

Dezember 2017

## Wie entscheidet man, ob ein Stoff ein Polymer ist oder nicht, und wie geht man mit der entsprechenden Registrierung vor?

### Inhalt

|   |           |
|---|-----------|
| <b>1. Einleitung</b> .....  | <b>2</b>  |
| <b>2. Stoffidentifikation – Polymer oder Nicht-Polymer</b> .....  | <b>4</b>  |
| 2.1. Einleitung – Herstellung eines (potenziellen) Polymers .....   | 4         |
| 2.2. Was ist ein Polymer? .....   | 5         |
| 2.3. Beispiel für die Anwendung der Polymerdefinition .....   | 6         |
| 2.4. Folgen für die Registrierung .....   | 8         |
| 2.5. Analyseverfahren .....   | 8         |
| <b>3. Informationsbeschaffung zu den physikalisch-chemischen Eigenschaften sowie zu den Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit und die Umwelt ....</b> | <b>11</b> |
| 3.1. Programm für die Informationsbeschaffung zu den physikalisch-chemischen Eigenschaften .....  | 11        |
| 3.2. Programm zur Informationsbeschaffung zu den umweltbezogenen Eigenschaften .....  | 14        |
| 3.3. Programm zur Informationsbeschaffung zu den Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit .....  | 16        |
| <b>Verzeichnis der Abbildungen</b>  |           |
| Abbildung 1: Ablaufdiagramm zur Vorgehensweise bei der Datenerhebung mit Unterscheidung zwischen Polymer/Nicht-Polymer .....  | 3         |
| Abbildung 2: Beispiele für eine einfache chemische Struktur mit Wiederholungseinheiten. ....  | 4         |
| Abbildung 3: Beispiel für vernetzte chemische Strukturen mit Wiederholungseinheiten .....   | 4         |
| Abbildung 4: Beispiele für komplexere Strukturen mit verschiedenen Monomeren sowie möglichen vernetzten Strukturen .....  | 5         |
| Verzeichnung der Tabellen   |           |
| Tabelle 1: Veranschaulichung der Polymerdefinition in Abhängigkeit von der Zusammensetzung .....  | 7         |
| Tabelle 2: Beispiele für Analyseverfahren zur Bestimmung, ob es sich bei einem aus einer Polymerisationsreaktion gewonnenen Stoff um ein Polymer handelt .....        | 9         |
| Tabelle 3: Informationsbeschaffung zu (einigen) physikalisch-chemischen Eigenschaften .....   | 11        |
| Tabelle 4: Informationsbeschaffung zu (einigen) umweltbezogenen Eigenschaften .....   | 14        |
| Tabelle 5: Informationsbeschaffung zu (einigen) Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit .....   | 16        |

Dezember 2017

## 1. Einleitung

Anhand dieses Beispiels wird ein Teil des Verfahrens zur Gewinnung von Informationen zu einem Stoff beschrieben, der aus mehreren Wiederholungseinheiten besteht. Daher ist es wichtig zu wissen, ob es sich bei dem Stoff um ein Polymer handelt. Es handelt sich um einen flüssigen, organischen Stoff, der aus einer chemischen Reaktion gewonnen wurde. Die als Ausgangsmaterial verwendeten Stoffe reagieren so, dass eine oder mehrere Einheiten miteinander verbunden werden (kovalente Bindung).

Das Unternehmen, das den Stoff registrieren möchte, stellt den Stoff in einer Menge von mehr als zehn Tonnen jährlich her. Daher gelten die Informationsanforderungen aus Anhang VII und Anhang VIII der REACH-Verordnung sowie die Pflicht zur Durchführung einer Stoffsicherheitsbeurteilung und zur Vorlage eines Stoffsicherheitsberichts als Teil des Regierungsdossiers. HINWEIS: Bei einem Polymer hängen die Informationsanforderungen nicht von der jährlichen Menge des Polymers ab, sondern von der jährlichen Menge des Monomers und anderer zur Herstellung des Polymers verwendeter Reaktanten.

Anhand dieses Beispiels werden schwerpunktmäßig die folgenden Fragen beantwortet:

- Wie wird bestimmt, ob es sich bei einem Stoff um ein Polymer handelt?
- Falls es sich nicht um ein Polymer handelt, hat eine entsprechende Registrierung zu erfolgen (entweder als ein- oder mehrkomponentiger Stoff oder als UVCB-Stoff).
- Was leitet sich aus den oben stehenden Optionen jeweils für die Datenerhebung ab?

Im Rahmen des Beispiels wird mittels mehrerer Szenarien aufgezeigt, wie bereits vorhandene Informationen unterschiedliche Vorgehensweisen zur Erhebung weiterer Daten nach sich ziehen können. Nicht alle Vorgehensweisen werden vollständig beschrieben. Bei einigen werden nur die nächsten Schritte sowie relevante Aspekte kurz umrissen.

Alle in diesem Dokument erwähnten Leitlinien können auf einer eigens dafür eingerichteten ECHA-Webseite abgerufen werden<sup>1</sup>.

Weitere Informationen finden Sie in Kapitel I und II der Praxisanleitungen für KMU-Manager und REACH-Koordinatoren – „Erfüllung Ihrer Informationsanforderungen bei einer Menge von 1-10 und 10-100 Tonnen pro Jahr“<sup>2</sup> (nachfolgend als „Praxisanleitung für KMU zu Informationsanforderungen“ bezeichnet).

Die Ablaufdiagramme zu diesem Beispiel sind in Abbildung 1 zu sehen.

