



Reach 31 mai 2018 :
Comment répondre au besoin
d'identification des substances ?



La définition

- « **Substance** » : un **élément chimique et ses composés** à l'état naturel ou obtenus par un processus de fabrication, y compris **tout additif nécessaire pour en préserver la stabilité** et toute **impureté** résultant du processus mis en œuvre, mais **à l'exclusion de tout solvant** qui peut être séparé sans affecter la stabilité de la substance ou modifier sa composition
- Un **mélange** est constitué de plusieurs substances

Les objectifs de l'identification de la substance (*Sameness*)

- OSOR
- Va faciliter le partage de données et la soumission conjointe
- S'assurer que les membres du SIEF enregistrent tous la même substance
- Dans le cas d'une *inquiry* (demande préalable d'information), permettre à l'ECHA la mise en relation entre le déclarant et des détenteurs de données
- Il incombe au déclarant d'identifier une substance de la façon la plus appropriée

Identification des substances

- Enquête dans le SIEF afin de définir le profil de la substance (SIP – *substance identification profile*)
- Chaque déclarant décrit **SA substance** (article 11.1)
 - Composition
 - Procédé de fabrication
 - Analyses
- Critères de l'annexe VI, section 2

Annexe VI

- *Pour chaque substance, les informations données dans cette section doivent être suffisantes pour en permettre l'identification. S'il n'est pas techniquement possible ou s'il ne semble pas nécessaire, du point de vue scientifique, de fournir des informations sur l'un ou plusieurs des points énumérés ci-après, il y a lieu d'en indiquer clairement les raisons.*

Annexe VI

2.1. Nom ou autre identificateur de chaque substance

2.1.1.	<i>Nom(s) dans la nomenclature IUPAC ou autres noms chimiques internationaux</i>
2.1.2.	<i>Autres noms (nom usuel, marque commerciale, abréviation)</i>
2.1.3.	<i>Numéro EINECS ou ELINCS (s'il est disponible et pertinent)</i>
2.1.4.	<i>Nom CAS et numéro CAS (s'ils sont disponibles)</i>
2.1.5.	<i>Autre code d'identité (s'il est disponible)</i>

2.2. Informations relatives à la formule moléculaire et structurelle de chaque substance

2.2.1.	<i>Formule moléculaire et structurelle (y compris la notation Smiles, si elle est disponible)</i>
2.2.2.	<i>Informations sur l'activité optique et ratio habituel des (stéréo-)isomères (si elles sont disponibles et pertinentes)</i>
2.2.3.	<i>Poids moléculaire ou intervalle de poids moléculaire</i>

