Acute toxicity: oral	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
7.2.2 Acute toxicity: inhalation	1 ●	1 ●	1 ●	
7.2.3 Acute toxicity: dermal	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●
7.5.1 Repeated dose toxicity: oral			1 ●	1 ●
7.5.3 Repeated dose toxicity: inhalation			1 ●	1 ●
7.6.1 Genetic toxicity in vitro	1 ●	1 ●	1 ●	1 ●

Abbildung 4: Beispiel einer IUCLID 5-Stoffgruppenmatrix

Wenn Sie z. B. auf die Zeile „6.1.1. Short-term toxicity to fish“ klicken, werden in einer Übersicht die Informationen angezeigt, die zu diesem Endpunkt vorhanden sind (siehe Abbildung 5).

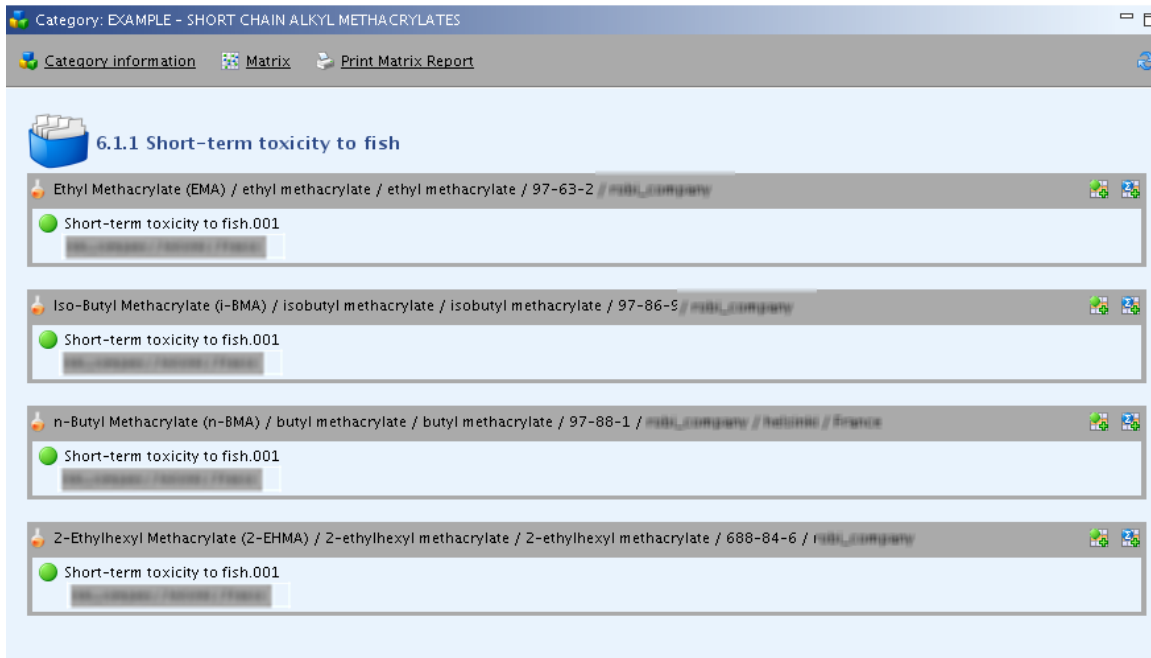


Abbildung 5: Übersicht der Daten, die für die einzelnen Stoffgruppenmitglieder zum Endpunkt „Short-term toxicity to fish“ vorhanden sind

Gehen Sie auf die Startseite, klicken Sie auf „Substance“ und wählen Sie den nach REACH zu registrierenden Stoffdatensatz aus (Abb. 6).

