



Universidad de Valladolid



ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES

UNIVERSIDAD DE VALLADOLID

ESCUELA DE INGENIERIAS INDUSTRIALES

Grado en Ingeniería Química

Ultrapurificación de etanol, acetonitrilo y
tetrahidrofurano para su uso como
eluyentes en HPLC

Autor:

Ortiz de Latierro Delgado, Sonsoles

Tutor:

Rodríguez García, Félix Joaquín
Departamento de Química
Analítica

Valladolid, junio de 2019



A mis padres y hermano, quienes siempre han depositado toda su confianza en mí, aportándome seguridad. A María, por apoyarme y ser parte fundamental en todos mis proyectos. Y a todos aquellos que se han cruzado en mi camino durante el grado y han decidido quedarse convirtiéndose en amigos.



RESUMEN

En este trabajo de fin de grado se analizan tres disolventes específicos: etanol, acetonitrilo y tetrahidrofurano, a fin de conocer cuáles son los métodos de ultrapurificación más adecuados para cada uno de ellos.

En primer lugar, se eligen productos comerciales para poder realizar el estudio de manera individualizada y que pueda llevarse a práctica en líneas futuras.

Conocidas las impurezas que presentan los disolventes y analizadas las propiedades físico-químicas de estas, se procede a la selección de las técnicas más apropiadas.

Posteriormente, se detallan las técnicas propuestas para este cometido, siendo estas: intercambio iónico, rectificación, extracción en fase sólida (SPE), desecación y filtración. Estas técnicas resultan ser las más adecuadas para la purificación de disolventes de manera general y más específicamente para los tres eluyentes de estudio.

Por último, se proponen otras técnicas alternativas a tener en cuenta en aquellos casos en los que los disolventes presenten otras impurezas frecuentes.

Palabras clave: etanol, acetonitrilo, tetrahidrofurano, ultrapurificación, HPLC.



ABSTRACT

This end-of-degree Project analyses three specific solvents: ethanol, acetonitrile and tetrahydrofuran, in order to know which are the most suitable ultrapurification methods for each one of them.

First of all, commercial products have been chosen to be studied in an individualized way and this can be carried out in future lines.

Once the impurities present in the solvents are known and their physico-chemical properties have been analysed, the most suitable techniques are selected.

Subsequently, the proposals techniques for this task are detailed, these being: ion exchange, rectification, extraction in solid phase (SPE), drying and filtration. These methods are the most appropriate for the solvent purification in a general way and more specifically for the three studied eluents.

Finally, other important and alternative techniques are suggested for cases where the solvents have other frequent impurities.

Keywords: ethanol, acetonitrile, tetrahydrofuran, ultrapurification, HPLC.



Índice de contenido

| | |
|--|----|
| RESUMEN | 5 |
| ABSTRACT | 7 |
| CAPÍTULO 1. Introducción y objetivos | 17 |
| CAPÍTULO 2. Cromatografía líquida de alta resolución | 21 |
| 2.1. Antecedentes | 21 |
| 2.2. Fundamento teórico | 21 |
| 2.3. Justificación..... | 22 |
| | 23 |
| CAPÍTULO 3. Etanol | 25 |
| 3.1. Descripción del etanol..... | 25 |
| 3.2. Descripción del producto | 26 |
| 3.3. Justificación de los métodos seleccionados..... | 27 |
| CAPÍTULO 4. Acetonitrilo..... | 31 |
| 4.1. Descripción del acetonitrilo | 31 |
| 4.2. Descripción del producto | 32 |
| 4.3. Justificación de los métodos seleccionados..... | 33 |
| | 35 |
| CAPÍTULO 5. Tetrahidrofurano | 37 |
| 5.1. Descripción del tetrahidrofurano..... | 37 |
| 5.2. Descripción del producto | 37 |
| 5.3. Justificación de los métodos seleccionados..... | 38 |
| CAPÍTULO 6. Métodos de ultrapurificación | 43 |
| 6.1. Intercambio iónico | 43 |
| 6.1.1. Modo de operación | 44 |
| 6.1.2. Resinas catiónicas | 45 |
| 6.1.3. Resinas aniónicas | 46 |
| 6.1.4. Entrecruzamiento..... | 47 |
| 6.1.5. Regeneración | 48 |
| 6.2. Desecación..... | 48 |

