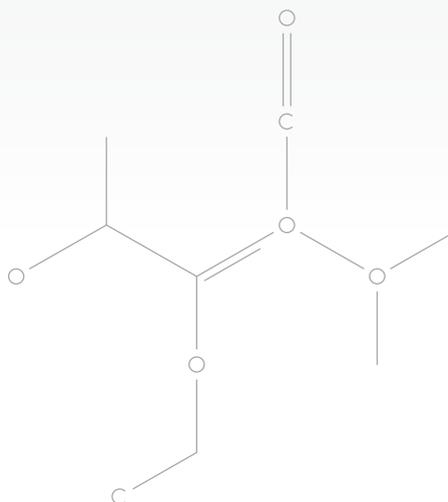


화학물질 확인 및 중간체 구분 실무가이드



화학물질 확인 및 중간체 구분 실무가이드 | 2019



주의 사항

- 이 실무가이드는 『화학물질의 등록 및 평가 등에 관한 법률』에서 규정하고 있는 화학물질의 등록·신고, 중점관리물질 함유제품 신고 등 일련의 법상 절차를 이행하는 과정에서 관련 의무를 이행하여야 하는 자가 그 의무의 단초(端初)가 되는 화학물질의 확인에 관한 방법을 다루고 있다.
- 이 실무가이드는 『유해화학물질관리법』상 신규화학물질 유해성심사 등을 이행하는 과정에서 축적된 물질확인에 관한 지식과 경험, 관련 고시 등을 토대로 전문가와 관련 기관의 의견을 수렴하여 작성되었다.
- 이 실무가이드는 법적·강제적 효력을 갖지 않으며 물질 확인에 대한 일반적 방법에 관한 기술적 참고자료로서, 법상 절차를 이행하기 위한 화학물질의 확인과 관련하여 개별적 특수성을 고려할 책임은 법상 의무를 이행하여야 하는 자에게 있다.
- 이 실무가이드는 『화학물질의 등록 및 평가 등에 관한 법률』 및 시행령, 시행규칙, 고시, 예규 등이 정하는 사항을 종합적으로 고려하여 해석·활용되어야 하며, 관련 법령 및 상위규칙에서 정하는 내용과 상이할 경우에는 법령과 상위규칙이 우선 적용되어야 한다.

개정 이력

화학물질 확인 및 중간체 구분 실무가이드

초판
(2015. 1)

화학물질 확인절차 및 방법 초판발행

제1차 개정판
(2019. 12)

안내서의 개요 및 화평법 개정에 따른 목차 수정

위해우려제품의 관리 이관(현행 제2조제16호, 제33조, 제34조, 제36조 및 제37조 삭제)

-위해우려제품을 포함한 생활화학제품의 관리가 「생활화학제품 및 살생물제의 안전관리에 관한 법률」로 이관됨에 따라 위해우려제품의 위해성평가, 안전기준 및 표시기준, 위해우려 제품에 함유된 화학물질의 정보제공 등에 관한 규정을 삭제

화학물질의 등록 및 신고(제10조)

-기존화학물질의 등록대상을 연간 1톤 이상 환경부장관이 고시한 등록대상기존화학물질을 제조 또는 수입하려는 자에서 연간 1톤 이상 기존화학물질을 제조 또는 수입하려는 자로 확대함

-신규화학물질을 제조 또는 수입하려는 자는 환경부장관에게 등록하도록 하던 것을 앞으로는 연간 100킬로그램 이상 제조 또는 수입하려는 경우에만 등록하도록 하고, 100킬로그램 미만인 경우에는 환경부장관에게 신고하도록 함

[추가]

-수송분리중간체, 현장분리중간체 개념 도입 내용 반영

목차

화학물질 확인 및 중간체 구분 실무가이드

제1장 개요

1.1. 발간목적	10
1.2. 활용방안	12
1.3. 용어의 정의 및 약어	14
1.3.1 용어의 정의	14
1.3.2 약어	18

제2장 화학물질 확인 방법

2.1. 일반적인 확인방법 및 활용	20
2.1.1 화학물질 식별정보의 확인	20
2.1.2 기존화학물질 및 신규화학물질의 확인	24
2.1.3 확인된 화학물질 정보의 활용	25
2.2. 유형별 화학물질 확인	28
2.2.1 단일성분으로 구성된 화학물질	29
2.2.2 반응생성물의 확인	37
2.2.3 고분자화합물	43
2.2.4 구조를 확인할 수 없는 물질	48
2.2.5 유형별 화학물질의 명명방법 및 식별정보 확인의 주요사항	50

제3장 동일 화학물질 여부 확인

3.1. 수화물(Hydrate)의 확인	53
3.2. 염류(Salts) 및 화합물(compounds)의 확인	54
3.2.1 염류(Salts)의 확인	54
3.2.2 화합물(Compounds)의 확인	54
3.3. 이성질체(Isomers)의 확인	58

제4장 중간체의 구분

4.1. 비분리중간체	64
4.2. (현장·수송) 분리중간체	66
4.2.1 현장분리중간체의 확인	66
4.2.2 수송분리중간체의 확인	70

부록

참고자료	74
------------	----

표 목차

화학물질 확인 및 중간체 구분 실무가이드

표 1_ 기타 용어 정의	16
표 2_ 주요 약어 정의	18
표 3_ 화학물질 확인을 위한 항목	27
표 4_ 단일 성분으로 구성된 물질(스티렌)의 확인	32
표 5_ 혼합물 내 화학물질 식별정보의 확인	34
표 6_ 반응출발물질을 활용한 명명방법과 식별정보 등 확인(CAS No.를 알고 있는 경우)	39
표 7_ 반응출발물질을 활용한 명명방법과 식별정보 등 확인(CAS No.를 모르는 경우)	40
표 8_ 최종 생성물질을 활용한 화학물질 명명방법과 정보 확인	42
표 9_ 화학물질 유형별 확인사항	50
표 10_ 동일 화학물질 여부 확인	52
표 11_ 구조이성질체	59
표 12_ 입체이성질체	59

그림 목차

화학물질 확인 및 중간체 구분 실무가이드

그림 1_	실무가이드의 구성 체계	13
그림 2_	국내 기존화학물질목록 확인 방법(NCIS 활용)	21
그림 3_	NCIS에서 폼알데하이드의 화학물질검색 결과 예시	23
그림 4_	화학물질 유형 확인	28
그림 5_	CASNo.를 이용한 화학물질정보시스템(NCIS)검색 예시	30
그림 6_	명명된 화학 물질명으로 검색	46
그림 7_	단량체로 중합반응을 거쳐 생성된 고분자 화합물의 물질명 검색	47
그림 8_	천연원료의 추출 및 정제공정으로 생성된 화학물질의 물질명으로 검색	49
그림 9_	중간체의 확인	63
그림 10_	비분리중간체	64
그림 11_	현장분리중간체	67
그림 12_	수송분리중간체	71

화학물질 확인 및 중간체 구분
실무가이드

제1장 개요

- 1.1. 발간목적
- 1.2. 활용방안
- 1.3. 용어의 정의 및 약어
 - 1.3.1 용어의 정의
 - 1.3.2 약어

1.1.

발간 목적

발간 목적

- > 화학물질을 확인하는 방법에 대한 사업자의 이해를 제고하고 업무 담당자로 하여금 화학물질 정보의 수집·선택·생산에 있어 정확성·일관성을 확보하도록 함으로써 법 이행과정에서 효율성을 높이는 것이 목적

법 의무이행을 위한 기본 과정

- > 화학물질의 확인은 「화학물질의 등록 및 평가 등에 관한 법률」에 따른 의무 이행 시 기본적인 고려사항
 - 의무이행 당사자는 우선 취급하는 화학물질이 무엇인지 확인필요
 - 화학물질확인에 따른 대상화학물질의 의무이행사항
 - [법 제10조] 화학물질의 등록 등
 - * 법 제10조제6항, 제15조에 따른 기존화학물질 및 신규화학물질을 제조·수입 하려는 자가 당해 물질을 명확히 확인하는 것은 관련 절차를 이행하는 데 있어 우선 고려사항
 - [법 제11조] 화학물질의 등록 등 면제
 - [법 제32조] 제품에 함유된 중점관리물질의 신고
 - [법 제35조] 제품 내 함유 화학물질의 정보제공 등
- > 공동등록 시 화학물질 동일성 판단이 필요
 - [법 제10조]에 따라 기존 화학물질 등록시 [법 제14조]에서 지정된 공동제출서류를 수집하는 데 있어 동일한 물질인지 확인
 - [법 제16조]에 따라 기존 등록신청자료를 활용하고자 하는 자로 하여금 같은 화학물질이 등록되었는지를 국립환경과학원장에 문의하는 경우
- > 부정확한 화학물질 확인으로 의무 불이행 등으로 인한 벌칙, 과태료 방지
 - 취급하는 화학물질에 대한 확인이 잘못되어 의도하지 않게 법에서 정한 등록 또는 신고 등의 의무를 이행하지 못하는 경우의 발생방지
 - 의무이행 대상이 아님에도 등록 또는 신고 대상으로 판단한 경우 불필요한 시간적·금전적 비용 발생방지

실무가이드 이용시 유의 사항

- > 안내서의 내용은 향후 여건의 변화 등 필요에 따라 수정·보완 등 갱신될 수 있으므로, 안내서를 활용하고자 하는 경우 먼저 가장 최신에 발간된 것인지를 확인할 것을 권고함
- > 등록, 신고 등 의무이행주체인 사업자의 화학물질 확인을 위한 기술적인 지원을 목적으로 작성된 안내서이므로 법적 구속력이 있는 것은 아님
- > 화학물질의 동일성 여부를 판단하는 최종 책임은 의무이행대상자인 사업자에게 귀속되는 것으로, 사업자는 개별적 특수성을 고려하여 이 안내서에서 제시하는 내용 이상의 방법을 활용할 필요도 있음

1.2. 활용방안

활용방안

- > 화학물질의 확인은 법에서 정한 등록, 신고 등의 의무 이행에 있어 기본적인 고려사항
- > 화학물질의 확인 방법
 - 사업자가 취급하는 화학물질이 법에서 정한 의무이행 대상 여부인지 확인
 - 화학물질명, CASNo. 등 고유번호, 분자식·구조식 등의 일반적인 정보를 확인
 - 혼합물인 경우 성분내역을 확보하여 모든 구성성분의 일반적인 정보와 함께 혼합물 내 함량을 확인
 - 신규화학물질과 기존화학물질에 대하여 각기 다른 절차로 등록이 진행되므로 앞서 확인한 물질의 신규화학물질 또는 기존화학물질 여부 파악
 - 확인한 화학물질이 법 제10조에 따른 화학물질의 등록 등 의무가 있다고 판단되는 경우 사업자는 화학물질 유형별 추가 확인사항이 있는지를 검토필요
 - 단일성분 화학물질과 고분자화합물은 등록신청을 위한 자료 요구사항이 상이하므로 정확한 화학물질 명칭확인이 필요
 - 법 제2조제3항에 따라 고시된 기존화학물질 목록에 등재되지 않은 경우라도 동일물질로 간주되어 기존화학물질로 확인될 수 있으므로 기존화학물질의 확인이 중요

실무가이드의 구성

- > 1장: 실무가이드의 목적 및 개요, 용어의 정의 및 약어 소개
- > 2장: 법상 절차와 연관된 화학물질의 확인방법, 확인이 필요한 화학물질의 유형화(단일성분 화학물질, 반응생성물, 고분자화합물, 구조 확인이 어려운 화학물질)하여 물질명 결정방법 및 사례 제시
- > 3장: 무수물과 수화물, 염류와 화합물, 이성질체 등 동일시 될 수 있는 화학물질의 확인
- > 4장: 제조과정 중 생성되는 중간체에 대한 구분

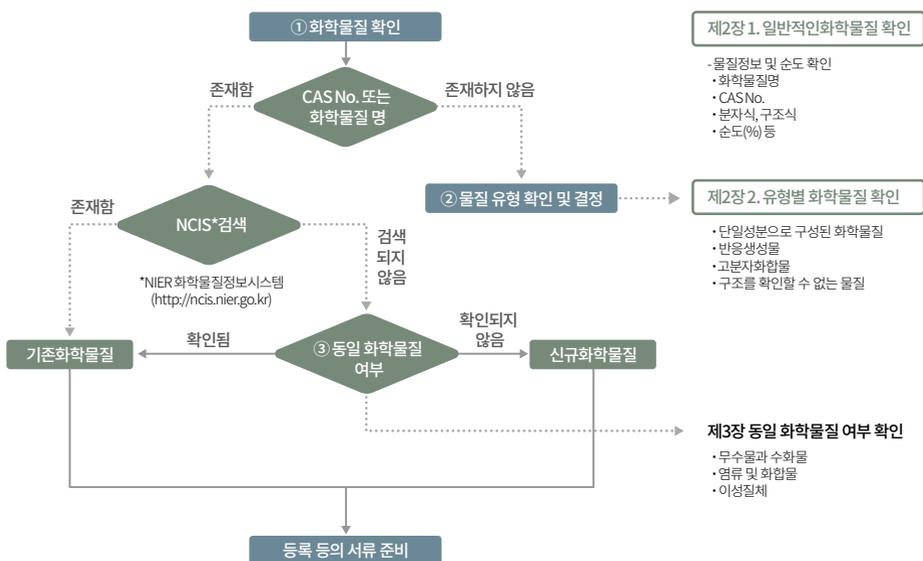


그림 1_
실무가이드의 구성 체계

1.3. 용어의 정의 및 약어

- > 용어의 정의는 「화학물질의 등록 및 평가 등에 관한 법률」에서 규정한 바가 있는 경우 이를 따름

1.3.1 용어의 정의

화학물질

- > 법 제2조제1호의 정의

“화학물질”이란 원소·화합물 및 그에 인위적인 반응을 일으켜 얻어진 물질과 자연 상태에서 존재하는 물질을 화학적으로 변형시키거나 추출(抽出) 또는 정제(精製)한 것을 말한다.

