

2017 m. gruodžio mėn.

## Kaip nuspręsti, ar cheminė medžiaga yra polimeras, ar ne, ir kaip pradėti atitinkamą registraciją

### Turinys

<b>1. Įvadas</b> .....	<b>2</b>
<b>2. Cheminės medžiagos identifikavimas – polimeras ar ne</b> .....	<b>4</b>
2.1. Įvadas. (Galimo) polimero gamyba .....	4
2.2. Kas yra polimeras? .....	5
2.3. Polimero apibrėžties taikymo pavyzdys .....	6
2.4. Registracijos pasekmės .....	8
2.5. Analitiniai metodai .....	8
<b>3. Informacijos apie fizikines ir chemines savybes ir poveikį žmonių sveikatai bei aplinkai turinčias savybes rinkimas</b> .....	<b>11</b>
3.1. Informacijos apie fizikines ir chemines savybes rinkimo programa .....	11
3.2. Informacijos apie poveikį aplinkai turinčias savybes rinkimas .....	15
3.3. Informacijos apie poveikį žmonių sveikatai turinčias savybes rinkimas .....	17

### Paveikslų sąrašas

1 paveikslas. Diagrama, kurioje pavaizduoti veiksmi, kuriuos reikia atlikti renkant duomenis, priklausomai nuo to, ar jūsų cheminė medžiaga yra polimeras, ar ne .....	3
2 paveikslas. Paprastos cheminės struktūros, turinčios pasikartojančias grandis, pavyzdžiai ...	4
3 paveikslas. Skersiniais ryšiais sujungtų cheminių struktūrų, turinčių pasikartojančias grandis, pavyzdys .....	4
4 paveikslas. Sudėtingesnių struktūrų, turinčių keletą monomerų, ir galimų skersiniais ryšiais sujungtų struktūrų, pavyzdžiai .....	5

### Lentelių sąrašas

1 lentelė. Polimero apibrėžties pavyzdžiai atsižvelgiant į polimero sudėtį .....	7
2 lentelė. Analizės, kuri naudojama siekiant nustatyti, ar polimerizacijos reakcijos metu gauta cheminė medžiaga yra polimeras, ar ne, pavyzdys .....	9
3 lentelė. Informacijos apie (tam tikras) fizikines ir chemines savybes rinkimas .....	11
4 lentelė. Informacijos apie (tam tikras) poveikį aplinkai turinčias savybes rinkimas .....	15
5 lentelė. Informacijos apie poveikį žmonių sveikatai turinčias savybes rinkimas .....	17

2017 m. gruodžio mėn.

## 1. Įvadas

Šiame pavyzdyje aprašoma informacijos apie cheminę medžiagą, kurią sudaro keletas pasikartojančių grandžių, rinkimo dalis. Todėl svarbu žinoti, ar tai yra polimeras, ar ne. Cheminė medžiaga yra skysta organinė medžiaga, gauta po cheminės reakcijos. Cheminės medžiagos, kurios naudojamos kaip pradinės medžiagos, reaguoja taip, kad sujungiamos į vieną ar daugiau grandžių (kovalentiškai sujungtos).

Įmonė, kuri nori įregistruoti cheminę medžiagą, per metus pagamina daugiau nei 10 tonų tokios medžiagos. Todėl REACH reglamento VII ir VIII prieduose nustatyti informacijai keliami reikalavimai, taip pat prievolė atlikti cheminės saugos vertinimą ir pateikti cheminės saugos ataskaitą yra sudedamoji registracijos dokumentacijos dalis. PASTABA. Polimero atveju informacijai keliami reikalavimai priklauso ne nuo metinio polimero kiekio, bet nuo metinio monomerų ir kitų reaguojančių medžiagų, kurios naudojamos polimero gamyboje, kiekio.

Šiame pavyzdyje iš esmės bus pateikiama tokia informacija:

- Kaip nustatyti, ar cheminė medžiaga yra polimeras, ar ne?
- Jei tai nėra polimeras, turite jį įregistruoti kaip atskirą cheminę medžiagą (kaip vienkomentę cheminę medžiagą, daugiakomentę cheminę medžiagą arba UVCB medžiagą).
- Kokios pasekmės atsiranda renkant duomenis, atsižvelgiant į pirmiau nurodytas alternatyvas?

Pavyzdyje pateikiami įvairūs scenarijai, kai, atsižvelgiant į turimą informaciją, duomenis nusprendžiama rinkti skirtingais būdais. Ne visi būdai bus išsamiai aprašyti. Šiame pavyzdyje aprašant kai kuriuos būdus trumpai apibūdinami kiti etapai ir susiję klausimai.

Visą rekomendacijų dokumentą, į kurį pateikiamos nuorodos šiame dokumente, galima rasti specialiame ECHA tinklalapyje<sup>1</sup>.

Daugiau informacijos pateikiama MVĮ vadovams ir REACH koordinatoriams skirto Praktinio vadovo I ir II skyriuose – Kaip įvykdyti jums galiojančius informacijai keliamus reikalavimus, jei metinis cheminės medžiagos kiekis yra 1–10 ir 10–100 tonų<sup>2</sup> (toliau – MVĮ skirtas Praktinis vadovas dėl informacijai keliamų reikalavimų).