| | |
|--|-----|
| 6.3. Extracción en fase sólida..... | 51 |
| 6.4. Rectificación | 54 |
| 6.4.1. Descripción del equipo..... | 55 |
| 6.4.2. Modo de operación..... | 57 |
| 6.5.3. Equipo comercial | 57 |
| 6.5. Filtración | 58 |
| 6.5.1. Tipos de filtración | 59 |
| 6.5.2. Factores importantes en filtración | 60 |
| 6.5.3. Medio filtrante | 61 |
| 6.5.4. Filtración con membranas | 61 |
| 6.5.5. Equipos de filtración con membranas | 64 |
| CAPÍTULO 7. Limpieza | 69 |
| 7.1. Proceso de limpieza | 69 |
| 7.2. Agua ultrapura | 70 |
| CAPÍTULO 8. Alternativas | 75 |
| 8.1. Destilación extractiva..... | 75 |
| 8.2. Destilación por sales..... | 75 |
| 8.3. Destilación con líquidos iónicos | 76 |
| 8.4. Destilación por cambios de presión | 76 |
| | 79 |
| CAPÍTULO 9. Conclusiones..... | 81 |
| BIBLIOGRAFÍA | 85 |
| ANEXOS | 91 |
| ANEXO 1. Hojas de seguridad..... | 91 |
| ANEXO 2. Certificado de análisis | 179 |



Índice de tablas

| | |
|--|----|
| Tabla 1. Puntos de ebullición de los alcoholes presentes en el etanol. | 28 |
| Tabla 2. Resumen de resinas. a) Dow Chemical Company, b)Mallinckrodt Chemical Works, c) J. T. Baker Chemical Company, d) Fischer Scientific Company, e) Matheson Coleman & Bell..... | 45 |
| Tabla 3. Resumen de tipos de procesos de filtración. | 64 |
| Tabla 4. Especificaciones de materiales poliméricos para filtración con membranas. | 66 |



Índice de figuras

| | |
|--|----|
| Figura 1. Molécula de etanol..... | 25 |
| Figura 2. Certificado de análisis del etanol..... | 26 |
| Figura 3. Molécula de acetonitrilo. | 31 |
| Figura 4. Certificado de análisis del acetonitrilo. | 32 |
| Figura 5. Molécula de tetrahidrofurano..... | 37 |
| Figura 6. Certificado de análisis del tetrahidrofurano..... | 38 |
| Figura 7. Proceso de intercambio iónico con resinas..... | 44 |
| Figura 8. Resina de divinilbenceno para intercambio iónico..... | 47 |
| Figura 9. Agentes desecantes: CaCl_2 (izquierda) y tamiz molecular de 3 Å (derecha)..... | 51 |
| Figura 10. Cartucho de SPE. | 52 |
| Figura 11. Procesos de destilación (a) y rectificación (b) | 55 |
| Figura 12. Rellenos para torres de rectificación..... | 57 |
| Figura 13. Columna de destilación con reflujo y evaporador rotatorio..... | 58 |
| Figura 14. Principio de filtración. | 59 |
| Figura 15. Filtración en superficie tangencial (A) y en torta (B)..... | 60 |
| Figura 16. Filtración en lecho profundo. | 60 |
| Figura 17. Tipos de filtración con membrana. | 62 |
| Figura 18. Proceso de microfiltración..... | 63 |
| Figura 19. Proceso de ultrafiltración. | 63 |
| Figura 20. Proceso de nanofiltración..... | 63 |
| Figura 21. Análisis de agua ultrapura (tipo I) y agua pura (tipo II) mediante cromatografía iónica. | 71 |



CAPÍTULO 1

Introducción y objetivos



CAPÍTULO 1. Introducción y objetivos

La cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) es una técnica analítica cada vez más utilizada para la separación y determinación de compuestos en muestras.