- 자연 상태에서 있는 그대로 존재하는 형태의 물질은 화학물질의 정의에 해당되지 않음
- 즉, 천연상태로 존재하는 것으로서 전혀 가공되지 않거나 단순 건조된 것은 법의 적용대상이 되는 화학물질로 보지 않음
 - 적용대상이 되지 않는 예: 자연에서 채굴한 원유, 석탄, 철광석 등
- 특정 성분을 얻거나 그 순도를 높이기 위해 추출이나 정제를 한 경우에는 법에서 정하는 화학물질에 해당
 - 적용대상이 되는 예: 원유를 분별 증류하여 생산하는 나프타(naphtha), 철광석에서 추출한 철이나 산화철 등
- > 취급 화학물질의 확인 필요한 법 의무이행 당사자
- 법 제10조 화학물질의 등록 등
- 법 제11조 화학물질의 등록 등 면제
- 법 제32조 제품에 함유된 중점관리물질의 신고
- 법 제35조 제품 내 함유 화학물질의 정보제공

화학물질명

- > 화학물질명의 정의[국립환경과학원 고시 “등록신청자료의 작성방법 및 유해성심사 방법 등에 관한 규정”]

“화학물질명”이란 IUPAC 또는 CA명명법에 따른 화학물질명 또는 ISO의 일반명을 뜻함

- 다만, 반응생성물이나 고분자화합물인 경우에는 반응을 개시할 당시의 각 화학물질명이나 단량체명에 기초하여 명명한 이름을, 반응생성물이 두 가지 이상의 화학물질로 혼합된 상태에서 서로 분리할 수 없거나 상업적 목적으로 분리할 필요가 없는 경우에는 반응혼합물의 형태로 명명한 이름을 포함
- 다만, 구성성분의 수가 많고 상당부분은 성분의 화학물질명과 함량을 알 수 없거나 함량이 자주 바뀌는 경우의 다성분 화학물질은 사용된 원료와 공정을 조합한 형태로 명명한 이름을 사용

* IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry)

* CA (Chemical Abstracts)

* ISO (International Standard Organization)

기타 주요 용어의 정의

표 1_
기타 용어 정의

용어	정의
고분자화합물	<ul style="list-style-type: none"> • 다음의 조건을 동시에 만족하는 화학물질, 이 경우 중량비 2% 이하의 단량체를 제외한 단량체로 구성된 고분자화합물이 기존화학물질에 해당하는 경우 그 고분자화합물은 기존화학물질로 봄 가. 1종 이상의 단량체단위가 연속하여 반복되는 분자로 이루어져 있을 것 나. 각 분자내 단량체단위의 반복수에 따라 특징적 분자량 분포를 보일 것 다. 3개 이상의 단량체단위가 적어도 한개 이상의 단량체단위 또는 다른 반응물과 공유결합을 이루는 분자가 50% 이상일 것 라. 분자량이 같은 분자가 중량비로 50%를 초과하지 않을 것 (시행령 제2조제3호)
기존화학물질	<ul style="list-style-type: none"> • 다음의 조건 중 하나를 만족하는 화학물질 가. 1991년 2월 2일 전에 국내에서 상업용으로 유통된 화학물질로서 환경부장관이 고용노동부장관과 협의하여 고시한 화학물질 나. 1991년 2월 2일 이후 「유해화학물질관리법」에 따라 유해성심사를 받은 화학물질로서 환경부장관이 고시한 화학물질 (법 제2조제3호)
신규화학물질	<ul style="list-style-type: none"> • 기존화학물질을 제외한 모든 화학물질 (법 제2조제4호)
단량체	<ul style="list-style-type: none"> • 둘 이상의 다른 분자와 결합하여 고분자 화합물을 형성하는 화학물질 및 그 화학반응에 참여하여 고분자화합물의 일부분이 되는 반응물 (시행령 제2조제4호)
단량체 단위	<ul style="list-style-type: none"> • 단량체가 반응하여 고분자화합물을 형성한 경우로 고분자화합물에서 단량체가 반복되는 구조 (시행령 제2조제5호)
불순물	<ul style="list-style-type: none"> • 우연히 또는 비의도적으로 다른 화학물질에 생성되거나 존재하는 성분으로서 그 자체로 수입 또는 시장에 출시되지 않는 물질 (환경부고시 “등록 또는 신고 면제대상 화학물질”)
부산물	<ul style="list-style-type: none"> • 의도한 화학물질의 제조과정에서 비의도적으로 함께 생성되는 물질로서 그 자체로 수입 또는 시장에 출시되지 않는 물질 (환경부고시 “등록 또는 신고 면제대상 화학물질”)
분자량	<ul style="list-style-type: none"> • 분자를 구성하는 원자의 원자량의 총합 (NCIS 용어사전)
분자식	<ul style="list-style-type: none"> • 원소기호를 사용하여 물질의 분자 조성을 나타내는 화학식 (NCIS 용어사전)
비분리중간체	<ul style="list-style-type: none"> • 다른 화학물질을 제조하는 과정에서 생성되어 그 화학공정에서 전량 사용되어 소멸되는 화학물질로서 제조되는 설비로부터 의도적으로 제거·분리되지 아니하는 화학물질 (시행령 제2조제1호)
현장분리중간체	<ul style="list-style-type: none"> • 다른 화학물질을 제조하는 과정에서 생성되어 환경부령으로 정하는 절차 및 방법에 따라 통제된 조건 하에 동일한 제조현장의 후속 공정단계에서 전량 사용·소멸되는 화학물질로서 비분리중간체에 해당하지 않는 화학물질 (시행령 제11조제1항제8호)

용어	정의
수송분리중간체	• 다른 화학물질을 제조하는 과정에서 생성되어 환경부령으로 정하는 절차 및 방법에 따라 통제된 조건 하에 다른 제조현장으로 이동되어 해당 제조현장의 후속 공정단계에서 전량 사용·소멸되는 화학물질로서 비분리중간체에 해당하지 않는 화학물질 (시행령 제13조제2의2호)
수평균분자량	• 고분자화합물의 모든 분자들의 분자량을 모두 더한 총 무게를 총 분자 수로 나눈 값(시행령 제2조제6호)
염류	• 산과 염기가 반응을 일으킬 때 물과 함께 생성되는 물질로 산의 음이온과 염기의 양이온으로 만들어지는 화합물이며 보통 산성염, 염기성염, 정염 등의 물질(NCIS 용어사전)
이성질체	• 분자식은 같으나 분자 내에 있는 구성원자의 연결방식이나 공간배열이 동일하지 않아 성질이 다른 화합물 이성질체에는 크게 구조이성질체와 입체이성질체로 분류 (NCIS 용어사전)
첨가제	• 화학품 생산과정에서 추가하는 물질의 총칭으로 주재료가 아닌 부수적으로 들어가는 물질로서, 목적은 매우 다양하지만, 대부분은 주재료의 품질 향상이나 안정성 유지 차원에서 사용
정성분석	• 화학분석법 중에서 시료가 어떤 성분으로 구성되어 있는지 알아내기 위한 분석법 - 건식분석법: 용액을 사용하지 않고 고체 시약만을 사용하는 분석방법 - 습식분석법: 시료 및 시약을 수용액으로 만들어 분석하는 방법(NCIS 용어사전)
정량분석	• 물질을 구성하는 양적 관계를 명확하게 하는 분석법 (NCIS 용어사전) - 물리화학적인 기계·기구를 사용해서 수행하는 기기분석 - 화학반응을 이용해서 성분의 양을 결정하는 화학분석
총칭명	• 자료보호를 목적으로 화학물질의 본래의 이름을 대체하여 명명한 이름(법 제2조제13호)
화합물	• 2종 이상의 원소가 화학적인 결합에 의해 생성하여 일정한 조성을 가지고 있는 물질(환경부고시 “제한물질·금지물질의 지정”)
혼합물	• 두 가지 이상의 물질로 구성된 물질 또는 용액(법 제2조제2호)
합금	• 둘 이상의 원소가 화합물이나 고체 형태로 되어있는 금속물질
나노물질	• 다음 조건 중 하나를 만족하는 물질 (시행령 제2조제7호). 가. 3차원의 외형치수 중 최소 1차원의 크기가 1나노미터에서 100나노미터인 입자의 개수가 50퍼센트 이상 분포하는 물질 나. 3차원의 외형치수 중 최소 1차원의 크기가 1나노미터 이하인 풀러렌 (fullerene), 그래핀 플레이크(graphene flake) 또는 단일벽 탄소나노튜브

* 참고

- 법 제2조, 시행령 제2조의 정의 수록
- 등록신청자료의 작성방법 및 유해성심사 방법 등에 관한 규정(국립환경과학원 고시)
- 제한물질·금지물질의 지정(환경부 고시)
- 화학물질정보시스템(NCIS)의 용어사전

1.3.2 약어

표 2_
주요 약어 정의

용어	정의
AAS	Atomic Absorption Spectrometer 원자흡광광도계
CAS No.	Chemical Abstracts Service에서 부여하는 화학물질 고유번호
CoA	Certificate of Analysis 분석성적서
GC	Gas Chromatography 가스크로마토그래피
GPC	Gel Permeation Chromatography 겔투과 크로마토그래피
HPLC	High Pressure(or Performance) Liquid Chromatography 고속(고성능)액체크로마토그래피
ICP-AES	Inductively Coupled Plasma-Atomic Emission Spectrometry 유도결합플라스마-원자 방출분광법
FTIR	Fourier Transform Infrared Spectroscopy 적외선분광광도계
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry 국제순수응용화학연합
KE No.	Korea Existing Number 한국 기존화학물질번호
MSDS	Material Safety Data Sheet 물질안전보건자료
NMR	Nuclear Magnetic Resonance 핵자기 공명 분광법
STN	The Scientific and Technical Information Network. 화학물질 초록 작성기관인 미국의 CAS(Cheical Abstracts Service)가 중심이 되어, 독일의 정보/제작 유통기관인 FIZ Karlsruhe, 그리고 일본의 과학기술진흥사업단인 JST와 공동으로 운영하는 세계 최대의 온라인 정보은행으로, 현재 세계 최대의 과학기술정보 데이터베이스(200여개)를 보유하고 있음

제2장 화학물질 확인 방법

- 2.1. 일반적인 확인방법 및 활용
 - 2.1.1 화학물질 식별정보의 확인
 - 2.1.2 기존화학물질 및 신규화학물질의 확인
 - 2.1.3 확인된 화학물질 정보의 활용
- 2.2. 유형별 화학물질 확인
 - 2.2.1 단일성분으로 구성된 화학물질
 - 2.2.2 반응생성물의 확인
 - 2.2.3 고분자화합물
 - 2.2.4 구조를 확인할 수 없는 물질
 - 2.2.5 유형별 화학물질의 명명방법 및 식별정보 확인의 주요사항

2.1. 일반적인 확인방법 및 활용

2.1.1 화학물질 식별정보의 확인

화학물질 식별정보의 확인 방법

- > 화학물질명, CAS No., 고유번호 등 각각의 화학물질을 식별할 수 있는 정보를 활용하여 확인
- > 국립환경과학원 ‘화학물질정보시스템(<http://ncis.nier.go.kr>)’ 접속하여 화학물질 식별정보 확인
- > 검색결과
 - 검색이 되는 경우 기존화학물질(단, 기존화학물질 고유번호 있어야 함)
 - 검색이 되지 않는 경우 신규화학물질일 가능성이 있으나, 수화물 여부 등 추가 확인 필요

‘화학물질정보시스템’ 검색방법

- > ‘화학물질정보시스템(<http://ncis.nier.go.kr>)’에 접속
- > 검색창에서 아래의 정보를 조회하여 화학물질에 대한 정보 조회 가능
 - 국문 또는 영문 화학물질명
 - CAS No.
 - 고유번호(유독물질 번호, 기존화학물질 고유번호(KE번호))
 - 전체 화학물질명 중 일부 키워드 검색(예, 고분자 구성단량체중 일부 명칭 검색)
 - (동시검색) 검색어 중간에 쉼표, 띄어쓰기로 여러 용어를 포함한 검색 가능
 - 예시: ‘아세톤, 폼알데하이드’ 입력 시 아세톤과 폼알데하이드를 포함한 물질이 동시 검색됨

화학물질통합 검색

전체 X 화학물질 검색

검색결과 총 4건 결과 내 계 검색 검색    10개씩보기

CAS번호	영문명	국문명	고유번호						활람명 규제정보	시험 자료
			기본화학 물질	등록대상 기준화학 물질	유독물질	제한물질	금지물질	사고대비 물질		
61788-4 4-1	Styrenated phenol [이명 : Phenol, styrenated:]	스타이렌화 페놀 [이명 : 페놀, 스타이렌화:]	KE-32262							4건
598-31-2	Bromo-2-propanone [이명 : 1-Bromo-2-propanone: 1-Bromopropan-2-one: 2-Propanone, 1-bromo-: α-Bromoacetone: ACETONE, BROMO-; Acetonyl bromide: Bromo-2-propanone: Bromoacetone: Martonite: Monobromoacetone:]	브로모-2-프로판온 [이명 : 1-브로모-2-프로판온; 1-브로모프로판-2-온; 2-프로판온, 1-브로모-; 마톤나이트; 모노브로모아세톤; 브로모-2-프로판논; 브로모-2-프로판온; 브로모메틸메틸케톤; 브로모아세톤; 아세톤, 브로모-; 아세톤일 브로마이드; 아세틸메틸브롬화물; 알파-브로모아세톤:]	KE-05-023 9		97-1-109					정보보기

그림 2_

NCIS 화학물질 동시검색 활용 예시

- > 검색된 결과 화면에서 CAS No., 영문명, 국문명을 클릭하여 해당 화학물질의 세부 정보 확인
- 세부 정보에서는 요약정보, 기본정보, 분류표시, 시험자료, 기타자료의 상세 내역 열람 가능
- NCIS에서 제공하는 화학물질 세부 정보는 전자문서(PDF)의 형태로 다운로드 가능

1. 일반정보

국문명	포르말린	영문명	Formalin
국문명-이명	폼알데하이드; 포름알데히드; 포름올; 메탄알; 포르말리트; 포름알데히드용액	영문명-이명	Formaldehyde
구조식	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \end{array}$		
CAS 번호	50-00-0	RTECS 번호	LP8925000
분자식	CH ₂ O	UN 번호	1198.2209
기준화학물질	KE-17074	EC 번호	200-001-8
분자량	30.03	HS 번호	
ICSC 번호	50-00-0		

2. 물질번호 및 함량 정보

물질구분	고유번호	혼합물(제품함량정보)	비고
기준화학물질	KE-17074		
유독물질	97-1-345	포르말린 및 포름알데히드로서 1% 이상 함유한 혼합물	
제한물질	06-5-5	폼알데하이드 및 이를 1% 이상 함유한 혼합물	가구용 무늬목, 직물, 3세 이하 유아용품, 도배용풀, 피혁가공, 유연제의 용도로 제조, 수입, 판매, 보관저장, 운반, 사용을 금지
사고대비물질	1	포르말린 또는 포름알데히드 및 이를 1% 이상 함유한 혼합물	
대량생산화학물질	V		
등록대상 기준화학물질	1		