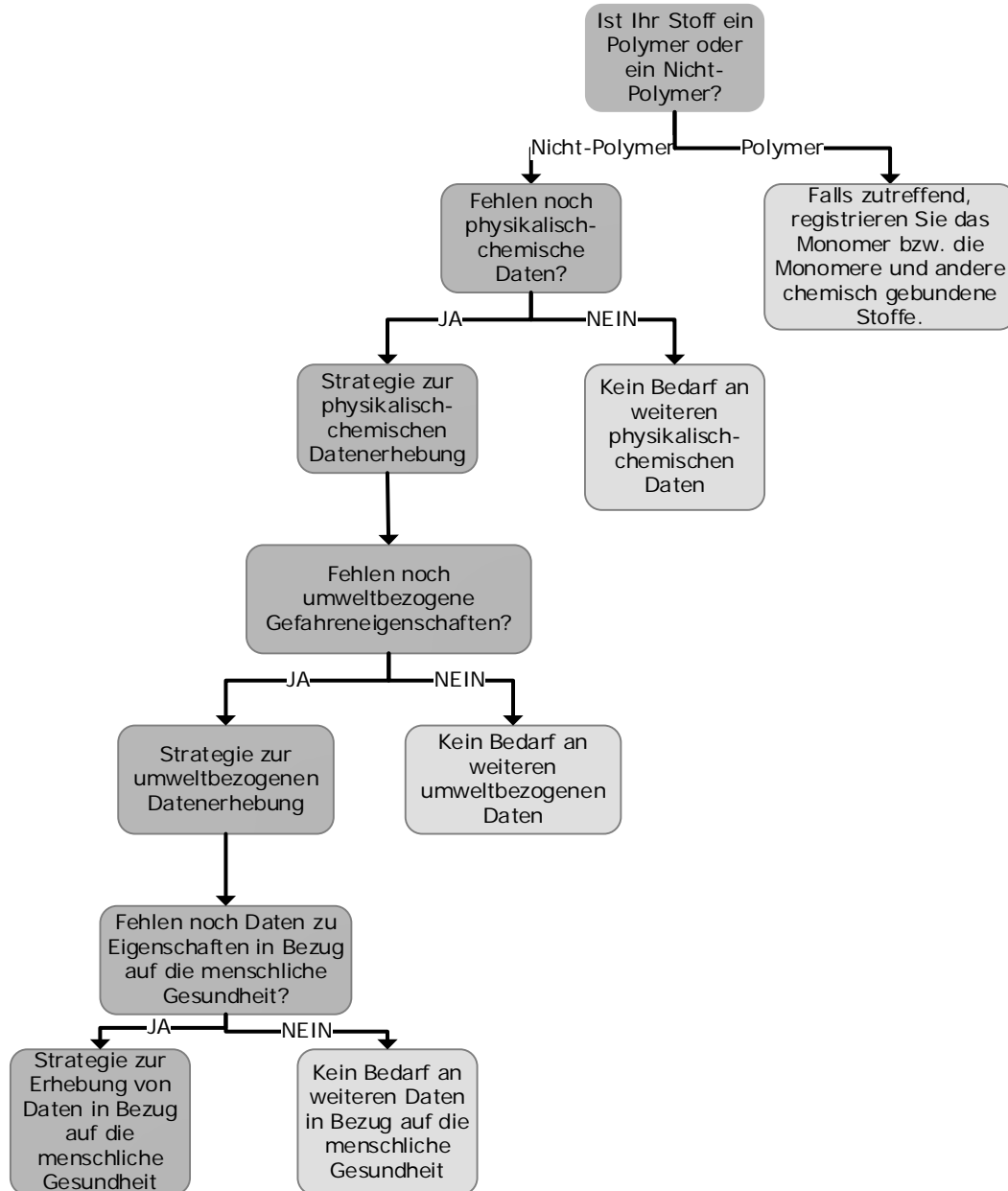
---

<sup>1</sup> Siehe <https://echa.europa.eu/de/guidance-documents/guidance-on-reach>.

<sup>2</sup> Siehe <https://echa.europa.eu/de/practical-guides>.

Dezember 2017

**Abbildung 1: Ablaufdiagramm zur Vorgehensweise bei der Datenerhebung mit Unterscheidung zwischen Polymer/Nicht-Polymer**



Falls es sich beim betreffenden Stoff um ein Polymer handelt, ist die Vorgehensweise zur Erhebung von Daten zum Monomere bzw. zu den Monomeren und (chemisch gebundenen) Reaktanten gleich wie bei einem Stoff, der kein Polymer ist.

Dezember 2017

## 2. Stoffidentifikation – Polymer oder Nicht-Polymer

### 2.1. Einleitung – Herstellung eines (potenziellen) Polymers

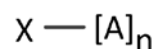
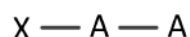
Sie stellen einen chemischen Stoff in einer Lösung her, zu der mehrere Stoffe (Reaktanten) hinzugegeben werden. Diese reagieren so miteinander, dass mehrere Moleküleinheiten miteinander verbunden werden. Es wird davon ausgegangen, dass die Reaktanten in solchen Mengen hinzugegeben werden, dass nach Abschluss der Reaktion die ursprünglichen Reaktanten nur noch in geringen Mengen vorhanden sind (< 1 %).

Angenommen, Sie beginnen mit Reaktant X und Monomer A, und im Herstellungsprozess reagieren X und A miteinander, wobei ein Katalysator vorhanden ist. Monomer A kann auch mit sich selbst reagieren und Wiederholungseinheiten bilden. Die Verbindungen aus dem Reaktanten und den Monomereinheiten werden kovalente Bindungen genannt. X wird bei der Reaktion verbraucht, jedoch bleibt eine X-Einheit am Ende der Kette der A-Einheiten bestehen. Die A-Einheiten sind nun miteinander verbunden (kovalente Bindung) und streng genommen kein A mehr, denn sie wurden zu A', da sie eine Bindung zu einem anderen A'- oder X'-Molekül haben, die zuvor nicht bestand. (Zur Vereinfachung werden im Text und in den Abbildungen A und X verwendet).

Die Reaktion endet, sobald alle ursprünglichen Stoffe verbraucht wurden (d. h., vollständig reagiert haben oder noch in geringen Mengen von < 1 % vorhanden sind oder die Polymerisation durch Abkühlung beendet wurde). Der Katalysator könnte z. B. durch Herausfiltern entfernt werden.

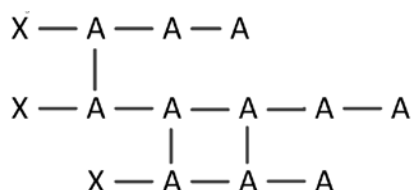
Dabei könnte der folgende Stoff entstanden sein: X-A-A oder X-A-A-A mit einer ggf. hohen Anzahl von A'-Einheiten, häufig ausgedrückt in X-[A]<sub>n</sub>, wobei n für die Anzahl von Einheiten steht, wie in Abbildung 2 dargestellt.

#### Abbildung 2: Beispiele für eine einfache chemische Struktur mit Wiederholungseinheiten.



Die Form muss nicht linear sein; Ketten von X-[A]<sub>n</sub> können auch mit anderen X-[A]<sub>n</sub>-Ketten verbunden (vernetzt) sein, wie in Abbildung 3 dargestellt.

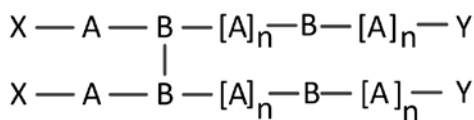
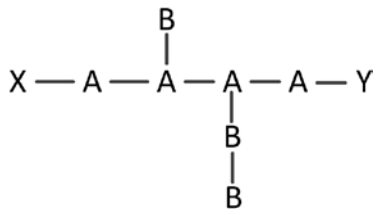
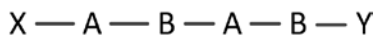
#### Abbildung 3: Beispiel für vernetzte chemische Strukturen mit Wiederholungseinheiten.



