

Diciembre de 2017

## Cómo decidir si una sustancia química es un polímero o no y cómo proceder al registro pertinente

### Contenido

<b>1. Introducción</b> .....	<b>2</b>
<b>2. Identificación de la sustancia: polímero o no</b> .....	<b>4</b>
2.1. Introducción: fabricación de un (posible) polímero .....	4
2.2. ¿Qué es un polímero? .....	5
2.3. Ejemplo de la aplicación de la definición de polímero .....	6
2.4. Consecuencias para el registro.....	8
2.5. Métodos analíticos.....	8
<b>3. Recopilación de información sobre propiedades fisicoquímicas, medio ambientales y de la salud humana</b> .....	<b>11</b>
3.1. Programa de recopilación de información sobre propiedades fisicoquímicas .....	11
3.2. Programa de recopilación de información sobre propiedades medio ambientales .....	15
3.3. Programa de recopilación de información sobre propiedades referidas a la salud humana .....	18

### Lista de figuras

Figura 1: Diagrama de flujo sobre los pasos que se deben seguir para recopilar datos en función de si la sustancia es polimérica o no .....	3
Figura 2: Ejemplo de una estructura química simple con unidades que se repiten.....	4
Figura 3: Ejemplo de estructuras químicas entrelazadas con unidades que se repiten. ....	4
Figura 4: Ejemplos de estructuras más complejas con varios monómeros y, posiblemente, estructuras entrelazadas. ....	5

### Lista de tablas

Tabla 1: Demostración de la definición de polímero, según la composición.....	7
Tabla 2: Ejemplo de un análisis utilizado para determinar si una sustancia que se obtiene de una reacción de polimerización es un polímero o no .....	9
Tabla 3: Recopilación de información sobre (algunas) propiedades fisicoquímicas .....	11
Tabla 4: Recopilación de información sobre (algunas) propiedades medio ambientales.....	15
Tabla 5: Recopilación de información sobre (algunas) propiedades referidas a la salud humana .....	18

Diciembre de 2017

## 1. Introducción

Con este ejemplo se describe parte de la recopilación de información de una sustancia química que consta de varias unidades repetitivas. Por este motivo, es importante saber si se trata de un polímero o no. La sustancia es una sustancia orgánica líquida obtenida de una reacción química. Las sustancias que se utilizan como materiales de partida reaccionan de manera que una o más unidades quedan enlazadas (mediante enlaces covalentes).

La empresa que quiere registrar la sustancia química la produce en un volumen de más de diez toneladas por año. Por eso, cobran relevancia los requisitos de información de los Anexos VII y VIII de REACH (Registro, evaluación, autorización y restricción de las sustancias y preparados químicos), así como la obligación de realizar una valoración de la seguridad química y de presentar un informe sobre la seguridad química como parte del expediente de registro. **NOTA:** Los requisitos de información para un polímero no dependen del volumen anual de este, sino del volumen anual de los monómeros y otros reactivos utilizados para fabricar dicho polímero.

Esto quedará ilustrado mediante el siguiente ejemplo:

- ¿Cómo se determina si una sustancia química es polimérica o no?
- En caso de no ser polimérica, deberá registrarla como tal (ya sea una sustancia monoconstituyente, multiconstituyente o UVCB)
- ¿Cuáles son las consecuencias para la recopilación de datos según las opciones descritas anteriormente?

En el ejemplo, se dan una serie de situaciones en las que la información existente conduce a diferentes itinerarios para una nueva recopilación de datos. No todos los itinerarios se describirán en su totalidad. En algunos casos, solo se ofrecerá una descripción limitada de los siguientes pasos. En este ejemplo se ofrecen problemas pertinentes.

Todos los documentos de orientación a los que se hace referencia en este documento pueden encontrarse en una página web de la ECHA destinada a tal fin<sup>1</sup>.

Se proporciona más información en los capítulos I y II de la Guía práctica para responsables de pymes y coordinadores de REACH. Cómo cumplir los requisitos de información para toneladas de 1 a 10 y de 10 a 100 toneladas por año<sup>2</sup> (denominada como Guía Práctica para pymes sobre requisitos de información).

Los diagramas de flujo de este ejemplo se ilustran en Figura 1.