3. 고시 정보

일자	내용
2014-12-30	환경부고시 제2014-237호
2018-03-30	국립환경과학원고시 제2018-9호
2014-12-30	환경부고시 제2014-238호
--	
--	
2015-07-01	고시일로부터 3년

4. 분류표시

신조어	위험	M계수	-
UN No	1198 V 2209	시행일자	

그림문자



유해성분		유해·위험표시문구	
인화성 가스	1	H220	극인화성 가스
고압가스	2	H280	고압가스 포함; 가열하면 폭발할 수 있음
급성 독성·경구	3	H301	삼키면 유독함
급성 독성·경피	3	H311	피부와 접촉하면 유독함
급성 독성·흡입	2	H330	흡입하면 치명적임
피부 부식성/자극성	1	H314	피부에 심한 화상과 눈에 손상을 일으킴
피부 과민성	1	H317	알레르기성 피부 반응을 일으킬 수 있음
발암성	1	H350	암을 일으킬 수 있음(노출되어도 암을 일으키지 않는다는 결정적인 증거가 있는 노출경로가 있다면 노출경로 기재)

그림 3_

NCIS에서 전자문서로 다운로드 받은 화학물질검색 결과 예시

그 외 화학물질 검색결과를 통해 확인 가능한 정보

- > 기존화학물질, 유독물질, 제한물질 등 해당 물질의 유형 및 고유번호
- > 영문명·국문명과 영문·국문 유사명, CAS No., 분자식, 구조식, 분자량 등 일반 정보
- > 유해화학물질로 지정·고시된 경우 혼합물의 함량정보와 물질별 금지 또는 제한 내용
 - 사고대비물질의 함량정보는 「화학물질관리법」 시행규칙 별표10 사고대비 물질별 수량기준 또는 ‘화학물질정보시스템(<http://ncis.nier.go.kr>)’에서 확인
- > 유해화학물질로 지정된 경우 환경부 및 국립환경과학원의 관련고시 정보
- > OECD SIDS 위해성평가보고서, EU CLP 분류정보 등 해당 원문 DB 자료
- > UN번호, EC번호 등 외국에서 화학물질 관리를 위하여 부여한 번호
- > 물질의 물리화학적 특성 및 독성 등에 관한 정보
 - 물리적 상태, 녹는점, 끓는점, 밀도, 옥탄올·물 분배계수 등 물리화학적 특성
 - 광분해, 가수분해, 생분해 등 매체 내 안정성, 생물농축성 등 환경거동
 - 어류 급/만성 독성, 수생식물 독성 등 생태독성
 - 급성 경구독성, 자극성/부식성, 유전독성, 발암성 등 인체건강독성
- > 취급방법, 누출 시 방제요령, 폐기방법 등 화학물질안전정보

2.1.2 기존화학물질 및 신규화학물질의 확인

기존화학물질의 정의 [법 제2조제3호]

가. 1991년 2월 2일 전에 국내에서 상업용으로 유통된 화학물질로서 환경부장관이 고
용노동부장관과 협의하여 고시한 화학물질
나. 1991년 2월 2일 이후 종전의 「유해화학물질관리법」에 따라 유해성심사를 받은 화
학물질로서 환경부장관이 고시한 화학물질

* 기존화학물질: 환경부가 고시한 물질로 가목, 나목으로 구성

- > 기존화학물질 고시(환경부 고시)에서 취급하는 물질의 지정 여부를 확인 가능
- > 영어의 알파벳순으로 목록화
- > 물질별로 KE-OOOOO(5자리의 일련번호)와 CAS No. 표기
- > 일부 물질은 자료보호의 필요성이 인정되어 정확한 물질명 대신 총칭명으로 표기된 물질은 기존화학물질 여부를 정확히 판단하기 위해서는 국립환경과 학원에 문의 가능
- > '화학물질정보시스템(<http://ncis.nier.go.kr>)'검색
 - 기존화학물질 해당여부를 보다 쉽게 확인할 수 있는 방법
 - 화학물질정보시스템에서 물질 검색이 되지 않는 경우라도 해당 물질이 기존 화학물질로 고시되어 있을 수도 있으므로, 기존화학물질 고시 별표 1 과 별표 2의 목록 확인 필요
- > 기존화학물질 판단시 유의사항
 - 「유해화학물질관리법」에 따라 유해성심사를 받은 신규화학물질은 법 제2조 제3호의 나목에 따라서 고시되는 경우 기존화학물질에 해당
 - 「화학물질의 등록 및 평가 등에 관한 법률」 제2조제3호의 정의에 의거 동법에 따라 유해성심사가 완료된 신규화학물질은 기존화학물질에 해당하지 않음

신규화학물질의 정의 [법 제2조제4호]

기존화학물질을 제외한 모든 화학물질

- > 국립환경과학원의 “화학물질정보시스템”을 활용하여 확인가능
- > 화학물질 정보(화학물질 명, CAS No. 등)를 입력한 후 검색결과 기존화학물질로 분류되지 않는 경우

2.1.3 확인된 화학물질 정보의 활용

- > 확인된 화학물질의 정보는 법에서 정하는 등록신청, 신고 등의 다양한 의무를 이행하기 위해 활용

활용대상 정보

- > 화학물질명 또는 총칭명
- > 고유번호
- > 분자식·구조식
- > 순도(%)
- > 확인된 불순물·부산물

화학물질 정보가 활용되는 서식

- > 화학물질 등록·변경등록 신청서, 기존화학물질 신고서·변경신고서, 화학물질 등록·신고 면제확인신청서

화학물질 정보의 활용

- > 기존화학물질
 - 국립환경과학원의 화학물질정보시스템을 활용한 화학물질 검색
 - 물질명, 고유번호, 분자량, 구조식, 분자식 등의 정보를 확인
 - 그 외 사업자별로 상이할 수 있는 순도와 불순물·부산물 항목은 해당 화학물질을 취급하는 사업자가 관련 정보를 수집·파악하여 작성
- > 신규화학물질
 - 화학물질정보시스템에서 검색이 불가능
 - 물질명 등 관련 정보는 해당 물질을 제조·수입·판매하는 자가 개별적으로 수집·생산하여 파악(제3장 02. 유형별 화학물질 확인 참조)
- > 기타
 - 신규화학물질이든 기존화학물질이든 확인된 정보의 정확성과 신뢰성을 확보해야 하는 책임은 의무이행 당사자인 사업자에게 있음
 - 해당 구비서류에 기재된 정보가 부정확하고 신뢰도가 낮은 경우 서류 검토기관(국립환경과학원 또는 한국환경공단)으로부터 서류의 보완이 요구되는 등 추가적인 시간적·경제적 부담이 발생할 수 있음
 - 각 항목별로 확인한 정보는 명확하고 간결하게 작성되어야 함
 - 서류 제출 후 검토기관이 관련 정보를 확인할 수 있는 추가 자료의 제출을 요구할 수 있음

표 3_
화학물질 확인을 위한 항목

항목	기술방법
화학물질명	IUPAC명, CA명, ISO 일반명 등 화학물질명을 기술한다.
고유번호	CAS No., 기존화학물질번호(KE번호), 유독물질 번호 등을 기재한다. 기존화학물질은 국립환경과학원의 화학물질정보시스템(http://ncis.nier.go.kr)에서 정보 검색 가능하며, 고유번호가 없는 물질은 기재를 생략할 수 있다.
분자식 및 구조식	기존화학물질은 화학물질정보시스템에서 검색 가능하며, 신규화학물질은 취급사업자가 개별적으로 정보를 수집·생산하여 기재한다. 분자식은 분자를 구성하는 원소의 종류와 개수를 나타내는 화학식으로 예를 들어 폼알데하이드의 분자식은 CH ₂ O이다. 구조식은 분자식을 화학기호로 풀어 분자 화합물을 이루고 있는 각 원소들의 결합이나 배열 상태를 원소기호와 결합기호를 사용하여 도식적으로 나타낸 것으로 예를 들어 폼알데하이드의 구조식은 다음과 같다. $\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{H}-\text{C} \\ \backslash \\ \text{H} \end{array}$
순도(%)	화학물질 내 주요 구성물질이 차지하는 중량비율로서 이를 증빙할 수 있는 자료는 검토기관(국립환경과학원)이 요구하는 경우 제출할 수 있어야 한다.
확인된 불순물 및 부산물	확인된 불순물과 부산물이 있는 경우 화학물질명과 함량 정보를 중량비율(%)로 기재한다. 등록신청 또는 신고 대상 물질과 동일한 CAS No.를 가졌다 하더라도 개별 사업자가 취급하는 물질이 함유하는 불순물이 서로 다른 경우에는 동일한 물질로 간주되지 못할 수도 있으므로 유의하여야 한다.

2.2. 유형별 화학물질 확인

화학물질의 구분

- > 화학물질의 구조 및 구성성분의 종류에 따라 다음과 같이 4종의 유형의 분류 가능

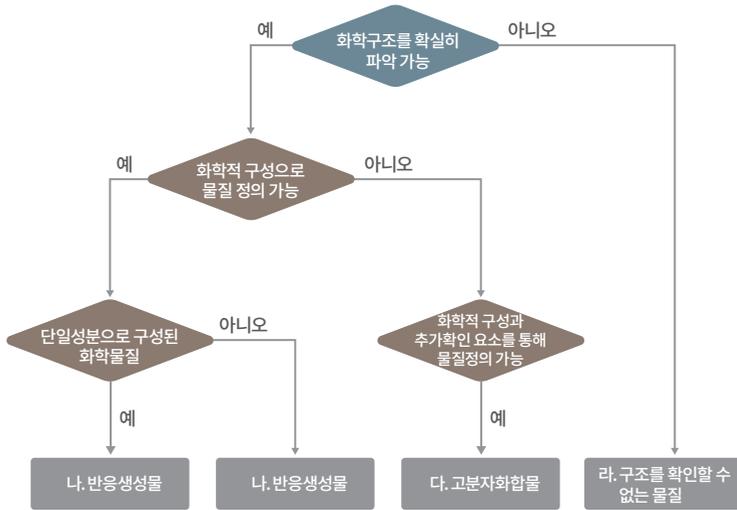


그림 4 _
화학물질 유형 확인

- 단일물질 : 화학물질이 단일성분으로 구성된 경우
- 반응생성물 : 화학반응 결과 여러 종류의 화학물질이 함께 생성됨
- 고분자화합물 : 시행령 제2조제3호의 정의에 따른 고분자화합물¹⁾
- 구조를 확인할 수 없는 물질 : 석유계물질, 천연추출물처럼 다수의 구성성분으로 이루어져 있어 그 구조를 확인하기 어려운 물질

1. 고분자화합물: 1종 이상의 단량체단위가 연속하여 반복되는 분자로 이루어져 있고, 각 분자 내 단량체 단위의 반복수에 따라 특징적 분자량 분포를 보이며, 3개 이상의 단량체 단위가 적어도 한개 이상의 단량체 단위 또는 다른 반응물과 공유결합을 이루며, 이러한 분자가 50%이상이고 분자량이 같은 분자가 중량비로 50%를 초과하지 않는 화학물질을 말한다. 이 경우 중량비 2% 이하의 단량체를 제외한 단량체로 구성된 고분자화합물이 법 제2조제3호에 따른 기존화학물질에 해당하는 경우 그 고분자화합물은 기존화학물질로 본다.

화학물질의 식별정보가 요구되는 법적인 의무사항

- > 법 시행규칙 별지 제2호서식 화학물질의 등록·변경등록 신청서
- > 법 시행규칙 별지 제5호의2서식 기존화학물질 신고서·변경신고서
- > 법 시행규칙 별지 제5호의3서식 신규화학물질 신고서·변경신고서
- > 법 시행규칙 별지 제6호서식 화학물질 등록·신고 면제확인신청서·변경신청서
- > 법 시행규칙 별지 제8호서식 등록화학물질의 변경신고서
- > 법 시행규칙 별지 제10호서식 개별제출확인신청서
- > 법 시행규칙 별지 제12호서식 등록여부 문의서
- > 법 시행규칙 별지 제14호서식 척추동물시험자료 사용부동의 확인신청서
- > 법 시행규칙 별지 제25호와 제27호서식 화학물질안전정보 등

2.2.1 단일성분으로 구성된 화학물질

불순물과 부산물의 확인

- > 불순물과 부산물 : 그 자체로 수입되거나 시장에 출시되지 않는 물질로 그 자체로는 법에서 정한 등록 등의 대상이 아님
- > 불순물 및 부산물이 등록 등 대상이 되는 화학물질에 함유되어 있는 것으로 확인된 경우에는 그 명칭과 함량비(%)를 등록신청 또는 신고서류에 기재해야 함
- > 관련 서식
 - 시행규칙 별지 제2호서식에 따른 화학물질 등록·변경등록 신청서
 - 시행규칙 별지 제5호의3서식에 따른 신규화학물질 신고서·변경신고서
 - 검토기관(국립환경과학원)이 요구시 추가 자료를 제출해야 하므로 불순물과 부산물의 확인 및 서류기재를 정확히 해야 함

단일성분의 명명방법

- > 부산물과 불순물을 제외한 단일성분의 물질에 대하여 명명
 - IUPAC(International Union of Pure and Applied Chemistry) 명명
 - CA(Chemical Abstracts) 명명
 - ISO(International Standard Organization)의 일반명 확인(제2장 01. 정의 나. 화학물질명 참조)
 - 확인된 불순물과 부산물 : IUPAC 또는 CA 명명법에 따른 화학물질명, ISO의 일반명으로 관련 서류에 기재
 - 취급하는 화학물질의 CAS No.를 알고 있는 경우, 화학물질명은 국립환경과학원 화학물질정보시스템(<http://ncis.nier.go.kr>)에서 검색 가능(그림 5 참조)

화학물질통합 검색

전체

106-42-3

X

화학물질 검색

검색결과 총 1건

결과 내 재 검색

검색

10개씩보기

CAS번호	영문명	국문명	고유번호					관련법 규제정보	시험 자료
			기준화학 물질	등록대상 기준화학 물질	유독물질	제한물질	금지물질		
106-42-3	p-Xylene [이명 : 1,4-Dimethylbenzene; 1,4-Xylene; 4-Methyltoluene; Benzene, 1,4-dimethyl-; para-Xylene; p-Xylol; XYLENE, P-; XYLENE, PARA-;]	p-자일렌 [이명 : 1,4-다이메틸벤젠; 1,4-디메틸벤젠; 1,4-자일렌; 4-메틸톨루엔; 파라자일렌; 파라-자일렌; 파라크실렌; p-디메틸벤젠; p-메틸톨루엔; p-자일롤; p-크실렌;]	KE-35430	110	97-1-275				정보보기

