

Joulukuu 2017

## Miten määrittää onko aine polymeeri vai ei ja asiaankuuluvan rekisteröinnin aloittaminen

### Sisällysluettelo

<b>1. Johdanto</b> .....	<b>2</b>
<b>2. Aineen tunnistaminen – polymeeri vai ei</b> .....	<b>4</b>
2.1. Johdanto – (mahdollisen) polymeerin valmistus .....	4
2.2. Mikä polymeeri on? .....	5
2.3. Esimerkki polymeerin määritelmän soveltamisesta .....	6
2.4. Vaikutukset rekisteröintiin .....	8
2.5. Analyysimenetelmät .....	8
<b>3. Tietojen kerääminen fysikaalis-kemiallisista, ihmisen terveyteen ja ympäristöön liittyvistä ominaisuuksista</b> .....	<b>10</b>
3.1. Tietojen kerääminen fysikaalis-kemiallisista ominaisuuksista .....	11
3.2. Tietojen kerääminen ympäristöominaisuuksista.....	14
3.3. Tietojen kerääminen ihmisen terveyteen liittyvistä ominaisuuksista .....	16

### Kuvat

Kuva 1: Vuokaavio tietojen keräämisen vaiheista sen perusteella, onko aine polymeeri vai ei .	3
Kuva 2: Esimerkkejä yksinkertaisesta kemiallisesta rakenteesta, jossa on toistuvia yksikköjä.	4
Kuva 3: Esimerkki silloittuneista kemiallisista rakenteista, joissa on toistuvia yksikköjä.....	4
Kuva 4: Esimerkkejä monimutkaisemmista rakenteista, joissa on useita monomeerejä ja mahdollisesti silloittuneita rakenteita. ....	5

### Taulukot

Taulukko 1: Polymeerin määritelmän havainnollistaminen koostumuksen perusteella.....	7
Taulukko 2: Esimerkki analyysistä, jota käytetään määrittämään, onko polymerisaatioreaktiossa saatu aine polymeeri vai ei .....	9
Taulukko 3: Tietojen kerääminen (joistakin) fysikaalis-kemiallisista ominaisuuksista.....	11
Taulukko 4: Tietojen kerääminen (joistakin) ympäristöominaisuuksista .....	14
Taulukko 5: Tietojen kerääminen (joistakin) ihmisen terveyteen liittyvistä ominaisuuksista ..	16

Joulukuu 2017

## 1. Johdanto

Tässä esimerkissä kuvataan osa siitä, miten tietoja kerätään useasta toistuvasta yksiköstä koostuvaa ainetta varten. Siksi on tärkeää tietää, mitä polymeeri on ja mitä se ei ole. Aine on nestemäinen orgaaninen aine, joka on saatu kemiallisesta reaktiosta. Lähtöaineina käytettävät aineet reagoivat siten, että yksi tai useampi yksikkö liittyy yhteen (kovalenttisisidos).

Yritys, joka haluaa rekisteröidä aineen, tuottaa ainetta vähintään kymmenen tonnin määrinä vuodessa. Siksi REACH-asetuksen liitteessä VII ja liitteessä VIII esitetyt tietovaatimukset ovat asiaankuuluvia kuten myös velvollisuus tehdä kemikaaliturvallisuusarviointi ja toimittaa kemikaaliturvallisuusraportti rekisteröintiasiakirjojen osana. HUOMAUTUS: Polymeeriä koskevat tietovaatimukset eivät riipu polymeerin vuotuisesta määrästä vaan polymeerin valmistuksessa käytettyjen monomeerien ja muiden lähtöaineiden vuotuisesta määrästä.

Tässä esimerkissä havainnollistetaan pääasiassa seuraavia asioita:

- Miten määritetään, onko aine polymeeri vai ei?
- Jos aine ei ole polymeeri, se on rekisteröitävä sellaiseksi (joko yhdestä ainesosasta koostuvaksi aineeksi, useammasta ainesosasta koostuvaksi aineeksi tai UVCB-aineeksi).
- Mitä vaikutuksia edellä esitetyillä vaihtoehdoilla on tietojen keräämiseen?

Tässä esimerkissä esitetään useita skenaarioita siitä, mihin eri suuntiin olemassa olevat tiedot johtavat lisätietojen keräämiseen. Kaikkia suuntia ei kuvata kokonaan. Tässä esimerkissä esitetään joidenkin suuntien osalta vain rajallinen kuvaus seuraavista vaiheista ja asiaankuuluvista kysymyksistä.

Kaikki ohjeasiakirjat, joihin tässä asiakirjassa viitataan, ovat saatavissa kemikaaliviraston ohjeita käsittelevällä verkkosivulla<sup>1</sup>.

Lisätietoa on pk-yritysten johtajille ja REACH-koordinaattoreille tarkoitettun käytännön oppaan: Tietovaatimusten täyttäminen, kun määrä on 1–10 tai 10–100 tonnia vuodessa<sup>2</sup> (jäljempänä "pk-yritysten käytännön opas tietovaatimuksista") luvuissa I ja II.

Tämän esimerkin vuokaaviot esitetään kuvassa Kuva 1.