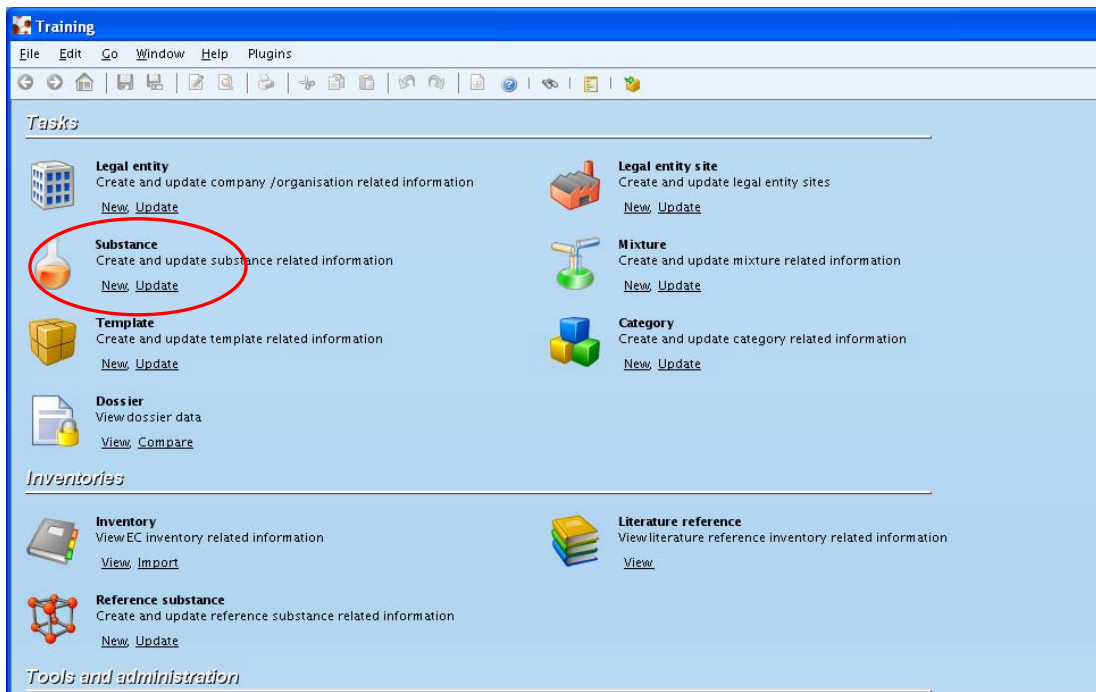


Abbildung 6: Stoffbezogene Informationen

Erstellen Sie von diesem Stoffdatensatz aus das Dossier (gehen Sie dazu zu „File“). Führen Sie die Schritte des Dossierassistenten aus (Abb. 7). Im Folgenden sind nur die Schritte beschrieben, die für die Erstellung eines Dossiers für einen Stoff relevant sind, der zu einer Stoffgruppe gehört. Weiterführende Informationen finden Sie in den [Leitlinien zu IUCLID](#).

Klicken Sie im Popup-Fenster unter „Use related categories“ auf das Kontrollkästchen „Yes“.

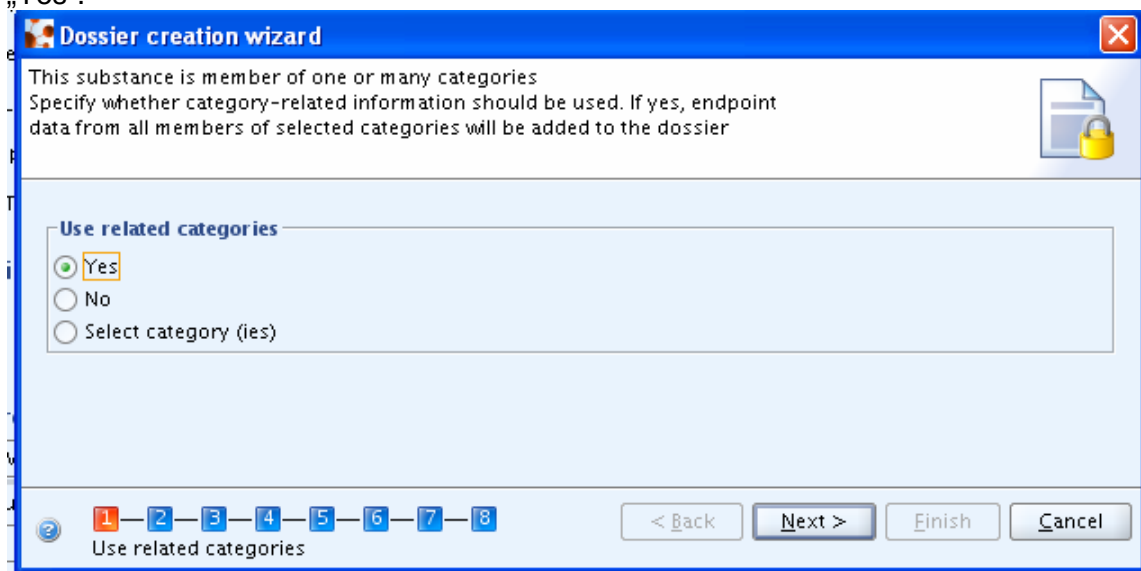


Abbildung 7: Auswahl der zum zu registrierenden Stoff gehörigen Stoffgruppe(n)

