

# RIP 3.10 'Stoffidentität' – Stand, Ergebnisse, Bewertung Bestimmung des Stoffnamens und der Stoffidentität

5. BDI-REACH-Workshop  
06.-07. Februar 2008 in  
Berlin



**LANXESS**  
Energizing Chemistry



# Agenda

---

- I Bedeutung der Stoffidentität / Kernelemente der Stoffbeschreibung**
- II REACH – Verordnung: Artikel 3.1 “Stoff“**  
**Artikel 3.2 “Zubereitung”**
- II ECHA-Guideline “Guidance for Identification and Naming of Substances under REACH”**
- III CEFIC – Erläuterungen: Application of RIP 3.10 on “Guidance for identification and naming of substances”**
- IV Wann handelt es sich um den gleichen Stoff?**
- V Praktische Schritte für die Ermittlung des Stoffnamens**
- VI Fazit**

# Agenda

---

- I Bedeutung der Stoffidentität / Kernelemente der Stoffbeschreibung**
- II REACH – Verordnung: Artikel 3.1 “Stoff“  
Artikel 3.2 “Zubereitung”
- II ECHA-Guideline “Guidance for Identification and Naming of Substances under REACH”
- III CEFIC – Erläuterungen: Application of RIP 3.10 on “Guidance for identification and naming of substances”
- IV Wann handelt es sich um den gleichen Stoff?
- V Praktische Schritte für die Ermittlung des Stoffnamens
- VI Fazit

# Bedeutung der Stoffidentität in REACH

---

Bedeutung der Stoffidentität für:

- **Vorregistrierung** (Was ist mein Stoff?) -> Art. 28
- **SIEF\*\*\*\*- Bildung** (Wie wird festgelegt, wer in welches SIEF gehört?)-> Art. 29
- **Registrierung, Konsortienbildung** (was sind identische Stoffe, was nicht?)
  - > Anhang VI(2): Name (IUPAC\*, EINECS\*\*- + CAS\*\*\*- Nummern)
- **Data sharing, Grouping of substances** (Was sind **vergleichbare Stoffe**?)
- Registrierung von **Phase- in- Stoffen**
- bestehende **EINECS\*- Regeln** zur Bezeichnung eines Stoffes

\*International Union of Pure and Applied Chemistry

\*\*European INventory of Existing Commercial chemical Substances

\*\*\*Chemical Abstracts Service

\*\*\*\*Substance Information Exchange Forum

# **Bedeutung der Stoffidentität in REACH**

---

**REACH regelt Stoffe als solche, als Bestandteile von Zubereitungen und Erzeugnissen. Die Bezeichnung / Beschreibung eines Stoffes ist wichtig z.B. für die:**

- **Einstufung und Kennzeichnung**
- **Pflichten nachgeschalteter Anwender**
- **Zulassung**
- **Verbote / Beschränkungen**

**Außerdem beziehen sich nachgeschaltete Regelungen auf Stoffe:**

- **Chemikalien-,**
- **Umweltschutz-,**
- **Verbraucherschutz- und Arbeitsschutzregelungen**

# Beispiel aus der Chemikalienverbotsverordnung

---

Abschnitt 6: Benzol

Name

CAS-Nummer

Benzol

71-43-2

Benzol und Zubereitungen mit einem Massengehalt von 0,1% oder mehr Benzol dürfen nicht in den Verkehr gebracht werden.

# Kernelemente der Stoffbeschreibung

---

Der Name des Stoffes ist wichtig für die Kommunikation mit Abnehmern (Kunden), Vorlieferanten, Behörden, Öffentlichkeit, wiss. Veröffentlichungen, Datenbanken

## 2. Identifizierung des Stoffes

### 2.1. Name oder andere Bezeichnung des Stoffes

#### 2.1.1. Namen laut IUPAC oder andere intern. chem. Bezeichnung

#### 2.1.2. Andere Namen (allg. Bezeichnung, Handelsnamen, Abkürzung)

#### 2.1.3. EINECS- oder ELINCS- Nummer (sofern vorhanden u. sachdienlich)

#### 2.1.4. CAS- Bezeichnung und CAS- Nummer (sofern vorhanden)

#### 2.1.5. Sonstiger Identifizierungscode (sofern vorhanden)

- **Wissenschaftliche Beschreibung des Stoffes**  
Strukturformel, Summenformel, optische Aktivität, Isomere, ...
- **Zusammensetzung des Stoffes**  
Reinheitsgrad, Verunreinigungen, Additive, Nebenprodukte, ...
- **Nachweise zur Stoffidentität / Dokumentation**  
Spektraldaten, Chromatogramme, Analysenmethoden

→ weitere Angaben siehe Anhang VI Abschnitt 2 der REACH-Verordnung

# Kernelemente der Stoffbeschreibung: Stoffname

---

## *Artikel 28*

### **Beispiel:**

### *Vorregistrierungspflicht für Phase-in-Stoffe*

1. Zur Inanspruchnahme der in Artikel 23 vorgesehenen Übergangsregelungen übermittelt jeder potenzielle Registrant eines Phase-in-Stoffes in Mengen von 1 Tonne oder mehr pro Jahr, einschließlich Zwischenprodukten ohne Einschränkung, der Agentur folgende Informationen:
  - a) den Namen des Stoffes gemäß Anhang VI Abschnitt 2, einschließlich der EINECS- und CAS-Nummer, oder, falls nicht verfügbar, anderer Identifizierungs-codes; (...)

# Kernelemente der Stoffbeschreibung: Stoffidentität

---

## 2. Identität des Stoffes

Name + wissenschaftliche Beschreibung

+ Zusammensetzung (z. B. Verunreinigungen) + Nachweise (z. B. Spektren)

### Beispiel:

*Artikel 10*

*Zu allgemeinen Registrierungszwecken vorzulegende Informationen*

Ein nach Artikel 6 oder Artikel 7 Absätze 1 oder 5 einzureichendes Registrierungsdossier muss folgende Informationen enthalten:

- a) ein technisches Dossier mit folgenden Informationen:
  - i) Identität des/der Hersteller/s oder Importeurs/e gemäß Anhang VI Abschnitt 1;
  - ii) Identität des Stoffes gemäß Anhang VI Abschnitt 2;

# Anforderungen zur Stoffbeschreibung / REACH

---

## Zusammenfassung:

### 1. Registrierung

#### Zulassungsantrag

Voranfragen an Agentur gemäß Art. 26 (Pflicht zur Erkundung vor der Registrierung)

⇒ vollständige Stoffidentität (gemäß Anhang VI Abschnitt 2)

### 2. Meldungen als nachgeschalteter Anwender (Art. 38 Abs. 2c)

Meldungen für das Einstufungs- und Kennzeichnungsinventar

⇒ Stoffnamen, Summen- / Strukturformel, Zusammensetzung

keine Spektren, keine Analysemethoden

### 3. Vorregistrierung

⇒ nur Stoffnamen (+ EINECS-Nr. und CAS-Nr.)