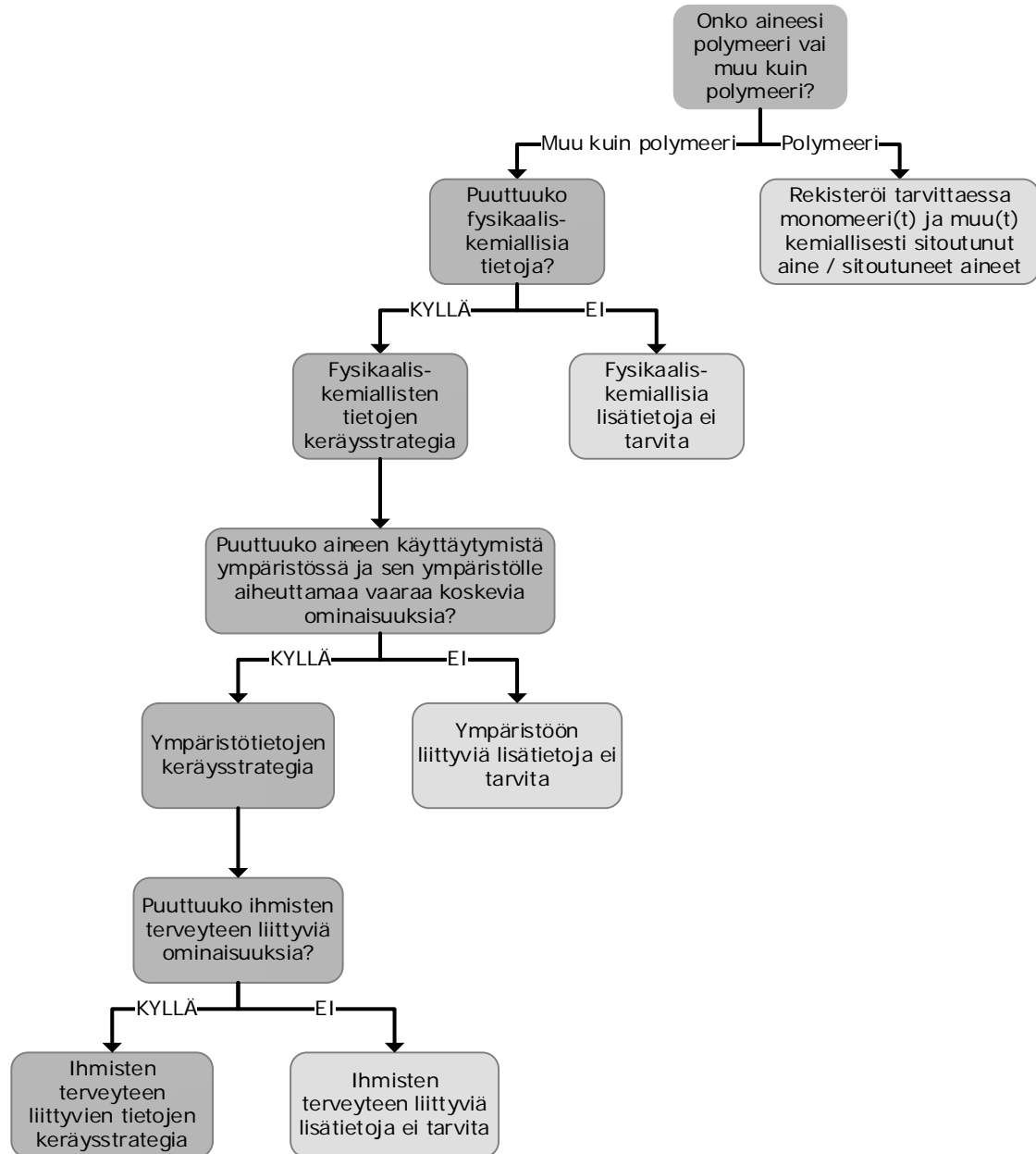
---

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

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

Joulukuu 2017

**Kuva 1: Vuokaavio tietojen keräämisen vaiheista sen perusteella, onko aine polymeeri vai ei**



Jos aine on polymeeri, monomeerejä ja (kemiallisesti sitoutuneita) lähtöaineita koskevien tietojen keräämisen vaiheet ovat samat kuin aineelle, joka ei ole polymeeri.

Joulukuu 2017

## 2. Aineen tunnistaminen – polymeeri vai ei

### 2.1. Johdanto – (mahdollisen) polymeerin valmistus

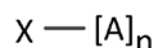
Valmistat kemiallista ainetta liuoksessa, johon lisäät useita aineita (lähtöaineita), jotka reagoivat toistensa kanssa siten, että useat molekyyliyksiköt yhdistyvät. Oletetaan, että lähtöaineita lisätään sellaisina määrinä, että kun reaktio on päätöksessä, alkuperäisiä lähtöaineita on enää vain pieninä määrinä (< 1 %).

Oletetaan nyt, että aloitat lähtöaineella X ja monomeerillä A, ja valmistusprosessissa X ja A reagoivat yhdessä katalyytin läsnä ollessa. Monomeeri A voi myös reagoida itsensä kanssa ja muodostaa toistuvia yksiköitä. Lähtöaineen ja monomeerin liitoksia kutsutaan kovalenttisisidoksiksi. X kuuluu reaktiossa, mutta yksi yksikkö X pysyy yksikköjen A ketjun päässä. Yksiköt A liittyvät nyt yhteen (kovalenttisisidos), eivätkä ne tarkasti ottaen ole enää A vaan niistä on tullut A', koska niillä on toiseen A'- tai X'-molekyyliin sidos, jota niillä ei ollut ennen. (Tekstissä ja kuvissa on yksinkertaisuuden vuoksi käytössä A ja X).

Reaktio päättyy, kun kaikki alkuperäiset aineet ovat kuluneet (ne ovat reagoineet täysin tai niitä on edelleen vain pieninä määrinä (< 1 %) tai polymerisaatio on tukahtunut (pysähtynyt). Katalyytti voidaan poistaa esimerkiksi suodattamalla.

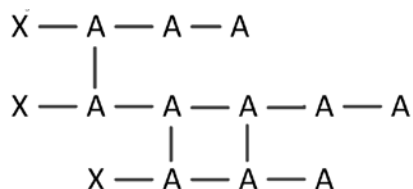
Tuloksena saatava aine voisi siten olla X-A-A tai X-A-A-A siten, että A:ta voi olla suuria määriä, mikä usein kirjoitetaan X-[A]<sub>n</sub>, jossa n tarkoittaa yksikköjen määrää, kuten kuva Kuva 2 havainnollistaa.

**Kuva 2: Esimerkkejä yksinkertaisesta kemiallisesta rakenteesta, jossa on toistuvia yksiköitä.**



Muodon ei tarvitse olla suoraketjuinen; X-[A]<sub>n</sub>-ketjut voivat myös yhdistyä (silloittua) muiden X-[A]<sub>n</sub>-ketjujen kanssa, kuten Kuva 3 havainnollistaa.