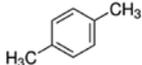
그림 5_

CAS No.를 이용한 화학물질정보시스템(NCIS)검색 예시

화학물질 식별정보의 확인

- > 화학물질의 명칭, CAS No. 등 고유번호, 분자식·구조식, 순도(%), 확인된 불순물·부산물 등의 식별정보를 같이 확인
 - 취급하는 물질에 대한 보다 정확하고 신뢰성 있는 정보를 확보
 - 현실적으로도 법에서 정한 의무사항을 이행하기 위하여 필요
- > 단일성분으로 구성된 화학물질의 CAS No.나 물질명을 알고 있는 경우 고유번호와 분자식·구조식의 식별정보를 비교적 쉽게 얻을 수 있음²
 - [예시] CAS No. 106-42-3을 알고 있는 경우, 국립환경과학원 화학물질정보시스템(<http://ncis.nier.go.kr>)에서 검색하면 물질명(p-Xylene(파라-자일렌))과 고유번호, 분자식·구조식을 다음과 같이 확인 가능

예시. CAS No. 106-42-3을 알고 있는 경우

화학물질명	p-Xylene			
고유번호	CAS No. 106-42-3			
분자식 및 구조식	기존화학물질번호 KE-35430		유독물질번호 97-1-275	
순도(%)	분자식	C ₈ H ₁₀ 또는 C ₆ H ₄ (CH ₃) ₂	구조식	

- > 식별정보 중 순도(%) 및 불순물·부산물 정보 확인은 사업자가 관련된 자료를 수집하거나 생산하여 확인해야 함
 - 순도 확인을 위한 정성분석과 정량분석을 통한 자료 수집
 - 유기화학물질 : GC 또는 HPLC 등을 활용한 분석
 - 무기화학물질 또는 금속류 : AAS, ICP-AES 등을 활용한 분석
- > 불순물·부산물이 확인된 경우
 - 개별 불순물·부산물의 화학물질명, CAS No., 함량(또는 함량범위)을 기재

2. 제3장 화학물질 확인방법 중 1.일반적인 화학물질 확인 가. 화학물질 식별정보의 확인 참조

단일성분으로 구성된 화학물질을 확인 예시

- > 화학물질의 명칭, 고유번호, 분자식 중 하나를 검색하여 화학물질정보시스템에서 필요한 정보 확인

표 4

단일성분으로 구성된 물질(스티렌)의 확인

1) 화학물질정보시스템을 활용한 식별정보 확인

국립환경과학원 화학물질정보시스템의 검색기능을 활용하여 아래와 같은 식별정보를 얻을 수 있다.

• **Vinylbenzene; Styrene, Ethenylbenzene**
• CAS 번호 : 100-42-5

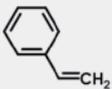
검색	기본 정보	분류 표시	시험자료	기타자료
● 일반정보				
구조식	<ul style="list-style-type: none"> - CAS 번호 100-42-5 - [분자식] - [국제화학물질] KE-25342 - [분자량] 	<ul style="list-style-type: none"> - [RECS 번호] - [UN번호] - [EC 번호] - [HS번호] - [CSC번호] 		
● 물질번호 및 위험정보				
물질구분	고유번호	혼합물(제품)위험정보	비고	
기초화학물질	KE-35342			
대량생산화학물질	V			
특대상기초화학물질	96			
<small> ※ 대량생산화학물질은 OECD회원국 별도 연간 인출이상 생산·수입되는 화학물질로 기초화학물질 제14대부 단산자는 별개입. 즉, 대량생산화학물질에만 체크되어 있는 경우, 기초화학물질 다님 </small>				

2) 시험자료를 활용한 물질정보 확인

- 해당물질(스티렌)에 대해 GC를 활용한 정성 및 정량 분석 결과를 기초로 순도 및 불순물 등 성분 정보를 확인할 수 있으며, 불순물에 대해서도 확인이 필요
- GC 외에도 구성성분을 효과적으로 분리할 수 있는 분석방법도 적용 가능

3) 물질확인 결과 예시

해당정보는 시행규칙 별지 제2호 화학물질의 등록·변경등록 신청서 등의 작성에 활용 가능

화학물질명	Vinylbenzene 또는 Styrene			
고유번호	CAS No. 100-42-5 기존화학물질번호 KE-35342			
분자식 · 구조식	분자식	C ₈ H ₈ 또는 C ₆ H ₅ CHCH ₂	구조식	
	순도 (%)	>99%(W/W)		
확인된 불순물	화학물질명	CAS No.	함량	
	2-Phenylpropene	98-83-9	0.01-0.04% (w/w)	
	Ethylbenzene	100-41-4	0.007-0.3% (w/w)	
	Toluene	108-88-3	<0.0010% (w/w)	
	Benzene	71-43-2	0.0-0.04% (w/w)	
	p-Xylene	106-42-3	<120.0 ppm	
	m-Xylene	108-38-3	<200.0 ppm	
	o-Xylene	95-47-6	<300.0 ppm	

혼합물을 구성하는 개별물질의 식별정보 확인

- > 단일성분으로 구성된 화학물질에서 기술한 방법과 동일
- > 혼합물을 구성하는 개별물질의 CAS No., 명칭 등을 화학물질정보시스템에 개별물질별로 필요한 정보를 검색하여 확인 가능
- > 등록 또는 신고가 필요한 화학물질이 함유되어 있는 것으로 확인되는 경우 확인된 물질별로 시행규칙 별지 제2호 [화학물질의 등록·변경등록 신청서] 또는 별지제5호의3 [화학물질의 신고·변경신고 신청서]를 작성

표 5_

혼합물 내 화학물질 식별정보의 확인

1) 혼합물 구성성분 확인

수입한 희석제 A의 성분명세서에 따르면 A를 구성하는 개별물질은 다음과 같다. 국립한경과학원의 화학물질정보시스템(<http://ncis.nier.go.kr>)이나 환경부가 지정·고시한 기존화학물질 목록(환경부고시)을 통하여 개별물질이 등록 등 대상 여부를 확인한 결과 모두 기존화학물질로 등록 등 대상에 해당되는 경우이다. 그러므로 각각의 물질을 확인하여 시행규칙 별지 제2호서식을 작성하여야 한다. 단, 해당 물질은 모두 기존화학물질 등록 기준에 해당하는 연간 1톤 이상으로 제조 또는 수입하는 경우를 가정한다.

희석제 A의 구성성분

화학물질명	CAS No.	함량 (%)
Acetone	67-64-1	75
n-Hexane	110-54-3	15
4-Methyl-2-pentanone (MIBK)	108-10-1	10

2) 식별정보의 확인

① 아세톤(Acetone)의 화학물질정보시스템 검색 결과 다음의 식별정보를 얻을 수 있다.

- 아세톤 : 2-프로판논; 다이메틸프로판데하이드; 다이메틸 케톤; 베타-케토프로판; 메틸 케톤; 프로판논; 락톤; 피로아세트 에테르
- Acetone : 2-Propanone; Beta-Ketopropane; Dimethyl Ketone; Methyl Ketone; Propanone; Ketone Propane; Ketone, Dimethyl
- CAS 번호 : **67-64-1**

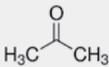
전체	기본 정보	분류 표시	시험자료	기타자료
일반정보				
<div style="border: 1px solid #ccc; padding: 5px; margin-bottom: 5px;"> <p style="text-align: center; font-size: small;">구조식</p> <div style="text-align: center;">  </div> </div>	<ul style="list-style-type: none"> - [CAS 번호] 67-64-1 - [분자식] C3H6O - [기준화합물일] KE-29367 - [분자량] 58.08 	<ul style="list-style-type: none"> - [RTECS 번호] AL3150000 - [EUN번호] - [EC 번호] 200-662-2 - [HS번호] 2914 11 - [ICSC번호] 0087 		
물질번호 및 규명정보				
물질구분	고유번호	혼합물(대물)규명정보		비고
기존화학물질	KE-29367			
대량생산화학물질	V			
<ul style="list-style-type: none"> ■ 대량생산화학물질은 OECD회원국 별로 연간 천톤 이상 생산, 수입되는 화학물질로 기존화학물질 해당여부 판단과는 별개임. ■ 즉, 대량생산화학물질에만 체크되어 있는 경우, 기존화학물질 아님 				
고시정보				
고시일자	고시정보			
2014-12-30	기존화학물질 : 환경부고시 제2014-237호			

A) 분석자료를 활용한 물질정보 확인 - 구성성분 1. Acetone의 확인

사업자는 국외 제조·생산자로부터 확보한 GC 분석 결과를 바탕으로 아세톤에 대한 순도 및 불순물 등 성분 정보를 확인할 수 있다. 불순물이 확인된 경우 해당 불순물에 대한 확인도 필요하다. 화학물질의 확인은 GC 이외에도 구성성분의 효과적 분리가 가능한 다양한 기법의 적용이 가능하다.

B) 물질확인 결과 예시

해당정보는 시행규칙 별지 제2호서식 (화학물질의 등록·변경등록 신청서 등의 작성에 활용)

화학물질명	Acetone			
고유번호	CAS No. 67-64-1 (기존화학물질번호 KE-29367)			
분자식 · 구조식	분자식	C3H6O	구조식	
순도 (%)	>99.5%(W/W) 해당 물질의 분석된 순도 기재			
확인된 불순물	화학물질명	CAS No.	함량범위	
	Toluene	108-88-3	<0.0010% (w/w)	
	Benzene	71-43-2	<0.01% (w/w)	

② 톨루엔(Toluene)의 화학물질정보시스템 검색 결과 다음의 식별정보를 얻을 수 있다.

- 톨루엔 : 매질번호: 매질번호: 매질번호
- Toluene
- CAS 번호 : 108-88-3

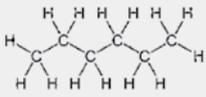
전체	기본 정보	분류 표시	시험자료	기타자료
○ 일반정보				
구조식	<ul style="list-style-type: none"> • [CAS 번호] 108-88-3 • [분자식] • [기존화학물질] KE-33936 • [분자명] 	<ul style="list-style-type: none"> • [RECS 번호] • [EUV번호] 1294 • [EC 번호] • [HS번호] • [BCSC번호] 		
○ 물질번호 및 할량정보				
물질구분	고유번호	순한물(계량)할량정보		비고
기존화학물질	KE-33936			
유류물질	97-1-298	톨루엔 및 아를 85% 이상 함유한 혼합물		
사고대비물질	28	톨루엔 및 아를 85% 이상 함유한 혼합물		
대량생산화학물질	V			
중대위험화학물질	131			

■ 대량생산화학물질은 OECD회원국 별로 연간 원천이상 생산, 수입되는 화학물질로 기존화학물질 해당여부 판단과는 별개임.
 즉, 대량생산화학물질이면 체크되어 있는 경우, 기존화학물질 여부

A) 분석자료를 활용한 물질정보 확인 - 구성성분 2,3-n-Hexane, MIBK의 확인
 추가 2개 물질(n-Hexane과 4-Methyl-2-pentanone (MIBK))에 대해 국외 제조·생산
 자로부터 확보한 GC를 활용한 정성 및 정량 분석 결과를 기초로 순도 및 불순물 등 성분
 정보를 확인할 수 있으며, 각각에 대하여 불순물 정보 확인이 필요하다. GC 외에도 구성
 성분을 효과적으로 분리할 수 있는 분석기법도 사용 가능하다.

B) 물질확인 결과 예시

두 개의 물질 중 n-Hexane의 확인된 정보를 요약하면 다음과 같으며, 해당정보는 시행
 규칙 별지 제2호서식 (화학물질의 등록·변경등록 신청서) 등의 작성에 활용할 수 있
 다. 마지막으로 4-methyl-2-pentanone (MIBK)에 대하여도 아세톤과 n-Hexane과 동
 일한 확인 과정을 수행할 수 있다.

화학물질명	n-Hexane; Hexane		
고유번호	CAS No. 110-54-3 (기존화학물질번호 KE-18626)		
분자식 · 구조식	분자식	C ₆ H ₁₄	구조식 
순도 (%)	>99.9%(W/W) 해당 물질의 분석된 순도 기재		
확인된 불순물	화학물질명	CAS No.	함량범위
	Benzene	71-43-2	<0.01% (w/w)

2.2.2 반응생성물의 확인

반응생성물(Reaction product)

- > 단일성분으로 구성된 화학물질과 달리 반응결과 여러 종류의 화학물질이 함께 얻어진 경우로 개별물질로 각각 분리할 수 없다는 점에서 혼합물과도 구별

반응생성물의 명명방법

- > 반응생성물의 CAS No.를 알고 있는 경우
- 화학물질정보시스템에서 해당 물질의 명칭과 고유번호 등을 확인 가능

예시. CAS No. 68411-20-1을 입력하여 화학물질명과 고유번호를 확인한 결과

The screenshot shows a search interface with a search bar containing '68411-20-1' and a '화학물질 검색' button. Below the search bar, there are options for '검색결과 총 1건' and '결과 내 재 검색'. A table displays the search results for the CAS No. 68411-20-1.