Annexe VI

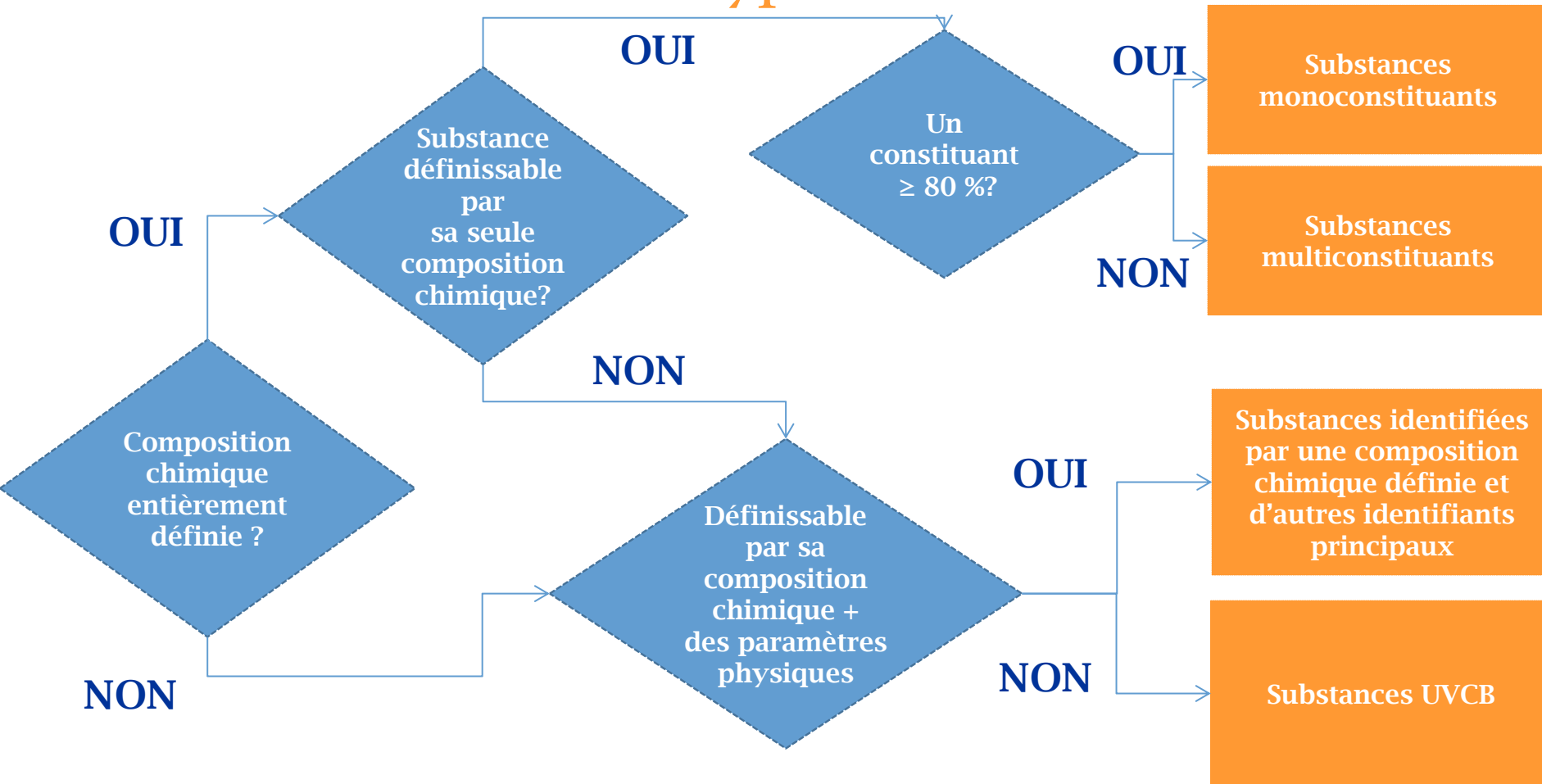
2.3. Composition de chaque substance

- | | |
|--------|---|
| 2.3.1. | <i>Pureté en pourcentage (%)</i> |
| 2.3.2. | <i>Nature des impuretés, y compris les isomères et les sous-produits</i> |
| 2.3.3. | <i>Pourcentage des principales impuretés (significatives)</i> |
| 2.3.4. | <i>Nature et ordre de grandeur (... ppm, ...%) des additifs éventuels (agents stabilisateurs ou inhibiteurs, par exemple)</i> |

Analyses

- | | |
|--------|---|
| 2.3.5. | <i>Données spectrales (ultraviolet, infrarouge, résonance magnétique nucléaire ou spectre de masse)</i> |
| 2.3.6. | <i>Chromatographie liquide à haute pression, chromatographie en phase gazeuse</i> |
| 2.3.7. | <i>Description des méthodes d'analyse ou références bibliographiques appropriées permettant d'identifier la substance et, le cas échéant, les impuretés et les additifs. Ces informations doivent être suffisantes pour que les méthodes puissent être reproduites.</i> |

Les différents types de substances



Substances bien définies

- Monoconstituants
- Multiconstituants

Généralités

- Constituant
 - Part significative de la substance
 - Contribue à son nom
- Impureté, n'est pas ajoutée intentionnellement
 - Toutes les impuretés $\geq 1\%$ doivent être identifiées et quantifiées
 - Toutes les impuretés importantes pour la classification et/ou l'évaluation PBT *
- Additif
 - Ajouté intentionnellement pour stabiliser la substance
 - Contribue à la composition de la substance
 - Pris en compte dans le bilan massique

* PBT : persistants, bioaccumulables et toxiques

Les substances monoconstituants

- En général un constituant principal à plus de 80% m/m
- Le nom est donné par le constituant principal
 - Règles IUPAC
 - En anglais
 - D'autres informations en complément
- Pour tous les déclarants
 - Mêmes identifiants : nom IUPAC, CAS, EINECS, ou autres disponibles et pertinents...
 - Même formule brute et développée

Les substances monoconstituants

- Doivent être fournis pour chaque élément de la composition :
 - La concentration usuelle
 - Les limites supérieure et inférieure de l'intervalle de concentration
 - Les intervalles peuvent bien sûr varier d'un déclarant à l'autre
- La composition est connue et complétée à 100 %
- D'autres caractéristiques peuvent être nécessaires pour définir la substance (morphologie cristalline...)