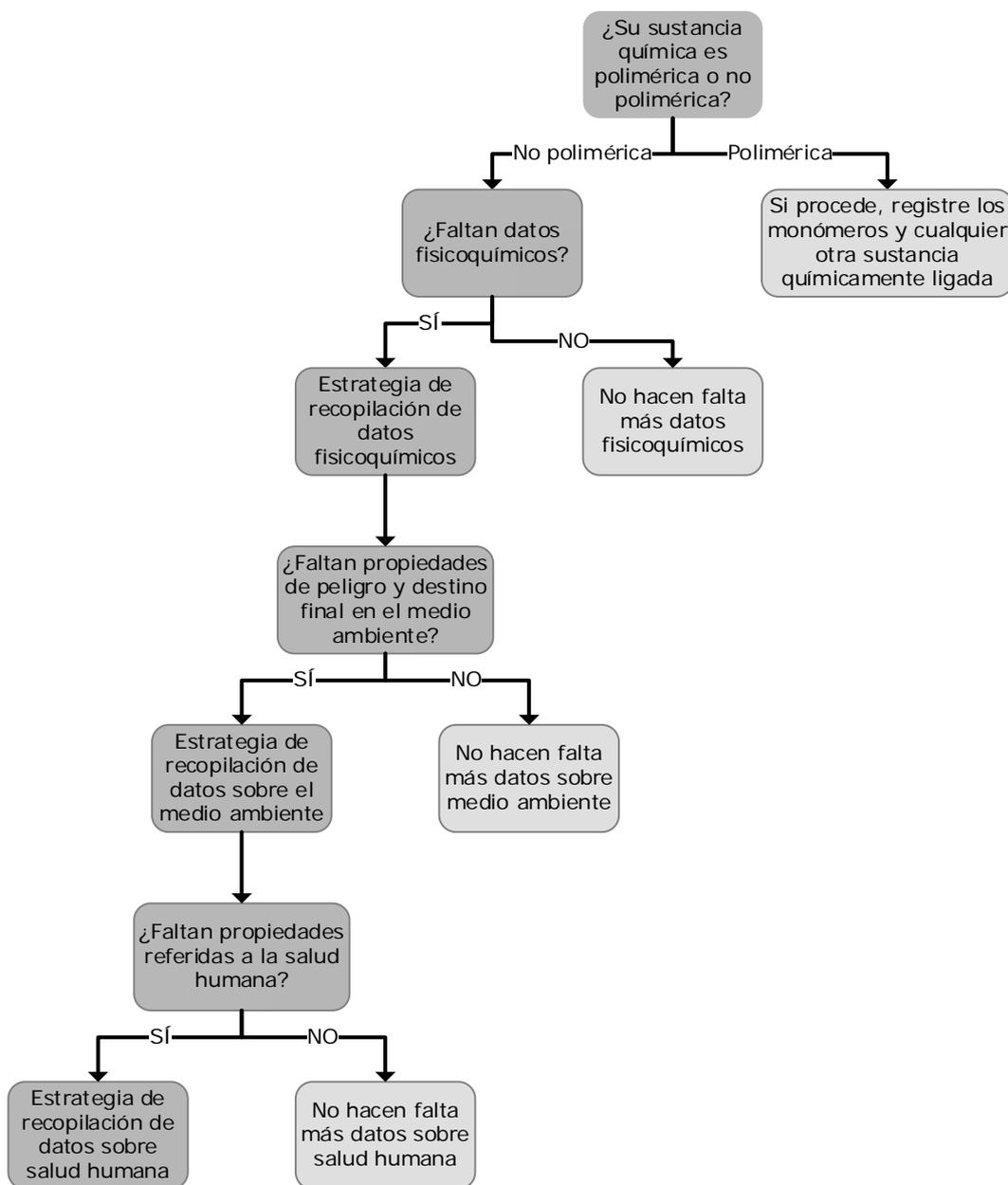
---

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

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

Diciembre de 2017

**Figura 1: Diagrama de flujo sobre los pasos que se deben seguir para recopilar datos en función de si la sustancia es polimérica o no**



Si la sustancia resultara ser un polímero, los pasos para la recopilación de datos sobre las unidades monoméricas y los reactantes (químicamente ligados), serán los mismos que en caso de no serlo.

Diciembre de 2017

## 2. Identificación de la sustancia: polímero o no

### 2.1. Introducción: fabricación de un (posible) polímero

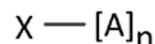
Usted fabrica una sustancia química en una solución a la que añade varias sustancias (reactantes) que reaccionan entre sí, de manera que quedan enlazadas varias unidades moleculares. Se supone que los reactantes se añaden en cantidades que, una vez finalizada la reacción, los originales quedarán presentes solo en cantidades pequeñas (<1 %).

Suponga que comienza con un reactante X y un monómero A y en el proceso de fabricación, X y A reaccionan entre sí en presencia de un catalizador. El monómero A solo puede experimentar una reacción consigo mismo con el fin de formar unidades repetitivas. Las conexiones entre las unidades reactantes y las monoméricas reciben el nombre de enlaces covalentes. X se consume en la reacción, pero una de sus unidades X permanece al final de la cadena de unidades A. Ahora, las unidades A quedan enlazadas entre sí (mediante enlaces covalentes) y, en sentido estricto, ya no son unidades A, sino unidades modificadas hacia A, ya que cuentan con un enlace a otra molécula A o X que no tenían antes. (Para simplificarlo, A y X se utilizan en el texto y en las figuras).

La reacción concluye cuando todas las sustancias de partida se han consumido (han reaccionado totalmente), todavía están presentes en cantidades pequeñas (<1 %) o la polimerización se detiene. El catalizador debe eliminarse, por ejemplo, mediante filtración.

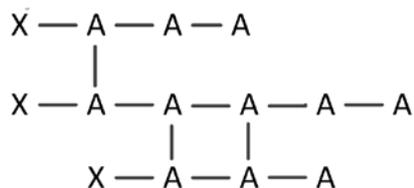
La sustancia resultante podría ser: X-A-A o X-A-A-A-A hasta numerosas A, a menudo abreviada como X-[A]<sub>n</sub>, en la que n hace referencia al número de unidades, como se ilustra en Figura 2.

**Figura 2: Ejemplo de una estructura química simple con unidades que se repiten.**



La fórmula no tiene que ser lineal, las cadenas de X-[A]<sub>n</sub> también pueden unirse (entrelazarse) a otras cadenas X-[A]<sub>n</sub>, como se muestra en Figura 3.