La razón del crecimiento de esta técnica puede encontrarse en la gran cantidad de ventajas que presenta frente a otros métodos de análisis o procesos de purificación de compuestos. Entre sus características, destacan su gran versatilidad y la alta sensibilidad de análisis que permite obtener.

Para que los análisis realizados sean satisfactorios, es importante tener en cuenta las condiciones de operación. La selección del disolvente adecuado es una de las condiciones más importantes a considerar, ya que de su polaridad depende la retención de los compuestos.

La fase móvil utilizada ha de tener una gran pureza para evitar que sus impurezas sean detectadas durante la cromatografía y prevenir que estas impurezas afecten al análisis.

En el presente trabajo de fin de grado, se analizan y exponen distintos métodos de ultrapurificación para tres de los eluyentes más utilizados en la técnica de cromatografía líquida de alta resolución: etanol, acetonitrilo y tetrahidrofurano.



CAPÍTULO 2

Cromatografía líquida de alta resolución



CAPÍTULO 2. Cromatografía líquida de alta resolución

2.1. Antecedentes

Hasta la publicación, en 1964 por J. Calvin Giddings, de un artículo comparativo sobre la capacidad de separación de la cromatografía líquida y de gases, la cromatografía de líquidos se había desarrollado en columnas grandes, con partículas grandes y con alimentación por gravedad. Las fracciones de eluyentes eran recolectadas de manera manual para su medición en el espectrofotómetro. Giddings previó que el desempeño de la cromatografía de líquidos sería mejor si se utilizaban partículas pequeñas, bajo mayor presión de flujo, con lo que teóricamente podrían obtenerse un mayor número de placas. Poco después, Csaba Horváth y S. R. Lipsky construyeron el primer equipo de HPLC al que denominaron “cromatografía de líquidos de alta presión”. Posteriormente, a principios de los 70, gracias al desarrollo de la tecnología, se produjeron pequeñas partículas de sílice silanizadas que permitían el uso de columnas de menor volumen y mayor longitud, lo cual provocó un funcionamiento de alta eficacia. Este método fue bautizado como “cromatografía de líquidos de alta eficacia”.

2.2. Fundamento teórico

La cromatografía de líquidos, tiene un potencial de aplicaciones más alto que la cromatografía de gases, debido a que el 85% de los productos conocidos no son completamente volátiles o estables como para ser separados mediante cromatografía de gases.

La cromatografía de líquidos de alta eficacia puede usarse en el modo de cromatografía de adsorción líquido-sólido o en el de cromatografía de partición líquido-líquido (el más común). Para ambos, el fundamento se basa en el aprovechamiento de las diferencias de polaridad del soluto.

Generalmente, los materiales de alta polaridad son separados mediante la cromatografía de partición y los materiales de baja polaridad son separados mediante la cromatografía de adsorción.

En la cromatografía de líquidos, entran en juego dos fases: estacionaria y móvil. La estacionaria se encuentra en el interior de la columna y es la encargada de retener los compuestos. La fase móvil atraviesa la columna

junto con la muestra, de manera que arrastra los componentes menos retenidos por la fase estacionaria.