CAS번호	영문명	국문명	고유번호							
			가스화학 물질	유류대상 기름화학 물질	유독물질	계면활성	공기중립	사고대 물질	환경영 향정보	시험 자료
68411-20-1	Reaction products of butanal and aniline		KE-90100							

- > 반응생성물의 CAS No.를 모르는 경우
- 반응생성물을 생산하기 위해서 필요한 출발물질을 활용
 - 주요 출발물질을 나열하고 생성물이 이들의 반응물임을 표현하며 출발물질 중 반응 개시 당시에 가장 높은 농도 비율을 지닌 성분의 순서대로 나열
 - 반응을 개시할 당시 출발물질이 A, B, C 3종, A가 가장 높은 함량인 경우 최종 반응생성물의 명명방법

A reaction product with B and C 또는 Reaction products of A with B and C

- 최종 얻어지는 생성물을 기준으로 명명
 - 반응 결과 최종 생성물이 X, Y, Z 3종 물질이 혼합된 상태로서 출발물질의 정확한 함량을 확인할 수 없고 이를 기술적으로 분리할 수 없거나 분리할 필요가 없는 경우의 명명방법

Reaction mixture of X, Y and Z 또는 Mixture of X, Y and Z

화학물질 식별정보의 확인

- > 반응생성물에 대한 화학물질명, CAS No. 등 고유번호, 분자식·구조식, 순도 (%), 확인된 불순물·부산물 등의 식별정보를 확인
- 유기화학물질 : NMR, FTIR, GC 또는 HPLC, 질량분석기 등을 활용
- 무기화학물질 : NMR, FTIR, ICP-AES, AAS, X선 회절분석기 등을 이용
- > 반응생성물로 구성된 화학물질을 확인 예시
 - 반응출발물질을 기초로 화학물질을 명명하고 확인된 정보를 기재
 - CASNo.를 알고 있는 경우(반응출발물질을 활용한 명명방법과 식별정보 확인)
 - CASNo.를 모르는 경우(반응출발물질을 활용한 명명방법과 식별정보 등 확인)
 - 출발물질이 모두 기존화학물질로 등록 등 대상 물질에 해당되더라도 반응생성물을 하나의 물질로 취급하여 기존화학물질여부를 확인하여 등록의무 이행 필요

표 6_

반응출발물질을 활용한 명명방법과 식별정보 등 확인(CAS No.를 알고 있는 경우)

1) 화학물질정보시스템(<http://ncis.nier.go.kr>)을 활용한 식별정보 확인
반응 출발물질인 Styrene과 Phenol 및 Cresol과의 반응 생성물인 Styrene reaction products with phenol and cresol의 구성성분은 다음의 표와 같다.

주요 구성성분 (반응출발물질)	함량(%)	CAS No.	화학물질명
Styrene	60	100-42-5	Styrene reaction products with phenol and cresol
Phenol	30	108-95-2	
Cresol	10	15831-10-4	

제조·수입자가 CAS No.를 알고 있는 경우 국립환경과학원의 화학물질정보시스템을 활용하여 아래와 같이 고유번호 등의 확인이 가능하다.

• Styrene reaction product with phenol and cresol
• CAS 번호 : 73378-69-5

전체	기본 정보	분류 표시	시험자료	기타자료
일반정보				
구조식	<ul style="list-style-type: none"> • [CAS 번호] 73378-69-5 • [분자식] • [기준화학물질] KE-32309 • [분자명] 	<ul style="list-style-type: none"> • [RECS 번호] • [UN번호] • [EC 번호] • [HS번호] • [BSC번호] 		
물질번호 및 할당정보				
물질구분	고유번호	순합성(계통)할당정보		비고
기준화학물질	KE-32309			
<p>■ 대량생산화학물질은 OECD회원국 발표 연간 원천이상 생산, 수입되는 화학물질로 기준화학물질 해당여부 판단과는 별개임. 즉, 대량생산화학물질에만 체크되어 있는 경우, 기준화학물질 아님</p>				
고시정보				
고시일자	고시정보			
2014-12-30	기준화학물질 : 환경부고시 제2014-237호			

2) 물질 확인 결과 예시

분자식, 구조식, 순도와 불순물 등은 정성 및 정량 분석자료를 활용하여 파악

화학물질명	Styrene reaction products with phenol and cresol			
고유번호	CAS No. 73378-69-5, 기준화학물질 고유번호 KE-32309			
분자식 · 구조식	분자식	해당물질의 분자식 기재	구조식	해당물질의 구조식 기재
순도 (%)	>97% (w/w) 해당 반응생성물의 분석된 순도 기재			
확인된 불순물	없음			

표 7_

반응출발물질을 활용한 명명방법과 식별정보 등 확인(CAS No.를 모르는 경우)

1) 화학물질 명명

Phosphorous pentachloride와 Ammonium chloride를 혼합하여 반응생성물을 제조하였으나, 최종 생성물의 확인이 어려운 경우 다음과 같이 출발물질을 활용하여 명명할 수 있다. Phosphorous pentachloride, Ammonium chloride 순으로 나열한다. Phosphorous pentachloride reaction product with Ammonium chloride로도 병행 사용 가능하다.

주요 구성성분 (반응출발물질)	함량(%)	CAS No.	화학물질명
Phosphorous pentachloride	65	10026-13-8	Reaction products with phosphorous pentachloride and ammonium chloride
Ammonium chloride	< 35	12125-02-9	

2) 화학물질정보시스템을 활용한 물질정보 확인

• Reaction product with phosphorous pentachloride and ammonium chloride

전체	기본 정보	분류 표시	시정자료	기타자료
----	-------	-------	------	------

● 일반정보

구조식	- [CAS 번호]	- [RECS 번호]
	- [분자식]	- [UN번호]
	- [기준화학물질] 98-3-1065	- [EC 번호]
	- [분자량]	- [HS번호]
		- [BSC번호]

● 물질번호 및 할당정보

물질구분	고유번호	준합물(예외)할당정보	비고
기준화학물질	98-3-1065		

■ 대량생산화학물질은 OECD회원국 별로 연간 정론이상 생산, 수입되는 화학물질로 기준화학물질 해당여부 판단과는 별개임.
 즉, 대량생산화학물질에만 체크되어 있는 경우, 기준화학물질 아님

● 고시정보

고시일자	고시정보
2014-12-30	기준화학물질 : 환경부고시 제2014-237호

국립환경과학원의 화학물질정보시스템(<http://ncis.nier.go.kr>)에서 명명한 화학물질명을 검색한 결과 아래와 같이 영문명과 유독물 등에 해당하지 아니하는 물질(98-3-1065)로 고시되어 있으므로 기준화학물질로 간주할 수 있음

3) 물질 확인 결과 예시

분자식, 구조식, 순도와 불순물 등은 정성 및 정량 분석자료를 활용한다.

화학물질명	Reaction products with phosphorous pentachloride and ammonium chloride			
고유번호	98-3-1065			
분자식 · 구조식	분자식	해당물질의 분자식 기재	구조식	해당물질의 구조식 기재
순도 (%)	>98% (w/w) 해당 반응생성물의 분석된 순도 기재			
확인된 불순물	없음			

- > 최종 얻어지는 반응생성물을 기준으로 화학물질명 명명
- 출발물질을 확인하거나 분리할 수 없는 반응생성물의 경우 최종 생성물을 하나의 물질로 간주하여 명명
- 반응 혼합물(Reaction mixture)은 최종으로 얻어지는 각각의 구성 물질에 대한 화학물질명 및 CAS No., 함량 등에 대한 정보를 토대로 확인하여 명명
- 최종생성물만 확인이 가능한 반응생성물에 대해서는 단일한 분자식, 구조식 등의 식별정보 확인이 곤란하므로 등록 등을 위한 관련서류에는 최종생성물을 각각 기재하고 검토기관(국립환경과학원)이 관련 자료를 요구하는 경우 제출 필요
- 반응 혼합물(Reaction mixture)은 최종으로 얻어지는 각각의 구성 물질에 대한 화학물질명 및 CAS No., 함량 등에 대한 정보를 토대로 확인하고 필요한 경우, 이에 대한 분석 정보(GC, HPLC와 같은 분석자료)와 이를 기초로 한 불순물 등의 정보 작성

표 8_

최종 생성물질을 활용한 화학물질 명명방법과 정보 확인

1) 화학물질명 확인

Disodium hydroxysulfinacetate와 Disodium hydroxysulfoacetate 2가지의 최종 생성물이 확인되는 경우 화학물질명은 함량이 높은 최종생성물을 우선 나열하여 Reaction mixture of disodium hydroxysulfinacetate and disodium hydroxysulfoacetate이 된다.

최종 생성물	CAS No.	함량(%)	물질명
Disodium hydroxysulfinacetate	29736-24-1	70	Reaction mixture of disodium hydroxysulfinacetate and disodium hydroxysulfoacetate
Disodium hydroxysulfoacetate	223106-41-0	30	

2) 화학물질정보시스템을 활용한 물질정보 확인

명명된 화학물질명을 검색어로 국립환경과학원의 화학물질정보시스템(<http://ncis.nier.go.kr>)을 검색하면, 유해성 심사 결과 “유독물 등에 해당하지 아니하는 물질”로서 고유번호는 있으나 CAS No.가 부여되지는 않았음을 확인할 수 있다.

• Reaction mixture of disodium hydroxysulfinacetate and disodium hydroxysulfoacetate

전체	기본 정보	분류 표시	시험자료	기타자료
----	-------	-------	------	------

● 일반정보

구조식	- [CAS 번호] - [분자식] - [기준화학물질] 2010-3-4260 - [분자량]	- [RECS 번호] - [UN번호] - [EC 번호] - [HS번호] - [BSCC번호]
-----	--	--

● 물질번호 및 함량정보

물질구분	고유번호	조합물(여름)함량정보	비고
기준화학물질	2010-3-4260		

※ 대량생산화학물질은 OECD회원국 별로 연간 정론이상 생산, 수입되는 화학물질로 기준화학물질 해당여부 판단과는 별개임.
 즉, 대량생산화학물질에만 체크되어 있는 경우, 기준화학물질 아님

● 고시정보

고시일자	고시정보
2014-12-30	기준화학물질 : 환경부고시 제2014-237호

3) 물질 확인 결과 예시

분자식, 구조식, 순도와 불순물 등은 정성 및 정량 분석 자료를 활용하며, 분자식과 구조식의 경우는 최종 생성물인 Disodium hydroxysulfinoacetate와 Disodium hydroxysulfoacetate 각각에 대하여 확인하여 기재한다.

화학물질명	Reaction mixture of disodium hydroxysulfinoacetate and disodium hydroxysulfoacetate			
고유번호	유독물에 해당되지 아니하는 물질(2010-3-4260) CAS No. 없음			
분자식 · 구조식	분자식	해당물질의 분자식 기재	구조식	해당물질의 구조식 기재
순도 (%)	>98% (w/w) 해당물질의 분석된 순도 기재			
확인된 불순물	없음			

2.2.3 고분자화합물

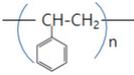
고분자화합물의 정의 [시행령 제2조제3호]

다음 각 목의 요건을 모두 갖춘 화학물질

중량비 2퍼센트 이하의 단량체를 제외한 단량체로 구성된 고분자화합물이 기존화학물질에 해당하는 경우 그 고분자화합물은 기존화학물질로 봄

- 가. 1종 이상의 단량체단위가 연속하여 반복되는 분자로 이루어져 있을 것
- 나. 각 분자 내 단량체단위의 반복수에 따라 특징적 분자량 분포를 보일 것
- 다. 세 개 이상의 단량체단위가 적어도 한 개 이상의 단량체단위 또는 다른 반응물과 공유결합을 이루는 분자가 50퍼센트 이상일 것
- 라. 분자량이 같은 분자가 중량비로 50퍼센트를 초과하지 아니할 것

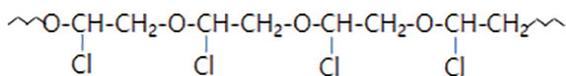
- > 고분자화합물 여부 결정 조건
 - 고분자화합물의 정의에 만족해야 함
 - [예시] Polystyrene
 - 다음의 표에서 제시하는 사례 중에서 세 번째만 고분자화합물의 정의를 만족
 - 사례 1은 3개 이상의 단량체 단위($n \geq 3$)의 분자량이 총 40%로 두 번째 조건을 충족시키지 않음
 - 사례 2는 반복되는 단량체 단위 중 하나($n=3$)의 함량이 75%로 동일한 분자량의 중량비가 50% 미만이어야 한다는 세 번째 조건에 맞지 않음
 - 사례 3은 3개 이상의 단량체 단위($n \geq 3$)의 분자량 비율이 90%이며 분자량이 같은 분자 중 어느 것도 중량비로 50%를 넘지 않으므로 고분자화합물의 정의를 만족

	사례 1	사례 2	사례 3
n=1	30%	0%	5%
n=2	30%	10%	5%
n=3	15%	75%	40%
n=4	13%	15%	30%
n=5	12%	0%	20%
합계	100%	100%	100%

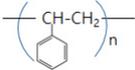
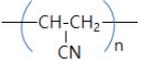
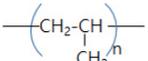
* n은 단량체 단위가 반복되는 횟수

명명방법

- > 고분자의 명명법은 원료기준 명명법과 IUPAC의 구조기준 명명법으로 명명
 - 원료기준 명명법은 고분자로 파생된 출발물질의 이름 앞에 폴리(poly)라는 접두사 사용
 - 단량체가 두 개 이상의 단어로 구성된 경우에는 괄호를 사용
 - 구조적 반복단위(Constitutional Repeating Unit, CRU)의 한 종류만의 화학적으로 구성되고 한가지의 순차적 배열과 하나만의 띠를 가지는 유기고분자는 poly(CRU)로 표기
- > 고분자 명명 예시



- [예시] A제품
 - 옥시(1-클로로에틸렌)이 반복되고 있으며, 폴리[옥시(1-클로로에틸렌)]으로 명명
- 원료기준 명명법과 구조기준 명명법에 대한 예시

고분자	원료기준 명명법	구조기준 명명법
	polystyrene	poly(1-phenylethene)
	poly(acrylonitrile)	poly(1-cyanoethene)
	polypropylene	poly(1-propene)

- 원료물질이 스티렌인 고분자화합물은 polystyrene 또는 구조기준으로 페닐기의 1번 위치에 에텐기가 있는 것이므로 poly(1-phenylethene)이라고 명명
- 단량체단위 propylene을 중합하여 얻은 고분자화합물은 polypropylene 또는 poly(propylene) 또는 poly(1-propene)로 모두 명명
- 명명된 화학물질명으로 검색결과 CAS No.(9003-07-0), KE No. (KE-29389) 등 고유번호를 확인 가능

1-Propene homopolymer: Polypropylene
CAS 번호 : 9003-07-0

전체	기본 정보	분류 표시	시험자료	기타자료
▶ 일반정보				
구조식	- [CAS 번호] 9003-07-0 - [분자식]	- [RETECS 번호] - [UN번호]		
	- [기준화학물질] KE-29389 - [분자명]	- [EC 번호] - [HS번호] - [ICS번호]		
▶ 물질번호 및 함량정보				
물질구분	고유번호	순합물(재품)함량정보	비고	
기준화학물질	KE-29389			
<small>1 대량생산화학물질은 OECD회원국 별로 연간 천톤이상 생산, 수입되는 화학물질로 기준화학물질 해당여부 판단과는 별개임. <small>즉, 대량생산화학물질에만 체크되어 있는 경우, 기준화학물질 아님</small> </small>				
▶ 고시정보				
고시일자	고시정보			
2014-12-30	기준화학물질 : 환경부고시 제2014-237호			