Hinweis: Sollte der zu registrierende Stoff zu mehreren Stoffgruppen gehören, muss der Registrant auf das Kontrollkästchen „Select category (ies)“ klicken und die Stoffgruppe(n) auswählen, die angezeigt wird/werden.

Im Dossierassistenten ist für die IUCLID-Abschnitte 1 bis 3 standardmäßig nur der Abschnitt „1.2 Composition“ auf der Registerkarte „Other category members“ mit einem Häkchen versehen (Abbildung 8). Diese Standardeinstellung sollte beibehalten werden, da im Dossier des federführenden Registranten zur Beurteilung der Gültigkeit der Stoffgruppe nur die Angaben zur Stoffzusammensetzung benötigt werden. Bitte beachten Sie, dass alle anderen Angaben zu den Stoffgruppenmitgliedern (z. B. Informationen zur Herstellung, Verwendung und Exposition) für das Dossier des federführenden Registranten nicht relevant sind, da diese von den einzelnen beteiligten Registranten in ihren Registrierungs dossiers zu machen sind.

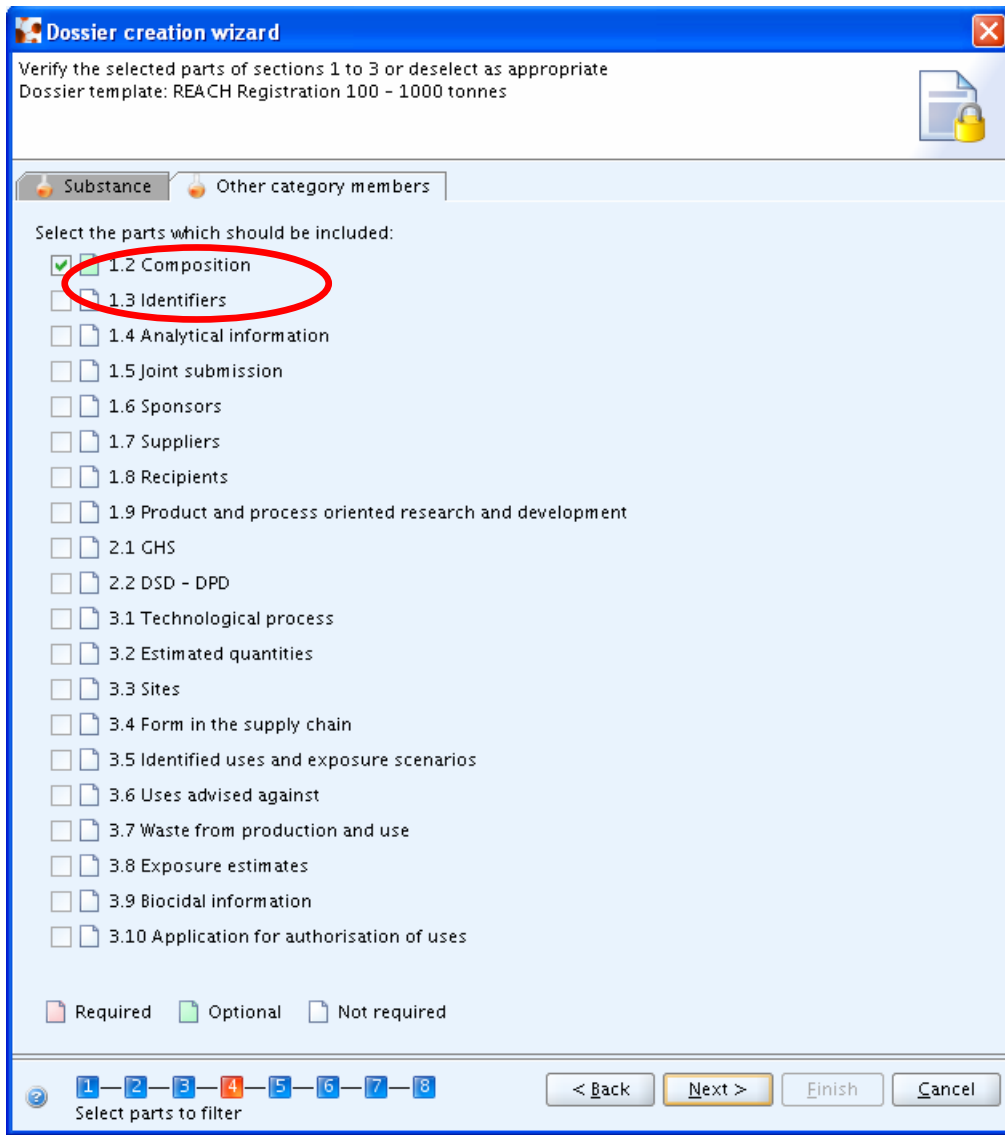


Abbildung 8: Übersicht über die für die Stoffgruppenmitglieder erforderlichen Informationen in den IUCLID-Abschnitten 1 bis 3

Wählen Sie die Dossievorlage aus, die den höchsten Mengenbereich der gemeinsamen Einreichung abdeckt.

Führen Sie die erforderlichen Schritte zum Fertigstellen der Dossiererstellung aus.

Ausführlichere Informationen dazu, wie Sie ein Dossier korrekt erstellen, finden Sie im Datenübermittlungshandbuch 4, „How to Pass Business Rule Verification“ (Anleitung zum Bestehen der Geschäftsregelprüfung), das auf der ECHA-Website unter folgender Adresse heruntergeladen werden kann:

http://echa.europa.eu/reachit/supp_docs_en.asp

Das erstellte Dossier enthält die folgenden Informationen (**Abbildung 9**):

- Dossierkopf

- Informationen zu:
 - dem vom federführenden Registranten zu registrierenden Stoff (**in Fettschrift hervorgehoben**). Für diesen Stoff müssen alle laut REACH-Verordnung erforderlichen Abschnitte ausgefüllt werden.
 - den anderen Stoffen, die als Stoffgruppenmitglieder verwendet werden. Die einzigen Informationen, die im Registrierungsdossier für diese Stoffe angezeigt werden, beziehen sich auf die Abschnitte 1.1 und 1.2.
- Referenzstoffe für den zu registrierenden Stoff und für alle Stoffe, die als Stoffgruppenmitglieder verwendet werden
- Stoffgruppe mit den Verknüpfungen zu den Stoffgruppenmitgliedern, über die alle Endpunkte, die in der IUCLID-Funktion „Category“ definiert wurden, für alle Stoffgruppenmitglieder verfügbar sind
- Rechtsperson (LEO) des federführenden Registranten

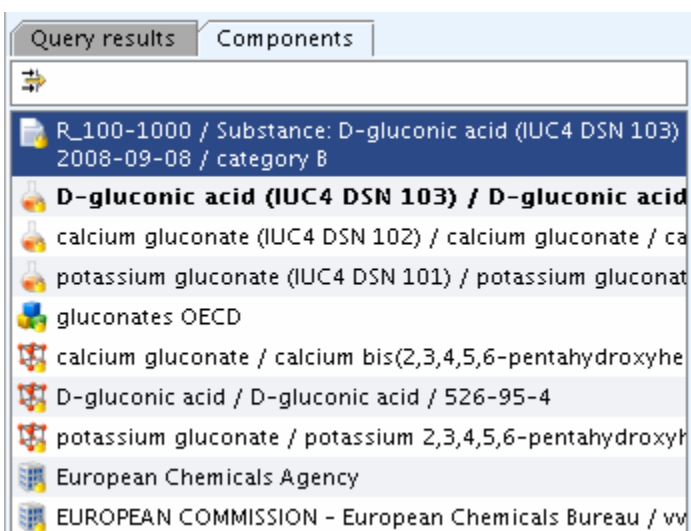


Abbildung 9: Übersicht über die Komponenten des Dossiers

Ausführlichere Informationen zu einer gemeinsamen Einreichung finden Sie im Nutzerhandbuch für die Industrie, Teil 7, „Gemeinsame Einreichung“, das auf der ECHA-Website unter folgender Adresse zum Herunterladen bereitsteht:

http://echa.europa.eu/help/help_docs_en.asp

4.3.2.2. Aufgaben der an einer gemeinsamen Einreichung beteiligten Registranten

Die an einer gemeinsamen Einreichung beteiligten Registranten müssen im Rahmen der gemeinsamen Einreichung ein Registrierungsdossier für diesen Stoff für den Mengbereich einreichen, in dem der Stoff hergestellt und/oder eingeführt wird.