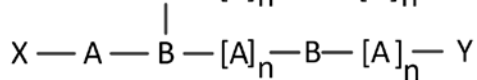
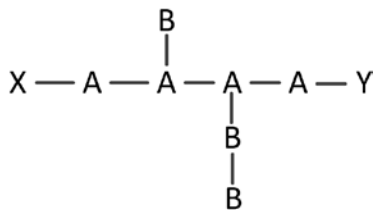
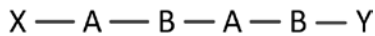
**Kuva 3: Esimerkki silloittuneista kemiallisista rakenteista, joissa on toistuvia yksiköitä.**



Joissakin tapauksissa reaktiossa voi olla mukana useampi kuin yksi lähtöaine: esimerkiksi X ja Y reagoivat monomeerien A ja B kanssa. Tästä olisi seurauksena a) aine, jonka / aineita, joiden koostumus olisi esimerkiksi X-A-B-A-B-Y (suoraketjuinen tai haaroittunut), tai silloittuneita rakenteita X-A-B-[A-B]<sub>n</sub>-Y tai monimutkaisempia rakenteita, joissa on eri määriä toistuvia yksiköitä, kuten kuvan 4 'n' ja 'm'.

Joulukuu 2017

**Kuva 4: Esimerkkejä monimutkaisemmista rakenteista, joissa on useita monomeerejä ja mahdollisesti silloittuneita rakenteita.**



Vaikka tiedetään, että tämä reaktio tapahtuu, tarkasti ei tiedetä sitä, miten monta monomeeriyksikköä A on liittynyt yhteen eikä siten sitä, miten pitkä ketju tavallisesti on. Juuri tiedot liittyneiden toistuvien yksikköjen määrästä ja kunkin ainesosan vastaavasta pitoisuudesta sekä sen toistuvien yksikköjen määrästä määrittävät, katsotaanko aine REACH-asetuksen mukaiseksi polymeeriksi.

## 2.2. Mikä polymeeri on?

Vaikka kuvissa 2–4 kuvatut ketjut näyttävät polymeeriltä, joudut tarkistamaan, päteekö polymeerin määritelmä todella. Määritelmälainaus esitetään seuraavassa laatikossa, ja sitä selitetään lisää monomeerejä ja polymeerejä käsittelevissä ohjeissa.

Kuvissa 2–4 kuvatuissa eri esimerkeissä aine koostuisi monomeeriyksiköitä "A" ja/tai "B". Sinun on määritettävä, miten moni niistä liittyy yhteen ja mikä niiden molekyyllipainon jakauma on.

Joulukuu 2017

**Polymeerin määritelmä**

Polymeeri on aine, joka koostuu molekyyleistä, joille on ominaista yhden tai useamman tyyppisten monomeeriyksikköjen muodostama jakso. Näiden molekyylien on molekyylipainon suhteen jakaannuttava useisiin eri molekyylipainoluokkiin. Molekyylipainon erot johtuvat pääasiassa monomeeriyksikköjen lukumäärien eroista.

REACH-asetuksen 3 artiklan 5 kohdan mukaan polymeeri määritellään aineeksi, joka täyttää seuraavat kriteerit:

- yli 50 prosenttia kyseisen aineen painosta koostuu polymeerimolekyyleistä (katso määritelmä jäljempää)
- keskenään samanpainoisten polymeerimolekyylien määrän on oltava alle 50 prosenttia aineen massasta.

Tämän määritelmän mukaisesti voidaan todeta seuraavaa:

**"Polymeerimolekyyli"** on molekyyli, jossa on vähintään kolmesta monomeeriyksiköstä, jotka ovat sitoutuneet kovalenttisesti vähintään yhteen toiseen monomeeriyksikköön tai muuhun lähtöaineeseen, muodostuva jakso.

**"Monomeeriyksikkö"** tarkoittaa monomeeriaineen reagoimutta muotoa polymeerissä (monomeeriyksikön määrittämiseksi polymeerin kemiallisessa rakenteessa voidaan ottaa huomioon esimerkiksi polymeerin muodostumismekanismi).

**"Jakso"** on molekyylissä oleva jatkuva jono monomeeriyksiköitä, jotka ovat sitoutuneet toisiinsa kovalenttisesti ja joiden keskellä ei ole muita kuin monomeeriyksiköitä. Tällainen monomeeriyksiköiden jatkuva jono voi muodostua mihin tahansa verkostoon polymeerin rakenteessa.

**"Muu lähtöaine"** tarkoittaa molekyyliä, joka voi olla sitoutunut yhteen tai useampaan monomeeriyksikköjakssoon mutta jota ei voida pitää monomeerinä polymeerin muodostumisprosessissa käytettävissä reaktio-oloissa.

### 2.3. Esimerkki polymeerin määritelmän soveltamisesta

Taulukko 1 havainnollistaa polymeerin määritelmää: osassa 2.1 kuvatun tuotantomenetelmän perusteella ehdotetaan useita kuvauksia.

Joulukuu 2017

**Taulukko 1: Polymeerin määritelmän havainnollistaminen koostumuksen perusteella**

Taulukko 1		
Tiedot	Kysymys	Tulos
Aineessasi on X, joka on sitoutunut toistuvien sidoksissa olevien molekyyliyksikköjen A jaksoon, ja se on suspendoitunut liuokseen.	Voiko aine olla polymeeri?	Kyllä, jos aineen kemiallisen koostumuksen muodostavat molekyylit koostuvat toistuvista yksiköistä A ja täyttävät polymeerin määritelmän.  Huomautus: Oletetaan, että liuote voidaan poistaa muuttamatta molekyylin kemiallista koostumusta.
<i>Koostumus (esimerkki 1)</i> Liuos sisältää seuraavien jaksojen fraktiot (painon mukaan): 5 % X-A 20 % X-A-A, 40 % X-A-A-A, (n=3, voidaan kirjoittaa myös X-[A] <sub>3</sub> ) 20 % X-[A] <sub>4</sub> , 10 % X-[A] <sub>5</sub> - ja 5 % X-[A] <sub>6</sub>	Mitkä näistä fraktioista voidaan katsoa polymeerimolekyyliksi ja mikä on näiden polymeerifraktioiden yhteismäärä?	Fraktiot X-A- ja X-A-A eivät ole polymeerisiä, mutta fraktiot X-A-A-A ja sitä suuremmat ovat polymeerisiä, koska ne sisältävät vähintään kolme yksikköä, jotka ovat kiinnittyneet neljälleen. Näin ollen polymeerifraktiot ovat yhteensä 40 + 20 + 10 + 5 = 75 %.  → aine on polymeeri
<i>Koostumus (esimerkki 2)</i> Liuos sisältää seuraavien jaksojen fraktiot (painon mukaan): 20 % X-A 35 % X-A-A, 15 % X-A-A-A, (n=3, voidaan kirjoittaa myös X-[A] <sub>3</sub> ) 15 % X-[A] <sub>4</sub> 10 % X-[A] <sub>5</sub> - ja 5 % X-[A] <sub>6</sub>	Mitkä näistä fraktioista voidaan katsoa polymeerimolekyyliksi ja mikä on näiden polymeerifraktioiden yhteismäärä?	Fraktiot X-A- ja X-A-A eivät ole polymeerisiä, mutta fraktiot X-A-A-A ja sitä suuremmat ovat polymeerisiä, koska ne sisältävät vähintään kolme yksikköä, jotka ovat kiinnittyneet neljälleen. Näin ollen polymeerifraktiot ovat yhteensä 15 + 15 + 10 + 5 = 45 %.  → aine <b>ei</b> ole polymeeri  Huomautus: Tähän ainetyyppiin viitataan usein oligomeerinä.
	Jos aine <b>ei</b> ole polymeeri, onko se yhdestä tai useammasta ainesosasta koostuva aine tai UVCB-aine?	Koska aineessa ei ole yhtä vähintään 80 prosentin fraktiota, aine ei ole yhdestä ainesosasta koostuva aine. Jos fraktioiden määrät vaihtelevat, aine on UVCB-aine, ja jos ne ovat kiinteitä, aine voidaan katsoa useammasta ainesosasta koostuvaksi aineeksi (katso Monomeerejä ja polymeerejä koskevat toimintaohjeet)