Dezember 2017

In anderen Fällen kann mehr als nur ein Reaktant an der Reaktion beteiligt sein: X und Y können beispielsweise mit A- und B-Monomeren reagieren. Dies würde zu einem Stoff bzw. Stoffen mit beispielsweise folgender Zusammensetzung führen: X-A-B-A-B-Y (linear oder verzweigt); oder zu vernetzten Strukturen vom Typ X-A-B-[A-B]<sub>n</sub>-Y oder komplexeren Strukturen mit einer unterschiedlichen Anzahl von Wiederholungseinheiten, wie in Abbildung 4 anhand von 'n' und 'm' dargestellt.

**Abbildung 4: Beispiele für komplexere Strukturen mit verschiedenen Monomeren sowie möglichen vernetzten Strukturen.**



Obwohl bekannt ist, dass diese Reaktion eintritt, weiß man doch nicht genau, wie viele der A-Monomereinheiten miteinander verbunden sind und daher auch nicht, wie lang die Kette für gewöhnlich ist. Von der Information zur Anzahl verbundener Wiederholungseinheiten sowie der jeweiligen Konzentration jedes Bestandteils mit seiner Anzahl an Wiederholungseinheiten hängt ab, ob der Stoff gemäß REACH als Polymer betrachtet wird.

## 2.2. Was ist ein Polymer?

Obwohl die in den Abbildungen 2-4 dargestellten Ketten wie ein Polymer aussehen, muss dennoch überprüft werden, ob sie tatsächlich der Polymerdefinition entsprechen. Die Definition ist im nachfolgenden Kästchen zu finden und wird in der Leitlinie für Monomere und Polymere weiter ausgeführt.

Bei den verschiedenen Beispielen in den Abbildungen 2-4 würde der Stoff aus den Monomereinheiten „A“ und/oder „B“ bestehen und Sie müssen herausfinden, wie viele dieser Einheiten miteinander verbunden sind und wie das Molekulargewicht verteilt ist.

Dezember 2017



### Polymerdefinition

Ein Polymer ist ein Stoff, der aus Molekülen besteht, die durch eine Kette einer oder mehrerer Arten von Monomereinheiten gekennzeichnet sind. Diese Moleküle müssen innerhalb eines bestimmten Molekulargewichtsbereichs liegen. Unterschiede beim Molekulargewicht sind im Wesentlichen auf die Unterschiede in der Zahl der Monomereinheiten zurückzuführen.

Laut REACH (Artikel 3 Nummer 5) ist ein Polymer als ein Stoff definiert, der die folgenden Kriterien erfüllt:

- Mehr als 50 Prozent des Gewichts dieses Stoffes machen Polymermoleküle aus (siehe Definition unten) und
  - Die Menge an Polymermolekülen, die dasselbe Molekulargewicht aufweisen, muss weniger als 50 Gewichtsprozent des Stoffes ausmachen.

Im Rahmen dieser Definition gilt:

Ein „**Polymermolekül**“ enthält eine Kette von mindestens drei Monomereinheiten, die zumindest mit einer weiteren Monomereinheit oder einem sonstigen Reaktanten eine kovalente Bindung eingegangen sind.

Eine „**Monomereinheit**“ ist die gebundene Form eines Monomerstoffes in einem Polymer (für die Identifizierung der Monomereinheit(en) in der chemischen Struktur des Polymers kann beispielsweise der Mechanismus der Polymerbildung herangezogen werden).

Eine „**Kette**“ ist eine kontinuierliche Folge von Monomereinheiten innerhalb des Moleküls, die miteinander kovalente Bindungen eingegangen sind und höchstens durch Monomereinheiten unterbrochen werden. Diese kontinuierliche Folge von Monomereinheiten kann potenziell jedem beliebigen Netzwerk innerhalb der Polymerstruktur folgen.

Ein „**sonstiger Reaktant**“ ist ein Molekül, das mit einer oder mehreren Ketten von Monomereinheiten verbunden sein kann aber unter den relevanten Reaktionsbedingungen, die für den Prozess der Polymerbildung zur Anwendung kommen, nicht als Monomer betrachtet werden kann.

## 2.3. Beispiel für die Anwendung der Polymerdefinition


Tabelle 1 veranschaulicht die Polymerdefinition: Auf der Grundlage der Herstellungsmethode in Abschnitt 2.1 werden verschiedene Beschreibungen vorgestellt.

Dezember 2017

**Tabelle 1: Veranschaulichung der Polymerdefinition in Abhängigkeit von der Zusammensetzung**

| Tabelle 1  |   |  |
|--|---|--|
| Information  | Frage   | Ergebnis   |
| Ihr Stoff besteht aus X, das an eine Kette sich wiederholender gekoppelter A-Moleküleinheiten gebunden ist, in einer Lösung schwimmend.  | Könnte es sich bei Ihrem Stoff um ein Polymer handeln?  | Ja, falls die Moleküle, die die chemische Zusammensetzung des Stoffs ausmachen, aus den Wiederholungseinheiten von A bestehen und der Polymerdefinition entsprechen.<br><br>Anmerkung: Es wird davon ausgegangen, dass das Lösungsmittel entfernt werden kann, ohne die chemische Zusammensetzung des Moleküls zu verändern.   |
| <i>Zusammensetzung (Beispiel 1)</i><br>Die Lösung setzt sich aus den folgenden Gewichtsanteilen zusammen und weist folgende Ketten auf:<br>5 % X-A<br>20 % X-A-A,<br>40 % X-A-A-A, (n=3, könnte ausgedrückt werden in X-[A] <sub>3</sub> )<br>20 % X-[A] <sub>4</sub> ,<br>10 % X-[A] <sub>5</sub> - und<br>5 % X-[A] <sub>6</sub> | Welche dieser Anteile können als Polymermolekül betrachtet werden und was ist die Gesamtheit dieser Polymeranteile?                     | Die Anteile X-A- und X-A-A sind nicht polymer, die Anteile X-A-A-A und höher hingegen sind polymer, da sie mindestens drei Einheiten enthalten, die mit einer vierten verbunden sind. Die Gesamtheit der polymeren Anteile beläuft sich also auf 40 + 20 + 10 + 5 = 75 %.<br>→ Bei diesem Stoff handelt es sich also um ein Polymer  |
| <i>Zusammensetzung (Beispiel 2)</i><br>Die Lösung setzt sich aus den folgenden Gewichtsanteilen zusammen und weist folgende Ketten auf:<br>20 % X-A<br>35 % X-A-A<br>15 % X-A-A-A, (n=3, könnte ausgedrückt werden in X-[A] <sub>3</sub> )<br>15 % X-[A] <sub>4</sub><br>10 % X-[A] <sub>5</sub> - und<br>5 % X-[A] <sub>6</sub>   | Welche dieser Anteile können als Polymermolekül betrachtet werden und was ist die Gesamtheit dieser Polymeranteile?                     | Die Anteile X-A und X-A-A sind nicht polymer, die Anteile X-A-A-A und höher hingegen sind polymer, da sie mindestens drei Einheiten enthalten, die mit einer vierten verbunden sind. Die Gesamtheit der Polymeranteile beläuft sich also auf 15 + 15 + 10 + 5 = 45 %.<br>→ Bei diesem Stoff handelt es sich also <b>nicht</b> um ein Polymer.<br><br>Anmerkung: Dieser Stofftyp wird häufig als Oligomer bezeichnet. |
|  | Falls es sich bei dem Stoff <b>nicht</b> um ein Polymer handelt, ist es dann ein ein- oder mehrkomponentiger Stoff oder ein UVCB-Stoff? | Falls keiner der Anteile 80 Prozent oder mehr ausmacht, handelt es sich nicht um einen einkomponentigen Stoff. Falls die Anteile variieren, handelt es sich um einen UVCB-Stoff. Falls die Anteile jedoch fest sind, könnte es sich um einen mehrkomponentigen Stoff handeln (siehe: Leitlinien zu Monomeren und Polymeren)  |