keine Stoffidentität

# Bestimmung der Stoffidentität / Hilfen im Internet

---

IUPAC: <http://www.iupac.org>

CAS-Nr.: <http://www.cas.org>

EINECS- und ELINCS-Nr. aus EC-Inventar ESIS: <http://ecb.jrc.it>

The screenshot shows a web browser window titled "ECB - ESIS (European chemical Substances Information System). - Windows Internet Explorer". The address bar displays "http://ecb.jrc.it/esis/index.php". The main content area features the ESIS logo (a blue circle with a white 'E' and 'C' and yellow stars) and the title "ESIS : European chemical Substances Information System". Below the title is a navigation menu with buttons for "ESIS", "EINECS", "ELINCS", "NLP", "PBT", "BPD", "C & L", "HPV-LPV", "IUCLID DS", and "ORATS". A search bar is present with a dropdown menu showing options: "- EC# (EINECS# / ELINCS# / NLP#)", "- EC# (EINECS# / ELINCS# / NLP#)", "- CAS#", "- Substance Name", and "- Molecular Formula". A "SEARCH" button is located to the right of the search bar. Below the search bar, there is a brief description of the system: "stances Information System), is an IT System which provides you with information on chemicals, related to: - EINECS (European Inventory of Existing Commercial chemical Substances),".

# Agenda

---

- I Bedeutung der Stoffidentität / Kernelemente der Stoffbeschreibung
- II REACH – Verordnung: Artikel 3.1 “Stoff“**  
**Artikel 3.2 “Zubereitung”**
- II ECHA-Guideline “Guidance for Identification and Naming of Substances under REACH”
- III CEFIC – Erläuterungen: Application of RIP 3.10 on “Guidance for identification and naming of substances”
- IV Wann handelt es sich um den gleichen Stoff?
- V Praktische Schritte für die Ermittlung des Stoffnamens
- VI Fazit

# Definition Stoff nach Artikel 3.1

---

**REACH (VO 1907/2006) ist eine stoffbezogene Verordnung.**



Definition **Stoff**:

als chemisches Element und seine Verbindungen in natürlicher Form oder gewonnen durch ein Herstellungsverfahren, einschließlich der zur Wahrung seiner Stabilität notwendigen Zusatzstoffe und der durch das angewandte Verfahren bedingten Verunreinigungen, aber mit Ausnahme von Lösungsmitteln, die von dem Stoff ohne Beeinträchtigung seiner Stabilität und ohne Änderung seiner Zusammensetzung abgetrennt werden können.



# Definition - Stoff

---

Die Stoffdefinition enthält Aussagen, die Spielraum für Interpretationen lassen:

➤ a) **Stoff: chemisches Element und seine Verbindungen ...**

d. h. es handelt sich um reine Stoffe und reine Verbindungen im wissenschaftlichen Sinne

**... in natürlicher Form ...**

z. B.: **Kohlenstoff** in den Modifikationen **Graphit** und **Diamant**. Es handelt sich um Zustandsformen, die in der Natur auftreten bzw. üblicherweise vorhanden sind.

**... oder gewonnen durch ein Herstellungsverfahren ...**

„Gewinnung“ setzt die absichtliche Herstellung voraus!

z. B.: **Kohlenstoff** in der 3. Elementmodifikation **Fulleren C<sub>60</sub>**:



## Definition - Stoff

---

- b) ... *einschließlich der zur Wahrung seiner Stabilität notwendigen Zusatzstoffe ...*

### *Wahrung der Stabilität*

d. h. eine Zersetzung oder Veränderung des Stoffes soll verhindert werden als Folge stoffinhärenter Eigenschaften oder üblicher Umgebungsbedingungen (z. B. katalytische Zersetzungen durch Verunreinigungen oder UV-Strahlung, Oxidation durch Luftsauerstoff, ...).

### *erforderliche Zusatzstoffe*

d. h. Stoffe, die eine Zersetzung oder Veränderung verhindern, z. B. Inhibitoren, Radikalfänger oder Antioxidantien.

Guidance on Polymers: The **importer** of a polymer containing an unbound heat stabiliser, light stabiliser and/or antioxidant does **not need to register these stabilisers.**“

➡ **Stoff muss mit Stabilisator geprüft und registriert werden!**

## Definition - Stoff

---

➤ **c) ... und der durch das angewandte Verfahren bedingten Verunreinigungen ...**

d. h. alle Stoffe, die bei einem Verfahren eingesetzt wurden bzw. bei einem Verfahren entstehen, sind, sofern sie im hergestellten Stoff enthalten sind und nicht als abtrennbares Lösungsmittel gelten, solche Verunreinigungen und **gehören damit zu dem Stoff**: u. a.

1. Verunreinigungen, die durch die Eingangsstoffe in eine Reaktion gelangen
2. Nicht abgetrennte Isomeren (z. B. gewollter Einsatz von Isomerengemischen)
3. Nebenprodukte, die bei einer Reaktion entstehen .....

➔ **REACH schreibt keine Konzentrationsgrenzen für Verunreinigungen vor!**

## Definition - Stoff

---

➤ d) ... *aber mit Ausnahme von Lösungsmitteln, die von dem Stoff ...*

### Lösungsmittel

Eine Unterscheidung zwischen einer Verunreinigung und einem Lösungsmittel ist nicht immer rechtsverbindlich zu treffen. Lösungsmittel werden i. d. Regel absichtlich eingesetzt, um andere Stoffe zu lösen. Bei Importen ist die Absichtlichkeit nicht überprüfbar!

z.B.: Oleum ist  $\text{SO}_3$  in  $\text{H}_2\text{SO}_4$  gelöst. Schwefelsäure ist abtrennbares Lösungsmittel.  
➔ Stoff ohne Lösungsmittel prüfen und registrieren!

Wird jedoch auf die intrinsische Fähigkeit einer Substanz, einen bestimmten Stoff zu lösen abgehoben, so ist eine Zuordnung dieser Substanz als evt. Lösungsmittel einzelfallabhängig zu klären.

Nicht abtrennbare Reste von Lösungsmitteln sind Verunreinigungen.

## Definition - Stoff

---

➤ **e) ... ohne Beeinträchtigung seiner Stabilität ...**

eine Abtrennung darf die Stabilität eines Stoffes als solche nicht verändern, z. B. Isododecan kann von einer z.B. 18%igen Lösung des Peroxids nicht vollständig abgetrennt werden, da das Peroxid sonst explodiert.

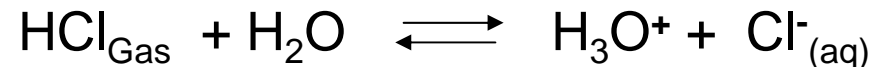
➤ **f) ... und ohne Änderung seiner Zusammensetzung abgetrennt werden können.**

die Abtrennung darf die chemische Zusammensetzung des Stoffes nicht verändern.