Joulukuu 2017

**Oligomeerin selitys**

Oligomeeri tarkoittaa monomeeriyksikköjen jonoa, jossa ketjun yksikköjen määrä on pieni, se koostuu esimerkiksi tavallisesti kahdesta tai kolmesta yksiköstä, jotka ovat liittyneet yhteen, ja sisältää toisinaan pieniä määriä myös neljästä, viidestä tai useammasta yhteen liittyneestä yksiköstä.

Joitakin oligomeerisiä aineita esitetään "[luettelossa aineista, jotka eivät enää ole polymeerejä](#)". Tarkasta, onko jokin niistä valmistamasi/maahantuomasi aine.

Tarkasta sen jälkeen kemikaaliviraston verkkosivustolta, onko aineesi jo rekisteröity.

Aineesi määrittämiseksi on olennaisen tärkeää selvittää molekyylipainon jakautuminen monomeeriyksikköjen osalta. Suositelluin menetelmä "keskimääräisen molekyylipainon" ja "molekyylipainon" määrittämiseen on kokoekskluusiokromatografia (Gel Permeation Chromatography, GPC), ja se kuvataan [OECD:n testausohjeissa 118](#). Testin tekeminen edellyttää laboratoriota ja kokemusta kyseisestä menetelmästä. Jos GPC:tä ei voida tehdä, OECD:n testausohjeissa 118 on viittauksia muihin menetelmiin.

## 2.4. Vaikutukset rekisteröintiin

Jos aineesi on polymeeri, itse polymeeriä ei tarvitse rekisteröidä. Monomeeri/monomeerit (esitetään A:nä ja/tai B:nä) ja lähtöaine/lähtöaineet (esitetään X:nä ja/tai Y:nä) on kuitenkin kaikki rekisteröitävä erillisinä rekisteröinteinä, paitsi jos kunkin polymeerin valmistuksessa käytetyn aineen määrä on alle 1 tonni vuodessa tai ne on jo rekisteröity "toimitusketjussa taaksepäin". Lisätietoja on monomeerejä ja polymeerejä koskevassa toimintaohjeessa.

Jos aine ei ole polymeeri, se on rekisteröitävä sellaiseksi (joksikin muuksi aineeksi). Tärkein kysymys, johon on vastattava, on siten seuraava: "Onko se yhdestä ainesosasta koostuva aine vai useammasta ainesosasta koostuva aine vai UVCB-aine?"

Taulukko 2 esittää joitakin analyysituloksia ja niiden vaikutuksia REACH-asetuksen mukaiseen rekisteröintiin. Aineiden tunnistamista ja nimeämistä REACH- ja CLP-asetusten mukaisesti koskevassa toimintaohjeessa on lisätietoa siitä, miten voidaan päätellä, onko kyseessä yhdestä ainesosasta koostuva aine, useammasta ainesosasta koostuva aine vai UVCB-aine.

## 2.5. Analyysimenetelmät

Taulukossa 2 esitetään joitakin skenaarioita siitä, miten voidaan analysoida ja määrittää, onko aineesi polymeeri vai ei. Aineille, joiden molekyylipaino on suuri, menetelmäksi valitaan tavallisesti kokoekskluusiokromatografia (Gel Permeation Chromatography, GPC). Niiden aineiden osalta, joiden molekyylipaino on pieni, kaasukromatografiasta (Gas Chromatography, GC) tai korkean suorituskyvyn nestekromatografiasta (High Pressure Liquid Chromatography, HPLC) voi kuitenkin saada riittävästi tietoa sen päättelemiseksi, onko aine polymeeri vai ei. Jäljempänä esitetään asiaankuuluvia menetelmiä kaikkien orgaanisten aineiden rekisteröinnissä vaadittavaa aineen tunnistamista varten.



Joulukuu 2017

**Taulukko 2: Esimerkki analyysistä, jota käytetään määrittämään, onko polymerisaatioreaktiossa saatu aine polymeeri vai ei**