Dezember 2017

|   |   |
|---|---|
|  | <b>Definition von „Oligomer“</b>  |
|   | <p>Ein Oligomer bezeichnet eine Folge von Monomereinheiten, bei der die Anzahl von Einheiten in einer Kette klein ist. Sie besteht beispielsweise aus zwei oder drei Einheiten, die miteinander verbunden sind und enthält gelegentlich kleine Mengen von vier, fünf oder mehr miteinander verbundenen Einheiten.</p> <p>In der <a href="#">„No-Longer Polymer List“</a> ist eine Reihe oligomerer Stoffe enthalten. Überprüfen Sie, ob der von Ihnen hergestellte/eingeführte Stoff darin enthalten ist. Informieren Sie sich dann auch auf der ECHA-Webseite, ob Ihr Stoff bereits registriert ist.</p> |

Zur Bestimmung Ihres Stoffes muss die Verteilung des Molekulargewichts in Bezug auf Monomereinheiten festgelegt werden. Die bevorzugte Methode zur Bestimmung des „durchschnittlichen Molekulargewichts“ und des „Molekulargewichts“ ist die sogenannte „Gelpermeationschromatographie“ (GPC), die in [OECD TG 118](#) beschrieben ist. Diese Prüfung kann nur in einem Labor durchgeführt werden, das im Einsatz dieser Methode erfahren ist. Ist die GPC nicht möglich, sind in der OECD TG 118 Verweise auf andere Methoden zu finden.

## 2.4. Folgen für die Registrierung

Handelt es sich bei Ihrem Stoff um ein Polymer, ist das Polymer selbst von der Registrierungspflicht ausgenommen. Jedoch sind das Monomer bzw. die Monomere (mit A und/oder B bezeichnet) und der Reaktant bzw. die Reaktanten (mit X und/oder Y bezeichnet) einzeln zu registrieren, es sei denn, die jeweilige zur Herstellung des Polymers verwendete Menge beträgt weniger als eine Tonne pro Jahr oder sie sind bereits „weiter oben in der Lieferkette“ registriert. Weitere Informationen finden Sie in den Leitlinien zu Monomeren und Polymeren.

Falls es sich bei Ihrem Stoff nicht um ein Polymer handelt, ist es demgemäß zu registrieren (wie jeder andere Stoff). Die zentrale Frage ist also: „Handelt es sich um einen ein- oder mehrkomponentigen Stoff oder um einen UVCB-Stoff?“

Tabelle 2 sind ausgewählte Analyseergebnisse und ihre Folgen für die Registrierung gemäß REACH zu entnehmen. Weitere Informationen zur Unterscheidung zwischen einem einkomponentigen, mehrkomponentigen oder UVCB-Stoff finden Sie in den Leitlinien zur Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen gemäß REACH und CLP.

## 2.5. Analyseverfahren

Tabelle 2 enthält einige Szenarien zur Analyse und Bestimmung Ihres Stoffes als Polymer. Bei Stoffen mit höherem Molekulargewicht ist das Verfahren der Wahl normalerweise die Gelpermeationschromatographie (GPC). Jedoch kann bei Stoffen mit niedrigem Molekulargewicht die Gaschromatographie (GC) oder Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (High Pressure Liquid Chromatography – HPLC) genügend Informationen dahingehend liefern,



Dezember 2017

ob es sich bei Ihrem Stoff um ein Polymer handelt. In der nachfolgenden Tabelle sind relevante Verfahren für die Identifizierung von Stoffen aufgeführt, die für die Registrierung organischer Stoffe erforderlich sind.

**Tabelle 2: Beispiele für Analyseverfahren zur Bestimmung, ob es sich bei einem aus einer Polymerisationsreaktion gewonnenen Stoff um ein Polymer handelt**

| Tabelle 2   |   |   |
|---|---|---|
| Analyseverfahren  | Ergebnisse  | Folgerungen nächste Schritte  |
| <i>Szenario 1</i>   |   |   |
| GPC und/oder GC oder HPLC angewandt auf Stoff X-[A] <sub>n</sub>                                | Über 50 Prozent der Polymermoleküle sind vorhanden und keines der Polymermoleküle mit demselben Molekulargewicht macht über 50 Prozent aus<br><br>Peaks im Chromatogramm können mit Bestandteilen im Zusammenhang stehen, die eine unterschiedliche Zahl von Wiederholungseinheiten von A enthalten, die mit dem Reaktanten X verbunden sind. | <b>Der Stoff ist ein Polymer.</b><br><br>A und X müssen in Ihrer Lieferkette registriert werden.<br><br>Im Zusammenhang mit Monomer (A) und Reaktant (X), die im Polymer vorhanden sind (kovalente Bindung), müssen Sie sich entweder i) einer vorhandenen Registrierung anschließen oder ii) selbst registrieren, wenn eine Herstellung in der EU bzw. eine Einführung in die EU erfolgt.<br><br>Es wird geraten, die Analyse mittels GPC und/oder eine andere bestätigende Analyse zu wiederholen, um Schwankungen im Herstellungsprozess abzudecken. |
| <i>Szenario 2</i>   |   |   |
| GPC- und/oder GC- oder HPLC-Analyse auf Stoff X-[A] <sub>n</sub> -[B] <sub>m</sub> -Y angewandt | Weniger als 50 Prozent der Polymermoleküle sind vorhanden.<br><br>Die Ergebnisse zeigen, dass der Stoff Bestandteile mit ein bis vier Wiederholungseinheiten von A und B enthält, die mit den Reaktanten X und Y reagieren.   | <b>Der Stoff ist wahrscheinlich kein Polymer</b> , jedoch ein Stoff, der aus verschiedenen Oligomeren (mehreren miteinander verbundenen Monomereinheiten) besteht.<br><br>Es wird geraten, die Analysen mit verschiedenen Chargen zu wiederholen. Sollten zwischen den Chargen starke Abweichungen festgestellt werden, handelt es sich bei Ihrem Stoff nicht um ein Polymer und er ist dementsprechend zu registrieren.  |