## Beispiel für ein nicht abtrennbares Lösungsmittel

---

**Salzsäure** (systematischer Name **Chlorwasserstoffsäure**) ist eine wässrige Lösung des Gases Chlorwasserstoff (HCl) in Wasser. Sie ist eine starke, anorganische Säure und lässt sich bis zu einer Konzentration von 36 % in Wasser lösen:

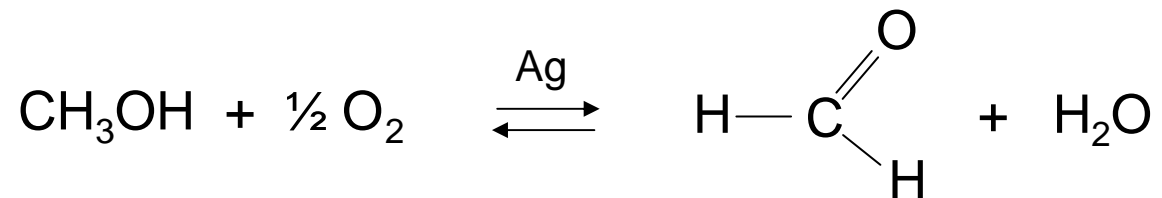


Die Entfernung von Wasser aus der Salzsäure führt dazu, dass nicht mehr die hydratisierten Ionen, sondern gasförmiges HCL vorliegt.

## Beispiel für ein nicht abtrennbares Lösungsmittel

---

**Synthese von Formalin:** Technisch durch Dehydrierung von Methanol mit Luftsauerstoff am Silberkontakt bei ca. 600°C: wässrige Lösungen von ca. 30 bis max. 50%:



Hochkonzentrierte Formalinlösungen ab ca. 40% müssen durch Zusätze von z.B. Methanol oder aromatischen Aminen stabilisiert werden und sind nur stabilisiert lager- und transportfähig.

## Definitionen Zubereitung nach Artikel 3.2

---

**Zubereitung: Gemenge, Gemische oder Lösungen, die aus zwei oder mehr Stoffen bestehen.\***

Zubereitungen können, da sie sich auf Stoffe und die zugrunde liegende Stoffdefinition beziehen, in **natürlicher Form** vorliegen oder durch ein **Herstellungsverfahren** gewonnen werden.

Die Definition lässt folgende Auslegung zu:

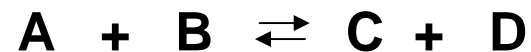
1. durch eine absichtliche oder unabsichtliche Mischung oder Lösung von **vorhandenen separaten** Stoffen
2. durch Herstellungsverfahren, bei denen direkt (absichtlich oder unabsichtlich) Gemenge oder Gemische bzw. Lösungen gewonnen werden.

*\* Englischer Text der Definition: Mixture or solution composed of two or more substances*

# Stoff- und Zubereitungs- Definitionen der REACH- VO:

---

Das erwartete Produkt einer Reaktion von



das mit Resten von Ausgangsmaterialien, Lösungsmitteln , bzw. den Reaktionsnebenprodukten verunreinigt ist („Rohprodukt“), wird als

## Zubereitung

betrachtet! Jede Zubereitung besteht aus zwei oder mehr Stoffen, die alleine nach REACH registrierbar sind!!

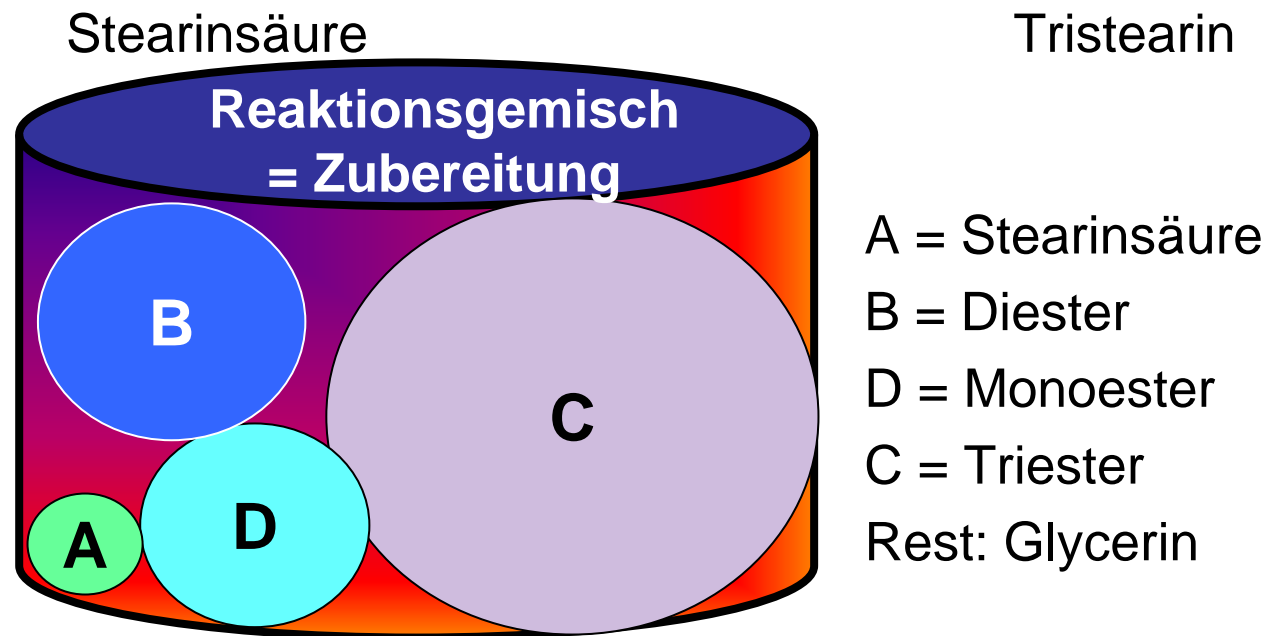
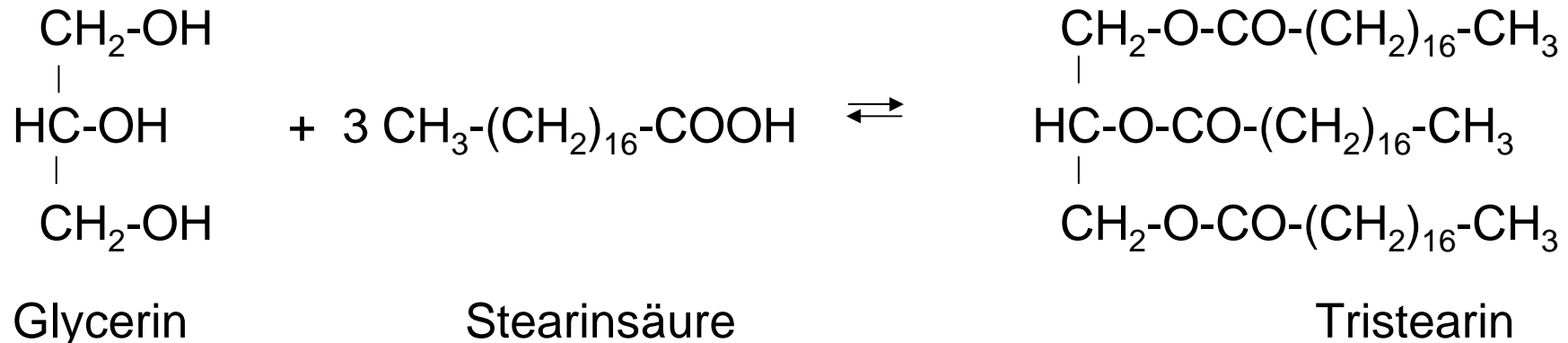
Besteht das Reaktionsprodukt aus einem Gemisch von Substanzen, liegt eine **Zubereitung** vor, die nach REACH nicht registriert werden kann, sondern nur in Form ihrer Einzelkomponenten!