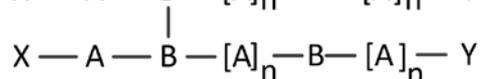
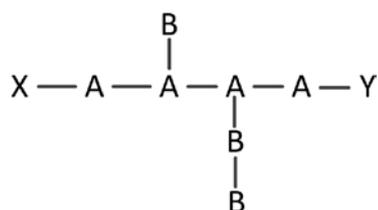
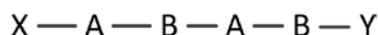
**Figura 3: Ejemplo de estructuras químicas entrelazadas con unidades que se repiten.**



En otros casos, puede que haya más de un reactante involucrado en la reacción: por ejemplo, X e Y reaccionan con monómeros A y B. Esto resultaría en una o varias sustancias con la composición de, por ejemplo, X-A-B-A-B-Y (lineal o bifurcada), en estructuras químicas entrelazadas de X-A-B-[A-B]<sub>n</sub>-Y, o en estructuras químicas más complejas con números diferentes de unidades que se repiten, como se muestra con 'n' y 'm' en la figura 4.

Diciembre de 2017

**Figura 4: Ejemplos de estructuras más complejas con varios monómeros y, posiblemente, estructuras entrelazadas.**



Aunque sepa que esta reacción ocurre, no conoce con exactitud cuántas unidades monoméricas A están enlazadas entre sí ni, por lo tanto, la longitud habitual de la cadena. Lo que determina si una sustancia es o no un polímero de acuerdo con REACH es la información sobre números de unidades enlazadas que se repiten y la respectiva concentración de cada constituyente con su número de unidades repetitivas.

## 2.2. ¿Qué es un polímero?

A pesar de que las cadenas descritas en las figuras 2-4 parecen polímeros, usted tendría que comprobar si en realidad pueden definirse como tal. La definición de polímero se cita en el siguiente cuadro y se explica en profundidad en el Documento de orientación sobre monómeros y polímeros.

En los ejemplos descritos en las figuras 2-4, la sustancia constaría de unidades monoméricas «A» o «B» y tendría que determinar la cantidad de ellas que se enlazan entre sí y la distribución del peso molecular.

Diciembre de 2017



### Definición de polímero

Un polímero es una sustancia constituida por moléculas caracterizadas por la secuencia de uno o varios tipos de unidades monoméricas. Estas moléculas deben distribuirse sobre un margen de pesos moleculares. Las diferencias en el peso molecular pueden atribuirse principalmente a las diferencias en el número de unidades monoméricas.

De acuerdo con el Reglamento REACH (artículo 3, apartado 5), un polímero se define como una sustancia que cumple los siguientes criterios:

- Más del 50 % del peso de esa sustancia consta de moléculas de polímero (consulte la siguiente definición); y,
- la cantidad de moléculas de polímero del mismo peso molecular debe ser inferior al 50 % del peso de la sustancia.

En el contexto de esta definición:

Una «**molécula de polímero**» es una molécula que contiene una secuencia de al menos tres unidades monoméricas ligadas covalentemente a otra unidad monomérica u otro reactante, como mínimo.

Una «**unidad monomérica**» es la forma reactada de una sustancia monomérica en un polímero (para la identificación de las unidades monoméricas en la estructura química del polímero, puede tenerse en cuenta, por ejemplo, el mecanismo de la formación de polímeros).

Una «**secuencia**» es una cadena continua de unidades monoméricas dentro de la molécula con enlaces covalentes con otra y que solo interrumpen las unidades monoméricas. Es posible que esta cadena continua de unidades monoméricas se adapte a cualquier red dentro de la estructura polimérica.

«**Otro reactante**» se refiere a una molécula que puede vincularse a una o más secuencias de unidades monoméricas, pero que no puede considerarse un monómero bajo las condiciones de reacción pertinentes utilizadas para el proceso de formación de polímeros.

## 2.3. Ejemplo de la aplicación de la definición de polímero

Tabla 1 ejemplifica la definición de polímero: se proponen varias descripciones según el método de fabricación que se describe en la sección 2.1.

