

Идентификация химических веществ в соответствии с принципами регламента REACH

Муратова Надежда Михайловна

Начальник отдела ФГУП «ВНИЦСМВ», канд. хим. наук, ответственный секретарь ТК 60 «Химия»

Косоруков Иван Андреевич

Начальник сектора ФГУП «ВНИЦСМВ»



Вышедший в 2006 г. регламент Европейского союза REACH внес радикальные изменения в техническое регулирование химической продукции, обращаемой на территории европейских государств. В первую очередь он обязал производителей и импортеров химической продукции в Европе провести в определенном порядке регистрацию химических веществ (именно химических веществ, а не продукции), что подразумевает предоставление как общих сведений о продукции, так и большое количество информации о физико-химических, токсикологических и экотоксикологических свойствах химических веществ, которая должна быть подтверждена испытаниями.

Для выполнения данной сложной задачи регламент REACH позволил регистрантам объединяться в так называемые форумы обмена информацией о веществах с целью сбора необходимых сведений. Однако для совместной регистрации необходимо доказать, что вещество, регистрируемое данным производителем, является тем же веществом, которое регистрируют другие участники совместного предоставления данных, то есть провести идентификацию химического вещества. В данной статье будут рассмотрены основные принципы идентификации химического вещества в соответствии

с правилами системы регулирования REACH.

В первую очередь следует пояснить понятие «вещество», применяемое в системе регулирования REACH. В REACH оно определяется как «химический элемент или его соединения в естественном состоянии или полученные в процессе производства, включая добавки, необходимые для сохранения устойчивости, и примеси, обусловленные применяемой технологией, но исключая растворители, которые можно отделить от вещества, не нарушая его устойчивости и не изменяя его состава». В тексте самого регла-

Ключевые слова: регламент REACH, химическая продукция, идентификация, химическое вещество.

Основная идентифицирующая информация о веществе

№ п/п	Наименование данных
1	ИДЕНТИФИКАЦИЯ ВЕЩЕСТВА
1.1	Наименование или иной идентификатор каждого вещества
1.1.1	Наименование по общепринятой номенклатуре международного союза по теоретической и прикладной химии (IUPAC) или иное(ые) международное(ые) химическое(ие) название(я)
1.1.2	Иные наименования (обычное название, торговое название, аббревиатура)
1.1.3	Номера EINECS или ELINCS (Европейский перечень существующих коммерческих химических веществ или Европейский перечень зарегистрированных химических веществ) (если имеются или применимы)
1.1.4	Наименование CAS (реестр Химической реферативной службы Американского химического общества) и номер CAS (если имеется)
1.1.5	Другой идентификационный код (если имеется)
1.2	Информация, относящаяся к молекулярной и структурной формуле каждого вещества
1.2.1	Молекулярная и структурная формула, включая написание SMILES (спецификация упрощенного представления молекул в строке ввода) (если имеется)
1.2.2	Информация по оптической активности и типичное соотношение (стерео)изомеров (если имеется и применимо)
1.2.3	Молекулярная масса или диапазон молекулярной массы
1.3	Состав каждого вещества
1.3.1	Степень чистоты
1.3.2	Природа примесей, включая изомеры и побочные продукты
1.3.3	Процентное содержание основных примесей
1.3.4	Природа и порядок любой добавки (например, стабилизирующих агентов или ингибиторов)
1.3.5	Спектральные данные
1.3.6	Хроматографические данные
1.3.7	Описание аналитических методов или соответствующие библиографические ссылки для идентификации вещества и (где это необходимо) для идентификации примесей или добавок

мента нет подробных указаний по принципам проведения идентификации, основная информация представлена в Руководстве по идентификации и наименованию веществ в соответствии с REACH и CLP (Guidance for identification and naming of substances under REACH and CLP) (далее — Руководство по идентификации). В таблице приведена основная идентифицирующая информация о веществе, которая должна быть включена в досье, представляемое на регистрацию.

Требования, предъявляемые к идентификации вещества в системе регулирования REACH, достаточно жестки. Подход к идентификации вещества основан на том, что предоставленная информация должна быть достаточна для полной идентификации каждого вещества. Допускается, что один (или более) идентификационный