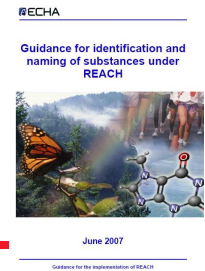
## Beispiele für Zubereitungen = Gemenge/Gemische/Lösungen

---

- **Dichlorierung von Benzol liefert das Isomerengemisch Dichlorbenzol roh. Die Zubereitung hat etwa folgende Zusammensetzung: ca. 40% 1,2-, ca. 5% 1,3- und ca. 55% 1,4-Dichlorbenzol**
- **Chlorierung von Toluol ergibt die Zubereitung Chlortoluol roh, bestehend aus: ca. 40% 1,2- und ca. 60% 1,4-Chlortoluol**
- **Nitrierung von Toluol liefert die Zubereitung Nitrotoluol roh, die aus: ca. 60% 1,2-, ca. 5% 1,3- und ca. 35% 1,4- Nitrotoluol besteht**
- **Nitrierung von Chlorbenzol liefert eine Zubereitung aus: ca. 38% 1,2-, 2% 1,3-, 60% 1,4- Chlornitrobenzol**

# Veresterung von Glycerin mit Stearinsäure





# REACH Verordnung versus ECHA-Leitlinie

## Definition aus ECHA-Leitlinie:

Preparations (...) are *intentional* mixtures of substances (Seite: 24)

- *If a multi-constituent substance is produced it has to be registered (**and is not covered by a registration of the individual constituents**); e.g. the isomeric mixture difluorobenzene is produced, thus “difluorobenzene”, as an isomeric mixture, has to be registered (Seite 50).*

- *If the individual isomers 1,2-Difluorobenzene, 1,3-Difluorobenzene and 1,4-Difluorobenzene are produced and mixed afterwards, the individual isomers have to be registered and the isomeric mixture would be regarded as a preparation (Seite 50).*

-The registration of a multi-constituent substance does not cover the individual constituents (Seite 50).

➔ **Die ECHA-Leitlinie legt die REACH-Verordnung zu eng aus!**

# UVCB- Stoffe in der REACH-Verordnung

---

## Erwägungsgründe:

- (45) Das Europäische Verzeichnis der auf dem Markt vorhandenen chemischen Stoffe (EINECS) führte bestimmte komplexe Stoffe in einem einzigen Eintrag auf. UVCB-Stoffe (Stoffe mit unbekannter oder variabler Zusammensetzung, komplexe Reaktionsprodukte und biologische Materialien) können ungeachtet ihrer variablen Zusammensetzung als ein einzelner Stoff im Rahmen dieser Verordnung registriert werden, sofern die gefährlichen Eigenschaften nicht nennenswert abweichen und dieselbe Einstufung gewährleisten.

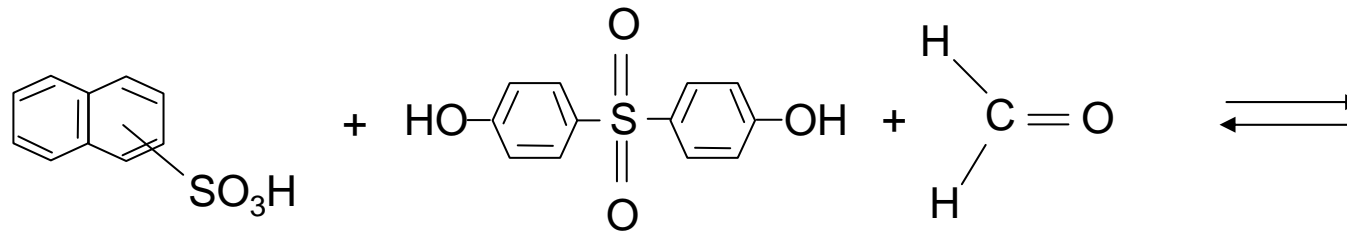
**Verordnung (EG) Nr. 1907/2006**

**des Europäischen Parlaments und des Rates vom 18. 12. 2006 zur Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung chemischer Stoffe (REACH), zur Schaffung einer Europäischen Agentur für chemische Stoffe, zur Änderung der Richtlinie 1999/45/EG und zur Aufhebung der Verordnung (EWG) Nr. 793/93 des Rates, der Verordnung (EG) Nr. 1488/94**

## Beispiel für UVCB - Stoff

---

Synthese einfacher organischer Gerbstoffe:



**CAS: 93924-64-2** Naphthalinsulfonsäuren, Reaktionsprodukte mit Formaldehyd und Sulfonylbis[phenol], Natriumsalze **EINECS- Nr.: 300-260-8**

# Agenda

---

- I Bedeutung der Stoffidentität / Kernelemente der Stoffbeschreibung
- II REACH – Verordnung: Artikel 3.1 “Stoff“  
Artikel 3.2 “Zubereitung”
- II ECHA-Guideline “Guidance for Identification and Naming of Substances under REACH”**
- III CEFIC – Erläuterungen: Application of RIP 3.10 on  
“Guidance for identification and naming of substances”
- IV Wann handelt es sich um den gleichen Stoff?
- V Praktische Schritte für die Ermittlung des Stoffnamens
- VI Fazit



June 2007

Guidance for the implementation of REACH

# Rechtlicher Status der ECHA-Leitlinien

---

## LEGAL NOTICE

This document contains guidance on REACH explaining the REACH obligations and how to fulfil them.

However, users are reminded that the text of **the REACH regulation is the only authentic legal reference** and that the information in this document does not constitute legal advice.

The **European Chemicals Agency does not accept any liability** with regard to the contents of this document.

# Rechtlicher Status der ECHA-Leitlinien

---

**REACH-Verordnung ist rechtsverbindlich!**

**Interpretationen / Leitlinien / Hilfen:**

ECHA-Guidance for identification and naming of substances under REACH

CEFIC / VCI Guidance zur Anwendung von RIP 3.10

VCI-Leitfäden / FAQ etc.