Existen dos modos de operación en la cromatografía líquida:

- Fase normal. Se caracteriza porque la fase estacionaria es polar y la fase móvil es no polar. La fase móvil suele ser n-heptano, cloruro de metileno o cloroformo; mientras que la fase estacionaria suele tratarse de un siloxano unido con un grupo funcional polar. Estas fases retienen compuestos polares en mayor medida.
- Fase inversa. Se caracteriza por una fase estacionaria relativamente no polar y una fase móvil polar. La fase móvil puede ser metanol, acetonitrilo, tetrahidrofurano o agua, entre otros; típicamente, se trata de una mezcla de los disolventes anteriores con agua. En cuanto a la fase estacionaria, suele tratarse de cadenas de n-octadecilo (C_{18}) o n-decilo (C_8), grupos fenilo. Se utiliza para analizar compuestos multiaromáticos con grupos hidroxilo y compuestos fenólicos.

2.3. Justificación

Para realizar HPLC, es necesaria una fase móvil ultrapura, capaz de arrastrar los componentes de la muestra, sin afectar al detector con sus impurezas.

Se han escogido productos comercializados de los tres disolventes para poder analizar los diferentes métodos de purificación. Para cada uno de ellos, se han comparado las impurezas que presentan con las impurezas que pueden encontrarse en los mismos disolventes pero con calidad para HPLC.



CAPÍTULO 3

Etanol



CAPÍTULO 3. Etanol

3.1. Descripción del etanol

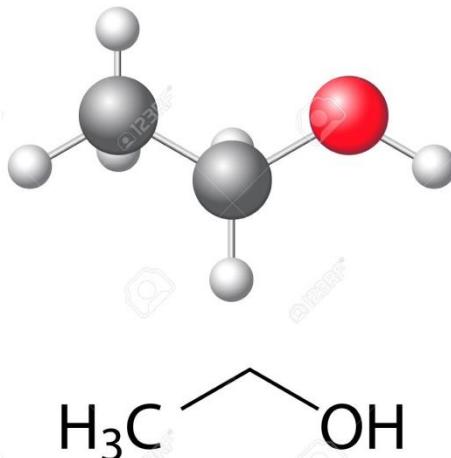


Figura 1. Molécula de etanol.

El etanol es un compuesto químico también conocido como alcohol etílico. Se trata de un alcohol inferior que en condiciones normales de presión y temperatura se encuentra como líquido incoloro. Su fórmula química es C_2H_6O y tiene un peso molecular de 46,07 g/mol. El alcohol etílico es también inflamable y produce una llama azul sin humo.

En cuanto a sus propiedades físicas, tiene unos puntos de ebullición y fusión de 78,3°C y -114,1°C, respectivamente, y una densidad (a 20°C) de 0,79 g/cm³. Es miscible con agua y con la gran mayoría de disolventes orgánicos como ácido acético, acetona, benceno y éter entre otros.

Sus propiedades químicas pueden explicarse teniendo en cuenta la estructura de esta molécula. El grupo hidroxilo en el carbono terminal hace posible que el etanol pueda formar puentes de hidrógeno y enlaces dipolo-dipolo, dándole así su alta polaridad ($\mu=1,69D$).

Cuando el etanol se encuentra en agua, forma con esta una mezcla azeotrópica que cambia las propiedades de ambos componentes.

La preparación industrial del etanol se realiza por dos procesos bien diferenciados:

- Fermentación de residuos agrícolas. Utiliza como materias primas mosto de uva, melazas residuales de la fabricación de sacarosa o líquidos residuales de industrias de alimentos.
 - Hidratación directa catalítica de etileno (que ha sido obtenido previamente por craqueo al vapor). Se lleva a cabo en fase gas, conlleva altas presiones y la conversión de etileno que se obtiene es del 4%.