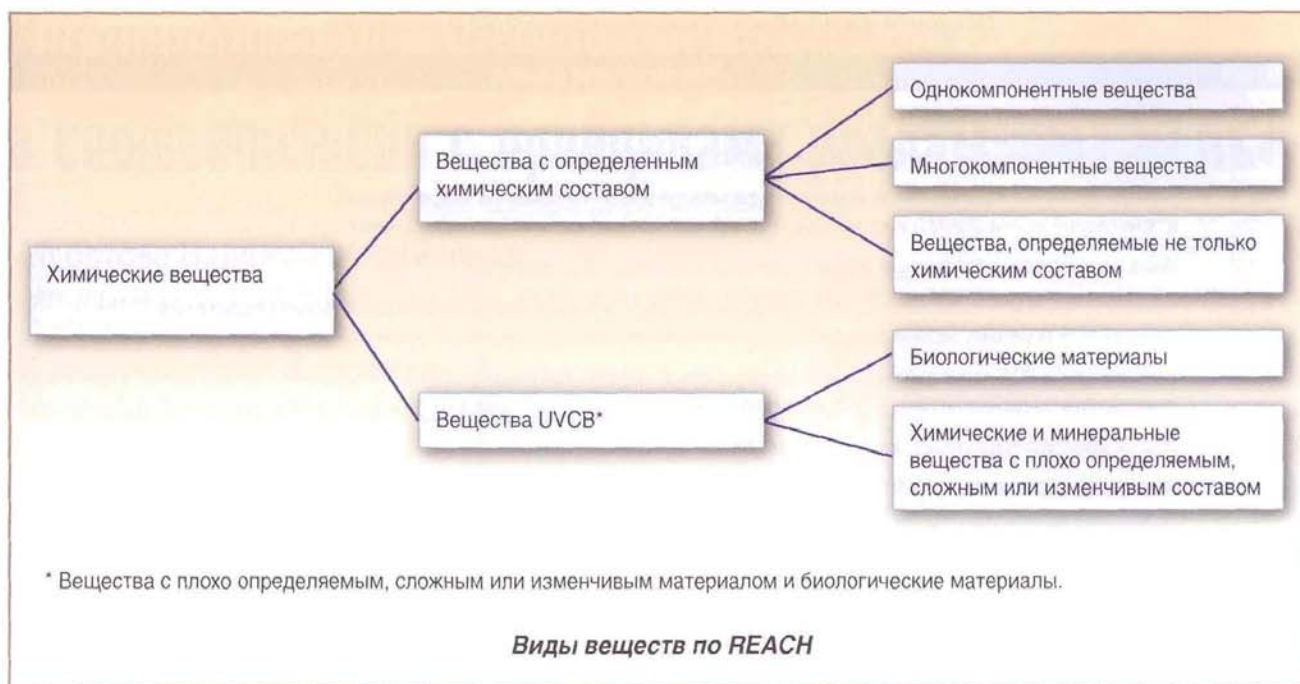
параметр может быть пропущен, если его выполнение представляется технически невозможным или предоставление информации по данному параметру считается ненужным с научной точки зрения. В таком случае причина отказа должна быть четко сформулирована и научно обоснована.

Подход к идентификации и, соответственно, набор идентификационных параметров зависят от типа вещества. В соответствии с Руководством по идентификации выделяют несколько видов веществ на основе степени сложности их химического состава (см. рисунок) и идентификаторов, требуемых для признания тождественности веществ данной группы.

В любом случае для полной информации по идентификации вещества требуется проведение аналитических исследований, ко-

торые бы выявили или подтвердили химический состав, структуру вещества и его чистоту. Так как задача идентификации заключается в том, чтобы участники форума по обмену информацией о веществе подтвердили, что работают с одним и тем же веществом, то методы, применяемые при идентификации, как правило, согласовываются между участниками форума. Тем не менее набор методов должен соответствовать требованиям, установленным в Руководстве по идентификации. Данные требования будут рассмотрены далее.

Для определения состава вещества Руководство по идентификации предлагает использовать спектральные методы, включающие инфракрасную и ультрафиолетовую спектроскопию, масс-спектроскопию и спектроскопию ядерного магнитного



резонанса. Несмотря на то что для однозначного определения вещества иногда достаточно одного спектра, рекомендовано не ограничиваться только одним спектральным методом, а использовать все возможные методы, которые могут подтвердить или дополнить полученную информацию. В некоторых сложных случаях (например, для многокомпонентных веществ) однозначное определение состава вещества по спектру невозможно. Но в данной ситуации, так как задачей является сопоставление нескольких веществ, для получения вывода об их идентичности достаточно сравнения спектров, полученных при одинаковых условиях.

Следующим шагом является определение степени чистоты вещества. Для этих целей предлагается использовать хроматографические методы — газовую хроматографию, высокоэффективную жидкостную хроматографию и др. Хроматограмма должна наглядно демонстрировать содержание заявленных компонентов химического вещества и примесей, а обработанные результаты анализа — показывать их количествен-

ное содержание. В данном случае нельзя забывать о требовании воспроизводимости результатов анализа, потому что в хроматографии конечный результат зависит от условий и параметров хроматографирования.

Использование спектральных и хроматографических методов является приоритетным для идентификации веществ в системе регулирования REACH и CLP, но нередко их использование является недостаточным. В таком случае рекомендовано использовать дополнительные методы и дополнительную информацию. Для этих целей могут быть применены любые другие подходящие методы химического количественного анализа, к примеру методы «мокрой химии». Очевидно, что лучше применять методы, стандартизированные на международном уровне, то есть описанные в стандартах ИСО (Международной организации по стандартизации) и СЕН (Европейского комитета по стандартизации). В случае использования методов, не нашедших отражения в международных стандартах, необходимо предоставить информацию, достаточ-

ную для воспроизведения использованных методик.

В более сложных случаях, когда определение химического состава оказывается недостаточным, на помощь могут прийти другие методы, предназначенные для определения структуры вещества, к примеру методы, с помощью которых возможно идентифицировать специфические геометрические или оптические изомеры или морфологию кристаллических веществ.

Для определенных веществ, в частности UVCB, помимо данных о химическом составе и структуре вещества, предназначенных для идентификации, требуется дополнительная информация. К ней относится информация о сырье, процессе производства, методе очистки, биологических видах происхождения и частях используемого организма.

В соответствии с вышеперечисленными принципами регистранты собирают информацию о веществе, являющуюся основной частью мини-досье или регистрационного досье члена совместной подачи данных, на основе которого и проводится регистрация в соответствии с правилами REACH.