Gesetzeskommentare

Leitfaden zur Zusatzmeldung zum EINECS-Verzeichnis (1982)

Manual of Decisions zu Neustoffmeldungen (Juni 2006)

**sind nicht verbindlich und auch nicht “rechtssicher”...**

**geben aber wichtige Hinweise für die Umsetzung von REACH!**

**→ Individuelle Entscheidungen der Unternehmen sind erforderlich!**

# TGD for Identification and Naming of Substances under REACH

**! Neue Definitionen !  
! Nicht in REACH-VO !**

Wesentliche Inhalte des RIP 3.10 -TGD:

- **Well defined substances:** 100% der Zusammensetzung sind definiert
  - **Mono- constituent substance:** 1 Hauptkomponente  $\geq$  80%
  - **Multi- constituent substance:** 2 oder mehr Hauptkomponenten zwischen 10 - 80%
- „kaum definierte Stoffe“ oder „**Stoffe mit wechselnder Zusammensetzung**“  
sog. **“UVCB“- Stoffe:** Substances of **U**nknown or **V**ariable composition,  
**C**omplex reaction products or **B**iological materials
  - die Anzahl der Komponenten ist relativ hoch, und/oder
  - Zusammensetzung ist weitgehend unbekannt, sehr variabel und kaum vorhersehbar

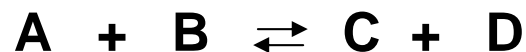
# TGD for Identification and Naming of Substances under REACH

**Mono- constituent substance:** 1 Hauptkomponente  $\geq$  80% w/w

- Die Benennung des Stoffes erfolgt nur nach der Hauptkomponente

Beispiele: 91% iges m- Xylol mit 5% o- Xylol heißt: **m- Xylol**

87% iges o- Xylol mit 10% m- Xylol heißt: **o- Xylol**



**80:20 - Regel:** 1 Hauptkomponente  $>$  80%: Mono- constituent substance

Mehrere Komponenten  $<$  80% und  $>$  10%: Multi- constituent substance

Summe der Verunreinigungen: max. 20%!

# Die 80/20 - Regel aus Neustoffanmeldungen bekannt

---

Abweichung von der **80/20 - Regel** ist nur in begründeten Fällen erlaubt:

- wenn der Konzentrationsbereich der Hauptkomponente und der Verunreinigungen  $\geq 80\%$  ist, die Hauptkomponente aber gelegentlich  $\geq 80\%$  ist,
- Die Hauptkomponente  $< 80\%$ . Es kann aber gezeigt werden, dass der Stoff vergleichbare physikalisch- chemische Eigenschaften und ein ähnliches Gefahrenprofil aufweist, wie ein anderer Einkomponentenstoff, der die 80/20 - Regel erfüllt.
- Für die Einstufung relevante Verunreinigungen  $> 1\%$  müssen unter Angabe von Namen, CAS- und EC- Nr. sowie Formel genannt werden

## Multi- constituent substance

---

Unter einem sog. „**Mehrkomponenten - Stoff**“ versteht man nach TGD zu RIP 3.10 ein Stoffgemisch aus **zwei** oder **mehr Hauptkomponenten**, die zwischen **10% und 80%** in dem Gemisch enthalten sind.

- Die Namensgebung erfolgt nach allen im Stoff vorhandenen Hauptkomponenten  $\geq 10\%$

Beispiel: m- Xylol, 50%

o- Xylol, 45%

p- Xylol, 5%

**Mischung aus**

**m- Xylol und**

**o- Xylol**

- Hauptkomponenten sind vollständig identifiziert: CAS-, EC-Nr., Molekularstruktur
- Alle Komponenten auf 100% aufsummierbar
- Verunreinigungen  $> 1\%$  namentlich identifiziert mit CAS- und EC-Nr., Formel

## Multi- constituent substances – Beispiele aus der Praxis

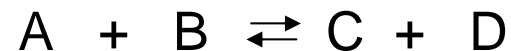
---

- **Dichlorierung von Benzol führt zu folgendem Isomerengemisch:**  
**40%** 1,2-, **5%** 1,3-, **55%** 1,4-Dichlorbenzol  
**-> Mischung aus 1,4- und 1,2-Dichlorbenzol alt: Dichlorbenzol roh**
- **Chlorierung von Toluol liefert: 40%** 1,2- und **60%** 1,4-Chlortoluol  
**-> Mischung aus 1,4- und 1,2- Chlortoluol alt: Chlortoluol roh**
- **Nitrierung von Toluol führt zu einem Gemisch aus:**  
**60%** 1,2-, **5%** 1,3- und **35%** 1,4- Nitrotoluol  
**-> Mischung aus 1,2- und 1,4- Nitrotoluol alt: Nitrotoluol roh**
- **Nitrierung von Chlorbenzol: 38%** 1,2-, **2%** 1,3-, **60%** 1,4- Nitrochlorbenzol  
**-> Mischung aus 1,4- und 1,2- Chlornitrobenzol alt: Chlornitrobenzol roh**

# Multi- constituent substances - Registrierung

---

Nach dem **TGD zu RIP 3.10** soll bei der Reaktion



das Reaktionsgemisch (C + D) mit dem Namen „**Mischung aus C + D**“ als **“Multi- constituent substance“** betrachtet werden und **nicht als Zubereitung!**

**Das hat folgende Konsequenzen für die Registrierung:**

- **(C + D) muss** als Stoff registriert werden, da REACH die Registrierung aller **hergestellten/importierten** Stoffen vorschreibt.
- Werden die Einzelkomponenten z. B. destillativ aufgearbeitet, müssen **zusätzlich C und D** registriert werden!
- 3 Registrierungen anstatt 2!

# Multi- constituent substances - Registrierung

---

Die Registrierung der Einzelkomponenten wird akzeptiert, unter der Bedingung, dass

- **der Registrierende dadurch nicht in ein niedrigeres Tonnageband kommt (Informationsverlust!):**

**Stoff C + D (in Summe 12 t/a, C = 8 t/a und D = 4 t/a); bei der Registrierung von C + D muss Datensatz für C und D jeweils > 10 t/a eingereicht werden!!**

- Die erforderlichen Daten für die Einzelkomponenten müssen vorliegen
- Keine zusätzlichen Tierversuche
- Wenn dadurch die Gesamtzahl der Registrierungen nachweislich reduziert werden kann.