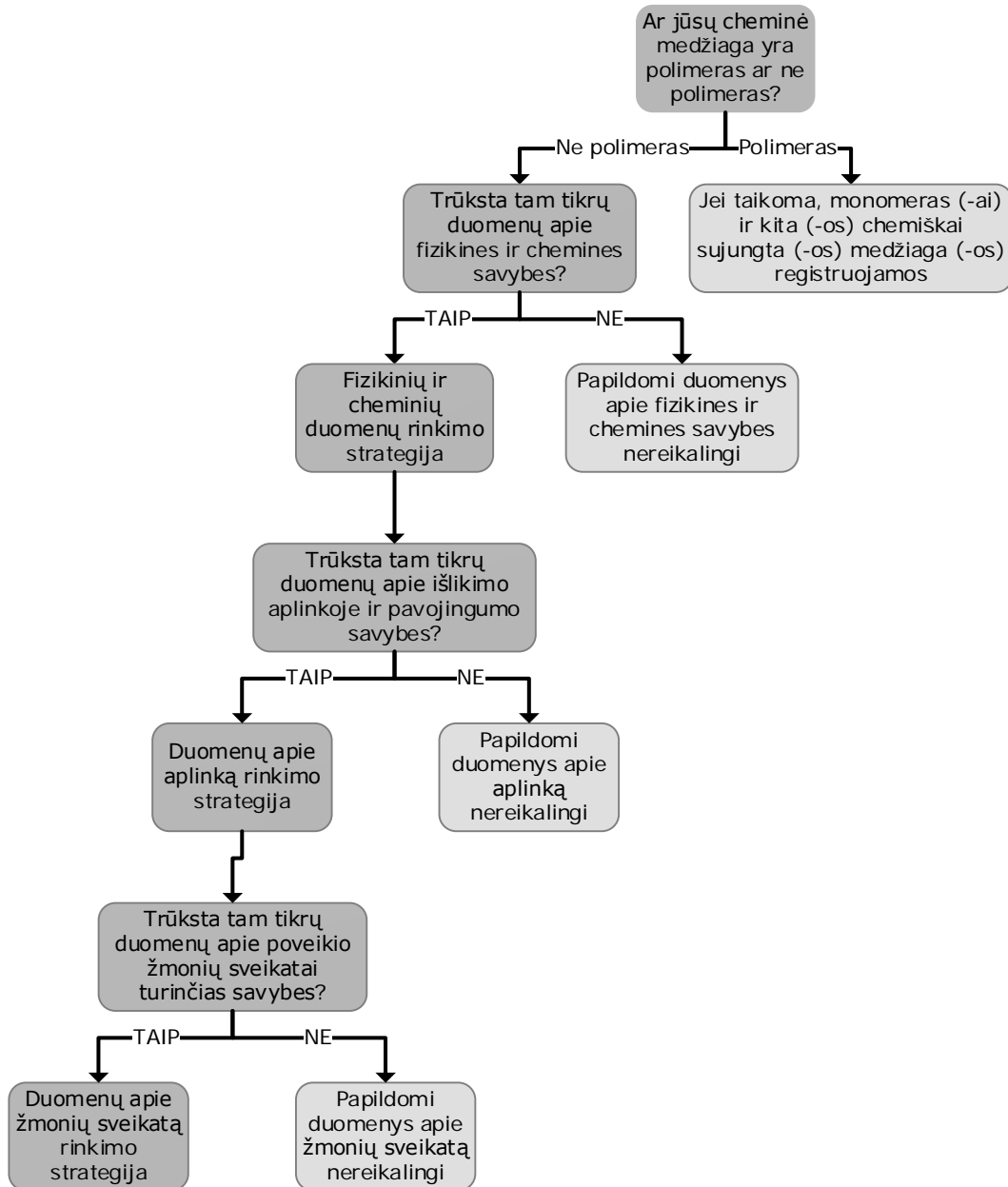
Šiame pavyzdyje pateikiamos dvi diagramos, žr. 1.

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

<sup>2</sup> Žr. <https://echa.europa.eu/lt/practical-guides>.

2017 m. gruodžio mėn.

**1 paveikslas. Diagrama, kurioje pavaizduoti veiksmai, kuriuos reikia atlikti renkant duomenis, priklausomai nuo to, ar jūsų cheminė medžiaga yra polimeras, ar ne**



Jeigu cheminė medžiaga yra polimeras, duomenys apie monomerą (-us) ir (chemiškai sujungtas) reaguojančias medžiagas renkami taip pat kaip ir dėl cheminės medžiagos, kuri nėra polimeras.

2017 m. gruodžio mėn.

## 2. Cheminės medžiagos identifikavimas – polimeras ar ne

### 2.1. Įvadas. (Galimo) polimero gamyba

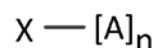
Gaminant cheminę medžiagą tirpale, į kurį įdedate keletą cheminių medžiagų (reaguojančių medžiagų), kurios reaguoja tarpusavyje taip, kad keletas molekulių grandinių susijungia tarpusavyje. Daroma prielaida, kad į tirpalą dedama tiek reaguojančių medžiagų, kad, pasibaigus reakcijai, pradinių reaguojančių medžiagų lieka labai nedaug (mažiau nei 1 %).

Tarkime, kad gamybos procesą pradodate naudodami reaguojančią medžiagą X ir monomerą A; X ir A reaguoja tarpusavyje veikiant katalizatoriui. Monomeras A taip pat gali reaguoti pats su savimi, kad suformuotų pasikartojančias grandis. Reaguojančios medžiagos ir monomero grandžių jungtys vadinamos kovalentiškai sujungtomis. X sunaudojama reakcijos metu, tačiau A grandžių pabaigoje lieka viena X grandis. Dabar A grandys yra tarpusavyje sujungtos (kovalentiškai sujungtos), todėl iš esmės tai yra nebe A grandys, bet modifikuotos A grandys, nes jos yra sujungtos su kita A arba X molekule, su kuria nebuvo sujungtos anksčiau. (Siekiant paprasčiau perteikti informaciją, tekste ir paveiksluose naudojama A ir X).

Reakcija baigiasi, kai sunaudojamos visos pradinės cheminės medžiagos (įvyksta visiška reakcija arba lieka tik nedideli kiekiai (< 1 %), arba polimerizacija ataušinama (sustabdoma). Katalizatorių galima pašalinti naudojant, pvz., filtrą.

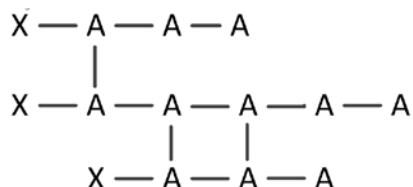
Tuomet gauta cheminė medžiaga gali būti: X-A-A arba X-A-A-A, kai A skaičius gali būti daug didesnis, dažnai užrašoma X-[A]<sub>n</sub>, kur „n“ reiškia grandžių skaičių, kaip parodyta 2.

#### 2 paveikslas. Paprastos cheminės struktūros, turinčios pasikartojančias grandis, pavyzdžiai



Forma nebūtinai turi būti linijinė; X-[A]<sub>n</sub> grandinės taip pat gali būti sujungtos (sujungtos skersiniais ryšiais) su kitomis X-[A]<sub>n</sub> grandinėmis, kaip parodyta 3.