Diciembre de 2017

**Tabla 1: Demostración de la definición de polímero, según la composición**

Tabla 1		
Información	Pregunta	Resultado
Su sustancia consta de X ligada a una secuencia de unidades moleculares A repetitivas acopladas, suspendidas en una solución.	¿Podría ser su sustancia química un polímero?	Sí, si las moléculas que conforman la composición química de la sustancia constan de unidades repetitivas de A y se ajustan a la definición de polímero.  Nota: Se supone que puede eliminarse el disolvente sin cambiar la composición química de la molécula.
<i>Composición (ejemplo 1)</i> La solución contiene fracciones (en peso) con las siguientes secuencias: 5 % X-A 20 % X-A-A, 40 % X-A-A-A, (n = 3, puede abreviarse como X-[A] <sub>3</sub> ) 20 % X-[A] <sub>4</sub> , 10 % X-[A] <sub>5</sub> - y 5 % X-[A] <sub>6</sub>	¿Cuál de estas fracciones puede considerarse como una molécula de polímero y cuál es el total de estas fracciones poliméricas?	Las fracciones X-A y X-A-A no son poliméricas, pero X-A-A-A y superiores sí lo son, ya que contienen como mínimo tres unidades acopladas a una cuarta. Por consiguiente, los porcentajes poliméricos conforman 40 + 20 + 10 + 5 = 75 %. → la sustancia es un polímero
<i>Composición (ejemplo 2)</i> La solución contiene fracciones (en peso) con las siguientes secuencias: 20 % X-A 35 % X-A-A 15 % X-A-A-A, (n = 3, puede abreviarse como X-[A] <sub>3</sub> ) 15 % X-[A] <sub>4</sub> 10 % X-[A] <sub>5</sub> - y 5 % X-[A] <sub>6</sub>	¿Cuál de estas fracciones puede considerarse como una molécula de polímero y cuál es el total de estas fracciones poliméricas?	Las fracciones X-A y X-A-A no son poliméricas, pero X-A-A-A y superiores sí lo son, ya que contienen como mínimo tres unidades acopladas a una cuarta. Por consiguiente, las fracciones poliméricas conforman 15 + 15 + 10 + 5 = 45 %. → la sustancia química <b>no</b> es un polímero  Nota: Este tipo de sustancia recibe el nombre normalmente de oligómero.
	Si la sustancia química <b>no</b> es un polímero, ¿es una sustancia monoconstituyente, multiconstituyente o UVCB?	Como ninguna fracción se corresponde con el 80 % o mayor, la sustancia es monoconstituyente. Si las cantidades de las fracciones varían, la sustancia es UVCB; mientras que, si son fijas, la sustancia puede ser multiconstituyente (consulte: Documento de orientación para monómeros y polímeros)

Diciembre de 2017

**Explicación de oligómero**

Un oligómero hace referencia a unidades monoméricas en las que el número de unidades de una cadena es reducido, por ejemplo: consta normalmente de dos o tres unidades enlazadas entre sí y ocasionalmente contiene, a su vez, pequeñas cantidades de otras cuatro o cinco unidades enlazadas entre sí.

Se incluye una serie de sustancias oligoméricas en la «[Lista de ex-polímeros](#)». Compruebe si alguno de ellos se corresponde con una sustancia que usted fabrica o importa. Después, visite la página web de la Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas y compruebe si su sustancia ya está registrada.

Es esencial que especifique la distribución del peso molecular de su sustancia en cuanto a unidades monoméricas para poder caracterizarla. El método preferido para definir el «peso molecular promedio» y el «peso molecular» recibe el nombre de «cromatografía por permeación sobre gel» (CPG), y se detalla en la [directriz 118 de la OCDE para la realización de pruebas \(OECD TG 118\)](#). Necesitará tener acceso a un laboratorio con experiencia en esta metodología para llevar a cabo la prueba. Si no es posible realizar una CPG, la OECD TG 118 aporta referencias sobre otros métodos.

## 2.4. Consecuencias para el registro

Si su sustancia resulta ser un polímero, estará exento del registro. Sin embargo, los monómeros (representados como A o B) y los reactantes (representados como X e Y) tendrán que registrarse como inscripciones por separado, a menos que la cantidad de cada uno utilizada en la fabricación del polímero sea menor a una tonelada por año o que ya estén registrados «por encima en la cadena de suministro». Para más información, consulte el Documento de orientación para monómeros y polímeros.

Si su sustancia no es un polímero, tendrá que registrarla como no polímero (como cualquier otra sustancia). Entonces, la pregunta crucial que tiene que responder es: «¿es una sustancia monoconstituyente, multiconstituyente o UVCB?»

Tabla 2 describe ciertos resultados analíticos y las repercusiones de su registro de acuerdo con el Reglamento REACH. Para más información acerca de cómo decidir entre una sustancia monoconstituyente, multiconstituyente o UVCB, consulte el Documento de orientación para la identificación y denominación de las sustancias en REACH y CLP.

## 2.5. Métodos analíticos

La tabla 2 ilustra algunos supuestos sobre cómo analizar y determinar si su sustancia es un polímero o no. El método que se suele elegir es la cromatografía por permeación sobre gel (CPG) para sustancias con un peso molecular mayor. Sin embargo, para sustancias con menor peso molecular, la cromatografía de gases (CG) o la cromatografía líquida de alta resolución (CLAR) pueden proporcionar suficiente información para decidir si su sustancia es un polímero o no. A continuación, se presentan algunos métodos pertinentes para la identificación de sustancias requerida para el registro de cualquier sustancia orgánica.

Diciembre de 2017

**Tabla 2: Ejemplo de un análisis utilizado para determinar si una sustancia que se obtiene de una reacción de polimerización es un polímero o no**