# ECHA-Leitlinie: wohl definierte Stoffe

---

## “Mono-constituent substances”:

- nur eine Hauptkomponente  $\geq 80\%$
- jede Verunreinigung  $\leq 10\%$ ,
- Summe der Verunreinigungen maximal  $20\%$  (“80/20 Regel”)

## “Multi-constituent substances” (reaction mass = Reaktionsmasse)

- mehrere Komponenten zwischen  $10$  und  $80\%$
- Verunreinigungen  $\leq 10\%$

## Unterschied zur REACH-Verordnung / EINECS:

- Konzentrationsvorgabe für Hauptkomponenten bzw. Nebenkomponenten
- Begrenzung für Verunreinigungen / Zusatzstoffe
- Reaktionsmasse = Multi-constituent Substance  $\neq$  Zubereitungen

ECHA

Guidance for identification and  
naming of substances under  
REACH



June 2007

Guidance for the implementation of REACH

# Multi-Constituent Substances: Vorteile / Probleme

---

## Vorteil:

Reaktionsgemisch kann als ein einziger Stoff registriert werden.

⇒ ggf. vorteilhaft, wenn Reaktionsprodukt ohne Aufarbeitung genutzt wird

## Probleme:

Multi-constituent substance [A+B+C]

z. B. „Reaktionsmasse von o-Xylol, m-Xylol und p-Xylol“

⇒ neue Bezeichnungen

⇒ jede einzelne Komponente (>10%) mit EINECS-Nr. ist bei Vorregistrierung anzugeben. Geschäftsgeheimnisse ?!

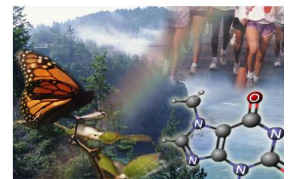
**Achtung:** Falls keine EINECS-Nr. für eine Komponente existiert,

⇒ Multi-constituent substance ist kein phase-in Stoff!