Mit Ausnahme der Fälle, in denen der beteiligte Registrant gemäß Artikel 11 der REACH-Verordnung Informationen nicht gemeinsam, sondern gesondert einreicht (Opt-out), sollte sein individuelles IUCLID-Registrierungsdossier nur Informationen in den Abschnitten 1 und 3 sowie in Abschnitt 1.5 einen Verweis auf die gemeinsame Einreichung und die anderen beteiligten Registranten enthalten.

Demzufolge enthält das Registrierungsdossier dann Folgendes:

- Dossierkopf
- Stoffdatensatz für den zu registrierenden Stoff, wobei die Abschnitte 1 und 3 ausgefüllt sein müssen
- Referenzstoff für den zu registrierenden Stoff
- Rechtsperson des an der gemeinsamen Einreichung beteiligten Registranten

Die zum Erstellen des Dossiers auszuführenden Schritte sind mit den Schritten identisch, die der federführende Registrant für sein Dossier ausführen muss, wobei die an einer gemeinsamen Einreichung beteiligten Registranten nicht die Stoffgruppe auswählen müssen, da nur der federführende Registrant ein vollständiges Dossier sendet. In diesem Fall sollte im Dossierassistenten unter „Use related categories“ auf „No“ geklickt werden (Abbildung 10).

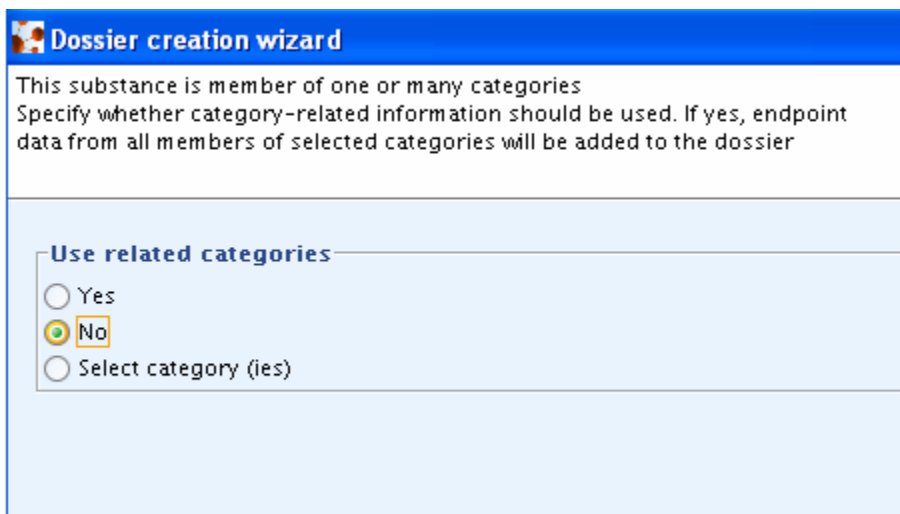


Abbildung 10: Bildschirm zur Auswahl der zum zu registrierenden Stoff gehörigen Stoffgruppe(n)

4.4. Wie melde ich eine Stoffgruppe im Stoffsicherheitsbericht (CSR)?

Für das Melden von Stoffgruppen im Stoffsicherheitsbericht (CSR) gibt es noch kein Berichtsformat. Daher ist das für Einzelstoffe vorhandene Berichtsformat (Leitlinien, Teil F) so anzupassen, dass alle notwendigen Angaben zur Stoffgruppe in den CSR aufgenommen werden können.