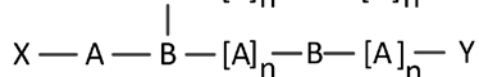
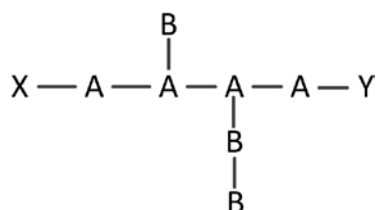
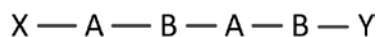
#### 3 paveikslas. Skersiniais ryšiais sujungtų cheminių struktūrų, turinčių pasikartojančias grandis, pavyzdys



Kitais atvejais reakcijoje gali būti daugiau nei viena reaguojanti medžiaga: pavyzdžiui, X ir Y reaguoja su monomerais A ir B. Taip atsirastų cheminė (-s) medžiaga (-os), kurios (-ių) sudėtis, pvz., yra X-A-B-A-B-Y (linijinė arba šakinė struktūra) arba skersiniais ryšiais susietos struktūros X-A-B-[A-B]<sub>n</sub>-Y, arba sudėtingesnės struktūros, kuriose yra skirtingas pasikartojančių grandžių skaičius, kaip parodyta 4 paveiksle su „n“ ir „m“.

2017 m. gruodžio mėn.

#### 4 paveikslas. Sudėtingesnių struktūrų, turinčių keletą monomerų, ir galimų skersiniais ryšiais sujungtų struktūrų, pavyzdžiai



Nors žinote, kad ši reakcija įvyksta, tiksliai nežinote, kiek monomero A grandžių yra sujungtos tarpusavyje, todėl nežinote įprasto grandies ilgio. Informacija apie sujungtų pasikartojančių grandžių skaičių ir atitinkamą kiekvienos sudedamosios dalies, įskaitant jos pasikartojančių grandžių skaičių, koncentraciją, nulemia, ar cheminė medžiaga pagal REACH reglamentą yra laikoma polimeru, ar ne.

## 2.2. Kas yra polimeras?

Nors 2–4 paveiksluose aprašytos grandinės atrodo kaip polimeras, turėsite patikrinti, ar iš tikrųjų taikoma polimero apibrėžtis. Žemiau esančiame langelyje pateikta apibrėžties citata, be to, Rekomendacijose dėl monomerų ir polimerų ši apibrėžtis paaiškinta išsamiau.

Įvairiuose 2–4 paveiksluose aprašytuose pavyzdžiuose cheminę medžiagą turėtų sudaryti monomerų A ir (arba) B grandys, todėl turėsite nustatyti, kiek šių grandžių yra tarpusavyje sujungtos, ir koks jose yra molekulinės masės pasiskirstymas.

2017 m. gruodžio mėn.

**Polimero apibrėžtis**

Polimeras – tai junginys, sudarytas iš pasikartojančių vienodų arba skirtingų monomerinių grandžių molekulių. Šios molekulės turi būti pasiskirsčiusios tam tikrame molekulinės masės intervale. Molekulinės masės skirtumai iš esmės priklauso nuo monomerinių grandžių skaičiaus.

Pagal REACH reglamento 3 straipsnio 5 dalį polimeras apibrėžiamas kaip cheminė medžiaga, atitinkanti šiuos kriterijus:

- daugiau kaip 50 % medžiagos svorio sudaro polimero molekulės (žr. apibrėžtį toliau);
- tos pačios molekulinės masės polimero molekulių kiekis turi sudaryti mažiau kaip 50 % cheminės medžiagos masės.

Pagal šią apibrėžtį:

**Polimero molekulė** – tai molekulė, sudaryta bent iš 3 monomerinių grandžių, kurios yra kovalentiškai sujungtos su bent viena kito monomero grandimi arba kita reaguojančia medžiaga.

**Monomerinė grandis** – tai monomero reagavimo polimeruose forma (siekiant identifikuoti monomerinę (-es) grandį (-is) polimero cheminėje struktūroje, galima atsižvelgti, pavyzdžiui, į polimero formavimosi mechanizmą).

**Seka** – tai monomerinių grandžių jungtis molekulėje, kai jos kovalentiškai susijungusios viena su kita be jokių kitų elementų. Ši monomerinių grandžių jungtis polimero struktūroje gali būti kartu su kitu junginiu.

**Kita reaguojanti medžiaga** – tai molekulė, kuri gali būti susijungusi su viena ar keliomis monomerinėmis grandimis, bet negali būti laikoma monomeru atitinkamomis reakcijos sąlygomis polimero formavimosi procese.

### 2.3. Polimero apibrėžties taikymo pavyzdys

1 paaikškinta polimero apibrėžtis: remiantis 2.1 skirsnyje aprašytu gamybos metodu, siūlomos kelios apibrėžtys.

2017 m. gruodžio mėn.

**1 lentelė. Polimero apibrėžties pavyzdžiai atsižvelgiant į polimero sudėtį**

Informacija	Klausimas	Rezultatas
Jūsų cheminę medžiagą sudaro X, sujungta su pasikartojančių susietų molekulinį grandžių A seka, kuri yra suspenduota tirpale.	Ar jūsų cheminė medžiaga gali būti polimeras?	Taip, jeigu cheminės medžiagos cheminę sudėtį sudarančios molekulės sudaro pasikartojančios A grandys ir ji atitinka polimero apibrėžtį.  Pastaba. Daroma prielaida, kad tirpiklį galima pašalinti nepakeičiant molekulės cheminės sudėties.
<b>Sudėtis (1 pavyzdys)</b> Tirpalą sudaro frakcijos (pagal masę), kurių seka yra tokia: 5 % X-A 20 % X-A 40 % X-A-A-A, (n=3, galėtų būti užrašoma kaip X-[A] <sub>3</sub> ) 20 % X-[A] <sub>4</sub> , 10 % X-[A] <sub>5</sub> - ir 5 % X-[A] <sub>6</sub>	Kurias iš šių frakcijų galima įvertinti kaip polimero molekulę ir kokia yra šių polimerinių frakcijų visuma?	X-A- ir X-A-A frakcijos nėra polimerinės, tačiau X-A-A-A ir didesnės frakcijos yra polimerinės, nes jose yra ne mažiau kaip trys grandys, kurios yra prijungtos prie ketvirtos grandies. Todėl polimerinės frakcijos sudaro 40 + 20 + 10 + 5 = 75 %. → Cheminė medžiaga yra polimeras.
<b>Sudėtis (2 pavyzdys)</b> Tirpalą sudaro frakcijos (pagal masę), kurių seka yra tokia: 20 % X-A 35 % X-A-A 15 % X-A-A-A, (n=3, galėtų būti užrašoma kaip X-[A] <sub>3</sub> ) 15 % X-[A] <sub>4</sub> 10 % X-[A] <sub>5</sub> - ir 5 % X-[A] <sub>6</sub>	Kurias iš šių frakcijų galima įvertinti kaip polimero molekulę ir kokia yra šių polimerinių frakcijų visuma?	X-A- ir X-A-A frakcijos nėra polimerinės, tačiau X-A-A-A ir didesnės frakcijos yra polimerinės, nes jose yra ne mažiau kaip trys grandys, kurios yra prijungtos prie ketvirtos grandies. Todėl polimerinės frakcijos sudaro 15 + 15 + 10 + 5 = 45 %. → Cheminė medžiaga <b>nėra</b> polimeras.  Pastaba. Cheminės medžiagos rūšis dažnai nurodoma kaip oligomeras.
	Jeigu cheminė medžiaga <b>nėra</b> polimeras, ar tai yra vienkomentė, daugiakomentė cheminė medžiaga, ar UVCB medžiaga?	Kadangi nėra vienos 80 % arba didesnės frakcijos, cheminė medžiaga nėra vienkomentė. Jeigu frakcijų kiekiai yra nevienodi, cheminė medžiaga yra UVCB medžiaga, o jeigu frakcijų kiekiai yra tikslūs, cheminė medžiaga gali būti laikoma daugiakomponente (žr. Rekomendacijas dėl monomerų ir polimerų).