⇒ **Vorregistrierung ist nicht erlaubt! Deshalb genau prüfen!**

ECHA

Guidance for identification and naming of substances under REACH



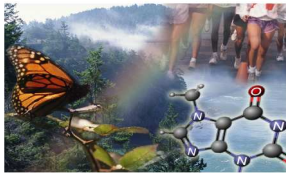
June 2007

Guidance for the implementation of REACH

# ECHA-Leitlinie: Entscheidungsbaum

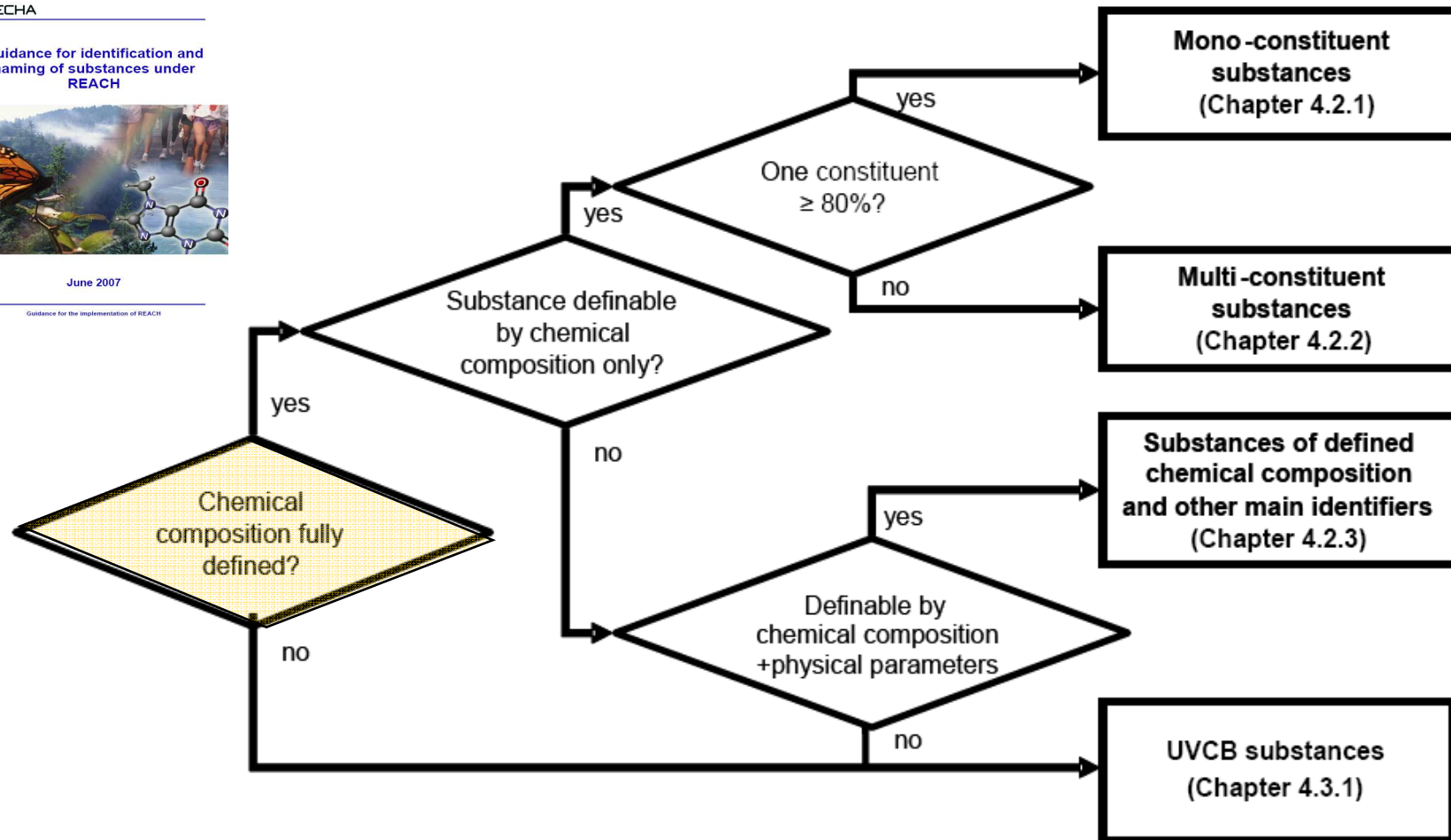
ECHA

Guidance for identification and naming of substances under REACH



June 2007

Guidance for the implementation of REACH



## ECHA-Leitlinie: VCI-Bewertung

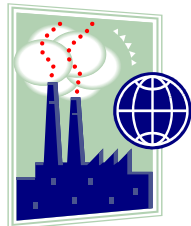
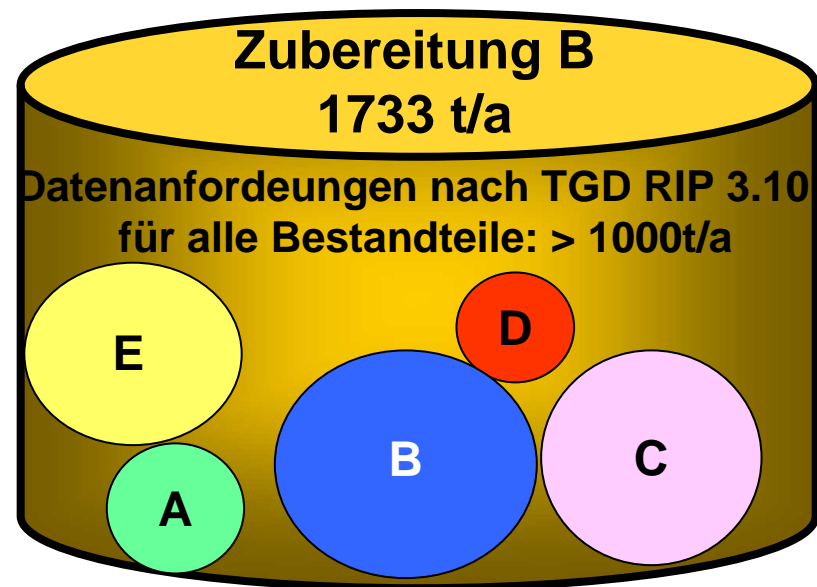
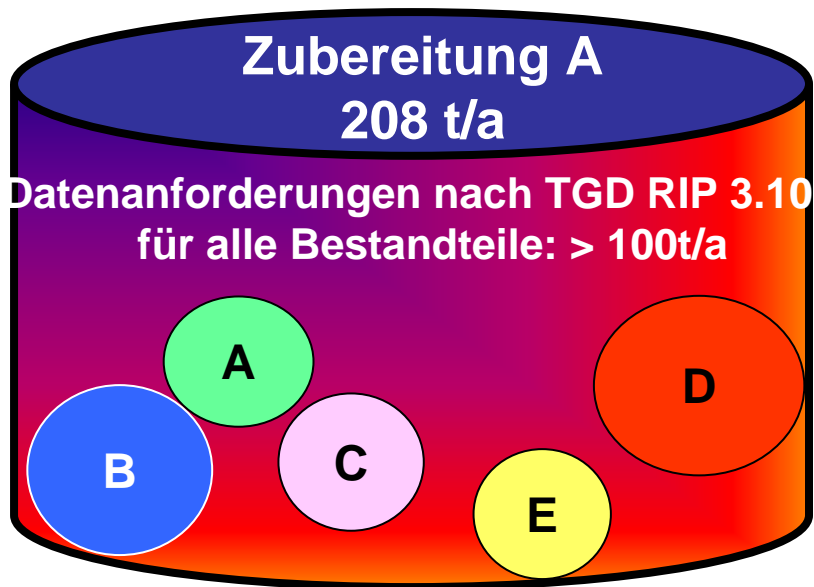
---

ECHA-Leitlinie gibt viele hilfreiche Beispiele zur Beschreibung und Benennung von Stoffen (z. B. UVCB-Stoffe)

**Allerdings können Probleme entstehen durch zu enge bzw. widersprüchliche Auslegung der REACH-Verordnung bei:**

- dem Ansatz der Mono- / Multi-constituenten Stoffe durch die Konzentrationsvorgaben für Hauptkomponenten bzw. Nebenkompnenten („80/20 Regelung“)
- Begrenzung für Verunreinigungen / Zusatzstoffe (< 10%)
- neue Stoffbezeichnungen
- Definition von Zubereitungen  
(Reaktionsprodukte = Multi-constituent Substance ≠ Zubereitungen)

# Bestandteile von Zubereitungen



	Zubereitung A:		Zubereitung B:		
A	A: 18% = 38t	→	A: 7% = 129t	→	∑ A = 167t
B	B: 25% = 53t	→	B: 39% = 687t	→	∑ B = 740t
C	C: 21% = 45t	→	C: 33% = 573t	→	∑ C = 618t
D	D: 29% = 60t	→	D: 6% = 115t	→	∑ D = 175t
E	E: 6% = 12t	→	E: 13% = 229t	→	∑ E = 241t
	1% Nichtgefährstoffe		2% Nichtgefährstoffe		

Datenanforderungen  
für alle Bestandteile  
> 100 t/a

# Konsequenzen für die Industrie aus dem TGD zu RIP 3.10

---

## Mögliche Konsequenzen aus der Umsetzung der RIP 3.10- TGD- Vorgaben:

- Umbenennung einer Vielzahl von Stoffen
- Viele Stoffe sind in der neuen Klassifizierung und Benennung nicht länger EINECS gelistet, da „Mischung aus...“ nicht EINECS gelistet wurde
- Sie verlieren den sog. “Phase- in- Status“
- Dadurch können sie die Übergangsfristen, die für die Registrierung der Altstoffe unter REACH gewährt werden, nicht in Anspruch nehmen
- Durch den Verlust des “Phase- in- Status“ werden sie zu nicht ELINCS gelisteten Neustoffen, die unverzüglich zum 01.06.2008 der Verpflichtung zur Vollregistrierung unterliegen!

## **Konsequenzen für die Industrie aus dem TGD zu RIP 3.10**

---

- **Konsequente Anwendung der 80/20- Regel führt zu einer Verwässerung der Stoffidentität**
- **„Trittbrettfahrern“ oder sog. „free- rider“ wird unter Berufung auf diese Regel der Nachweis der Stoffidentität ohne Nachweispflicht erleichtert**
- **Nach bisher vorliegende Ergebnissen wird die Zahl der Mehrkomponentenstoffe mit allen Komponenten < 80%, die bis heute als EINECS gelistet gelten, die Zahl der nach REACH zu registrierenden Altstoffe um ein Vielfaches übersteigen.**
- **Nach bisher vorliegenden Schätzungen bei VCI- Mitgliedsfirmen könnte die Zahl der zu erwartenden Neustoffregistrierungen 3- 4 so hoch liegen, wie die Zahl der nach REACH zu registrierende Altstoffe!**

# Agenda

---

- I Bedeutung der Stoffidentität / Kernelemente der Stoffbeschreibung
- II REACH – Verordnung: Artikel 3.1 “Stoff“  
Artikel 3.2 “Zubereitung”
- II ECHA-Guideline “Guidance for Identification and Naming of Substances under REACH”
- III CEFIC – Erläuterungen: Application of RIP 3.10 on “Guidance for identification and naming of substances”**
- IV Wann handelt es sich um den gleichen Stoff?
- V Praktische Schritte für die Ermittlung des Stoffnamens
- VI Fazit

# CEFIC-Erläuterung zu Reaktionsprodukten

---



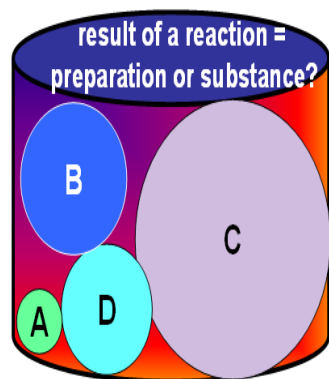
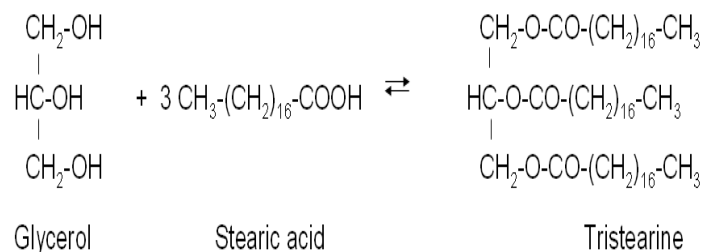
Application of RIP 3.10 on  
“Guidance for identification and naming of substances”