Die Stoffgruppenhypothese und die Begründung sowie Informationen dazu, welche Endpunkte, Expositionswege und relevanten Wirkungsarten von der Stoffgruppe abgedeckt werden, sind in der Gefahrenbeurteilung im CSR (Abschnitte 4–8) sowohl für die Beurteilung der Wirkungen auf die menschliche Gesundheit als auch auf die Umwelt anzugeben, sofern für die Stoffgruppe relevant. Die Begründung sollte außerdem Angaben dazu enthalten, inwiefern die in Anhang XI der REACH-Verordnung genannten Ähnlichkeitskriterien (Regeln) eingehalten werden und ob es innerhalb der Hauptstoffgruppe irgendwelche Unterstoffgruppen gibt. Diese Angaben müssen im CSR (vorzugsweise in der Einleitung der einzelnen Gefahrenbeurteilungen, z. B. „Section 5 Human Health

Hazard Assessment“, „Section 7 Environmental Hazard Assessment“) manuell hinzugefügt werden, unabhängig davon, ob das IUCLID 5-CSR-Plug-in verwendet oder der CSR ohne dieses Plug-in erstellt wird.

Sollte die Stoffgruppe mit der IUCLID 5-Funktion „Category“ erstellt worden sein, empfiehlt es sich auch, die IUCLID 5-Datenmatrix aufzunehmen. Dies kann ganz einfach durch Kopieren und Einfügen der in IUCLID erstellten Druckversion der Matrix erfolgen. Die Datenmatrix vor dem Füllen der Datenlücke sollte illustriert werden. Zu diesem Zweck sollte der Nutzer zunächst zum entsprechenden Stoffgruppenmatrixbericht gehen, den Druckvorgang starten und im Browser, der sich daraufhin öffnet, die Matrixdaten in die Zwischenablage kopieren. Von dort kann er die Daten dann unterhalb der Kategoriehypothese und Begründung in den CSR einfügen. Auf diese Weise werden auch die in der Matrix vorhandenen Daten in den CSR eingefügt.

Darüber hinaus empfiehlt es sich, in Abschnitt 3 des CSR in tabellarischer Form die Einstufung und Kennzeichnung aller Stoffe aufzuführen, die Mitglieder der Stoffgruppe sind, um so einen Vergleich ihrer gefährlichen Eigenschaften zu ermöglichen. Außerdem ist es äußerst nützlich, unter jedem Endpunkt (physikalisch-chemische Eigenschaften, (öko)toxikologische Eigenschaften, Verhalten und Verbleib in der Umwelt) Tabellen mit einer Zusammenfassung der Gefahren der einzelnen Mitglieder der Stoffgruppe und Informationen dazu hinzuzufügen, für welche Mitglieder gemessene Daten für den jeweiligen Endpunkt vorliegen. Auf diese Weise wird für die Mitglieder der Stoffgruppe, bei denen Daten mittels Analogiekonzept bereitgestellt werden, eine ordnungsgemäße Bewertung der Stoffgruppenbegründung und der Robustheit der Gefahrenprognose ermöglicht. (Sofern die IUCLID 5-Funktion „Category“ verwendet wurde, sind alle Daten im Matrixbericht vorhanden).

WEITERFÜHRENDE INFORMATIONEN

- **Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung**
http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/information_requirements_r6_en.pdf?vers=20_08_08
- **(Q)SAR Application Toolbox**
www.oecd.org/env/existingchemicals/qsar
- **OECD-Kategorien der OECD**
[http://cs3-hq.oecd.org/scripts/hpv/;](http://cs3-hq.oecd.org/scripts/hpv/)
<http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/OECDSEIDS/sidspub.html>
- **OECD Global Portal (eChemPortal)**
<http://webnet3.oecd.org/eChemPortal/Home.aspx>
- **Datenübermittlungshandbuch 4, „How to Pass Business Rule Verification“ (Anleitung zum Bestehen der Geschäftsregelprüfung):**
http://echa.europa.eu/reachit/supp_docs_en.asp
- **Datenübermittlungshandbuch 5, „Anleitung zum Ausfüllen eines technischen Dossiers für Registrierungen und PPORD-Mitteilungen“**
http://echa.europa.eu/help/help_docs_en.asp
- **Nutzerhandbuch für die Industrie – Teil 7, „Gemeinsame Einreichung“**
http://echa.europa.eu/help/help_docs_en.asp
- **Nutzerhandbuch IUCLID 5**
<http://iuclid.echa.europa.eu/index.php?fuseaction=home.documentation&type=public>

European Chemicals Agency
P.O. Box 400 FI-00121 Helsinki
<http://echa.europa.eu>