그림 6_ 명명된 화학 물질명으로 검색

- 단량체단위 A, B, C를 중합하여 얻을 수 있는 고분자화합물의 경우 다음과 같이 표기

A, polymer with B and C

예시. 단량체로 중합반응을 거쳐 생성된 고분자 화합물의 명명

단량체	고분자화합물 명칭 및 CAS No.
Caseins [CAS No. 9000-71-9]	Caseins, polymer with formaldehyde and phenol [CAS No. 68475-72-9]
Formaldehyde [CAS No. 50-00-0]	
Phenol [CAS No. 108-95-2]	

- Caseins, Formaldehyde, Phenol을 단량체로 하여 중합반응을 거쳐 고분자 화합물을 제조한 경우, 실제 단량체의 비율과는 무관하게 고분자화합물 명명 시 다음 3가지 경우로 명명 가능
 - ▣ Caseins, polymer with formaldehyde and phenol
 - ▣ Formaldehyde, polymer with caseins and phenol
 - ▣ Phenol, polymer with caseins and formaldehyde
- 고분자화합물 자체가 단량체인 X, Y로 구성된 고분자화합물의 명명
 - ▣ Polymer X, polymer with Polymer Y
 - ▣ Polymer Y, polymer with Polymer X

Caseins, polymers with formaldehyde and phenol
CAS 번호 : 68475-72-9

진제	기본 정보	분류 표시	시열자료	기타자료
----	-------	-------	------	------

▶ 일반정보

구분	구분	구분
구조식	<ul style="list-style-type: none"> ▣ [CAS 번호] 68475-72-9 ▣ [분자식] ▣ [기준화합물] KE-04902 ▣ [분자량] 	<ul style="list-style-type: none"> ▣ [RECS 번호] ▣ [IUPAC] ▣ [EC 번호] ▣ [HS번호] ▣ [BCSC번호]

▶ 물질번호 및 함량정보

물질구분	고유번호	순입물(제품)함량정보	비고
기준화합물	KE-04902		

▶ 대량생산화학물질은 OECD회원국 별로 연간 정론이상 생산, 수입되는 화학물질로 기준화학물질 해당여부 판단과는 별개로, 대량생산화학물질에만 체크되어 있는 경우, 기준화학물질 아님

▶ 고시정보

고시일자	고시원본
2014-12-30	기준화학물질 : 환경부고시 제2014-237호

그림 7_

단량체로 중합반응을 거쳐 생성된 고분자 화합물의 물질명 검색

화학물질 식별정보의 확인

- > 고분자화합물의 정보를 확인할 수 있는 분석방법
- 겔침투 크로마토그래피(GPC)를 이용한 측정이 일반적임
 - OECD 시험지침 118³은 GPC를 활용한 수평균 분자량(Mn) 및 분자량 분포도를 결정할 수 있는 방법임
- GPC를 활용하기 어려운 경우로서 수평균 분자량이 20,000 미만인 고분자에 대하여는 끓는점오름, 어는점내림, 증기압내림, 증기압삼투압법의 방법을 적용
- 수평균분자량 20,000~200,000인 고분자는 분리막 삼투압법을 이용
- 질량분광분석법으로 분자량 분포를 확인, 핵자기 공명 분광법(NMR, Nuclear Magnetic Resonances Spectroscopy) 등을 통하여 분자구조를 확인 가능

2.2.4 구조를 확인할 수 없는 물질

구조를 확인할 수 없는 물질

- > 구성성분이 다양하며 구성물질에 대한 조성이 명확하지 않고 가변적이어서 단일의 조성정보를 얻기 거의 불가능한 물질
- > 일부 석유정제물, 석유계물질, 천연추출물 등이 이에 해당

명명방법

- > CAS No.를 알고 있는 경우
- 국립환경과학원 화학물질정보시스템(<http://ncis.nier.go.kr>)을 활용하여 화학물질명 등의 정보 확인

3. OECD 시험지침 118 (Determination of the Number-Average Molecular Weight and the Molecular Weight Distribution of Polymers using Gel Permeation Chromatography)

- > CAS No.를 모르는 경우
 - 원료 및 공정을 조합해서 해당 물질의 명칭 명명
 - 천연 원료의 원인이 되는 생물의 속(genus), 종(species)을 확인, 원료에서 물질을 추출하는 경우 그 추출방식, 추출에 사용된 용제, 기타 관련 조건(온도나 온도범위) 확인 필요
- > 명명의 예시
 - 꿀에서 추출한 물질은 그 원료인 꿀(honey)과 공정방법인 추출(extraction)을 조합하여 Honey, ext.로 명명
 - 소나무 송진에서 추출한 칼륨염은 송진(rosin)과 공정방법인 추출(extraction)을 조합하여 Rosin, ext., K salt로 명명

예시. 천연 원료의 추출 및 정제공정으로 명명

KE번호	CAS No.	화학물질명
KE-19971	91052-92-5	Honey, ext.
KE-30353	91081-47-9	Rosin, ext., K salt

Honey, ext.
CAS 번호 : 91052-92-5

전체	기본 정보	분류 표시	시험자료	기타자료
▶ 일반정보				
구조식	- [CAS 번호] 91052-92-5 - [분자식] - [기준화학물질] KE-19971 - [분자양]	- [RTECS 번호] - [EINECS] - [EC 번호] - [HS번호] - [CSC번호]		
▶ 물질번호 및 함량정보				
물질구분	고유번호	혼합물(계량)함량정보	비고	
기준화학물질	KE-19971			
<small>† 해당생산화학물질은 OECD회원국 별로 연간 원천이상 생산, 수입되는 화학물질로 기준화학물질 해당여부 판단자는 불가함. <small>※, 해당생산화학물질에만 체크되어 있는 경우, 기준화학물질 아님</small> </small>				
▶ 고시정보				
고시일자	고시정보			
2014-12-30	기준화학물질 : 환경부고시 제2014-237호			

그림 8_

천연원료의 추출 및 정제공정으로 생성된 화학물질의 물질명으로 검색

화학물질 식별정보의 확인

- > 구조를 확인할 수 없는 물질의 경우
- 분석 가능한 주요성분의 정보를 확인
- 방향족 관능기의 함유 여부, 불포화 또는 포화 여부, 탄소사슬의 범위, 연결구조(선형 또는 가지형) 등과 함께 유해성 분류에 영향을 미치는 성분에 대한 정보를 준비

2.2.5 유형별 화학물질의 명명방법 및 식별정보 확인의 주요사항

표 9
화학물질 유형별 확인사항

물질 유형	주요 확인 사항
단일성분으로 구성된 화학물질	<ul style="list-style-type: none"> • CAS No.가 있는 경우: 국립환경과학원 화학물질정보시스템에서 CAS No.로 화학물질명, 구조식, 분자식 등 확인 • CAS No. 없는 경우: 분자식, 구조식 등을 확인한 후 화학물질 명명 • 순도확인: 정성분석 후 정량분석방법에 따라 순도 분석 • 불순물 및 부산물이 유해화학물질인 경우 정량분석 필요
반응생성물	<ul style="list-style-type: none"> • 혼합물인 경우, 구성 물질별 식별정보 및 함량 확인 필요. 구성물질의 명칭, CAS No. 등 식별 정보 검색에 있어서는 단일성분으로 구성된 화학물질 확인방법을 활용 • 반응생성물의 CAS No.가 있는 경우: 국립환경과학원 화학물질정보시스템에서 해당물질의 명칭과 고유번호 등을 확인 • CAS No.가 없는 경우: 반응출발물질 또는 반응 최종 생성물로 명명 • 순도확인: 정량분석방법에 따라 순도 분석 • 불순물 및 부산물이 유해화학물질인 경우 성분확인 및 정량분석 필요
고분자화합물	<ul style="list-style-type: none"> • CAS No.를 알고 있는 경우: 국립환경과학원 화학물질정보시스템에서 해당물질의 명칭과 고유번호 등을 확인 • CAS No.를 모르는 경우: 반응 개시물질 또는 단량체 정보를 활용하여 그 물질명을 정하고, 분자량, 수평균분자량, 분자량 분포, 단량체 정보, 순도, 불순물 정보 등 확인 필요
구조를 확인할 수 없는 물질	<ul style="list-style-type: none"> • CAS No.를 알고 있는 경우: 국립환경과학원 화학물질정보시스템에서 해당물질의 명칭과 고유번호 등을 확인 • CAS No.가 없는 경우: 원료, 추출, 분류, 정제 등 공정을 조합하여 명명

제3장 동일 화학물질 여부 확인

- 3.1. 수화물(Hydrate)의 확인
- 3.2. 염류(Salts) 및 화합물(compounds)의 확인
 - 3.2.1 염류(Salts)의 확인
 - 3.2.2 화합물(Compounds)의 확인
 - 3.2.3 이성질체(Isomers)의 확인

동일 화학물질 여부 확인

- > 서로 다른 화학물질명, CAS No., 분자식을 가지더라도 동일한 물질로 간주할 수 있는 물질에 대한 동일 화학물질 여부 확인 필요
- > CAS No.의 일치 여부를 통한 동일 화학물질 여부 확인
 - [예시] 기존화학물질로 지정 고시된 물질과 CAS No.가 일치하는 경우 물질의 동일성을 확인할 수 있음
- > CAS No.가 일치하지 않더라도 기존화학물질로 간주될 수 있는 물질
 - [예시] 무수물과 수화물
 - 무수물 : Sodium citrate, CAS No. 68-04-2, 분자식 C₆H₈O₇.3Na
 - 수화물 : Sodium citrate dihydrate, CAS No. 6132-04-3, 분자식 C₆H₈O₇.2H₂O.3Na

표 10_

동일 화학물질 여부 확인

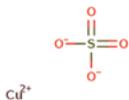
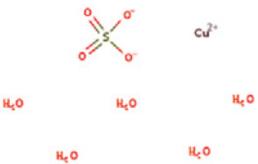
물질 유형	확인 사항
수화물	<ul style="list-style-type: none"> • 물질명, CAS No., 분자식, 구조식이 동일하지 않으나 구조식에서 물분자를 제외한 무수물은 수화물과 동일한 물질로 간주됨 • 어떤 물질의 무수물과 수화물은 동일한 물질로 각각의 등록이 아닌 하나의 등록이 필요
염류	<ul style="list-style-type: none"> • 동일한 물질에서 생성되는 각기 다른 염들은 출발물질(산 또는 염기)과 전혀 다른 물질로 간주하여 별도 등록 필요 • 염류 물질의 식별 정보는 각각의 물질이 유사물질이 아니라 다른 물질로 간주되므로 각 물질별 별도 등록 준비 필요
화합물	<ul style="list-style-type: none"> • 화합물은 각각 하나의 물질로 간주하여 각각의 화합물질별 등록 준비 필요 • 금속화합물의 경우에도 동일 금속화합물에 해당되어도 각각의 금속화합물은 동일한 물질로 간주하지 않음
이성질체	<ul style="list-style-type: none"> • 동일한 분자식을 가지나 분자 내에 있는 구성원자의 연결방식이나 공간배열이 동일하지 않는 물질로서 각각의 이성질체 물질은 동일한 물질로 간주하지 않음

3.1. 수화물(Hydrate)의 확인

수화물의 확인

- > 무수물인 화학물질을 물분자가 둘러싸는 상호작용을 통해 형성됨
- > 무수물과 수화물은 다른 CAS No.를 가지나 동일한 물질로 간주
- 무수물의 분자식과 구조식을 확인
- 수화물의 분자식과 구조식에서 물분자를 제외한 부분의 분자식과 구조식이 무수물과 일치하는 경우 해당 수화물은 무수물과 동일물질로 간주

예시. 무수물과 수화물

화학물질명(분자식)	CAS No.	구조식	적용
황산동 ($\text{CuH}_2\text{O}_4\text{S}$)	7758-98-7		무수물인 황산동 ($\text{CuH}_2\text{O}_4\text{S}$) 분자에 물 5분자가 결합된 황산구리염 5수화물 ($\text{CuH}_2\text{O}_4\text{S} \cdot 5\text{H}_2\text{O}$)은 동일한 물질로 간주됨
황산구리(2+), 염(1:2)5수화물 ($\text{CuH}_2\text{O}_4\text{S} \cdot 5\text{H}_2\text{O}$)	7758-99-8		

수화물의 등록 및 신고

- > 무수물과 수화물은 다른 CAS No.를 가지나 동일한 물질로 간주하여 하나의 등록 또는 신고대상임
- > 무수물을 등록 또는 신고하면 그 수화물도 등록이나 신고한 것으로 간주
- > 어떤 물질의 무수물과 수화물을 동시에 제조·수입하는 경우 제조·수입량을 합산하여 하나의 물질로 등록이나 신고 진행

3.2. 염류(Salts) 및 화합물(Compounds)의 확인

3.2.1 염류(Salts)의 확인

염류(Salts)

- > 산과 염기와의 중화반응에 의해 생성된 화학물질로 염류는 반응개시 당시의 출발물질인 산이나 염기와는 전혀 다른 물질로 간주

예시. 산 또는 산성염류

화학물질명(분자식)	CAS No.	적용
Chloric acid (HClO_3)	7790-93-4	염소산이며, 염소산소다와 동일한 물질로 간주되지 않음
Sodium chlorate (NaClO_3)	7775-09-9	염소산소다로서 염소산과 동일한 물질로 간주되지 않음

예시. 산과 서로 다른 2종의 염류

화학물질명(분자식)	CAS No.	적용
Benzoic acid ($\text{C}_7\text{H}_6\text{O}_2$)	65-85-0	산과 나트륨염, 칼륨염은 각각 다른 CAS No.를 가지며 동일한 물질로 간주되지 않음
Sodium benzoate ($\text{C}_7\text{H}_5\text{O}_2 \cdot \text{Na}$)	532-32-1	
Potassium benzoate ($\text{C}_7\text{H}_5\text{O}_2 \cdot \text{K}$)	582-25-2	

염류의 등록 및 신고

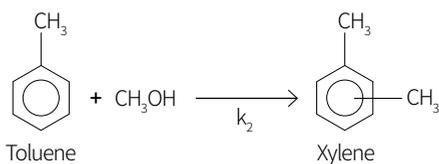
- > 염류는 반응개시 당시의 출발물질인 산이나 염기와는 전혀 다른 물질로 간주되어 산, 염기, 염류 각각 등록 또는 신고하여야 함

3.2.2 화합물(Compounds)의 확인

화합물(Compounds)

- > 2종 이상의 원소 또는 화합물의 화학적인 결합에 의해 생성되는 물질
- > 각각의 화합물은 서로 다른 CAS No.를 가지며, 다른 화학물질로 간주
- [예시 1] 톨루엔과 메탄올의 반응으로 자일렌이 생성됨. 화학반응의 출발물질(원료물질)인 톨루엔과 메탄올은 자일렌과는 서로 다른 물질임.