Método analítico	Resultados	Conclusiones y pasos siguientes
<i>Supuesto 1</i>		
CPG, CG o cromatografía líquida de alta resolución llevadas a cabo en una sustancia X-[A] <sub>n</sub>	Presencia de más del 50 % de las moléculas de polímero y ninguna de ellas con el mismo peso molecular, superior al 50 %  Los picos en el cromatograma pueden relacionarse con los constituyentes que contienen un número diferente de unidades A repetitivas, con un reactante X acoplado.	<p><b>La sustancia es un polímero.</b></p> <p>Se requiere el registro de A y X en su cadena de suministro.</p> <p>Para el monómero (A) y el reactante (X) presentes (enlazados covalentemente) en el polímero, tendrá que (i) incorporarse a un registro existente o (ii) registrarse usted mismo en caso de estar fabricándolo o importándolo a la UE.</p> <p>Se le recomienda que repita el análisis mediante CPG u otro análisis de confirmación para cubrir la variación en el proceso de producción.</p>
<i>Supuesto 2</i>		
CPG, CG o cromatografía líquida de alta resolución llevadas a cabo en una sustancia X-[A] <sub>n</sub> -[B] <sub>m</sub> -Y	Presencia de menos del 50 % de moléculas de polímero.  Los resultados muestran que la sustancia contiene constituyentes con unidades repetitivas del 1 al 4 de A y B, reaccionando con reactantes X e Y	<p><b>La sustancia probablemente no sea un polímero</b>, sino una sustancia de diferentes oligómeros (varias unidades monoméricas enlazadas entre sí).</p> <p>Se recomienda un análisis repetido de lotes diferentes y, si se aprecia una gran variación entre los lotes, su sustancia no es un polímero y tendrá que registrarse como no polímero.</p>
Repita el análisis llevado a cabo en la sustancia X-[A] <sub>n</sub> -[B] <sub>m</sub> -Y	Confirme si existe una gran variación entre los lotes desde el punto de vista de las concentraciones de los diferentes constituyentes que haya y, también, si la sustancia consta de constituyentes con un número distinto de unidades repetitivas.	<p><b>La sustancia definitivamente no es un polímero.</b></p> <p>Se requiere el registro de la sustancia como no polímero.</p>
<i>Supuesto 3</i>		

Diciembre de 2017

<b>Tabla 2</b>		
<b>Método analítico</b>	<b>Resultados</b>	<b>Conclusiones y pasos siguientes</b>
Múltiples pruebas CPG, CG o cromatografía líquida de alta resolución llevadas a cabo en una sustancia X-[A] <sub>n</sub>	Presencia de menos del 50 % de moléculas de polímero. Los resultados muestran una distribución clara e invariable de dos constituyentes: 60 % con la unidad n = 1 y 40 % con las unidades n = 2.	<p><b>La sustancia química</b> consta de oligómeros específicos y, por tanto, <b>parece ser una sustancia multiconstituyente</b>.</p> <p>Se necesita una confirmación de las estructuras (consulte la primera fila de esta tabla).</p> <p>Se requiere el registro de la sustancia como no polímero.</p>

**Aplicable a todos los supuestos anteriores**

En principio, siempre necesita confirmar la estructura de la sustancia que tiene que registrar (y la presencia de otros constituyentes) mediante una espectroscopia ultravioleta (UV), una espectroscopia infrarroja (IR), una espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN) o una espectrometría de masas (EM) y una cuantificación de constituyentes mediante una cromatografía de gases (CG) o una cromatografía líquida de alta resolución (CLAR) y una determinación de la distribución del peso molecular. Necesitará una cromatografía por permeación sobre gel (CPG) para pesos moleculares mayores. Consulte a un especialista en pruebas de polímeros para recibir asesoramiento sobre la mejor estrategia que puede utilizar.

Como se indica anteriormente, los resultados de CPG, CG o cromatografía líquida de alta resolución tienen que estar relacionados con las estructuras esperadas o confirmadas, que pueden contribuir a la hora de determinar las unidades repetitivas.

Por ejemplo, si su sustancia consta de cuatro constituyentes con una distribución de pesos moleculares diferente, tiene que haber cuatro picos en el cromatograma, que tienen que corresponderse con los pesos moleculares que se esperan. También se requiere la confirmación de la identidad de la sustancia por medio de otros métodos analíticos.

Incluso si su sustancia es una UVCB, tiene que tratar por todos los medios de identificar la estructura de cada constituyente presente en una proporción del 10 % o más de la sustancia como se fabricó. También tendrá que identificar y documentar cualquier constituyente presente, en caso de que sean pertinentes para la clasificación o valoración PBT<sup>3</sup> de su sustancia, independientemente de sus concentraciones. Si se prueba que es técnicamente imposible, tendrá que documentarlo y presentar un fundamento científico en el expediente de registro. Los constituyentes desconocidos deben identificarse en la medida de lo posible mediante una descripción genérica de su naturaleza química. La prueba y evaluación de su sustancia, ya sea un polímero u otra, precisa de una experiencia científica avanzada.

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

Diciembre de 2017

### 3. Recopilación de información sobre propiedades fisicoquímicas, medio ambientales y de la salud humana

Supongamos que su sustancia es un oligómero, es decir, una sustancia con varias unidades monoméricas enlazadas entre sí (mediante enlaces covalentes), que no cumple los requisitos de un polímero (supuesto 3 de la tabla 2 anterior), y que usted necesita recopilar información sobre propiedades fisicoquímicas, medio ambientales y de la salud humana.

Imaginemos también que usted fabrica o importa entre 10 y 100 toneladas por año. De ahí, que tenga que cumplir con los requisitos de información de los Anexos VII y VIII del Reglamento REACH.

#### 3.1. Programa de recopilación de información sobre propiedades fisicoquímicas

**Tabla 3: Recopilación de información sobre (algunas) propiedades fisicoquímicas**

Tabla 3		
Qué sabe	Acciones que debe realizar	Observaciones
Deberá registrar la sustancia oligomérica	Recopilar información interna, por ejemplo, en el departamento técnico	La información interna siempre es un buen punto de partida
<i>Supuesto 1: Toda la información fisicoquímica está disponible</i>		



Para las propiedades fisicoquímicas no existe diferencia entre los requisitos de datos para sustancias fabricadas o importadas en un margen de 1-10 toneladas por año o 10-100 toneladas por año.