3.2. Descripción del producto

Se ha escogido un etanol absoluto de calidad para análisis EMSURE, del catálogo de productos químicos de la empresa Merck. Sus especificaciones se muestran a continuación:

| Etanol absoluto para análisis EMSURE® | |
|---|----------------|
| ACS, ISO, Reag. Ph Eur | |
| N.º cat. | 100983 |
| Pureza (GC) | ≥ 99,9 % |
| Identidad (IR) | conforme |
| Apariencia | conforme |
| Color | ≤ 10 Hazen |
| Solubilidad en agua | conforme |
| Acidez o alcalinidad | ≤ 30 ppm |
| Ácido titulable | ≤ 0,0002 meq/g |
| Base titulable | ≤ 0,0002 meq/g |
| Densidad (d 20°C / 20°C) | 0,790-0,793 |
| Absorción UV | conforme |
| Aldehídos (como Acetaldehido) | ≤ 0,001 % |
| Petróleo | conforme |
| Sustancias reductoras del permanganato de potasio (como el O) | ≤ 0,0002 % |
| Compuestos de carbonilo (como CO) | ≤ 0,003 % |
| Sustancias fácilmente carbonizables | conforme |
| Acetona (GC) | ≤ 0,001 % |
| Étilmetilcetona (GC) | ≤ 0,02 % |
| Alcohol isoamílico (GC) | ≤ 0,05 % |
| 2-Propanol (GC) | ≤ 0,003 % |
| Alcoholes superiores (GC) | ≤ 0,01 % |
| Impurezas volátiles (GC) | |
| Acetaldehido y acetal | conforme |
| Benceno | ≤ 2 ppm |
| Metanol | ≤ 100 ppm |
| Total de otras impurezas | ≤ 300 ppm |
| Límite de indiferencia | ≤ 9 ppm |
| Cloruro (Cl) | ≤ 0,3 ppm |
| Nitrato (NO ₃) | ≤ 0,3 ppm |
| Fosfato (PO ₄) | ≤ 0,3 ppm |
| Sulfato (SO ₄) | ≤ 0,3 ppm |
| Ag | ≤ 0,000002 % |
| Al | ≤ 0,00005 % |
| As | ≤ 0,000002 % |
| Au | ≤ 0,000002 % |
| Ba | ≤ 0,00001 % |
| Be | ≤ 0,000002 % |
| Bi | ≤ 0,000002 % |
| Ca | ≤ 0,00005 % |
| Cd | ≤ 0,000005 % |
| Co | ≤ 0,000002 % |
| Cr | ≤ 0,000002 % |
| Cu | ≤ 0,000002 % |
| Fe | ≤ 0,00001 % |
| Ga | ≤ 0,000002 % |
| In | ≤ 0,000002 % |
| Li | ≤ 0,000002 % |
| Mg | ≤ 0,00001 % |
| Mn | ≤ 0,000002 % |
| Mo | ≤ 0,000002 % |
| Ni | ≤ 0,000002 % |
| Pb | ≤ 0,00001 % |
| Pt | ≤ 0,000002 % |
| Sb | ≤ 0,000002 % |
| Sn | ≤ 0,00001 % |
| Ti | ≤ 0,000002 % |
| Tl | ≤ 0,000002 % |
| V | ≤ 0,000002 % |
| Zn | ≤ 0,00001 % |
| Zr | ≤ 0,000002 % |
| Residuo de evaporación | ≤ 0,0005 % |
| Agua | ≤ 0,1 % |

Figura 2. Certificado de análisis del etanol.

Se trata de un etanol con una pureza superior al 99,9%, por lo que es un etanol adecuado para su utilización en cromatografía.



En cuanto a las impurezas que presenta, son tanto iones inorgánicos como moléculas orgánicas, por lo que se analizará cada una de ellas por separado, determinando, para cada caso, el mejor método de ultrapurificación.

Para la selección de los métodos, se han tenido en cuenta el punto de ebullición del etanol ($T_b=78,3^{\circ}\text{C}$) y su polaridad, mediante el momento dipolar ($\mu=1,69\text{D}$).

Tras comparar el punto de ebullición y la polaridad del etanol con dichas propiedades para cada impureza, se ha determinado que los métodos óptimos para ultrapurificar este disolvente son la rectificación y la extracción en fase sólida.