Les substances multiconstituants

- Plusieurs constituants $\geq 10\%$ mais $< 80\%$
- Identiques pour chaque déclarant
- Chaque constituant identifié
 - Nom IUPAC, CAS, EINECS, autres disponibles et pertinents...
 - Concentration usuelle, limites supérieure et inférieure de l'intervalle de concentration, propres à chaque déclarant

Quelques cas limites

- Il est admis de s'écarter des règles données à condition de pouvoir fournir une justification plausible

Consti-tuant principal	Teneur maximale (%)	Teneur habituelle (%)	Teneur minimale (%)	Impureté	Teneur maximale (%)	Teneur habituelle (%)	Teneur minimale (%)	Identité de la substance
o-xylène	90	85	65	m-xylène	35	15	10	o-xylène
o-xylène	90	85	65	p-xylène	5	4	1	o-xylène
m-xylène	35	15	10					

- Compte tenu des intervalles de concentration du constituant principal et de l'impureté, la substance peut être considérée comme :
 - Substance multiconstituant comprenant deux constituants principaux, l'o-xylène et le m-xylène,
 - Substance monoconstituant en considérant que l'o-xylène est en général présent à plus de 80%.

Règles générales de désignation

- **Substances monoconstituants** : désignées d'après le constituant principal
 - Nom IUPAC
 - D'autres dénominations reconnues internationalement
- **Substances multiconstituants** : masse de réaction des constituants principaux
 - Constituants répertoriés dans l'ordre alphabétique
 - Séparés par «et»

Cas particuliers

- Cas général : « reaction mass of... » en précisant tous les constituants au-delà de 10%
- Dans le cas d'un mélange de stéréoisomères
 - Si tous les isomères sont présents à plus de 10%, un nom générique est possible
 - Sinon : « reaction mass of isomer 1, isomer 2... »

Données analytiques

- Méthodes spectroscopiques :
 - UV-visible (150 à 800 nm)
 - Infrarouge (400 à 4000 cm^{-1})
 - Résonance magnétique nucléaire ^1H (0 à 15 ppm)
 - Si nécessaire : spectrométrie de masse, diffraction rayons X, fluorescence X ou spectroscopie d'absorption atomique (AAS)
- Méthodes chromatographiques pour confirmer la composition de la substance :
 - Chromatographie en phase gazeuse
 - Chromatographie en phase liquide à haute pression
- Quantification directe
- Les méthodes doivent pouvoir être reproduites

Définition d'un UVCB

*(Unknown or Variable composition,
Complex reaction products or Biological
materials)*

Substances de composition inconnue
ou variable, produits de réaction
complexes ou matériels biologiques

UVCB

- Une substance est décrite comme un UVCB quand :
 - Le nombre de constituants est relativement élevé et/ou
 - La composition est, pour une part importante, inconnue et/ou
 - La variabilité de la composition est relativement élevée ou difficilement prévisible
- Les constituants connus $\geq 10\%$: nom IUPAC, CAS
- Constituants importants pour la classification et/ou évaluation PBT : nom IUPAC, CAS
- Attention à l'utilisation de numéros/noms EINECS ou CAS trop génériques

Classes d'UVCB

- *UVCB de sous-type 1*, lorsque la source est biologique et que le processus est une synthèse. La matière biologique est modifiée au moyen d'un processus (bio)chimique générant de nouveaux constituants;
- *UVCB de sous-type 2*, lorsque la source est chimique ou minérale et que de nouvelles molécules sont synthétisées au moyen de réactions (bio)chimiques;
- *UVCB de sous-type 3*, lorsque la source est biologique et le processus un affinement et que de nouvelles molécules sont intentionnellement créées;
- *UVCB de sous-type 4*, lorsque la source est chimique ou minérale et que le processus un affinement, sans réactions chimiques intentionnelles.

Règles générales de désignation

- **Substances UVCB :**
 - La source et le procédé
 - Le nom de l'espèce (genre, espèce, famille) ou la matière d'origine (nom IUPAC) doit être utilisé selon que la source est biologique ou non.
 - Le procédé est identifié soit par le type de réaction chimique soit par le type de procédé de purification, soit en tant que résidu
- D'autres paramètres pertinents : description de la composition chimique, une empreinte chromatographique ou autre, un document de référence (ISO...), des paramètres physicochimiques, numéro du Colour index, numéro AISE...