Taulukko 2		
Analyysimenetelmä	Tulokset	Päätelmät ja seuraavat vaiheet
<i>Skenaario 1</i>		
GPC ja/tai GC tai HPLC tehty aineelle X-[A] <sub>n</sub>	<p>Polymeerimolekyylejä on yli 50 %, ja mikään polymeerimolekyyleistä, joilla on sama molekyyllipaino, ei ole &gt; 50 %</p> <p>Kromatogrammin huippulukemat voidaan yhdistää ainesosiin, jotka sisältävät eri määrän toistuvia yksiköjä A ja joihin lähtöaine X on kiinnittynyt.</p>	<p><b>Aine on polymeeri.</b></p> <p>A ja X on rekisteröitävä toimitusketjussasi.</p> <p>Polymeerissä läsnä olevan monomeerin (A) ja lähtöaineen ((X) (kovalenttisisidos) osalta sinun on joko i) liitettävä mukaan voimassa oleva rekisteröinti tai ii) rekisteröidyttävä itse, jos valmistat niitä tai maahantuot niitä EU:hun.</p> <p>On suositeltavaa toistaa analyysi GPC:llä ja/tai muulla varmistusanalyysillä tuotantoprosessin vaihtelun kattamiseksi.</p>
<i>Skenaario 2</i>		
Aineelle tehty GPC- ja/tai GC- tai HPLC-analyysi X-[A] <sub>n</sub> -[B] <sub>m</sub> -Y	<p>Polymeerimolekyylejä on alle 50 prosenttia.</p> <p>Tulokset osoittavat, että aine sisältää ainesosia, joissa on 1–4 toistuvaa A- ja B-yksikköä ja jotka reagoivat lähtöaineiden X ja Y kanssa.</p>	<p><b>Aine ei todennäköisesti ole enää polymeeri</b> vaan eri oligomeerien aine (useita monomeeriyksiköjä liittynyt yhteen).</p> <p>On suositeltavaa tehdä eri eristä toistuva analyysi, ja jos erien välillä on suuria vaihteluita, aine ei ole enää polymeeri, ja se on rekisteröitävä sellaiseksi.</p>
Toista aineelle X-[A] <sub>n</sub> -[B] <sub>m</sub> -Y tehty analyysi	Tarkasta, onko erien välillä suurta vaihtelua esiintyvien eri ainesosien pitoisuuksien osalta ja myös se, koostuuko aine ainesosista, joissa on eri määrä toistuvia yksiköjä.	<p><b>Aine ei ehdottomasti ole polymeeri.</b></p> <p>Aine on rekisteröitävä sellaiseksi.</p>
<i>Skenaario 3</i>		
Aineelle X-[A] <sub>n</sub> on tehty monia GPC- ja/tai GC- tai HPLC-analyysieja	Polymeerimolekyylejä on alle 50 prosenttia. Tulokset osoittavat kahden ainesosan selkeän ja muuttumattoman jakautumisen: 60 % yksikössä n=1 ja 40 % yksiköissä n=2.	<p><b>Aine</b> koostuu tietyistä oligomeereistä ja <b>näyttää</b> siten <b>olevan useammasta ainesosasta koostuva aine.</b></p> <p>Rakenteet on varmistettava (katso tämän taulukon ensimmäinen rivi).</p> <p>Aine on rekisteröitävä sellaiseksi.</p>

Joulukuu 2017

**Yleistä kaikille edellä oleville skenaarioille**

Periaatteessa sinun on aina varmistettava sen aineen rakenne, joka sinun on rekisteröitävä (ja muiden ainesosien läsnäolo) ultraviolettispektroskopiolla (UV), infrapunaspektroskopiolla (IR), ydinmagneettisella resonanssispektroskopiolla (NMR) ja/tai massaspektrometrilla (MS), ja määritettävä ainesosat kaasukromatografiolla (GC) tai korkean suorituskyvyn nestekromatografiolla (HPLC) ja/tai määritettävä molekyylipainon jakautuminen. Suuremmille molekyylipainoille tarvitaan kokoeksklusiokromatografiaa (Gel Permeation Chromatography, GPC). Kysy polymeerianalyysin asiantuntijalta neuvoa parhaasta strategiasta.

Kuten edellä todetaan, GPC- ja/tai GC- tai HPLC-tulokset on yhdistettävä odotettavissa oleviin tai varmistettuihin rakenteisiin, jotka voivat auttaa määrittämään toistuvien yksikköjen määrät.

Jos aineesi esimerkiksi koostuu neljästä ainesosasta, joiden molekyylipainot ovat jakautuneet eri tavalla, kromatogrammissa on oltava neljä huippukohtaa, ja niiden on myös vastattava odotettavissa olevia molekyylipainoja. Aineen tunnistetiedot on myös varmistettava muilla analyysimenetelmillä.

Vaikka aineesi on UVCB-aine, sinun on toteutettava kaikki kohtuullisiksi katsottavat toimenpiteet kaikkien niiden ainesosien rakenteen määrittämiseksi, joita on vähintään 10 prosenttia aineessa sellaisena kuin se on valmistettuna. Sinun on myös yksilöitävä ja dokumentoitava kaikki esiintyvät ainesosat, jos ne ovat merkittäviä aineen luokituksen ja/tai PBT-arvioinnin<sup>3</sup> kannalta, riippumatta niiden pitoisuuksista. Jos se osoittautuu teknisesti mahdottomaksi, sinun on dokumentoitava se ja annettava tieteelliset perustelut rekisteröintiasiakirjoissa. Tuntemattomat ainesosat on yksilöitävä mahdollisuuksien mukaan esittämällä yleinen kuvaus niiden kemiallisesta luonteesta. Aineen polymeerisyyden analysointi ja arviointi edellyttää edistynyttä tieteellistä asiantuntemusta.

### 3. Tietojen kerääminen fysikaalis-kemiallisista, ihmisen terveyteen ja ympäristöön liittyvistä ominaisuuksista

Oletetaan, että aineesi on oligomeerinen aine eli aine, jossa on useita yhteen liittyneitä (kovalenttisesti sitoutuneita) monomeerisiä yksiköjä ja joka ei täytä polymeeriä koskevia vaatimuksia (edellä taulukon 2 skenaario 3), ja että sinun on kerättävä tietoa fysikaalis-kemiallisista, ihmisten terveyteen ja ympäristöön liittyvistä ominaisuuksista.


Oletetaan myös, että valmistat ja/tai maahantuot sitä 10–100 tonnia vuodessa. Näin ollen sinun on täytettävä REACH-asetuksen liitteiden VII ja VIII tietovaatimukset.