3.3. Justificación de los métodos seleccionados

Para la selección de los métodos, se han tenido en cuenta el punto de ebullición del etanol ($T_b=78,3^{\circ}\text{C}$) y su polaridad, medida a través del momento dipolar ($\mu=1,69\text{D}$).

A continuación se comparan ambas propiedades con las propias de cada impureza.

Los aldehídos poseen puntos de ebullición bastante bajos, por lo que pueden ser eliminados con una rectificación a la temperatura de ebullición del etanol, en la que la primera porción es eliminada. En concreto, el acetaldehído posee una temperatura de ebullición de $20,2^{\circ}\text{C}$, con lo cual no serán las impurezas más críticas.

Un caso similar sucede con la acetona, cuyo punto de ebullición es de $56,2^{\circ}\text{C}$ y se encuentra en muy pequeña cantidad. Es por ello que controlando la temperatura del vapor de la rectificación se puede eliminar sin problemas. La humedad presente en el disolvente se eliminará de igual manera. Se empezará a recoger muestra una vez que la temperatura haya superado los 56°C , para poder eliminar estas impurezas.

Para la etilmethylcetona, se requiere otro método basado en la polaridad ya que su punto de ebullición (80°C) es bastante parecido al del etanol, mientras que la polaridad no lo es, $\mu=2,5\text{D}$. Se propone una extracción en fase sólida que permita retener esta impureza dejando pasar el disolvente.

Los alcoholes se eliminarán mediante la rectificación, por tener temperaturas de ebullición superiores a la del etanol. Dichas temperaturas son las que siguen:

Tabla 1. Puntos de ebullición de los alcoholes presentes en el etanol.

| Alcohol | Tb (°C) |
|------------|-----------|
| Isoamílico | 132 |
| 2-propanol | 82 |
| Superiores | 1-hexanol |
| | 3-hexanol |

El metanol posee un punto de ebullición de 64,7°C, por lo tanto, lo más oportuno será su eliminación mediante la rectificación.

Por otra parte, los iones inorgánicos están presentes en el etanol en muy bajos porcentajes, su eliminación quedará relegada a la fracción de colas de la rectificación, con la parte más pesada.

En cuanto al resto de impurezas que se encuentran en el disolvente (sustancias reductoras de permanganato de potasio, compuestos de carbonilo o benceno), pueden ser obviadas por estar en muy bajas proporciones.

Como método preventivo, se realizará en última instancia, una microfiltración del disolvente mediante un filtro de 0,2 µm.



CAPÍTULO 4

Acetonitrilo



CAPÍTULO 4. Acetonitrilo

4.1. Descripción del acetonitrilo

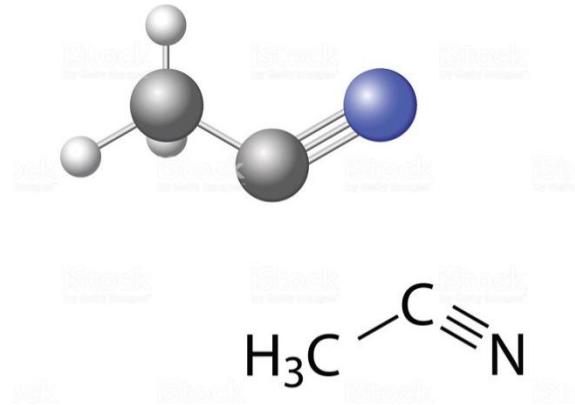


Figura 3. Molécula de acetonitrilo.

El acetonitrilo es un compuesto químico perteneciente al grupo de los nitrilos, siendo el más simple de aquellos de tipo orgánico. Tiene por fórmula C_2H_3N y un peso molecular de 41,05 g/mol. Su estado de agregación, en condiciones normales, es líquido incoloro.