Données analytiques

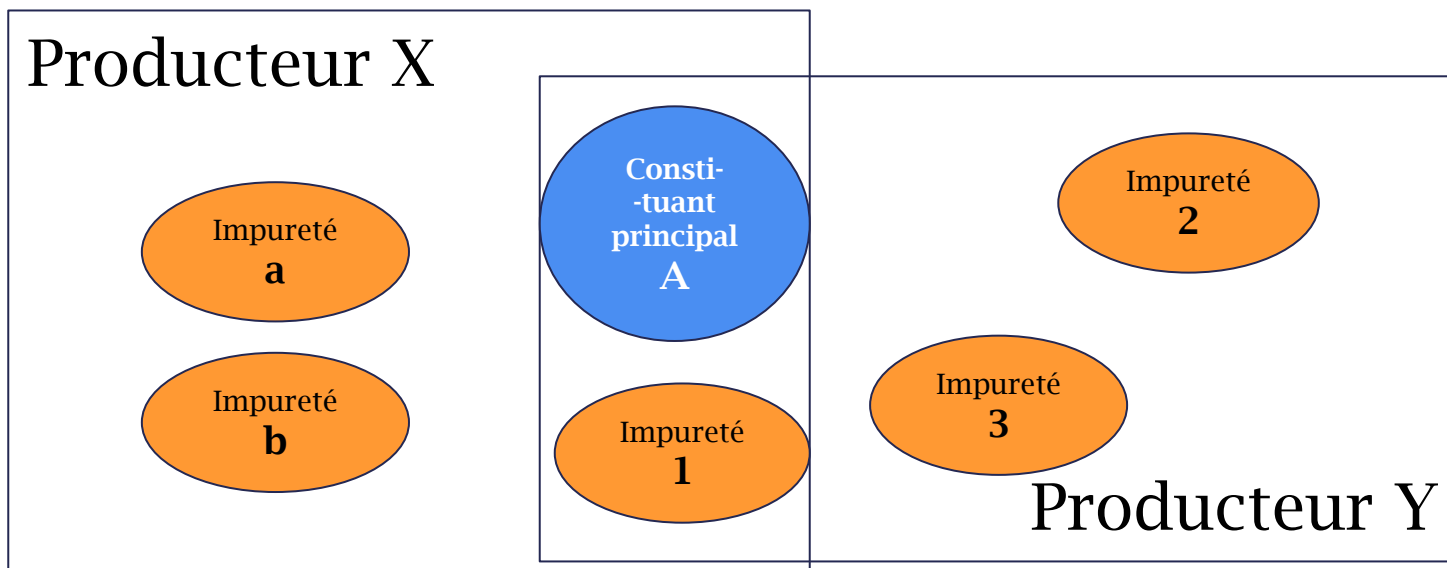
- Les données spectrales permettent d'établir la présence ou l'absence de groupe de constituants
- D'autres techniques non listées à l'annexe VI section 2 peuvent être utilisées et les résultats inclus s'ils permettent de donner plus d'informations



- Si les analyses de l'annexe VI ne sont pas faites une justification technique ou scientifique doit être donnée

Principes de la sameness

Cadre de la sameness



- Lorsque les profils d'impuretés diffèrent d'une voie de production à l'autre, un avis d'expert peut être nécessaire

Quelques cas particuliers

- Sont considérés comme identiques :
 - les hydrates et les formes anhydres
- Sont considérés comme différents :
 - Les acides ou bases et leurs sels
 - Les différents sels (sodique, potassique...)
 - Les substances contenant des groupes alkyle sans autres indications couvrent uniquement les chaînes linéaires non ramifiées
- Une substance UVCB présentant une distribution étroite de ses constituants n'est pas considérée comme équivalente à une substance UVCB ayant une composition plus large, et inversement.

Identification des substances au sein des SIEF

- Le déclarant principal ou la SIEF Leadership team propose un profil d'identification de la substance
- Accord des membres du SIEF
- Ou désaccord (identifiants pas assez spécifiques...) : création d'un 2ème SIEF
- En cas d'erreur lors du pré-enregistrement il est possible de rejoindre un autre SIEF (fonction « similar substance » de REACH-IT)

Liens utiles

- Guide sur l'identification et la désignation de substances dans REACH et du CLP

<https://echa.europa.eu/fr/guidance-documents/guidance-on-reach>



Merci de votre attention

Session questions/réponses



Note

- Les informations figurant dans ce diaporama sont données de bonne foi et reflètent l'état de notre compréhension actuelle du règlement (CE) 1907/2006 ; ces informations ne doivent pas être considérées comme exhaustives et devront être adaptées à chaque cas particulier. Seul le texte du règlement REACH fait foi.
- Le contenu présenté n'est pas opposable aux autorités publiques