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

Joulukuu 2017

### 3.1. Tietojen kerääminen fysikaalis-kemiallisista ominaisuuksista

**Taulukko 3: Tietojen kerääminen (joistakin) fysikaalis-kemiallisista ominaisuuksista**

Taulukko 3.		
Mitä tiedät?	Mitä on siis tehtävä?	Huomautuksia
Oligomeerinen aine on rekisteröitävä	Kerää sisäiset tiedot, esimerkiksi teknisestä osastosta	Sisäiset tiedot ovat aina hyvä lähtökohta.
<i>Skenaario 1: Kaikki fysikaalis-kemialliset tiedot ovat saatavilla</i>		
Saatavillasi on luotettavat tiedot kaikista asiaankuuluvista fysikaalis-kemiallisista ominaisuuksista	Fysikaalis-kemiallisten tietojen keräämisen osalta ei tarvita lisätoimia	Annettujen ohjeiden mukaan tehdyt testit ovat tavallisesti luotettavia. Käsikirjojen tai julkaisujen tiedot voivat olla luotettavia, jos tieteellinen asiantuntija on varmistanut ne. Niitä voidaan käyttää myös todistusnäyttöön perustuvassa lähestymistavassa.
 <p>Fysikaalis-kemiallisten ominaisuuksien osalta tietovaatimukset ovat samoja aineille, joita valmistetaan tai maahantuodaan 1–10 tonnia vuodessa tai 10–100 tonnia vuodessa.</p>		

Joulukuu 2017

Taulukko 3.		
Mitä tiedät?	Mitä on siis tehtävä?	Huomautuksia
<p><i>Skenaario 2: Suurin osa fysikaalis-kemiallisista tiedoista on saatavilla mutta eivät kaikki</i></p>		
<p>Sinulla on luotettavat tiedot seuraavista fysikaalis-kemiallisista ominaisuuksista:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• sulamispiste</li> <li>• suhteellinen tiheys</li> <li>• pintajännitys</li> <li>• leimahduspiste</li> <li>• syttyvyys</li> <li>• räjähtävyys</li> <li>• itsesyttymislämpötila</li> <li>• hapettavuus</li> </ul>	<p>Tietovaatimusten täyttämiseksi on kerättävä tietoja seuraavista fysikaalis-kemiallisista ominaisuuksista:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• kiehumispiste</li> <li>• höyrynpaine</li> <li>• vesiliukoisuus</li> <li>• jakautumiskerroin n-oktanoli-vesi</li> </ul> <p>Ensin on tarkistettava, voidaanko tietovaatimuksista "vapautua" joidenkin ominaisuuksien osalta.</p> <p>Esimerkiksi höyrynpainetta ei tarvitse määrittää, kun sulamispiste on &gt;300 °C. Testaaminen voi myös olla teknisesti mahdotonta tai tieteellisesti perusteetonta.</p> <p>Sen jälkeen on tarkistettava, onko mistään jäljellä olevista ominaisuuksista jo saatavilla tietoa. Tietoa voi olla saatavilla julkisessa kirjallisuudessa, kuten käsikirjoissa tai tietokannoissa tai ehkä vanhemmissa tutkimusraporteissa.</p> <p>Sinun on arvioitava huolellisesti, i) ovatko kyseiset tiedot luotettavia, ii)</p>	<p>Granulometrian (raekokojakauma) tiedot eivät ole merkityksellisiä, koska aine on neste.</p> <p>Annettujen ohjeiden mukaan tehdyt testit ovat tavallisesti luotettavia. Käsikirjojen tai julkaisujen tiedot voivat olla luotettavia, jos tieteellinen asiantuntija on varmistanut ne. Julkaisujen "luotettavuuden" varmistamiseksi tarvitaan tavallisesti enemmän kuin yksi tietolähde.</p> <p>Jos haluat käyttää käsikirjasta tai tietokannasta<sup>5</sup> peräisin olevaa tietoa, sinun on tarkistettava huolellisesti, onko testattu aine sama, jonka haluat rekisteröidä (mitä tulee puhtauteen/epäpuhtauksiin), ja saatiinko tieto luotettavalla testimenetelmällä. Tämä koskee myös vanhoja raportteja tutkimuksista, jotka suoritettiin ennen testimenetelmien standardisointia.</p> <p>Edistynyttä tieteellistä asiantuntemusta tarvitaan, jos tiedot luodaan vaihtoehtoisilla menetelmillä (esim. kvantitatiiviseen rakenne-</p>

<sup>5</sup> Yleiskatsaus hyväksytyistä käsikirjoista ja tietokannoista ja sellaisia käytettäviä tietoja koskevista vaatimuksista on kohdassa Tietovaatimuksia ja kemikaaliturvallisuusarviointia koskevat ohjeet, luku R.7a.

Joulukuu 2017



Kun saatavillasi on tiedot kaikista ominaisuuksista, sinun on tarkistettava, onko aineellasi fysikaalis-kemiallisia ominaisuuksia, jotka voivat aiheuttaa ei-toivottuja vaikutuksia, joiden perusteella ne kuuluvat CLP-asetuksen mukaiseen vaaraluokitukseen, kuten syttyvyyttä tai räjähtävyyttä. Jos näin on, sinun on tehtävä riskinluonnehdinta kemikaaliturvallisuusraportissasi.

**Taulukko 3.**

Mitä tiedät?	Mitä on siis tehtävä?	Huomautuksia
	<p>saako tiedoista aineen tietyn perusominaisuuden arviointiin asiaankuuluvaa arvoa ja iii) liittykö tietoihin tekijänoikeutta (asia, joka on otettava huomioon ennen kuin kyseisiä tietoja voidaan käyttää).</p> <p>Jos tietoja puuttuu edelleen, sinun on selvitettävä, miten kyseisiä tietoja voidaan tuottaa. Testi antaa lähes aina luotettavimmat tiedot, ja sitä pitäisi siksi aina harkita, kun tietovaatimuksesta vapauttamiseen ei ole perusteita.</p> <p>Joissakin tapauksissa voi kuitenkin olla mahdollista käyttää testauksen vaihtoehtoja, kuten vertailua samanlaisten aineiden ryhmään tai kvantitatiiviseen rakenne-aktiivisuussuhteeseen perustuvaa arviointia (QSAR)<sup>4</sup>.</p>	<p>aktiivisuussuhteeseen perustuva ennuste QSAR, interpolointi tai samankaltaisten aineiden ryhmästä peräisin olevien tietojen interpolointi). Tällaisen lähestymistavan käyttöön, perusteluun ja dokumentointiin sovelletaan hyvin tarkkoja sääntöjä.</p> <p>Lisätietoa REACH-asetuksen mukaisten tietovaatimusten täyttämistä on käytännön oppaassa (Q)SAR-mallien ilmoittamisesta i<sup>6</sup>.</p> <p>CLP-asetuksen mukaisen vaaraluokituksen määrittäviä fysikaalis-kemiallisia ominaisuuksia koskevat tiedot on hankittava hyvän laboratorioikäntönnön (GLP) vaatimusten mukaisesti. Aikaisemmat tulokset, joita ei ole saatu hyvän laboratorioikäntönnön mukaisesti, ovat kuitenkin mahdollisesti hyväksyttäviä.</p>

Jos harkitset vakiotestien vaihtoehtoja, huomaa, että jos aineessa on monia tuntemattomia ainesosia, tietovaatimuksia ei voida täyttää käyttämällä QSAR-malleja tai interpoloimalla muihin aineisiin.