Posee una densidad a 20°C de 0,786 g/cm³ aproximadamente y unos puntos de fusión y ebullición de -45 y 82°C, respectivamente. Es miscible con agua y gran variedad de solventes orgánicos a excepción de hidrocarburos o especies hidrocarbonadas saturadas.

El átomo de nitrógeno presente en la molécula contiene un par de electrones desapareados que le confieren sus propiedades de reactividad y estabilidad. Su momento dipolar es elevado ($\mu=3,92D$), por lo que es capaz de disolver sustancias iónicas y apolares.

El principal proceso de producción del acetonitrilo es como subproducto procedente de la síntesis de acrilonitrilo. Otros métodos son la deshidratación de la acetadamida o la hidrogenación de mezclas de monóxido de carbono (CO) y amoniaco (NH₃).

4.2. Descripción del producto

El producto de acetonitrilo seleccionado posee calidad para análisis tipo EMSURE. Ha sido seleccionado del catálogo de la empresa Merck. Su certificado de análisis, con algunas de las propiedades más importantes, se muestra a continuación:

1.00003.1000 Acetonitrile for analysis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

| Specification | | |
|---------------------------|---------------|---------|
| Purity (GC) | ≥ 99.5 | % |
| Identity (IR) | conforms | |
| Appearance | clear | |
| Color | ≤ 10 | Hazen |
| Acidity | ≤ 0.0002 | meq/g |
| Alkalinity | ≤ 0.0001 | meq/g |
| Density (d 20 °C/20 °C) | 0.782 - 0.783 | |
| Refractive index (n 20/D) | 1.343 - 1.345 | |
| Boiling range (80-82°C) | ≥ 95 | % (v/v) |
| Cyanide (CN) | ≤ 0.005 | % |
| Al (Aluminum) | ≤ 0.00005 | % |
| B (Boron) | ≤ 0.000002 | % |
| Ba (Barium) | ≤ 0.00001 | % |
| Ca (Calcium) | ≤ 0.00005 | % |
| Cd (Cadmium) | ≤ 0.000005 | % |
| Co (Cobalt) | ≤ 0.000002 | % |
| Cr (Chromium) | ≤ 0.000002 | % |
| Cu (Copper) | ≤ 0.000002 | % |
| Fe (Iron) | ≤ 0.00001 | % |
| Mg (Magnesium) | ≤ 0.00001 | % |
| Mn (Manganese) | ≤ 0.000002 | % |
| Ni (Nickel) | ≤ 0.000002 | % |
| Pb (Lead) | ≤ 0.00001 | % |
| Sn (Tin) | ≤ 0.00001 | % |
| Zn (Zinc) | ≤ 0.00001 | % |
| Evaporation residue | ≤ 0.001 | % |
| Water | ≤ 0.1 | % |
| ACS, Ph Eur-reagent | | |

Figura 4. Certificado de análisis del acetonitrilo.

Como se puede observar, posee una pureza superior al 99,5%.

No presenta gran cantidad de impurezas, siendo estas iones inorgánicos y agua en su totalidad. Se utilizará un método de intercambio iónico para la eliminación de los iones inorgánicos, en concreto columnas con resinas de intercambio catiónicas y aniónicas.



Posteriormente, se propone añadir un deshidratante para la eliminación del agua presente, inferior al 0,1%, así como la del agua procedente de la purificación de iones.

4.3. Justificación de los métodos seleccionados

Por tratarse de impurezas inorgánicas, las resinas de intercambio son un método óptimo de ultrapurificación para el acetonitrilo.

Se han escogido resinas de intercambio ácidas y básicas que intercambien los iones disueltos en el eluyente por protones e iones hidroxilo (H^+ y OH^- , respectivamente), que combinándose formarán nuevas moléculas de agua.

De esta manera, la única impureza por eliminar será el agua, que mediante un deshidratante puede llevarse a cabo.

Por último, como ha sido indicado, se realizará una filtración con membrana de 0,2 μ m, para asegurar que el disolvente posee la calidad de ultrapuro.