Dezember 2017

| Tabelle 2  |   |  |
|--|---|--|
| Analyseverfahren   | Ergebnisse  | Folgerungen nächste Schritte   |
| Wiederholen Sie die bei Stoff X-[A] <sub>n</sub> -[B] <sub>m</sub> -Y durchgeführte Analyse. | Überprüfen Sie, ob es starke Abweichungen zwischen den Chargen im Hinblick auf die Konzentration der verschiedenen vorhandenen Bestandteile gibt, und auch, ob der Stoff aus Bestandteilen mit einer unterschiedlichen Anzahl von Wiederholungseinheiten besteht. | <b>Der Stoff ist definitiv kein Polymer.</b><br><br>Eine dementsprechende Registrierung des Stoffes ist erforderlich.  |
| <i>Szenario 3</i>  |   |  |
| Mehrfache GPC- und/oder GC- oder HPLC-Analysen bei Stoff X-[A] <sub>n</sub> durchgeführt     | Weniger als 50 Prozent der Polymermoleküle sind vorhanden. Die Ergebnisse zeigen eine klare und feste Verteilung zweier Bestandteile: 60 Prozent auf Einheit n=1 und 40 Prozent auf Einheiten n=2.  | <b>Der Stoff besteht aus spezifischen Oligomeren und scheint daher ein mehrkomponentiger Stoff zu sein.</b><br><br>Eine Überprüfung der Strukturen ist notwendig (siehe 1. Zeile dieser Tabelle).<br><br>Eine dementsprechende Registrierung des Stoffes ist erforderlich. |

!

**Allgemeine Hinweise für alle oben dargestellten Szenarien**

Prinzipiell ist die Struktur des zu registrierenden Stoffes (sowie das Vorhandensein anderer Bestandteile) immer durch UV-Spektroskopie (UV), Infrarotspektroskopie (IR), Kernspinresonanzspektroskopie (NMR) und/oder Massenspektrometrie (MS) und die Quantifizierung von Bestandteilen durch Gaschromatographie (GC) oder Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (High Pressure Liquid Chromatography – HPLC) und/oder Bestimmung der Molekulargewichtsverteilung zu bestätigen. Bei höheren Molekulargewichten ist eine Gelpermeationschromatographie (GPC) durchzuführen. Fragen Sie einen Spezialisten für Polymeranalyse nach der am besten geeigneten Strategie.

Wie bereits erwähnt, sind die GPC- und/oder GC- oder HPLC-Ergebnisse mit den erwarteten oder bestätigten Strukturen zu verbinden, wodurch die Bestimmung der Anzahl von Wiederholungseinheiten erleichtert werden kann.

Wenn Ihr Stoff beispielsweise aus vier Bestandteilen mit einer Verteilung unterschiedlicher Molekulargewichte besteht, muss das Chromatogramm vier Peaks aufweisen, die auch den erwarteten Molekulargewichten entsprechen müssen. Ebenso ist eine Bestätigung der Stoffidentität durch andere Analyseverfahren erforderlich.

Selbst wenn es sich bei Ihrem Stoff um einen UVCB-Stoff handelt, so ist jeder verhältnismäßige Aufwand zu betreiben, um die Struktur aller Bestandteile zu identifizieren, die im hergestellten Stoff mindestens 10 Prozent ausmachen. Auch sind alle Bestandteile zu identifizieren und zu dokumentieren, die für die Einstufung und/oder für die Ermittlung der

Dezember 2017

PBT-Eigenschaften<sup>3</sup> Ihres Stoffes, unabhängig von ihrer jeweiligen Konzentration, relevant sind. Sollte dies technisch nicht möglich sein, ist dem Registrierungsdossier ein entsprechendes Dokument sowie eine wissenschaftliche Begründung dafür beizufügen. Unbekannte Bestandteile sind so weit wie möglich in Form einer allgemeinen Beschreibung ihrer chemischen Beschaffenheit zu identifizieren. Die Analyse und Beurteilung, ob es sich bei Ihrem Stoff um ein Polymer handelt, erfordert erweiterte wissenschaftliche Sachkenntnis.

### 3. Informationsbeschaffung zu den physikalisch-chemischen Eigenschaften sowie zu den Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit und die Umwelt

Wir gehen davon aus, dass es sich bei Ihrem Stoff um einen oligomeren Stoff handelt, d. h., einen Stoff mit mehreren miteinander verbundenen Monomereinheiten (kovalente Bindung), der die Anforderungen an ein Polymer nicht erfüllt (Szenario 3 in Tabelle 2 oben) und dass Sie Informationen zu den physikalisch-chemischen Eigenschaften sowie zu den Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit und die Umwelt beschaffen müssen.

Wir gehen ebenfalls davon aus, dass Sie jährlich zwischen zehn und 100 Tonnen herstellen und/oder einführen. In diesem Fall sind Sie dazu verpflichtet, die Informationsanforderungen in den Anhängen VII und VIII von REACH zu erfüllen.

#### 3.1. Programm für die Informationsbeschaffung zu den physikalisch-chemischen Eigenschaften

**!** In Bezug auf die physikalisch-chemischen Eigenschaften gibt es keine Unterschiede bei den Datenanforderungen für Stoffe, die im Umfang von 1-10 Tonnen jährlich oder 10-100 Tonnen jährlich hergestellt oder eingeführt werden.