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

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

Joulukuu 2017

### 3.2. Tietojen kerääminen ympäristöominaisuuksista

**Taulukko 4: Tietojen kerääminen (joistakin) ympäristöominaisuuksista**

Taulukko 4.		
Mitä tiedät?	Mitä on siis tehtävä?	Huomautuksia
Oligomeerinen aine on rekisteröitävä Määrä 10–100 tonnia vuodessa	Kerää sisäiset tiedot, esimerkiksi teknisestä osastosta	Sisäiset tiedot ovat aina hyvä lähtökohta.
<i>Skenaario 1: Kaikki ympäristötiedot ovat saatavilla</i>		
Saatavillasi on luotettavat tiedot kaikista asiaankuuluvista ympäristöominaisuuksista.	Ympäristötietojen keräämisen osalta ei tarvita lisätoimia	Annettujen ohjeiden mukaan tehdyt testit ovat tavallisesti luotettavia. Julkaisujen tiedot voivat olla luotettavia, jos tieteellinen asiantuntija on varmistanut ne.
<i>Skenaario 2 Kaikkia ympäristötietoja ei ole saatavilla</i>		
Sinulla on luotettavat tiedot seuraavista ympäristöominaisuuksista: <ul style="list-style-type: none"> <li>• nopea biohajoavuus</li> <li>• levän kasvun esto</li> <li>• myrkyllisyys (natriumpolyfosfaatti) mikro-organismeille</li> </ul> Tiedät jo olevasi tämän aineen ainoa (mahdollinen) rekisteröijä. Et ole tietoinen aineesta, joka on samankaltainen aineesi kanssa.	REACH-asetuksen liitteiden VII ja VIII aineen käyttäytymistä ympäristössä ja sen ympäristölle aiheuttamaa vaaraa koskevien tietovaatimusten täyttämiseksi aineesi osalta tietoa on kerättävä seuraavista ominaisuuksista: <ul style="list-style-type: none"> <li>• hydrolyysi</li> <li>• adsorptio-/desorptioseulonta</li> <li>• hajoaminen</li> <li>• lyhytaikainen myrkyllisyys selkärangattomille vesielioille</li> <li>• lyhytaikainen myrkyllisyys kaloille</li> </ul> Koska muita (mahdollisia) rekisteröijä ei ole ja koska et löytänyt samankaltaisia aineita, joudut keräämään nämä tiedot itse. Voit vapautua joistakin testeistä, jos niiden tekeminen ei ole teknisesti mahdollista tai tieteellisesti perusteltua. Tarkista muiden ominaisuuksien osalta esimerkiksi käsikirjoista, onko tietoja jo olemassa. Voit vapautua joistakin testeistä (olla tekemättä niitä) käyttämällä muita mukautuksia (interpolointi, QSAR-mallit, todistusnäyttö). Jos tietoja puuttuu edelleen, tee testi.	Annettujen ohjeiden mukaan tehdyt testit ovat tavallisesti luotettavia. Julkaisujen tiedot voivat olla luotettavia, jos tieteellinen asiantuntija on varmistanut ne. Julkaisujen luotettavuuden varmistamiseksi tarvitaan tavallisesti enemmän kuin yksi tietolähde. Kun aineen tiedetään olevan heti biohajoava, hydrolyysitestiä ei tarvitse tehdä. Hydrolyysitesti on tieteellisesti perusteeton, kun aine ei sisällä kemikaaliryhmiä, joita ei voida hydrolysoida. Ympäristöominaisuuksien testaaminen on teknisesti mahdotonta, kun aine on syttyvä ollessaan veden kanssa kosketuksessa. Adsorption osalta suositellaan testauksen sijasta, että tiedot tuotetaan ensin interpoloinnista tai QSAR-laskelmasta (katso pk-yrityksille tarkoitettujen tietovaatimuksia koskevan käytännön oppaan luku II.1.2). Kaikki aineen käyttäytymistä ympäristössä ja sen ympäristölle aiheuttamaa vaaraa koskevat testit on tehtävä yleisesti tunnustettujen testausohjeiden mukaisesti, ja niissä on noudatettava hyvän laboratoriokäytännön (GLP) vaatimuksia.

Joulukuu 2017



Kun saatavillasi on tiedot kaikista ominaisuuksista, sinun on tarkistettava, onko aineella sen käyttäytymistä ympäristössä tai sen ympäristölle aiheuttamaa vaaraa koskevia ominaisuuksia, jotka voivat aiheuttaa ei-toivottuja vaikutuksia (kuten myrkyllisyys vesieliöille). Käytännössä tämä tehdään tarkistamalla, onko aine luokiteltava ympäristölle vaaralliseksi CLP-asetuksen mukaisesti. Jos aine on luokiteltava ympäristölle vaaralliseksi, sinun on merkittävä ja luokiteltava se ja tehtävä myös altistumisen arviointi ja riskinluonnehdinta. Ne on dokumentoitava kemikaaliturvallisuusraportissa.

Kun käytetään ympäristövaaratutkimusten tuloksia (esim. myrkyllisyys kaloille, selkärangattomille vesieliöille ja leville), sinun on myös määritettävä taso, jonka alittuessa kielteisiä vaikutuksia ei ole odotettavissa. Näitä rajoja sanotaan arvioiduiksi vaikutuksettomiksi pitoisuuksiksi (Predicted No Effect Concentrations, PNEC), ja niiden johtamiseen tarvitaan edistynyttä tieteellistä asiantuntemusta.