Diciembre de 2017

**Tabla 3**

Qué sabe	Acciones que debe realizar	Observaciones
<p>Dispone de información fiable sobre todas las propiedades fisicoquímicas pertinentes</p>	<p>No deben realizarse otras acciones con respecto a la recopilación de información fisicoquímica</p>	<p>Por lo general, las pruebas que se llevan a cabo de acuerdo con las directrices estipuladas son fiables.</p> <p>La información procedente de manuales o publicaciones puede ser fiable, pero solo si está corroborada por un científico experto. Pueden utilizarse en un enfoque de ponderación de las pruebas.</p>

*Supuesto 2: La mayoría de la información fisicoquímica está disponible (aunque no toda)*

Diciembre de 2017

Tabla 3		
Qué sabe	Acciones que debe realizar	Observaciones
<p>Dispone de información fiable sobre las siguientes propiedades fisicoquímicas:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• punto de fusión</li> <li>• densidad relativa</li> <li>• tensión superficial</li> <li>• punto de ignición</li> <li>• inflamabilidad</li> <li>• propiedades explosivas</li> <li>• temperatura de ignición espontánea</li> <li>• propiedades oxidantes</li> </ul>	<p>Para cumplir los requisitos de información, tiene que recopilar datos sobre las siguientes propiedades fisicoquímicas:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• punto de ebullición</li> <li>• presión de vapor</li> <li>• solubilidad en agua</li> <li>• coeficiente de partición n-octanol/agua</li> </ul> <p>Primero, tendrá que comprobar si existe posibilidad de prescindir de los requisitos de datos para algunas propiedades.</p> <p>Por ejemplo, no necesita determinarse la presión de vapor cuando el punto de fusión supera los 300 °C. También puede darse el caso de que el ensayo sea técnicamente imposible de realizar o carezca de fundamento científico.</p> <p>Entonces, tendrá que comprobar si ya hay datos disponibles para alguna de las propiedades restantes. Los datos pueden estar disponibles en publicaciones abiertas, como manuales, bases de datos o informes de estudios anteriores.</p> <p>Tendrá que evaluar cuidadosamente si esos datos son (i) fiables, (ii) aportan valor a la evaluación de la propiedad intrínseca específica de su sustancia y (iii) no están sujetos a derechos de autor (punto que debe tener en cuenta antes de hacer uso de dicha información).</p> <p>Por último, si todavía faltan datos, deberá comprobar la cantidad de datos que pueden generarse. Un ensayo casi siempre aportará los datos más fiables y, por lo tanto, se contemplará siempre cuando no haya motivos para la prescindencia.</p> <p>Sin embargo, en ciertos casos pueden utilizarse otras alternativas a los ensayos, como la comparación con un grupo de sustancias similares o una estimación con una relación cuantitativa estructura-actividad (QSAR)<sup>4</sup>.</p>	<p>No es necesaria la información de granulometría (distribución de los tamaños de partículas), ya que la sustancia es un líquido.</p> <p>Por lo general, las pruebas que se llevan a cabo de acuerdo con las directrices estipuladas son fiables. La información procedente de manuales o publicaciones puede ser fiable, pero solo si está corroborada por un científico experto. Para constatar la «fiablez» de las publicaciones, por lo general necesitará más de una fuente de información.</p> <p>Si desea utilizar información de un manual o una base de datos<sup>5</sup>, tendrá que comprobar minuciosamente que la sustancia sometida a ensayo sea la misma que la que usted desea registrar (en cuanto a la pureza/impurezas) y que los datos se deriven de un método de ensayo fiable. Cabe aplicar lo mismo a informes antiguos de estudios llevados a cabo antes de que se normalizaran los métodos de ensayo.</p> <p>Se necesita una experiencia científica avanzada cuando los datos se obtengan mediante métodos alternativos (por ejemplo, previsión QSAR, extrapolación o interpolación de los datos a partir de un grupo de sustancias similares). El uso, la justificación y la documentación de dichos datos están sujetos a normas muy específicas.</p> <p>Para más información, consulte la <i>Guía práctica sobre cómo utilizar y comunicar los análisis (Q)SAR<sup>6</sup></i> para cumplir con los requisitos de información dispuestos en REACH.</p> <p>Las propiedades fisicoquímicas que determinan la clasificación de peligro según el Reglamento CLP deben realizarse de conformidad con los criterios de BPL. Sin embargo, podrán aceptarse datos existentes que no se hayan obtenido con arreglo a las BPL.</p>

<sup>5</sup> En el capítulo R.7a del Documento de orientación sobre los requisitos de información y sobre la valoración de la seguridad química de la Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas puede encontrarse un resumen de los manuales y las bases de datos aceptados y de los requisitos

Diciembre de 2017



Una vez disponga de información para todas las propiedades, tiene que verificar si su sustancia presenta propiedades fisicoquímicas que pudieran ocasionar efectos no deseados y que se incluyan en clasificación de peligros físicos de acuerdo con el Reglamento CLP, como inflamabilidad o explosividad. En tal caso, tendría que realizar una caracterización del riesgo en su informe sobre la seguridad química.