**Tabelle 3: Informationsbeschaffung zu (einigen) physikalisch-chemischen Eigenschaften**

| Tabelle 3   |  |   |
|---|--|---|
| Was Sie wissen  | Was zu tun ist   | Anmerkungen   |
| Sie müssen den oligomeren Stoff registrieren.   | Beschaffen Sie sich interne Informationen, z. B. in der technischen Abteilung.             | Interne Informationen sind immer eine gute Ausgangsgrundlage.   |
| <i>Szenario 1: Alle physikalisch-chemischen Informationen liegen vor.</i>                               |  |   |
| Sie verfügen über zuverlässige Informationen zu allen relevanten physikalisch-chemischen Eigenschaften. | Keine weiteren Schritte zur Beschaffung physikalisch-chemischer Informationen erforderlich | Prüfungen, die gemäß den vorgeschriebenen Leitlinien durchgeführt wurden, sind in der Regel zuverlässig.<br><br>Informationen aus Handbüchern oder Publikationen können |

<sup>3</sup> Siehe <https://echa-term.echa.europa.eu/de/home>

Dezember 2017

| Tabelle 3  |   |  |
|--|---|--|
| Was Sie wissen   | Was zu tun ist  | Anmerkungen  |
|  |   | zuverlässig sein, sofern sie von einem wissenschaftlichen Experten bestätigt wurden. Sie können in einem auf der „Beweiskraft der Daten“ basierenden Ansatz herangezogen werden.   |
| <i>Szenario 2: Die meisten, jedoch nicht alle physikalisch-chemischen Informationen liegen vor.</i>  |   |  |
| <p>Sie verfügen über zuverlässige Informationen zu den folgenden physikalisch-chemischen Eigenschaften:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Schmelzpunkt</li> <li>• Relative Dichte</li> <li>• Oberflächenspannung</li> <li>• Flammpunkt</li> <li>• Entzündlichkeit</li> <li>• Explosionsfähigkeit</li> <li>• Selbstentzündungstemperatur</li> <li>• Oxidierende Eigenschaften</li> </ul> | <p>Zur Erfüllung der Informationsanforderungen müssen Sie Informationen zu den folgenden physikalisch-chemischen Eigenschaften beschaffen:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Siedepunkt</li> <li>• Dampfdruck</li> <li>• Wasserlöslichkeit</li> <li>• Verteilungskoeffizient n-Okтанол/Wasser</li> </ul> <p>Überprüfen Sie zunächst, ob auf die Erfüllung der Datenanforderungen bei einigen Eigenschaften verzichtet werden kann.</p> <p>So muss beispielsweise der Dampfdruck nicht bestimmt werden, wenn der Schmelzpunkt über 300 °C liegt. Auch kann es sein, dass die Durchführung von Prüfungen technisch unmöglich oder wissenschaftlich unbegründet ist.</p> <p>Überprüfen Sie dann, ob bereits Daten zu den anderen Eigenschaften vorliegen. Diese können ggf. frei zugänglicher Literatur wie Handbüchern oder Datenbanken oder älteren Studienberichten entnommen werden.</p> <p>Dabei müssen Sie sorgfältig beurteilen, ob Daten dieser Art i) zuverlässig sind, ii) einen relevanten Wert für die Beurteilung der spezifischen inhärenten Eigenschaft Ihres Stoffes bieten und iii) keinem Urheberrecht unterliegen (dies ist zu berücksichtigen, bevor diese Informationen verwendet werden können).</p> <p>Sollten schließlich noch Daten fehlen, müssen Sie herausfinden, wie diese</p> | <p>Granulometrie-Daten, d. h. Daten aus Partikelgrößenanalysen, sind nicht relevant, da es sich bei Ihrem Stoff um eine Flüssigkeit handelt.</p> <p>Prüfungen, die gemäß den vorgeschriebenen Leitlinien durchgeführt wurden, sind in der Regel zuverlässig.</p> <p>Informationen aus Handbüchern oder Publikationen können zuverlässig sein, sofern sie von einem wissenschaftlichen Experten bestätigt wurden. Zur Bestätigung der Zuverlässigkeit von Publikationen benötigen Sie in der Regel mehr als nur eine Informationsquelle.</p> <p>Wenn Sie Informationen aus einem Handbuch oder einer Datenbank verwenden möchten<sup>5</sup>, müssen Sie sorgfältig prüfen, ob der untersuchte Stoff der gleiche wie jener ist, den Sie registrieren möchten (in Bezug auf Reinheit/Verunreinigungen), und ob die Daten von einer zuverlässigen Prüfmethode stammen. Selbiges gilt für alte Berichte von Studien, die vor der Standardisierung der Prüfmethoden durchgeführt wurden.</p> <p>Die Generierung von Daten mit alternativen Methoden (z. B. QSAR-Prognosen, Analogievergleich oder Interpolation von Daten aus einer Gruppe ähnlicher Stoffe) setzt erweiterte wissenschaftliche Sachkenntnis voraus. Die Verwendung, Begründung und Dokumentation eines solchen Ansatzes ist sehr spezifischen Regeln unterworfen.</p> <p>Weitere Informationen zur Erfüllung der Informationsanforderungen</p> |

<sup>5</sup> Ein Überblick über akzeptierte Handbücher und Datenbanken sowie die Anforderungen für derartige zu verwendende Daten kann den ECHA-Leitlinien zu Informationsanforderungen und Stoffsicherheitsbeurteilung, Kapitel R.7a entnommen werden.

Dezember 2017



Sobald Informationen zu allen Stoffen vorliegen, müssen Sie überprüfen, ob Ihr Stoff physikalisch-chemische Eigenschaften aufweist, die unerwünschte Effekte hervorrufen, welche wiederum zu einer physikalischen Gefahreinstufung gemäß der CLP-Verordnung, wie z. B. Entzündlichkeit oder Explosionsfähigkeit, führen. Ist dies der Fall, muss der Stoffsicherheitsbericht auch eine Risikobeschreibung enthalten.

**Tabelle 3**

| Was Sie wissen | Was zu tun ist  | Anmerkungen   |
|----------------|---|---|
|                | <p>generiert werden können. Eine Prüfung wird fast immer die zuverlässigsten Daten liefern und sollte daher immer dann in Betracht gezogen werden, wenn ein Verzicht auf die Datenerhebung unbegründet wäre.</p> <p>Jedoch kann es in manchen Fällen Alternativen zur Durchführung von Prüfungen geben, z. B. einen Vergleich mit einer Gruppe ähnlicher Stoffe oder eine QSAR-Abschätzung<sup>4</sup>.</p> | <p>gemäß REACH finden Sie in der Praxisanleitung <i>Meldung von Daten mit dem (Q)SAR-Ansatz</i><sup>6</sup>.</p> <p>Physikalisch-chemische Eigenschaften, die für die Gefahreinstufung gemäß der CLP-Verordnung ausschlaggebend sind, müssen unter Einhaltung der GLP-Kriterien geprüft werden. Bereits bestehende Daten, die nicht gemäß GLP erhalten wurden, können jedoch akzeptiert werden.</p> |

Falls Sie Alternativen zu Standardprüfungen in Betracht ziehen, beachten Sie bitte, dass es die Anwesenheit zahlreicher unbekannter Bestandteile im Stoff unmöglich machen wird, die Informationsanforderungen mittels QSARs oder Analogievergleich mit anderen Stoffen zu erfüllen.