Joulukuu 2017


### 3.3. Tietojen kerääminen ihmisen terveyteen liittyvistä ominaisuuksista

**Taulukko 5: Tietojen kerääminen (joistakin) ihmisen terveyteen liittyvistä ominaisuuksista**

Taulukko 5.		
Mitä tiedät?	Mitä on siis tehtävä?	Huomautuksia
Oligomeerinen aine on rekisteröitävä	Kerää sisäiset tiedot, esimerkiksi teknisestä osastosta	Sisäiset tiedot ovat aina hyvä lähtökohta.
<i>Skenaario 1: Kaikki ihmisten terveyteen liittyvät tiedot ovat saatavilla</i>		
Saatavillasi on luotettavat tiedot kaikista asiaankuuluvista ihmisten terveyteen liittyvistä ominaisuuksista.	Koska kaikki tiedot ovat jo saatavilla, ihmisten terveyteen liittyvien tietojen keräämiseksi ei edellytetä lisätoimia.	<p>Annettujen ohjeiden mukaan tehdyt testit ovat tavallisesti luotettavia.</p> <p>Julkaisujen tiedot voivat olla luotettavia, jos tieteellinen asiantuntija on varmistanut ne.</p>
<i>Skenaario 2: Suurin osa ihmisten terveyteen liittyvistä tiedoista on saatavilla mutta eivät kaikki</i>		
<p>Sinulla on luotettavat tiedot seuraavista ihmisten terveyteen liittyvistä ominaisuuksista:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• ihoärsytys/syöpyminen (<i>in vivo</i> - tutkimus)</li> <li>• silmä-ärsytys (<i>in vivo</i> -tutkimus)</li> <li>• ihon herkistyminen</li> <li>• <i>in vitro</i> -geenimutaatiotutkimus bakteereilla</li> <li>• välitön myrkyllisyys suun kautta</li> </ul> <p>Tiedät jo olevasi tämän aineen ainoa (mahdollinen) rekisteröijä.</p> <p>Et ole tietoinen aineesta, joka on samankaltainen aineesi kanssa.</p>	<p>REACH-asetuksen liitteen VIII ihmisten terveyttä koskevien tietovaatimusten täyttämiseksi aineesi osalta sinun on kerättävä tiedot seuraavista ominaisuuksista:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>in vitro</i> -sytogeenisuustutkimus nisäkässoluilla</li> <li>• <i>in vitro</i> -geenimutaatiotutkimus nisäkässoluilla</li> <li>• välitön myrkyllisyys hengitysteitse</li> <li>• lyhytaikainen myrkyllisyys toistuvalla annostuksella</li> <li>• lisääntymis-/kehitysmyrkyllisyyden seulonta</li> </ul> <p>Teet/teetät vaaditut ihmisten terveyttä koskevat testit itse.</p> <p>Tarpeettomien eläinkokeiden välttämiseksi tutkit asianmukaisimmat testiohjeet, jotta voit tehdä seulontatutkimuksen lisääntymis-/kehitysmyrkyllisyydestä, jolloin voit täyttää myös lyhyen aikavälin toistuvan annostelun myrkyllisyyttä (28 päivän hoito) koskevat vaatimukset. Päätät tehdä yhdistetyn toistuvan annostelun myrkyllisyyttä koskevan tutkimuksen ja lisääntymis-/kehitysmyrkyllisyyden seulontatestin.</p>	<p><i>REACH-asetuksen liitteitä on muutettu vuonna 2016, ja in vitro -testauksesta on tullut vakiovaatimus kolmelle ominaisuudelle:</i></p> <p>i) ihoärsytys ja syöpyminen, ii) silmä-ärsytys, iii) ihon herkistyminen.</p> <p>Koska ihoärsytystä ja syöpymistä sekä silmä-ärsytystä koskevat tietosi ovat peräisin <i>in vivo</i> -tutkimuksista, joudut laatimaan tieteelliset perustelut sille, miksi et toimita <i>in vitro</i> -testiä (nykyisen liitteen VII vaatimusten täyttämiseksi) Muuten asiakirja-aineistosi ei ole täydellinen.</p> <p>Ihon herkistymisen osalta joudut ehkä täydentämään tietojasi <i>in vitro</i> -menetelmillä nykyisen liitteen VII vaatimuksen mukaisesti.</p> <p>Annettujen ohjeiden mukaan tehdyt testit ovat tavallisesti luotettavia. Julkaisujen tiedot voivat olla luotettavia, jos tieteellinen asiantuntija on varmistanut ne. Julkaisujen luotettavuuden varmistamiseksi tarvitaan tavallisesti enemmän kuin yksi tietolähde.</p> <p>Kaikki ihmisten terveyteen liittyvät testit on tehtävä hyvän laboratoriokäytännön (GLP) mukaisesti.</p> <p>Tieteellistä asiantuntemusta tarvitaan tekemään <i>in vitro</i> -mutageenisuustestien perusteella päätös, tarvitaanko <i>in vivo</i> -mutageenisuustestiä (katso pk-yrityksille tarkoitettun tietovaatimuksia koskevan</p>



Joulukuu 2017

Taulukko 5.		
Mitä tiedät?	Mitä on siis tehtävä?	Huomautuksia
		käytännön oppaan luku II.2.3)
	<p>Kun saatavillasi on tiedot kaikista vaadittavista ominaisuuksista, on tarkistettava, onko aineella ihmisten terveyteen liittyviä ominaisuuksia, jotka voivat aiheuttaa ei-toivottuja vaikutuksia (kuten välitön myrkyllisyys ihon kautta). Käytännössä tämä tehdään tarkistamalla, onko aine luokiteltava ei-toivottujen ominaisuuksien osalta CLP-asetuksen mukaisesti. Jos aineesi on luokiteltava, kemikaaliturvallisuusarvioinnissa on tehtävä altistumisen arviointi ja riskinluonnehdinta.</p> <p>Kun käytetään ihmisten terveyttä koskevien tutkimusten tuloksia, sinun on myös määritettävä taso, jonka alittuessa kielteisiä vaikutuksia ei ole odotettavissa. Näitä rajoja sanotaan johdetuiksi vaikutuksettomiksi altistumistasoiksi (Derived No Effect Levels, DNEC), ja niiden johtamiseen tarvitaan edistynyttä tieteellistä asiantuntemusta.</p>	