2017 m. gruodžio mėn.

**Oligomero paaiškinimas**

Oligomeras – tai monomerinių grandžių jungtis, kurioje grandinės grandžių skaičius nėra didelis, pvz., grandinę paprastai sudaro 2 ar 3 grandys, kurios yra sujungtos tarpusavyje ir kuriose kartais yra nedidelis kiekis taip pat 4, 5 ar daugiau tarpusavyje sujungtų grandžių.

Oligomerinių cheminių medžiagų numeriai pateikiami [Polimeru nebelaikomu medžiagų sąrašė](#). Patikrinkite, ar tai nėra viena iš jūsų gaminamų / importuojamų medžiagų. Tuomet patikrinkite ECHA tinklalapį, kad sužinotumėte, ar jūsų cheminė medžiaga jau įregistruota.

Jei norite apibūdinti savo cheminę medžiagą, labai svarbu nustatyti molekulinio svorio pasiskirstymą monomerinėse grandyse. „Vidutinės molekulinės masės“ ir „molekulinio svorio“ apskaičiavimo metodas, kuriam taikoma pirmenybė, yra vadinamas gelchromatografija (GPC); šis metodas aprašytas [EBPO bandymo rekomendacijoje Nr. 118](#). Norėdami atlikti bandymą, turėsite kreiptis į laboratoriją, turinčią šios metodikos taikymo patirtį. Jeigu GPC taikyti neįmanoma, EBPO bandymo rekomendacijoje Nr. 118 pateikiama nuoroda į kitus metodus.

## 2.4. Registracijos pasekmės

Jeigu jūsų cheminė medžiaga yra polimeras, paties polimero registruoti nereikia. Tačiau pateikiant atskiras registracijos dokumentacijas reikės įregistruoti (visus) monomerą (-us) (pavaizduotas kaip A ir (arba) B) ir reaguojančią (-ias) medžiagą (-as) (pavaizduota kaip X ir (arba) Y), nebent kiekvienos šios medžiagos kiekis, kuris yra panaudojamas gaminant polimerą, neviršija 1 tonos per metus arba jas jau anksčiau įregistravo aukščiau tiekimo grandinėje esantys dalyviai. Daugiau informacijos pateikiama Rekomendacijose dėl monomerų ir polimerų.

Jeigu jūsų cheminė medžiaga nėra polimeras, turite ją įregistruoti kaip atskirą cheminę medžiagą (kaip ir bet kurią kitą cheminę medžiagą). Todėl esminis klausimas, į kurį turite atsakyti, yra: ar tai vienkomentė cheminė medžiaga, daugiakomentė cheminė medžiaga ar UVCB medžiaga?

2 pateikiami tam tikri analizės rezultatai ir jų pasekmės atliekant registraciją pagal REACH reglamentą. Daugiau informacijos apie tai, kaip nuspręsti, ar cheminė medžiaga yra vienkomentė, daugiakomentė, ar UVCB medžiaga, pateikiama Rekomendacijose dėl cheminių medžiagų identifikavimo ir pavadinimo joms suteikimo pagal REACH ir CLP reglamentų reikalavimus.

## 2.5. Analitiniai metodai

2 lentelėje pavaizduoti tam tikri scenarijai, kuriuose aptariama, kaip išanalizuoti ir nustatyti, ar jūsų cheminė medžiaga yra polimeras, ar ne. Paprastai pasirenkamas gelchromatografijos (GPC) metodas, kuris taikomas didesnį molekulinį svorį turinčioms cheminėms medžiagoms. Vis dėlto nedidelio svorio cheminėms medžiagoms taikomas gelchromatografijos (GPC) arba aukšto slėgio skysčių chromatografijos (HPLC) metodas gali padėti gauti pakankamai informacijos, siekiant nuspręsti, ar jūsų cheminė medžiaga yra polimeras, ar ne. Toliau pateikiami susiję cheminės medžiagos identifikavimo, siekiant įregistruoti bet kokią organinę



2017 m. gruodžio mėn.

cheminę medžiagą, metodai.

**2 lentelė. Analizės, kuri naudojama siekiant nustatyti, ar polimerizacijos reakcijos metu gauta cheminė medžiaga yra polimeras, ar ne, pavyzdys**