Toluene + Methanol → Xylene



- [예시 2] 금속화합물 : Lead methanesulfonate와 Lead acetate는 금속원소인 납을 포함하는 납화합물로서 금속화합물에 해당하나, 두 물질은 각각 다른 물질로 간주함
 - 납화합물은 하나의 유독물질 번호(97-1-9)를 기준으로 관리하고 있으나 납화합물 내의 화학물질은 각기 다른 화합물에 해당함
 - 납화합물은 납이라는 금속원소를 공유하는 서로 다른 원소 또는 화합물이 결합하여 생성한 화합물의 총칭명임

예시. 금속화합물 중 납화합물

화학물질명(분자식)	CAS No.	적용
Lead methanesulfonate (CH ₄ O ₃ S.xPb)	95860-12-1	금속원소인 납을 포함하나 서로 다른 물질로 간주함
Lead acetate (C ₂ H ₄ O ₂ .1/2Pb)	301-04-2	
Lead disodium dioxide (Na ₂ O ₂ .Pb)	12034-30-9	

- > 금속화합물의 경우 금속원소와 다른 원소 또는 화합물이 결합하여 생성한 새로운 물질에 해당함
- > 따라서 금속화합물의 등록 시 금속 원소와 결합하는 음이온이 상이한 경우 다른 물질로 등록
- > 다만, 금속화합물의 주요 양이온이 동일한 경우 유사금속화합물의 자료를 대체자료로 활용할 수 있음.
- > 카테고리 접근방식에 따라 동일 금속이온 또는 동일 금속이 포함된 이온을 포함한 다른 물질에 대한 자료를 활용 고려
[예시] Cu²⁺, Pb²⁺,

예시. 유사물질 카테고리

화학물질명(분자식)	CAS No.	적용
Coppersulfate (CuSO ₄)	7758-98-7	Cu ²⁺ 화합물
Copperoxide (CuO)	1317-38-0	
Lead oxide (PbO)	131-36-8	Zn ²⁺ 화합물
Basic lead sulfate (Pb ₂ (SO ₄)O)	12036-76-9	

- > 특히, 법이행 시 다음과 같은 조건인 경우 제출자료의 생략이 가능
 - 같은 금속을 포함하는 금속화합물 등 구조와 물리적·화학적 특성이 유사한 화학물질로부터 얻어진 결과를 통하여 사람의 건강이나 환경에 대한 유해성을 판단할 수 있는 화학물질
 즉, 등록하고자 하는 금속화합물의 독성자료가 없는 경우 해당 금속화합물의 유사물질인 양이온이 동일한 물질의 독성자료를 활용하여 제출

화합물의 등록

- > 화합물은 화학반응을 통해 생성된 새로운 물질에 해당
- > 화합물은 하나의 화학물질로 각각의 물질별로 등록이 필요
- > 금속화합물의 주요 양이온이 동일한 경우 자료가 존재하는 유사물질의 자료를 대체자료로 활용하여 등록 시 고려사항
 - 동일 양이온 금속의 경우 대체자료 활용이 가능한 물질 여부 확인
 - 금속의 산화상태에 따라 서로 다른 산화수를 가질 수 있으므로 동일한 산화 상태 여부 확인. 산화상태가 다를 경우 유해성이 상이할 수 있음.
- [예시] Cr^{3+} , Cr^{6+} (유해성 상이, Cr^{6+} 의 경우 발암성이 있음)
- 금속화합물의 짝이온 중 일부 음이온은 고유의 특성으로 인해 유해성에 영향을 미치는 경우가 있으므로 음이온의 유해성 여부를 확인 필요
- 화학물질의 수용해도, 가수분해 여부에 따라서 독성자료 활용 가능성 여부 고려
- 동일 양이온 화합물에 대한 생체이용률⁴ 및 환경거동⁵ 고려
- 동일 양이온 화합물의 물리화학적 성질의 유사성 고려 : 성상, 수용해도, 증기압, 옥탄올물분배계수, 녹는점, 입자크기 등
- 이용 가능한 금속화합물 자료의 신뢰도 확인

4. 생체이용률(Bioavailability): 생물학적 이용도, 생물학적 이용가능성이라고도 하며, 일정량의 약물이 나타내는 생리적인 효과

5. 환경거동(Environmental fate): 화학물질이 환경에 배출된 후 최종적으로 위치하는 곳에서 분해되거나 다른 형태의 물질로 전환되는 것

3.3.

이성질체(Isomers)의 확인

이성질체 정의

- > 이성질체는 동일한 분자식을 가지나 분자를 구성하는 원자의 연결방식이나 공간배열이 동일하지 않는 물질로서 각 이성질체는 동일한 물질로 간주되지 않음
- > 동일한 분자식을 갖는 물질이라도 배열에 따라 화학적 성질이 달라지므로 각 각 다른 물질로 간주

이성질체의 종류

- > 구조이성질체: 화학물질의 분자식은 동일하나 분자를 구성하는 원자들의 연결방식이 서로 다른 물질
 - 예시] 분자 내 원자들의 결합된 위치가 다른 경우 각각 별개의 화학물질로 간주
- > 입체이성질체: 화학물질의 분자를 구성하는 원자의 공간 배열이 달라짐에 따라 생기는 이성질체
 - [예시] 이중결합을 하고 있는 탄소원자에 원자단이 결합될 때, 그의 상대적 입체위치가 달라져서 생기는 이성질체 등

이성질체의 등록 및 신고

- > 이성질체의 경우 각각의 이성질체는 서로 다른 물질로 간주하므로 각 이성질체별로 등록이나 신고가 이루어져야 함

표 11_
구조이성질체

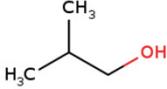
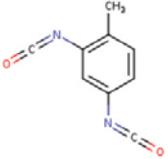
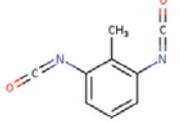
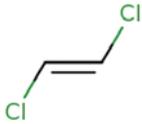
화학물질명	CAS No.	구조식	적용
n-butanol (C ₄ H ₁₀ O)	71-36-3		두 물질은 분자식(C ₄ H ₁₀ O)이 동일한 물질이나 그 화학적 구조식이 다른 물질로서 동일물질로 간주되지 않음
iso-butanol (C ₄ H ₁₀ O)	78-83-1		
2,4-diisocyanato-1-methylbenzene (C ₉ H ₆ N ₂ O ₂)	584-84-9		두 물질은 분자식(C ₉ H ₆ N ₂ O ₂)은 동일하나 그 화학적 구조식이 다른 물질로서 동일물질로 간주되지 않음
2,6-diisocyanato-1-methylbenzene (C ₉ H ₆ N ₂ O ₂)	91-08-7		

표 12_
입체이성질체

화학물질명	CAS No.	구조식	적용
cis-1,2-Dichloroethene (C ₂ H ₂ Cl ₂)	156-59-2		분자식이 C ₂ H ₂ Cl ₂ 로 동일하지만 분자내 2개의 chloride의 치환 위치가 달라 동일물질로 간주되지 않음
trans-1,2-Dichloroethene (C ₂ H ₂ Cl ₂)	156-60-5		

화학물질 확인 및 중간체 구분
실무가이드

제4장 중간체의 구분

- 4.1. 비분리중간체
- 4.2. (현장·수송) 분리중간체
 - 4.2.1 현장분리중간체의 확인
 - 4.2.2 수송분리중간체의 확인

중간체의 정의

- > 다른 화학물질을 제조하는 과정에서 생성되어 그 화학공정에서 전량 사용되어 소멸되는 물질 또는 통제된 조건하에서 동일한 또는 다른 제조현장으로 이송되어 해당 후속공정에서 전량(全量) 사용되어 소멸되는 화학물질을 말함
- > 중간체는 비분리중간체와 (현장·수송)분리중간체로 분류

중간체의 구분 방법

- > 중간체의 구분 기준
- 다음의 전제조건을 만족해야 중간체로 간주할 수 있음
 - 다른 화학물질을 제조하는 과정에서 생성
 - 제조현장 내에서 전량 사용·소멸하여야 함
 - 최종 출하 제품 내에 존재하지 않을 것
 - 생성된 설비로부터 의도적으로 제거·분리되지 않을 것(비분리중간체의 경우에 한함)
 - 통제된 조건하에서 전량 사용·소멸될 것(분리중간체의 경우에 한함)
- 중간체 구분의 중요 요소
 - 설비: 동일한 설비 내에서 생성되어 전량 사용·소멸 여부에 따라 비분리중간체 및 분리중간체로 구분
 - 제조현장: 생성된 중간체가 전량 사용·소멸하는 제조현장(사업장)의 동일성 여부
 - 동일 제조현장에서 전량 사용·소멸: 비분리중간체, 현장분리중간체
 - 다른 제조현장에서 전량 사용·소멸: 수송분리중간체

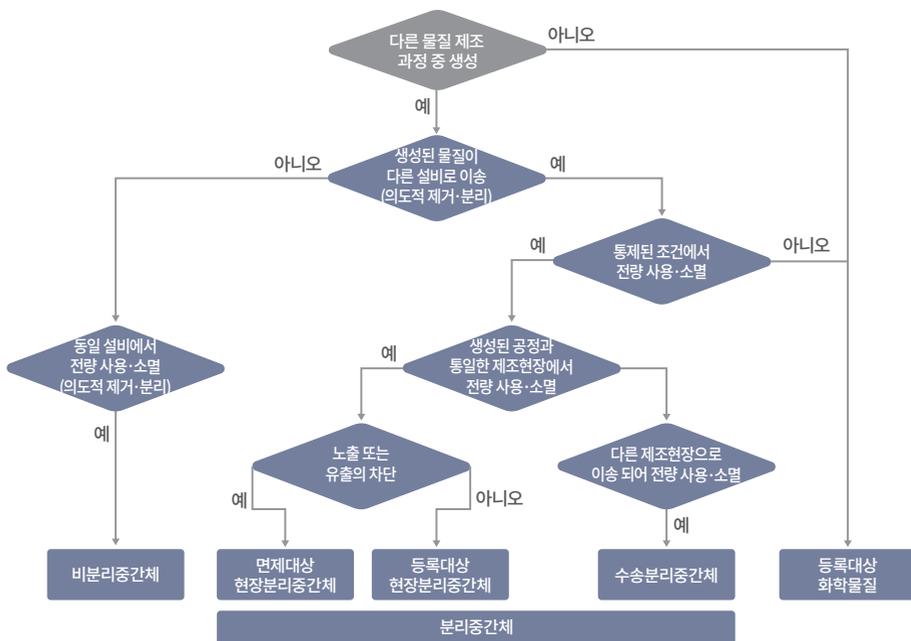


그림 9_ 중간체의 확인

4.1. 비분리중간체

비분리중간체

- > 다른 화학물질을 제조하는 과정에서 생성되어 그 화학공정에서 전량(全量) 사용되어 소멸되는 화학물질로서 제조되는 설비로부터 의도적으로 제거·분리되지 아니하는 화학물질(시행령 제2조제1호)
- 중간체인 화학물질의 생성되는 설비로부터 의도적으로 제거·분리되지 않고 동일 화학공정에서 전량 사용·소멸되는 물질로 다음 화학공정에서는 존재하지 않는 물질
- 비분리중간체는 해당 물질이 생성되는 설비로부터 의도적으로 제거·분리되지 않아야 함
- 중간체 물질을 확인을 위한 시료채취(sampling)는 의도적인 분리에서 제외됨

비분리중간체의 확인

- > 비분리중간체의 확인 시 고려사항
- 다른 화학물질의 제조 과정에서 생성되었는가?
- 생성된 화학공정에서 전량 사용되어 소멸되었는가?
- 전량 사용되는 과정 중 동일 설비로부터 의도적으로 제거·분리되지 않았는가? (시료채취 제외)
- > 비분리중간체의 예시

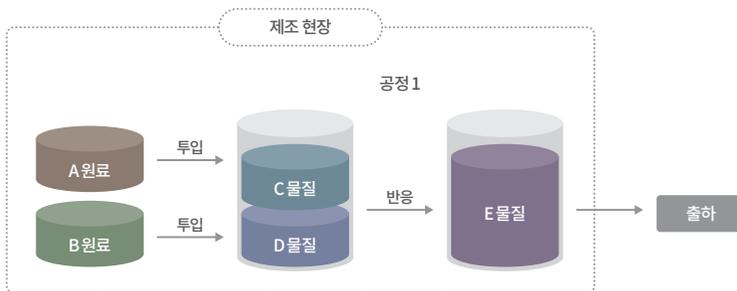


그림 10_
비분리중간체

- 동일한 공정내에서 A, B 원료를 투입하여 C, D의 전혀 새로운 화학물질이 생성
- 생성된 C, D는 동일 설비 내에서 최종 제조산물인 E를 생성
- 동일 설비 내에서 최종산물인 E를 제조하기 위해서 중간단계에 생성됨
- C, D는 제조 공정에서 분리되지 않고 반응기 내에만 존재했다가 다른 물질인 E의 제조과정에서 전량 소멸됨

비분리중간체의 법적 이행사항

- > 비분리중간체는 법에 따른 등록 등 면제 대상임
- > 등록면제 신청 시 제출자료
 - 비분리중간체임을 확인하는 서류
 - 화학물질 식별정보 : 물질명, CAS No., 분자식 등
 - 비분리중간체임을 확인할 수 있는 서술서
 - 비분리중간체가 생성되는 공정도식도 등 화학공정에 관한 개략적인 설명
 - 화학반응식 등 메커니즘
 - 공정도식도
 - 공정도식에 따른 공정설명
 - 공정도식도에 따른 제조설비 및 이송시설 사진

4.2. (현장·수송) 분리중간체

- > 다른 화학물질을 제조하는 과정에서 생성된 화학물질로 동일한 또는 다른 제조현장의 후속 공정단계에서 전량 사용·소멸되며 비분리중간체에 해당하지 않는 화학물질
- > 현장분리중간체와 수송분리중간체로 구분