Si considera alternativas a las pruebas estándares, tenga en cuenta que la presencia de constituyentes desconocidos en la sustancia hará imposible el cumplimiento con los requisitos de información por medio de QSAR o la extrapolación a otras sustancias.

---

correspondientes para tales datos.

<sup>5</sup> En el capítulo R.7a del Documento de orientación sobre los requisitos de información y sobre la valoración de la seguridad química de la Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas puede encontrarse un resumen de los manuales y las bases de datos aceptados y de los requisitos correspondientes para tales datos.

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

Diciembre de 2017

### 3.2. Programa de recopilación de información sobre propiedades medio ambientales

**Tabla 4: Recopilación de información sobre (algunas) propiedades medio ambientales**

<b>Tabla 4</b>		
<b>Qué sabe</b>	<b>Acciones que debe realizar</b>	<b>Observaciones</b>
Deberá registrar la sustancia oligomérica. Tonelaje: 10-100 tpa	Recopile información interna, por ejemplo, en el departamento técnico.	La información interna siempre es un buen punto de partida.
<i>Supuesto 1: Toda la información medio ambiental está disponible</i>		
Dispone de información fiable sobre todas las propiedades medio ambientales pertinentes.	No deben realizarse otras acciones con respecto a la recopilación de información medio ambiental.	Por lo general, las pruebas que se llevan a cabo de acuerdo con las directrices estipuladas son fiables. La información procedente de publicaciones también puede ser fiable siempre que esté corroborada por un científico experto.
<i>Supuesto 2: no está disponible toda la información medio ambiental</i>		

Diciembre de 2017

Tabla 4		
Qué sabe	Acciones que debe realizar	Observaciones
<p>Dispone de información interna fiable sobre las siguientes propiedades medio ambientales:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• biodegradabilidad fácil</li> <li>• inhibición del crecimiento de las algas</li> <li>• toxicidad para microorganismos (STP)</li> </ul> <p>Como ya sabe, usted es el único (posible) solicitante de registro de esta sustancia. No es consciente de las semejanzas entre otras sustancias y la suya.</p>	<p>Para que su sustancia cumpla con los requisitos de información sobre destino final y peligro en el medio ambiente que se estipulan en los Anexos VII y VIII de REACH, tendrá que obtener información acerca de las siguientes propiedades:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• hidrólisis</li> <li>• análisis de adsorción/desorción</li> <li>• degradación</li> <li>• toxicidad a corto plazo para invertebrados acuáticos</li> <li>• toxicidad a corto plazo para peces</li> </ul> <p>Como no hay otros (posibles) solicitantes de registro y usted no ha encontrado sustancias similares, tendrá que obtener los datos por su cuenta.</p> <p>Puede prescindir de algunas pruebas si no son técnicamente posibles de realizar o si carecen de fundamento científico.</p> <p>Para el resto de propiedades, compruebe si hay datos disponibles, como por ejemplo, en manuales</p> <p>Puede prescindir de (o no realizar) algunas pruebas mediante la aplicación de otras adaptaciones (extrapolación, QSAR, ponderación de las pruebas).</p> <p>Si aun así siguen faltando datos, entonces, realice un ensayo.</p>	<p>Por lo general, las pruebas que se llevan a cabo de acuerdo con las directrices estipuladas son fiables. La información procedente de publicaciones también puede ser fiable siempre que esté corroborada por un científico experto. Para constatar la fiabilidad de las publicaciones, por lo general necesitará más de una fuente de información.</p> <p>Si se sabe que una sustancia se degrada con facilidad, no será necesaria la realización de pruebas de hidrólisis.</p> <p>Se considera que una prueba de hidrólisis carece de fundamento científico cuando la sustancia no contiene grupos químicos que puedan hidrolizarse.</p> <p>No es técnicamente posible realizar pruebas sobre propiedades medio ambientales cuando la sustancia es inflamable en contacto con el agua.</p> <p>Para la adsorción, en lugar de realizar el ensayo, se recomienda que primero se obtengan los datos de una extrapolación o de un cálculo QSAR (consulte el capítulo II.1.2 de la Guía Práctica para pymes sobre requisitos de información).</p> <p>Todas las pruebas sobre destino final y peligro en el medio ambiente se desarrollarán de conformidad con las directrices para la realización de pruebas reconocidas y según lo estipulado en los criterios para Buenas Prácticas de Laboratorio (BPL).</p>

Diciembre de 2017



Una vez cuente con información para todas las propiedades, tendrá que comprobar si su sustancia supone un destino final o peligro en el medio ambiente que pueda dar lugar a efectos no deseados (como toxicidad para los organismos acuáticos). En la práctica, esto se lleva a cabo verificando si la sustancia debe clasificarse para el medio ambiente de acuerdo con el Reglamento CLP. En tal caso, tendrá que etiquetar y clasificar la sustancia química y también deberá realizar una evaluación de la exposición y una caracterización del riesgo. Tendrá que documentar estas últimas en su informe sobre la seguridad química.

Mediante los resultados obtenidos de los estudios sobre peligro medio ambiental (es decir, toxicidad para peces, invertebrados acuáticos y algas), también tendrá que calcular el nivel por debajo del cual no se produzcan efectos negativos. Estos umbrales reciben el nombre de concentraciones previstas sin efectos (PNEC) y se requiere una experiencia científica avanzada para su cálculo.