Analizės metodas	Rezultatai	Išvados dėl kitų etapų
<b>1 scenarijus.</b> X-[A] <sub>n</sub> cheminei medžiagai pritaikytas GPC ir (arba) GC arba HPLC.	Medžiagoje yra daugiau nei 50 % polimero molekulių ir jokių tokių pat molekulinį svorį turinčių molekulių nėra daugiau nei 50 %. Chromatogramos smailės gali būti susietos su sudedamosiomis dalimis, kuriose yra skirtingas pasikartojančių A grandžių, kuriose yra reaguojanti medžiaga X, skaičius.	<b>Cheminė medžiaga yra polimeras.</b> A ir X reikia įregistruoti savo tiekimo grandinėje. Jei polimere yra monomeras (A) ir reaguojanti medžiaga (X) (kovaletišškai sujungti), turėsite arba i) prisijungti prie esamos registracijos, arba ii) pats atlikti registraciją, jei esate gamintojas arba importuotojas į ES. Patariame atlikti analizę taikant GPC ir (arba) kitą patvirtinamojo pobūdžio analizę, kad atsižvelgtumėte į gamybos metu atsirandančias variacijas.
<b>2 scenarijus.</b> Atlikta cheminės medžiagos GPC ir (arba) GC arba HPLC analizė. X-[A] <sub>n</sub> -[B] <sub>m</sub> -Y	Medžiagoje yra mažiau nei 50 % polimero molekulių. Iš rezultatų matyti, kad cheminėje medžiagoje yra sudedamųjų dalių, turinčių 1–4 pasikartojančias A ir B grandis, kurios reaguoja su X ir Y reaguojančiomis medžiagomis.	<b>Cheminė medžiaga tikriausiai yra ne polimeras</b> , o iš skirtingų oligomerų sudaryta cheminė medžiaga (keletas tarpusavyje sujungtų monomerinių grandžių). Patariame atlikti skirtingų partijų kartotinę analizę, o jeigu partijose nustatomos didelės variacijos, tai reiškia, kad jūsų cheminė medžiaga nėra polimeras ir ją reikia įregistruoti kaip atskirą cheminę medžiagą.
Atlikta kartotinė X-[A] <sub>n</sub> -[B] <sub>m</sub> -Y cheminės medžiagos analizė.	Patvirtinkite, ar tarp partijų yra didelių variacijų atsižvelgiant į skirtingų esamų sudedamųjų dalių koncentracijas, taip pat, ar cheminę medžiagą sudaro sudedamosios dalys, kuriose pasikartojančių grandžių skaičius yra skirtingas.	<b>Akivaizdu, kad cheminė medžiaga nėra polimeras.</b> Reikia atlikti atskirą cheminės medžiagos registraciją.
<b>3 scenarijus.</b> Dėl X-[A] <sub>n</sub> cheminių medžiagų atliktos GPC ir (arba) GC arba HPLC analizės.	Medžiagoje yra mažiau nei 50 % polimero molekulių. Iš rezultatų matyti, kad dvi sudedamosios dalys yra aiškiai ir nekintamai pasiskirsčiusios: 60 %	<b>Cheminę medžiagą sudaro konkretūs oligomerai, todėl atrodo, kad tai daugiakomponentė cheminė</b>

2017 m. gruodžio mėn.

2 lentelė.		
Analizės metodas	Rezultatai	Išvados dėl kitų etapų
	sudedamųjų dalių turi grandį n=1 ir 40 % turi grandis n=2.	<b>medžiaga.</b> Reikia patvirtinti struktūras (žr. šios lentelės 1-ą eilutę). Reikia atlikti atskirą cheminės medžiagos registraciją.

**Taikoma visiems išvardytiems scenarijams**

Iš esmės visada turite patvirtinti registruotinos cheminės medžiagos (ir kitų sudedamųjų dalių) struktūrą atlikdami ultravioletinių spindulių spektroskopiją (UV), infraraudonųjų spindulių spektroskopiją (IR), branduolinio magnetinio rezonanso spektroskopiją (NMR) ir (arba) masinę spektroskopiją (MS), ir kiekybiškai apskaičiuoti sudedamąsias dalis atlikdami dujų chromatografiją (GC) arba aukšto slėgio skysčių chromatografiją (HPLC) ir (arba) nustatydami molekulinio svorio pasiskirstymą. Norėdami apskaičiuoti didesnę molekulinę svorį, turėsite taikyti gelchromatografijos (GPC) metodą. Atlikdami polimero analizę, pasikonsultuokite su specialistu, kad pateiktų rekomendacijas dėl geriausios strategijos.

Kaip nurodyta pirmiau, GPC ir (arba) GC arba HPLC rezultatus reikia susieti su tikėtinomis arba patvirtintomis struktūromis, kurios gali padėti nustatyti pasikartojančių grandžių skaičius.

Pavyzdžiui, jeigu jūsų cheminę medžiagą sudaro keturios sudedamosios dalys, kurių molekulinio svorio pasiskirstymas yra skirtingas, chromatogramoje turi būti keturios smailės, kurios taip pat turi būti susijusios su tikėtinu molekulinio svorio. Taip pat būtina patvirtinti cheminės medžiagos tapatybę naudojant kitus analizės metodus.

Net jeigu jūsų cheminė medžiaga yra UVCB medžiaga, turite dėti visas pagrįstas pastangas, kad nustatytumėte kiekvienos sudedamosios dalies, kurios kiekis pagamintoje cheminėje medžiagoje yra 10 % ar daugiau, struktūrą. Taip pat turite nustatyti ir dokumentuoti visas sudedamąsias dalis, jei jos yra svarbios jūsų cheminės medžiagos klasifikacijai ir (arba) PBT vertinimui<sup>3</sup>, nepriklausomai nuo šių sudedamųjų dalių koncentracijos. Jei paaiškėja, kad tai įmanoma padaryti techniškai, registracijos dokumentacijoje turite pateikti dokumentais pagrįstus įrodymus ir mokslinį pagrindimą. Nežinomos sudedamosios dalys, jei įmanoma, turi būti identifikuojamos pagal jų cheminių savybių bendrąjį apibūdinimą. Norint atlikti analizę ir vertinimą, siekiant nustatyti, ar jūsų cheminė medžiaga yra polimeras, reikia turėti išsamių mokslinių žinių.

<sup>3</sup> Žr. <https://echa-term.echa.europa.eu/lt/home>

2017 m. gruodžio mėn.

### 3. Informacijos apie fizikines ir chemines savybes ir poveikį žmonių sveikatai bei aplinkai turinčias savybes rinkimas

Darome prielaidą, kad cheminė medžiaga yra oligomerinė, t. y. cheminė medžiaga, kuri turi keletą kartu sujungtų monomerinių grandžių (kovalentiškai sujungtos) ir kuri neatitinka polimero reikalavimų (2 lentelės 3 scenarijus), ir kad turite surinkti informaciją apie fizikines ir chemines savybes ir poveikį žmonių sveikatai bei aplinkai turinčias savybes.