4.2.1 현장분리중간체의 확인

현장분리중간체의 정의

- > 다른 화학물질을 제조하는 과정에서 생성되어 통제된 조건하에 동일한 제조현장의 후속 공정단계에서 전량 사용·소멸되는 화학물질로서 비분리중간체에 해당하지 않는 화학물질
- > 통제된 조건이란 다음의 조건을 말함
 - 화학물질의 제조, 정제, 이송, 시료채취, 분석, 세정 및 장비 보수, 장비 또는 용기의 선적 및 하적, 폐기물의 처리 또는 정화 및 창고 보관을 포함한 해당 화학물질의 전체 주기 동안 화학물질의 유출 및 모든 인체·환경으로의 노출을 최소화하기 위한 통제기술 및 관리절차가 사용되어 엄격하게 통제·관리될 것
 - 훈련을 받은 담당자만이 해당 화학물질을 취급할 것
 - 세정 및 유지관리 작업의 경우, 제조공정이 시작되어 해당 화학물질이 투입되기 전에 정화 및 세척 등의 별도의 절차가 있을 것
 - 사고가 발생하여 해당 화학물질에 대한 폐기물이 생성되는 경우, 정화, 청소 및 유지보수 과정에서 발생하는 화학물질의 유출 및 모든 인체·환경으로의 노출을 최소화하기 위한 통제기술 및 관리절차가 사용될 것

현장분리중간체의 확인

- > 현장분리중간체의 확인 시 고려사항
 - 다른 화학물질의 제조 과정 중에 생성되었는가?
 - 통제된 조건하에서 동일한 제조현장의 후속 공정단계에서 전량 사용되어 소멸되었는가?
- > 현장분리중간체의 예시

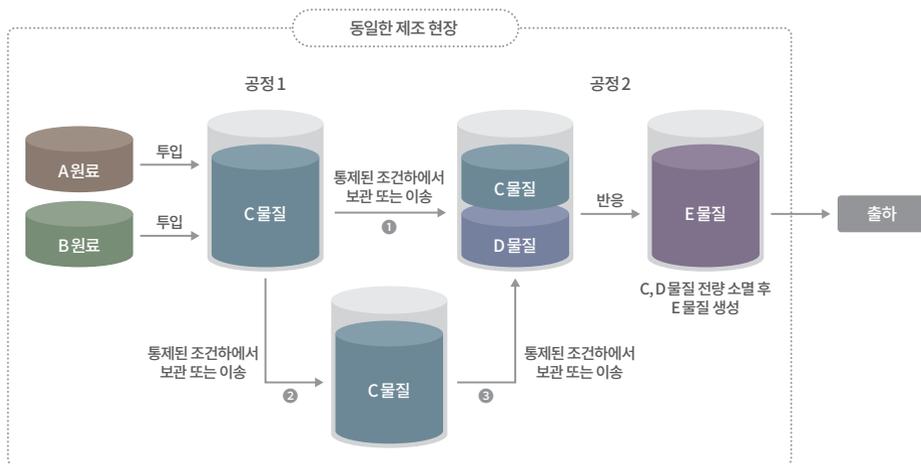


그림 11
현장분리중간체

- 원료물질 A, B 투입되어 반응결과물 C를 합성
- 합성된 C는 동일한 제조현장에서 통제된 조건하에서 노출되지 않고 배관 등을 통해(그림 11의 경로 ①, ②, ③) 다른 설비의 공정 2로 이송
- 공정 1의 반응결과물 C에 화학물질 D를 투여하여 새로운 반응결과물 E를 합성(C는 전량 소멸됨)
- 화학물질 C는 공정 2의 최종산물 E를 합성하기 위하여 생성되어 전량 사용 및 소멸되는 물질로 현장분리중간체에 해당
 - 현장분리중간체는 기술적인 방법으로 노출 또는 유출이 차단되는 경우 등록 면제 신청 대상
 - 현장분리중간체가 기술적인 방법으로 노출 또는 유출이 차단되지 않는 경우 등록 신청 대상

- > 현장분리중간체가 기술적인 방법으로 노출 또는 유출이 차단되는 경우 다음의 조건 만족 필요
 - 통제된 조건하에서 보관 또는 이송되어야 함
 - 보관 또는 이송 시 노출 또는 유출이 기술적으로 차단되어야 함
 - Sampling 과정에서 발생하는 노출 또는 유출은 제외
 - 현장분리중간체에 해당하는 물질이 전량 사용되어 소멸되어야 하며 최종산물에 남아있지 않을 것
 - 단, 불순물로 잔류하는 경우는 남아있지 않은 것으로 간주⁶.
- > 현장분리중간체가 기술적인 방법으로 노출 또는 유출이 차단되지 않는 경우 등록신청
 - 통제된 조건하에서 보관 또는 이송되어도 노출 및 유출이 기술적으로 차단되지 않는 경우

현장분리중간체의 법적 이행사항

- > 기술적으로 노출 또는 유출이 차단된 현장분리중간체는 등록 등 면제 대상임
- > 등록면제 신청 시 제출자료
 - 현장분리중간체임을 확인하는 서류
 - 화학물질 식별정보 : 물질명, CAS No., 분자식 등
 - 현장분리중간체임을 확인할 수 있는 서술서
 - 현장분리중간체가 생성되는 공정도식도 등 화학공정에 관한 개략적인 설명
 - 화학반응식 등 메커니즘
 - 공정도식도
 - 공정도식에 따른 공정설명
 - 공정도식도에 따른 제조설비 및 이송시설 사진

6. EU REACH법에 따른 중간체내 불순물 정의 (Guidance on Intermediates)
 제조과정에서 다른 물질로 변형되지 않은 분리중간체의 잔류물(residues)은 비분리 혹은 분리중간체로 재활용되지 않을 경우 폐기되거나 혹은 폐기물로 처리되어 폐기물에 해당된다. 따라서 그것들은 더 이상 REACH의 범주에 해당하지 않는다. 중간체의 잔류물이 합성된 물질에서 발견되면 그것들은 불순물 (impurity)로서 그 외의 다른 물질의 등록과 평가에 의해 불순물로 간주된다.

- 기술적으로 노출 또는 유출이 차단되는 내용 서술
 - 대기, 수질, 토양, 폐기물로의 노출 또는 유출이 차단됨을 확인하여 기술
- 통제된 조건하에서 이송 및 전량 사용·소멸에 관한 자료
- > 기술적으로 노출 또는 유출이 차단되지 않는 경우 현장분리중간체는 등록 대상임
- 단, 등록 대상에 해당하는 현장분리중간체의 등록 신청 시 자료 제출을 생략할 수 있음
- > 현장분리중간체의 등록 신청 시 제출자료
 - 등록대상화학물질의 식별정보 : 화학물질명, CAS No., 분자식 등
 - 현장분리중간체임을 확인할 수 있는 서술서
 - 현장분리중간체가 생성되는 공정도식도 등 화학공정에 관한 개략적인 설명
 - 화학반응식 등 메커니즘
 - 공정도식도
 - 공정도식에 따른 공정설명
 - 공정도식도에 따른 제조설비 및 이송시설 사진
 - 통제된 조건하에서 이송 및 전량 사용·소멸에 관한 자료
 - 등록톤수 구간별 요구되어지는 물리화학적 특성에 관한 자료

등록톤수별 제출자료

구분	시험항목	0.1-1	1-10	10-100	100-1000	1,000이상
물리 · 화 학 적 특 성 (13)	1) 물질의 상태	●	●	●	●	●
	2) 물용해도	●	●	●	●	●
	3) 녹는점/어는점	●	●	●	●	●
	4) 끓는점	●	●	●	●	●
	5) 증기압	●	●	●	●	●
	6) 옥탄올/물분배계수			●	●	●
	7) 밀도			●	●	●
	8) 입도분석			●	●	●
	9) 인화성			●	●	●
	10) 폭발성			●	●	●
	11) 산화성			●	●	●
	12) 점도				●	●
	13) 해리상수				●	●

- 등록의무자가 소유한 경우 제출하는 자료
 - 유해성 자료
 - 위해성에 관한 자료
 - 안전사용지침
 - 용도와 관련한 노출정보

4.2.2 수송분리중간체의 확인

수송분리중간체의 정의

- > 다른 화학물질을 제조하는 과정에서 생성되어 통제된 조건 하에 다른 제조현장으로 이동되어 해당 제조현장의 후속 공정단계에서 전량 사용·소멸되는 화학물질로서 비분리중간체에 해당하지 않는 화학물질
- > 통제된 조건이란 다음의 조건을 말함
 - 화학물질의 제조, 정제, 이송, 시료채취, 분석, 세정 및 장비 보수, 장비 또는 용기의 선적 및 하적, 폐기물의 처리 또는 정화 및 창고 보관을 포함한 해당 화학물질의 전체 주기 동안 화학물질의 유출 및 모든 인체·환경으로의 노출을 최소화하기 위한 통제기술 및 관리절차가 사용되어 엄격하게 통제·관리될 것
 - 훈련을 받은 담당자만이 해당 화학물질을 취급할 것
 - 세정 및 유지관리 작업의 경우, 제조공정이 시작되어 해당 화학물질이 투입되기 전에 정화 및 세척 등의 별도의 절차가 있을 것
 - 사고가 발생하여 해당 화학물질에 대한 폐기물이 생성되는 경우, 정화, 청소 및 유지보수 과정에서 발생하는 화학물질의 유출 및 모든 인체·환경으로의 노출을 최소화하기 위한 통제기술 및 관리절차가 사용될 것

수송분리중간체 확인

- > 수송분리중간체의 확인 시 고려사항
 - 다른 화학물질의 제조 과정 중에 생성되었는가?
 - 생성된 공정외의 다른 제조현장(다른 사업장)으로 이동되었는가?
 - 다른 제조현장의 후속공정단계에서 전량 사용·소멸되었는가?

> 수송분리중간체의 예시

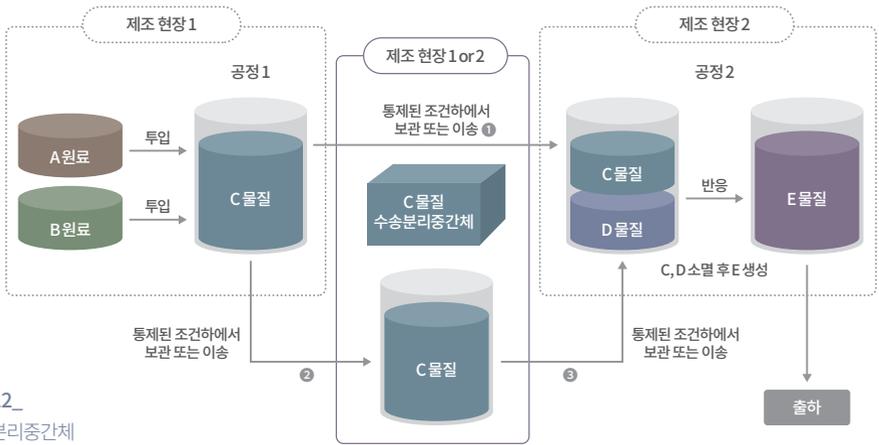


그림 12_ 수송분리중간체

- 원료물질 A, B 투입되어 반응결과물 C를 합성
- 합성된 C는 동일한 제조현장에서 통제된 조건하에서 배관 등을 통해(그림 11의 경로 ①, ②, ③) 다른 제조현장의 공정 2로 이송
- 공정 1의 반응결과물 C에 화학물질 D를 투여하여 새로운 반응결과물 E를 합성(C는 전량 소멸됨)
- 화학물질 C는 공정 2의 최종산물 E를 합성하기 위하여 생성되어 전량 사용 및 소멸되는 물질로 수송분리중간체에 해당
- 이 경우 화학물질 C는 등록대상이나 등록 신청 시 자료제출을 생략할 수 있고, 물리화학적 특성 및 유해성에 관한 시험자료 제출 시 수송분리중간체에 대한 특례 조항을 적용 받음

수송분리중간체의 법적 이행사항

- > 수송분리중간체의 등록 신청 시 제출자료
 - 등록대상화학물질의 식별정보 : 화학물질명, CAS No., 분자식 등
 - 수송분리중간체임을 확인할 수 있는 서술서
 - 수송분리중간체가 생성되는 공정도식도 등 화학공정에 관한 개략적인 설명
 - 화학반응식 등 메커니즘
 - 공정도식도
 - 공정도식에 따른 공정설명

- 공정도식도에 따른 제조설비 및 이송시설 사진
- 환경부 장관이 정한 통제된 조건하에서 이송 및 전량 사용·소멸에 관한 자료
- 등록톤수 구간별 요구되어지는 물리적·화학적 특성 및 유해성에 관한 자료

등록톤수별 제출자료

구분	시험항목	0.1-1	1-10	10-100	100-1000	1,000이상
물리적·화학적 특성 (13)	1) 물질의 상태	●	●	●	●	●
	2) 물용해도	●	●	●	●	●
	3) 녹는점/어는점	●	●	●	●	●
	4) 끓는점	●	●	●	●	●
	5) 증기압	●	●	●	●	●
	6) 옥탄올/물분배계수			●	●	●
	7) 밀도			●	●	●
	8) 입도분석			●	●	●
	9) 인화성			●	●	●
	10) 폭발성			●	●	●
	11) 산화성			●	●	●
	12) 점도				●	●
	13) 해리상수				●	●
인체 유해성 (4)	1) 급성경구독성*					●
	2) 복귀돌연변이					●
	3) 피부자극성/부식성					●
	4) 피부 과민성					●
환경 유해성 (3)	1) 어류급성독성					●
	2) 이분해성					●
	3) 물벼룩급성독성					●

* 상온에서 기체가거나 용도상으로 주된 노출경로가 흡입으로 판단되는 경우 흡입독성

- 등록의무자가 소유한 경우 제출하는 자료
 - 1,000톤 이상 제출되는 유해성자료 이외 유해성 자료
 - 유해성에 관한 자료
 - 안전사용지침
 - 용도와 관련한 노출정보



부록

참고자료



참고자료

- > ECHA (2017) Guidance for identification and naming of substances under REACH and CLP ver. 2.1
- > ECHA (2010) Guidance for intermediates
- > 환경부 (2015) 화학물질의 확인에 관한 안내서
- > 환경부 (2019) 고분자화합물 등록 등 실무가이드
- > 환경부 (2015) 등록대상 화학물질의 등록 신청에 관한 안내서
- > 환경부 (2019) 등록등 면제확인 가이드
- > 화학물질정보시스템 : <http://ncis.nier.go.kr/main.do>

화학물질확인 및 중간체 구분 실무가이드

발행일 2020년 3월

펴낸곳 환경부

서울시 중구 세종대로 39 대한상공회의소 8층
화학안전산업계지원단

<http://www.chemnavi.or.kr>

TEL. 02-6050-1305 ~ 8