<sup>4</sup> Siehe <https://echa-term.echa.europa.eu/de/home>

<sup>6</sup> <https://echa.europa.eu/de/practical-guides>

Dezember 2017

### 3.2. Programm zur Informationsbeschaffung zu den umweltbezogenen Eigenschaften

**Tabelle 4: Informationsbeschaffung zu (einigen) umweltbezogenen Eigenschaften**

| Tabelle 4   |  |  |
|---|--|--|
| Was Sie wissen  | Was zu tun ist   | Anmerkungen  |
| Sie müssen den oligomeren Stoff registrieren.<br>10-100 t pro Jahr  | Beschaffen Sie sich interne Informationen, z. B. in der technischen Abteilung.   | Interne Informationen sind immer eine gute Ausgangsgrundlage.  |
| <i>Szenario 1: Alle umweltbezogenen Informationen liegen vor.</i>   |  |  |
| Sie verfügen über zuverlässige interne Informationen zu allen umweltbezogenen Eigenschaften.  | Keine weiteren Schritte zur Sammlung umweltbezogener Informationen erforderlich.   | Prüfungen, die gemäß den vorgeschriebenen Leitlinien durchgeführt wurden, sind in der Regel zuverlässig. Informationen aus Publikationen können ebenfalls zuverlässig sein, sofern sie von einem wissenschaftlichen Experten bestätigt wurden.   |
| <i>Szenario 2: Nicht alle umweltbezogenen Informationen liegen vor.</i>   |  |  |
| <p>Sie verfügen über zuverlässige interne Informationen zu den folgenden umweltbezogenen Endpunkten:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Leichte biologische Abbaubarkeit</li> <li>• Algenwachstumshemmung</li> <li>• Toxizität für (STP-) Mikroorganismen</li> </ul> <p>Sie wissen bereits, dass Sie der einzige (potenzielle) Registrant für diesen Stoff sind.<br/>Sie sind sich keines Stoffes bewusst, der Ihrem Stoff ähnlich ist.</p> | <p>Zur Erfüllung der Informationsanforderungen zum Umweltrisiko Ihres Stoffes in Anhang VII und VIII von REACH müssen Sie Informationen zu den folgenden Eigenschaften sammeln:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Hydrolyse</li> <li>• Adsorptions-/Desorptions-Screening</li> <li>• Abbau</li> <li>• Kurzzeittoxizität für wirbellose Wassertiere</li> <li>• Kurzzeittoxizität für Fische</li> </ul> <p>Da es keine anderen (potenziellen) Registranten gibt und Sie keine ähnlichen Stoffe gefunden haben, müssen Sie die Daten selbst erheben.</p> <p>Sie können auf einige Prüfungen verzichten, falls deren Durchführung technisch nicht möglich oder wissenschaftlich unbegründet ist.</p> <p>Überprüfen Sie im Hinblick auf die verbleibenden Eigenschaften, ob bereits Daten vorliegen, z. B. in Handbüchern.</p> <p>Sie können auf die Durchführung einiger Prüfungen verzichten, wenn Sie andere Adaptionen</p> | <p>Prüfungen, die gemäß den vorgeschriebenen Leitlinien durchgeführt wurden, sind in der Regel zuverlässig. Informationen aus Publikationen können ebenfalls zuverlässig sein, sofern sie von einem wissenschaftlichen Experten bestätigt wurden. Zur Bestätigung der Zuverlässigkeit von Publikationen benötigen Sie in der Regel mehr als nur eine Informationsquelle.</p> <p>Ist bereits bekannt, dass ein Stoff leicht biologisch abbaubar ist, muss kein Hydrolysetest durchgeführt werden.</p> <p>Ein Hydrolysetest ist wissenschaftlich unbegründet, wenn der Stoff keine chemikalischen Gruppen enthält, die hydrolysiert werden können.</p> <p>Es ist technisch nicht möglich, umweltbezogene Eigenschaften zu überprüfen, wenn der Stoff bei Kontakt mit Wasser entzündlich ist.</p> <p>Zur Adsorption sollten die Daten statt über Prüfungen zunächst aus Analogievergleichen oder QSAR-Berechnungen generiert werden (siehe Kapitel II.1.2 der</p> |

Dezember 2017



Sobald Informationen zu jeder Eigenschaft vorliegen, müssen Sie überprüfen, ob Ihr Stoff eine umweltbezogene Gefahr mit sich bringt, die zu unerwünschten Effekten führen kann (z. B. Toxizität für aquatische Organismen). In der Praxis erfolgt dies durch Überprüfung, ob der Stoff im Hinblick auf seine Wirkung auf die Umwelt gemäß der CLP-Verordnung einzustufen ist. Ist dies der Fall, muss der Stoff entsprechend gekennzeichnet und eingestuft sowie eine Expositionsbeurteilung sowie Risikobeschreibung vorgenommen werden. Dies muss in Ihrem Stoffsicherheitsbericht dokumentiert werden.

Auf der Grundlage der Ergebnisse der Umweltrisikostudien (d. h. Toxizität für Fische, wirbellose Wassertiere und Algen) müssen Sie ebenfalls den Grenzwert festlegen, unter dem keine negativen Auswirkungen zu erwarten sind. Diese Grenzwerte werden als Predicted No Effect Concentrations (PNECs), also abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentrationen, bezeichnet. Ihre Ableitung setzt erweiterte wissenschaftliche Sachkenntnis voraus.