Darome prielaidą, kad per metus pagaminate ir (arba) importuojate 10–100 tonų cheminės medžiagos. Todėl turite įvykdyti REACH reglamento VII ir VIII prieduose nustatytus informacijai keliamus reikalavimus

#### 3.1. Informacijos apie fizikines ir chemines savybes rinkimo programa

#### 3 lentelė. Informacijos apie (tam tikras) fizikines ir chemines savybes rinkimas

3 lentelė.		
Jūs žinote, kad...	Ką turite daryti?	Pastabos
Privalote užregistruoti oligomerinę cheminę medžiagą.	Surinkite vidaus informaciją, pvz., techniniame departamente.	Vidaus informacija visada yra geras atspirties taškas.
<i>1 scenarijus. Prieinama visa informacija apie fizikines ir chemines savybes</i>		
Turite patikimos prieinamos vidaus informacijos apie visas susijusias fizikines ir chemines savybes.	Nereikia imtis jokių veiksmų, susijusių su fizikinės ir cheminės informacijos rinkimu.	Paprastai pagal nustatytas rekomendacijas atlikti bandymai yra patikimi. Vadovuose ar leidiniuose pateikta informacija gali būti laikoma patikima, jeigu ją patvirtina mokslo ekspertas. Ji gali būti naudojama taikant įrodomosios duomenų galios metodą.



Kalbant apie fizikines ir chemines savybes, pažymėtina, kad nepriklausomai nuo to, ar cheminių medžiagų per metus pagaminama ar importuojama 1–10 tonų ar 10–100 tonų, cheminėms medžiagoms taikomi vienodi reikalavimai pateikti duomenis.

2017 m. gruodžio mėn.

<b>3 lentelė.</b>		
<b>Jūs žinote, kad...</b>	<b>Ką turite daryti?</b>	<b>Pastabos</b>
<p><i>2 scenarijus. Prieinama didžioji dalis, bet ne visa informacija apie fizikines ir chemines savybes</i></p>		
<p>Turite patikimos informacijos apie šias fizikines ir chemines savybes:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• lydymosi temperatūrą;</li> <li>• santykinis tankis;</li> <li>• paviršiaus įtempį;</li> <li>• pliūpsnio temperatūrą;</li> <li>• degumą;</li> <li>• sprogo savybių bandymą;</li> <li>• savaiminio užsidegimo temperatūrą;</li> <li>• oksidacines savybes.</li> </ul>	<p>Norėdami įvykdyti informacijai keliamus reikalavimus, turite surinkti informaciją apie šias fizikines ir chemines savybes:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• virimo temperatūrą;</li> <li>• garų slėgį;</li> <li>• tirpumą vandenyje;</li> <li>• pasiskirstymo n-oktanolyje / vandenyje koeficientą.</li> </ul> <p>Pirmiausia patikrinsite, ar dėl tam tikrų savybių galima atsisakyti pateikti duomenis.</p> <p>Pavyzdžiui, garų slėgio nereikia nustatyti, kai lydymosi temperatūra yra &gt;300°C. Taip pat gali būti, kad</p>	<p>Granulometrijos (dalelių dydžio pasiskirstymas) informacija nėra susijusi, nes jūsų cheminė medžiaga yra skysta.</p> <p>Paprastai pagal nustatytas rekomendacijas atlikti bandymai yra patikimi.</p> <p>Vadovuose ar leidiniuose pateikta informacija gali būti laikoma patikima, jeigu ją patvirtina mokslo ekspertas. Norėdami patvirtinti leidinių patikimumą, paprastai turite naudotis daugiau nei vienu informacijos šaltiniu.</p> <p>Jeigu norite naudoti vadovuose arba duomenų bazėje<sup>5</sup>, esančią</p>

<sup>5</sup> Priimtinių vadovų ir duomenų bazių apžvalgą ir tokiems duomenims taikomus reikalavimus galima rasti ECHA rekomendacijų dėl informacijai keliamų reikalavimų ir cheminės saugos vertinimo R.7a skyriuje.

2017 m. gruodžio mėn.



Surinkę informaciją apie kiekvieną savybę, turite patikrinti, ar jūsų cheminė medžiaga turi fizikinių ir cheminių savybių, kurios gali sukelti nepageidaujamą poveikį, dėl kurio gali būti taikoma fizikinio pavojaus klasifikacija pagal CLP reglamentą, pvz., degi arba sprogi cheminė medžiaga. Tokiu atveju savo cheminės saugos ataskaitoje turėsite pateikti rizikos apibūdinimą.

**3 lentelė.**

Jūs žinote, kad...	Ką turite daryti?	Pastabos
	<p>bandymo neįmanoma techniškai atlikti arba tai moksliskai yra nepagrįsta.</p> <p>Tuomet patikrinsite, ar duomenys yra prieinami dėl visų kitų likusių savybių. Duomenys gali būti prieinami viešai prieinamoje literatūroje, pvz., vadovuose arba duomenų bazėse, be to, juos taip pat galima gauti iš senesnių tyrimo ataskaitų.</p> <p>Turite atidžiai įvertinti, ar tokie duomenys yra i) patikimi, ii) ar jie yra pakankamai vertingi atliekant konkrečios jūsų cheminės medžiagos būdingos savybės vertinimą, ir iii) ar jie nėra susiję su kokiomis nors autorių teisėmis (aspektas, į kurį turite atsižvelgti prieš pradėdami naudoti tą informaciją).</p> <p>Galiausiai, jeigu duomenų vis tiek trūksta, turite patikrinti, kaip tokius duomenis galima gauti. Bandymo metu beveik visada bus gaunami patikimiausi duomenys, todėl tais atvejais, kai nėra pagrindo atsisakyti pateikti duomenis, visada reikėtų apsvarstyti galimybę pateikti bandymo duomenis.</p> <p>Tačiau tam tikrais atvejais galima taikyti bandymo alternatyvas, pvz., palyginimas su panašių cheminių medžiagų grupe arba apskaičiavimas naudojant QSAR metodą<sup>4</sup>.</p>	<p>informaciją, turite atidžiai patikrinti, ar bandoma cheminė medžiaga yra tokia pat kaip ir ta, kurią norite įregistruoti (atsižvelgiant į grynumą / priemaišas) ir ar duomenys buvo gauti taikant patikimą bandymo metodą. Ši taisyklė taikoma ir senoms tyrimų, kurie buvo atlikti prieš bandymo metodų standartizaciją, ataskaitoms.</p> <p>Išplėstinę mokslinę ekspertizę reikalaujama atlikti, jeigu duomenys gaunami taikant alternatyvius metodus (pvz., QSAR spėjimas, analogijos metodas arba duomenų apie panašių cheminių medžiagų grupę interpoliacija). Tokių duomenų naudojimą, jų naudojimo pagrindimą ir patvirtinimą dokumentais reglamentuoja labai konkrečios taisyklės.</p> <p>Kad įvykdytumėte jums aktualius informacijai keliamus reikalavimus pagal REACH reglamentą, daugiau informacijos ieškokite <i>praktiniame vadove „Kaip pranešti apie (Q)SAR modelius“</i><sup>6</sup>.</p> <p>Fizikinės ir cheminės savybės, kurios lemia pavojingumo klasifikaciją pagal CLP reglamentą, turi būti nustatomos laikantis CLP kriterijų. Tačiau gali būti priimami jau esami bandymų, kurie nebuvo surinkti laikantis GLP, duomenys.</p>