Diciembre de 2017

### 3.3. Programa de recopilación de información sobre propiedades referidas a la salud humana

**Tabla 5: Recopilación de información sobre (algunas) propiedades referidas a la salud humana**

<b>Tabla 5</b>		
<b>Qué sabe</b>	<b>Acciones que debe realizar</b>	<b>Observaciones</b>
Deberá registrar la sustancia oligomérica.	Recopile información interna, por ejemplo, en el departamento técnico.	La información interna siempre es un buen punto de partida.
<i>Supuesto 1: Toda la información relativa a la salud humana está disponible</i>		
Dispone de información fiable sobre todas las propiedades relativas a la salud humana pertinentes.	Como ya se dispone de toda la información, no es necesario que realice otras acciones con respecto a la recopilación de información en relación con la salud humana.	<p>Por lo general, las pruebas que se llevan a cabo de acuerdo con las directrices estipuladas son fiables.</p> <p>La información procedente de publicaciones también puede ser fiable siempre que esté corroborada por un científico experto.</p>
<i>Supuesto 2: La mayoría de la información relativa a la salud humana está disponible (aunque no toda)</i>		

Diciembre de 2017

Tabla 5		
Qué sabe	Acciones que debe realizar	Observaciones
<p>Dispone de información fiable sobre las siguientes propiedades referidas a la salud humana:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• corrosión o irritación cutánea (estudio <i>in vivo</i>)</li> <li>• irritación ocular (estudio <i>in vivo</i>)</li> <li>• sensibilización cutánea</li> <li>• <b>mutación génica <i>in vitro</i></b> en bacterias</li> <li>• toxicidad oral aguda</li> </ul> <p>Como ya sabe, usted es el único (posible) solicitante de registro de esta sustancia.</p> <p>No es consciente de las semejanzas entre otras sustancias y la suya.</p>	<p>Para que su sustancia cumpla con los requisitos de información referidos a la salud humana que se estipulan en el Anexo VIII de REACH, tendrá que obtener información acerca de las siguientes propiedades:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• estudio <i>in vitro</i> de la citogenicidad en células de mamíferos</li> <li>• estudio <i>in vitro</i> de la mutación génica en células de mamíferos</li> <li>• toxicidad aguda por inhalación</li> <li>• toxicidad por dosis repetidas a corto plazo</li> <li>• análisis de la toxicidad para el desarrollo/la reproducción</li> </ul> <p>Llevará a cabo o subcontratará los análisis sobre salud humana pertinentes usted mismo.</p> <p>Para evitar la duplicación innecesaria de ensayos con animales, encontrará la directriz para la realización de pruebas más apropiada para realizar el análisis de la toxicidad para el desarrollo/la reproducción, de modo que pueda cumplir también con los requisitos de toxicidad por dosis repetidas a corto plazo (tratamiento de 28 días). Decidirá si llevará a cabo el análisis de toxicidad por dosis repetidas junto con la prueba relativa a la toxicidad para el desarrollo/la reproducción.</p>	<p><i>Los anexos de REACH cambiaron en 2016 y las pruebas in vitro se han convertido en el requisito estándar para tres propiedades:</i> (i) corrosión e irritación cutánea, (ii) irritación ocular, (iii) sensibilización cutánea.</p> <p>Debido a que su información sobre corrosión e irritación cutánea e irritación ocular procede de estudios <i>in vivo</i>, tendrá que redactar una justificación científica con respecto al hecho de no haber presentado una prueba <i>in vitro</i> (para cumplir con los requisitos actuales del Anexo VII). De lo contrario, su expediente no estará completo.</p> <p>En cuanto a la sensibilización cutánea, tendrá que completar su información mediante los métodos <i>in vitro</i> de acuerdo con los requisitos actuales del Anexo VII.</p> <p>Por lo general, las pruebas que se llevan a cabo de acuerdo con las directrices estipuladas son fiables. La información procedente de publicaciones también puede ser fiable siempre que esté corroborada por un científico experto. Para constatar la fiabilidad de las publicaciones, por lo general necesitará más de una fuente de información.</p> <p>Todas las pruebas de salud humana deberán realizarse de conformidad con las Buenas Prácticas de Laboratorio (BPL)</p> <p>Se requiere experiencia científica para decidir, con base a los resultados de las pruebas de mutagenicidad <i>in vitro</i>, si se necesitan ensayos de mutagenicidad <i>in vivo</i> (consulte el capítulo II.2.3 de la Guía Práctica para pymes sobre requisitos de información)</p>

Diciembre de 2017



Una vez cuente con información para todas las propiedades necesarias, tendrá que comprobar si su sustancia presenta una propiedad de la salud humana que pueda dar lugar a efectos no deseados, como toxicidad cutánea aguda. En la práctica, esto se lleva a cabo verificando si la sustancia necesita incorporarse a la clasificación de propiedades no deseadas de acuerdo con el Reglamento CLP. Si su sustancia no necesita añadirse a dicha clasificación, deberá llevar a cabo una evaluación de la exposición y una caracterización del riesgo en el informe sobre la seguridad química. Con los resultados obtenidos de los estudios sobre la salud humana, también tendrá que calcular el nivel por debajo del cual no se producirán efectos negativos. Estos umbrales reciben el nombre de niveles sin efectos derivados (DNEL) y se requiere una experiencia científica avanzada para su cálculo.