**Tabelle 4**

| Was Sie wissen | Was zu tun ist  | Anmerkungen  |
|----------------|---|--|
|                | <p>(Analogievergleich, QSAR, „Beweiskraft der Daten“) verwenden.</p> <p>Falls nach wie vor Daten fehlen, führen Sie eine Prüfung durch.</p> | <p>Praxisanleitung für KMU zu Informationsanforderungen).</p> <p>Alle umweltbezogenen Gefahrenprüfungen müssen gemäß allgemein anerkannten Prüflinien durchgeführt werden und den Kriterien der „Guten Laborpraxis“ (GLP) entsprechen.</p> |



Dezember 2017

### 3.3. Programm zur Informationsbeschaffung zu den Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit

**Tabelle 5: Informationsbeschaffung zu (einigen) Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit**

| Tabelle 5  |   |  |
|--|---|--|
| Was Sie wissen   | Was zu tun ist  | Anmerkungen  |
| Sie müssen den oligomeren Stoff registrieren.  | Beschaffen Sie sich interne Informationen, z. B. in der technischen Abteilung.  | Interne Informationen sind immer eine gute Ausgangsgrundlage.  |
| <i>Szenario 1: Alle Informationen zu den Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit liegen vor.</i>   |   |  |
| Sie verfügen über zuverlässige interne Informationen zu allen relevanten Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit.  | Da alle notwendigen Informationen bereits zur Verfügung stehen, sind keine weiteren Schritte zur Beschaffung von Informationen zu Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit erforderlich.   | Prüfungen, die gemäß den vorgeschriebenen Leitlinien durchgeführt wurden, sind in der Regel zuverlässig.<br><br>Informationen aus Publikationen können ebenfalls zuverlässig sein, sofern sie von einem wissenschaftlichen Experten bestätigt wurden.  |
| <i>Szenario 2: Die meisten, jedoch nicht alle Informationen zu den Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit liegen vor</i>  |   |  |
| <p>Sie verfügen über zuverlässige Informationen zu den folgenden Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Hautreizung/Ätzwirkung (<i>In-vivo</i>-Studie)</li> <li>• Augenreizung (<i>In-vivo</i>-Studie)</li> <li>• Sensibilisierung der Haut</li> <li>• <i>In-vitro</i>-Genmutationsversuch an Bakterien</li> <li>• Akute orale Toxizität</li> </ul> <p>Sie wissen bereits, dass Sie der einzige (potenzielle) Registrant für diesen Stoff sind.</p> <p>Sie sind sich keines Stoffes bewusst, der Ihrem Stoff ähnlich ist.</p> | <p>Zur Erfüllung der Informationsanforderungen zu den Eigenschaften Ihres Stoffes in Bezug auf die menschliche Gesundheit in Anhang VIII von REACH müssen Sie Informationen zu den folgenden Eigenschaften sammeln:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>In-vitro</i>-Cytogenitätsstudie an Säugetierzellen</li> <li>• <i>In-vitro</i>-Genmutationsstudie an Säugetierzellen</li> <li>• Akute Toxizität – inhalativ</li> <li>• Kurzzeittoxizität bei wiederholter Aufnahme</li> <li>• Screeningtest auf Reproduktions-/Entwicklungstoxizität</li> </ul> <p>Sie führen die erforderlichen Prüfungen in Bezug auf die menschliche Gesundheit selbst durch bzw. geben diese in Auftrag.</p> <p>Um die unnötige Wiederholung von Tierversuchen zu vermeiden, durchsuchen Sie die für den Screeningtest am meisten geeignete Prüfleitlinie nach Informationen zu Reproduktions-/Entwicklungstoxizität, damit Sie auch die Anforderungen der Kurzzeittoxizität bei wiederholter Aufnahme (28-tägige Behandlung) erfüllen. Sie beschließen, die Toxizitätsstudie bei wiederholter</p> | <p><i>Die REACH-Anhänge wurden 2016 verändert und demgemäß werden In-vitro-Prüfungen standardmäßig für drei Eigenschaften gefordert:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>i) Hautreizung und Ätzwirkung,</li> <li>ii) Augenreizung,</li> <li>iii) Hautsensibilisierung.</li> </ol> <p>Da Ihre Informationen zu Hautreizung und Ätzwirkung und Augenreizung aus <i>In-vivo</i>-Studien stammen, müssen Sie eine wissenschaftliche Begründung dafür erstellen, warum Sie keine <i>In-vitro</i>-Prüfung vorlegen (um die geltenden Anforderungen in Anhang VII zu erfüllen). Andernfalls ist Ihr Dossier nicht vollständig.</p> <p>In Bezug auf die Hautsensibilisierung müssen Sie ggf. Ihre Informationen mit Ergebnissen aus <i>In-vitro</i>-Prüfungen gemäß den geltenden Anforderung aus Anhang VII ergänzen.</p> <p>Prüfungen, die gemäß den vorgeschriebenen Leitlinien durchgeführt wurden, sind in der Regel zuverlässig. Informationen aus Publikationen können ebenfalls zuverlässig sein, sofern sie von einem wissenschaftlichen Experten bestätigt wurden. Zur Bestätigung der Zuverlässigkeit von Publikationen benötigen Sie in der</p> |



Dezember 2017



Sobald Informationen zu den betreffenden Eigenschaften vorliegen, müssen Sie überprüfen, ob Ihr Stoff in Bezug auf die menschliche Gesundheit eine Eigenschaft mit sich bringt, die zu unerwünschten Effekten, z. B. akute dermale Toxizität, führen kann. In der Praxis erfolgt dies durch Überprüfung, ob der Stoff im Hinblick auf seine unerwünschte Wirkung auf die menschliche Gesundheit gemäß der CLP-Verordnung einzustufen ist. Muss Ihr Stoff eingestuft werden, müssen Sie im Stoffsicherheitsbericht eine Expositionsbeurteilung und eine Risikobeschreibung vornehmen.

Auf der Grundlage der Ergebnisse der Studie zu den Eigenschaften in Bezug auf die menschliche Gesundheit müssen Sie ebenfalls den Grenzwert festlegen, unter dem keine negativen Auswirkungen zu erwarten sind. Diese Grenzwerte werden als Derived No Effect Levels (DNELs), also abgeleitete Nicht-Effekt-Grenzwerte, bezeichnet. Ihre Ableitung setzt erweiterte wissenschaftliche Sachkenntnis voraus.

**Tabelle 5**

| Was Sie wissen | Was zu tun ist  | Anmerkungen   |
|----------------|---|---|
|                | Aufnahme kombiniert mit dem Screeningtest für Reproduktions-/Entwicklungstoxizität durchzuführen. | <p>Regel mehr als nur eine Informationsquelle.</p> <p>Alle Prüfungen in Bezug auf die menschliche Gesundheit müssen gemäß der „Guten Laborpraxis“ (GLP) durchgeführt werden.</p> <p>Wissenschaftliche Sachkenntnis ist erforderlich, um auf der Grundlage der Ergebnisse der <i>In-vitro</i>-Mutagenitätsprüfungen entscheiden zu können, ob <i>In-vivo</i>-Mutagenitätsprüfungen erforderlich sind (siehe Kapitel II.2.3 der Praxisanleitung für KMU zu Informationsanforderungen)</p> |