Jei vietoje įprastų bandymų, svarstote galimybę taikyti alternatyvas, atkreipkite dėmesį, kad

<sup>4</sup> Žr. <https://echa-term.echa.europa.eu/lt/home>

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

2017 m. gruodžio mėn.

dėl daugybės nežinomų sudedamųjų dalių, esančių cheminės medžiagos sudėtyje, gali būti neįmanoma įvykdyti informacijai keliamų reikalavimų taikant QSAR metodus arba kitų cheminių medžiagų analogiją.


2017 m. gruodžio mėn.

### 3.2. Informacijos apie poveikį aplinkai turinčias savybes rinkimas

#### 4 lentelė. Informacijos apie (tam tikras) poveikį aplinkai turinčias savybes rinkimas

4 lentelė.		
Jūs žinote, kad...	Ką turite daryti?	Pastabos
Privalote užregistruoti oligomerinę cheminę medžiagą. 10–100 tonų per metus.	Surinkite vidaus informaciją, pvz., techniniame departamente.	Vidaus informacija visada yra geras atspirties taškas.
<i>1 scenarijus. Prieinama visa informacija apie aplinką</i>		
Turite patikimos prieinamos vidaus informacijos apie visas susijusias poveikį aplinkai turinčias savybes.	Nereikia imtis jokių veiksmų, susijusių su informacijos apie aplinką rinkimu.	Paprastai pagal nustatytas rekomendacijas atlikti bandymai yra patikimi. Leidiniuose pateikta informacija gali būti laikoma patikima, jeigu ją patvirtina mokslo ekspertas.
<i>2 scenarijus. Prieinama ne visa informacija apie aplinką</i>		
Turite patikimos prieinamos vidaus informacijos apie šiuos pakitimus aplinkoje: <ul style="list-style-type: none"> <li>• lengvas biologinis skaidumas;</li> <li>• dumblių augimo slopinimas;</li> <li>• toksiškumas (STP) mikroorganizmams.</li> </ul> Jau žinote, kad esate vienintelis (potencialus) šios cheminės medžiagos registruotojas. Nežinote apie cheminę medžiagą, kuri yra panaši į jūsiškę.	Norėdami įvykdyti REACH reglamento VII ir VIII prieduose nustatytus su išlikimu aplinkoje ir pavojingumu susijusius informacijai keliamus reikalavimus, kurie taikomi jūsų cheminei medžiagai, turite surinkti informaciją apie šias savybes: <ul style="list-style-type: none"> <li>• hidrolizę;</li> <li>• adsorbcijos / desorbcijos tikrinimą;</li> <li>• skaidymą;</li> <li>• trumpalaikį toksiškumą vandens bestuburiams gyvūnams;</li> <li>• trumpalaikį toksiškumą žuvims.</li> </ul> Kadangi nėra jokių kitų (potencialių) registruotojų ir neradote jokių panašių cheminių medžiagų, šiuos duomenis turite surinkti pats. <p>Galite atsisakyti tam tikrų bandymų, jeigu jų neįmanoma techniškai atlikti arba kai kurių bandymų atlikimas yra moksliai nepagrįstas.</p> Dėl likusių savybių patikrinkite, ar yra jau prieinamų duomenų, pvz., vadovuose.           Galite atsisakyti (neatlikti) tam tikrų bandymų, jei naudojate kitas taikomas priemones (analogiją, QSAR metodus, įrodomąją duomenų galią).	Paprastai pagal nustatytas rekomendacijas atlikti bandymai yra patikimi. Leidiniuose pateikta informacija gali būti laikoma patikima, jeigu ją patvirtina mokslo ekspertas. Norėdami patvirtinti leidinių patikimumą, paprastai turite naudotis daugiau nei vienu informacijos šaltiniu. <p>Jeigu žinoma, kad cheminė medžiaga yra lengvai biologiškai skaidi, nereikia atlikti jokio hidrolizės bandymo.</p> Hidrolizės bandymas moksliai yra nepagrįstas, kai cheminėje medžiagoje nėra cheminių grupių, kurios gali būti hidrolizuojamos.           Techniškai neįmanoma išbandyti jokių poveikio aplinkai savybių, kai cheminė medžiaga susilietusi su vandeniu užsidega.           Kalbant apie adsorbciją, pažymėtina, kad vietoje bandymo rekomenduojama duomenis pirmiausia surinkti taikant analogiją arba QSAR skaičiavimą (žr. Praktinio vadovo MVĮ dėl informacijai keliamų reikalavimų II.1.2 skyrių).           Visi išlikimo aplinkoje ir pavojingumo bandymai atliekami pagal visuotinai pripažintas bandymų rekomendacijas ir jie turi atitikti geros laboratorinės praktikos (GLP) kriterijus.

2017 m. gruodžio mėn.

<b>4 lentelė.</b>		
<b>Jūs žinote, kad...</b>	<b>Ką turite daryti?</b>	<b>Pastabos</b>
	Jeigu duomenų vis dar trūksta, tuomet atlikite bandymą.	
	<p>Surinkę informaciją apie kiekvieną savybę, turite patikrinti, ar jūsų cheminė medžiaga išlieka aplinkoje arba yra pavojinga, todėl gali sukelti nepageidaujamą poveikį (pvz., toksiškumas vandens organizmams). Praktiniu požiūriu tai atliekama patikrinant, ar cheminę medžiagą reikia klasifikuoti dėl poveikio aplinkai pagal CLP reglamentą. Jeigu cheminė medžiaga turi būti klasifikuojama dėl poveikio aplinkai, turėsite ją ženklinti ir klasifikuoti, taip pat privalėsite atlikti poveikio vertinimą ir parengti rizikos apibūdinimą. Šiuos aspektus turite patvirtinti dokumentais savo cheminės saugos ataskaitoje.</p> <p>Naudodamiesi pavojaus aplinkai tyrimų rezultatais (t. y. toksiškumas žuvims, vandens bestuburiams ir dumbliams), taip pat turite nustatyti vertę, kurios neviršijant nesitikima jokio neigiamo poveikio. Šios ribos vadinamos prognozuojamos poveikio nesukeliant koncentracijos (PNEC) ribomis ir jas nustatant būtinos išsamios mokslinės žinios.</p>	



2017 m. gruodžio mėn.