- Reaction mixtures, naming rules, phase-in criterion (a), impurities –



# Optionen gemäß REACH / ECHA-Leitlinie / Cefic-Guidance

## Esterification of Glycerol with Stearic acid



A = Stearic acid  
 B = Diester  
 D = Monoester  
 C = Triester  
 Remainder: Glycerol

**Einzelfallentscheidung** eines jeden Unternehmens, was sein Reaktionsprodukt ist:

1. Mischung / Lösung von mehreren Stoffen = Zubereitung
2. Einzelstoff mit Verunreinigungen
3. UVCB-Stoff
4. Multi-constituent substance

# Optionen gemäß REACH / ECHA-Leitlinie / Cefic-Guidance

---

Beispiel: Reaktionsergebnis einer Reaktion



kann wie folgt betrachtet werden:

## a) als Mischung = Zubereitung der Komponenten C, D, A und B

- Nur die neu hergestellten Stoffe C und D jeweils separat registrieren (A und B müssen als Ausgangsstoffe schon registriert sein):
- Komponente X als Verunreinigung den Komponenten C und/oder D zuordnen (oder als Abfall abtrennen).
- Nur Daten für die Mengenstufe der jeweiligen Komponente einreichen, z. B. nur 1 – 10 t/a (evt. Addition der Stoffmengen, wenn C und D zusätzlich vom Unternehmen separat hergestellt bzw. importiert wird).

## Optionen gemäß REACH / ECHA-Leitlinie / Cefic-Guidance

---

Beispiel:  $A + B \rightleftharpoons C + D + A + B + X$  (16 t/a)

- b) **als komplexes Reaktionsprodukt (UVCB-Stoff)**, falls die Zusammensetzung des Produktes variiert oder z. T. unbekannt ist. Es ist das gesamte Produkt zu prüfen (Mengenstufe 10 – 100 t/a)
- c) **als Stoff C (falls dies die beabsichtigte Produktion ist)**, die Komponenten A, B, D und X wären als Verunreinigungen, bei der Prüfung und bei der Angabe der Stoffidentität bei Registrierung einzubeziehen (Mengenstufe „Stoff C“ 10 – 100 t/a)

**REACH-Verordnung und EINECS: ➡ keine Konzentrationsgrenzen für Verunreinigungen!**

- b) **als „Multi-constituent“ Stoff [C+D+A+B+X] nach ECHA-Leitlinie**  
Name: „Reaction mass of C, D, A and B“ (Mengenstufe 10 – 100 t/a).  
X < 10 % und kann als Verunreinigung angesehen werden

# Agenda

---

- I Bedeutung der Stoffidentität / Kernelemente der Stoffbeschreibung
- II REACH – Verordnung: Artikel 3.1 “Stoff“  
Artikel 3.2 “Zubereitung”
- II ECHA-Guideline “Guidance for Identification and Naming of Substances under REACH”
- III CEFIC – Erläuterungen: Application of RIP 3.10 on “Guidance for identification and naming of substances”
- IV Wann handelt es sich um den gleichen Stoff?**
- V Praktische Schritte für die Ermittlung des Stoffnamens
- VI Fazit

# Entscheidung zur Gleichheit / Identität von Stoffen

---

Leitfaden enthält Beispiele für eine „Nicht Identität“ von Stoffen,

z. B:

- **iso-alkyl  $\neq$  n-alkyl (linear ungleich zu verzweigt)**
- **unterschiedliche Isomere / Enantiomere  
(ohne Spezifizierung wird Racemat angenommen)**
- **verschiedene Kristallstrukturen (Einzelfall)**

-----

Bei verschiedenen Verunreinigungen: Expertenentscheidung

**Einhaltung der 80/20 Regel bedeutet nicht gleicher Stoff!**

- **Gleiche Stoffe, z. B. wasserfreie Form und Hydrate eines Salzes.**

# Agenda

---

- I Bedeutung der Stoffidentität / Kernelemente der Stoffbeschreibung
- II REACH – Verordnung: Artikel 3.1 “Stoff“  
Artikel 3.2 “Zubereitung”
- II ECHA-Guideline “Guidance for Identification and Naming of Substances under REACH”
- III CEFIC – Erläuterungen: Application of RIP 3.10 on “Guidance for identification and naming of substances”
- IV Wann handelt es sich um den gleichen Stoff?
- V Praktische Schritte für die Ermittlung des Stoffnamens**
- VI Fazit

# Praktische Schritte für die Ermittlung des Stoffnamens

---

**1. ESIS prüfen** (Inventar enthält EINECS, ELINCS, no longer Polymere)  
IUPAC-Name, CAS-Nr., CAS-Name wird zugeordnet (falls vorhanden).  
⇒ bei mehreren EINECS-Einträgen am besten geeignete nehmen  
(evt. auch mehrere Namen alternativ angeben).

## **2. CAS-Register prüfen**

CAS-Register enthält oft auch IUPAC-Bezeichnungen  
⇒ bei mehreren CAS-Einträgen am besten geeignete nehmen  
(evt. auch mehrere Namen alternativ angeben).

## **3. IUPAC-Name oder internationale Bezeichnung selbst ableiten**

EINECS- / CAS-Nr. haben keine Begrenzung für Gehalte des Stoffes oder der Verunreinigungen (keine 80/20 Regel!)

# Agenda

---

- I Bedeutung der Stoffidentität / Kernelemente der Stoffbeschreibung
- II REACH – Verordnung: Artikel 3.1 “Stoff“  
Artikel 3.2 “Zubereitung”
- II ECHA-Guideline “Guidance for Identification and Naming of Substances under REACH”
- III CEFIC – Erläuterungen: Application of RIP 3.10 on “Guidance for identification and naming of substances”
- IV Wann handelt es sich um den gleichen Stoff?
- V Praktische Schritte für die Ermittlung des Stoffnamens
- VI Fazit**

# Fazit

---

**Bestehende Praxis möglichst beibehalten, sonst zusätzlicher Aufwand!**

**Firmen sollten selbst entscheiden,**

- ob sie ein Produktionsergebnis als
  - a) Zubereitung
  - b) Stoff
  - c) UVCB-Stoff oder
  - d) „Multi-constituent“ Stoff einordnen
- welche Stoffnamen / Stoffbezeichnungen sie wählen (möglichst international anerkannte Bezeichnungen für globalen Markt)
- ob sie Stoffe mit unterschiedlichen Verunreinigungen als **identisch** oder **nicht identisch** bewerten (jedoch Einschränkungen der EINECS-Regel beachten)

---

**Vielen Dank für Ihre  
Aufmerksamkeit.**