### 3.3. Informacijos apie poveikį žmonių sveikatai turinčias savybes rinkimas

#### 5 lentelė. Informacijos apie poveikį žmonių sveikatai turinčias savybes rinkimas

5 lentelė.		
Jūs žinote, kad...	Ką turite daryti?	Pastabos
Privalote užregistruoti oligomerinę cheminę medžiagą.	Surinkite vidaus informaciją, pvz., techniniame departamente.	Vidaus informacija visada yra geras atspirties taškas.
<b>1 scenarijus. Prieinama visa informacija apie žmonių sveikatą</b>		
Turite patikimos prieinamos vidaus informacijos apie visas susijusias poveikį žmonių sveikatai turinčias savybes.	Kadangi visa reikalaujama informacija yra prieinama, nereikia imtis jokių tolesnių veiksmų, susijusių su informacijos apie žmonių sveikatą rinkimu.	Paprastai pagal nustatytas rekomendacijas atlikti bandymai yra patikimi.  Leidiniuose pateikta informacija gali būti laikoma patikima, jeigu ją patvirtina mokslo ekspertas.
<b>2 scenarijus. Prieinama didžioji dalis, bet ne visa informacija apie žmonių sveikatą</b>		
<p>Turite patikimos informacijos apie toliau nurodytas fizikines ir chemines savybes:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• odos dirginimą / ėsdinimą (<i>in vivo</i> tyrimas);</li> <li>• akių dirginimą (<i>in vivo</i> tyrimas);</li> <li>• odos jautrinimą;</li> <li>• <i>in vitro</i> bakterijų genų mutaciją;</li> <li>• ūmų toksiškumą prarijus.</li> </ul> <p>Jau žinote, kad esate vienintelis (potencialus) šios cheminės medžiagos registruotojas.</p> <p>Nežinote apie cheminę medžiagą, kuri yra panaši į jūsiškę.</p>	<p>Norėdami įvykdyti REACH reglamento VIII priede nustatytus su žmonių sveikata susijusius reikalavimus, kurie taikomi jūsų cheminei medžiagai, turite surinkti informaciją apie šias savybes:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• citogeniškumo su žinduolių ląstelėmis <i>in vitro</i> tyrimus;</li> <li>• žinduolių ląstelių genų mutacijos <i>in vitro</i> tyrimus;</li> <li>• ūmų toksiškumą įkvėpus;</li> <li>• trumpalaikį kartotinių dozių toksiškumą;</li> <li>• toksiškumo reprodukcijai / vystymuisi tikrinimą.</li> </ul> <p>Reikalingus žmonių sveikatos tyrimus atliksite pats ir (arba) samdydami išorės rangovą.</p> <p>Siekdami išvengti bandymų su gyvūnais dubliavimo, jūs išsiaiškinate, kuri bandymo rekomendacija yra tinkamiausia, ir atliekate toksiškumo reprodukcijai / vystymuisi tikrinimo tyrimą, kad taip pat galėtumėte įvykdyti trumpalaikiam kartotinių dozių toksiškumui (28 dienų poveikis) taikomus reikalavimus. Jūs priimate sprendimą atlikti bendrą kartotinės dozės toksiškumo tyrimą ir toksiškumo reprodukcijai / vystymuisi tikrinimo bandymą.</p>	<p>2016 m. REACH reglamento priedai buvo pakeisti ir <i>in vitro</i> bandymai tapo standartiniu reikalavimu, kuris taikomas trims savybėms: i) odos dirginimui ir ėsdinimui, ii) akių dirginimui ir iii) odos jautrinimui.</p> <p>Kadangi informaciją apie odos dirginimą ir ėsdinimą, taip pat akių dirginimą gaunate iš <i>in vivo</i> tyrimų, turite parengti mokslinį pagrindimą, kuriame paaiškintumėte, kodėl neteikiate <i>in vitro</i> bandymo rezultatų (kad užtikrintumėte atitiktį dabartinio VII priedo reikalavimams). Kitu atveju jūsų dokumentacija nebus išsami.</p> <p>Kalbant apie odos jautrinimą, pažymėtina, kad jums gali tekti papildyti savo informaciją naudojant <i>in vitro</i> metodus, kurie atitinka dabartinio VII priedo reikalavimą.</p> <p>Paprastai pagal nustatytas rekomendacijas atlikti bandymai yra patikimi. Leidiniuose pateikta informacija gali būti laikoma patikima, jeigu ją patvirtina mokslo ekspertas. Norėdami patvirtinti leidinių patikimumą, paprastai turite naudotis daugiau nei vienu informacijos šaltiniu.</p> <p>Visi bandymai su žmonių sveikata turi būti atliekami laikantis geros laboratorinės praktikos (GLP).</p> <p>Mokslininkai, remdamiesi mutageniškumo <i>in vitro</i> bandymais, turi nuspręsti, ar reikia atlikti mutageniškumo <i>in vivo</i> bandymą (žr. Praktinio vadovo MVI dėl informacijai keliamų reikalavimų II.2.3 skyrių).</p>

2017 m. gruodžio mėn.



Surinkę informaciją apie reikalingas savybes, turite patikrinti, ar jūsų cheminė medžiaga turi žmonių sveikatai poveikį darančių savybių, kurios gali sukelti nepageidaujamą poveikį, pvz., ūmus toksiškumas odai. Praktiniu požiūriu tai atliekama patikrinant, ar cheminę medžiagą reikia klasifikuoti dėl nepageidaujamų savybių pagal CLP reglamentą. Jeigu privalote klasifikuoti savo cheminę medžiagą, turėsite atlikti jos poveikio vertinimą ir pateikti rizikos apibūdinimą.

Naudodamiesi žmonių sveikatos tyrimų rezultatais, taip pat turite nustatyti ribą, kurios neviršijant neatsiras joks neigiamas poveikis. Šios ribos vadinamos išvestinėmis ribinėmis poveikio nesukeliančiomis vertėmis (DNEL) ir jas nustatant būtina turėti išsamių mokslinių žinių.