CAPÍTULO 5

Tetrahidrofurano



CAPÍTULO 5. Tetrahidrofurano

5.1. Descripción del tetrahidrofurano

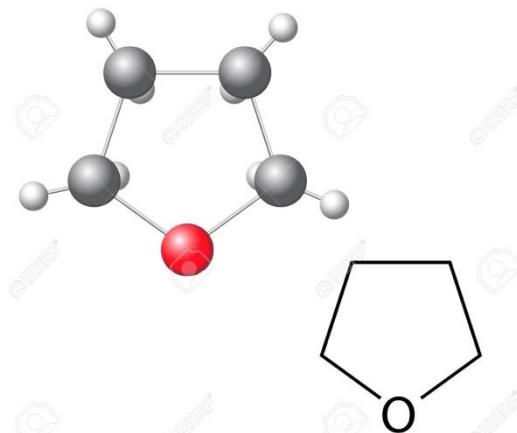


Figura 5. Molécula de tetrahidrofurano.

El tetrahidrofurano (THF) es un compuesto heterocíclico. Su fórmula química es C_4H_8O y tiene una masa molecular de 72,11 g/mol. En condiciones normales, se trata de un líquido transparente de baja viscosidad y un olor característico del éter.

De sus propiedades físicas cabe destacar que posee un punto de fusión de $-108,5^{\circ}C$, un punto de ebullición de $66^{\circ}C$ y una densidad (medida a $20^{\circ}C$) de $0,89\text{ g/cm}^3$. Es soluble en agua.

Es uno de los éteres más polares, tiene una constante dieléctrica de 7,5 a $25^{\circ}C$. Se dice que el tetrahidrofurano es un solvente dipolar aprótico ya que, debido a los pares de electrones no compartidos del átomo de oxígeno, es capaz de aceptar protones.

Según el compuesto de partida, existen varios procesos de síntesis del THF. El más utilizado es la deshidratación catalítica del 1,4-butanodiol; otras opciones son la hidrogenación de ácido maleico o de furano.

5.2. Descripción del producto

El tetrahidrofurano al que se propone realizar una ultrapurificación es el mostrado a continuación:

Tetrahidrofurano para análisis EMSURE®
ACS, Reag. Ph Eur

| N.º cat. | 109731 |
|--|----------------|
| Pureza (GC) | ≥ 99,8 % |
| Identidad (IR) | conforme |
| Apariencia | claro |
| Color | ≤ 10 Hazen |
| Densidad (d 20°C / 20°C) | 0,885-0,895 |
| Acidez | ≤ 0,0003 meq/g |
| Alcalinidad | ≤ 0,0002 meq/g |
| Peróxido (como H ₂ O ₂) | ≤ 0,005 % |
| Al | ≤ 0,00005 % |
| B | ≤ 0,000002 % |
| Ba | ≤ 0,00001 % |
| Ca | ≤ 0,00005 % |
| Cd | ≤ 0,000005 % |
| Co | ≤ 0,000002 % |
| Cr | ≤ 0,000002 % |
| Cu | ≤ 0,000002 % |
| Fe | ≤ 0,00001 % |
| Mg | ≤ 0,000002 % |
| Mn | ≤ 0,000002 % |
| Ni | ≤ 0,000002 % |
| Pb | ≤ 0,00001 % |
| Sn | ≤ 0,00001 % |
| Zn | ≤ 0,00001 % |
| Residuo de evaporación | ≤ 0,0005 % |
| Agua | ≤ 0,03 % |

9

Figura 6. Certificado de análisis del tetrahidrofurano.

Es un producto con calidad para análisis EMSURE, del fabricante Merck. Posee una pureza superior al 99,8%.

Este disolvente contiene iones inorgánicos en pequeñas porcentajes como impurezas, así como una cantidad de agua inferior al 0,03% y de peróxidos (como H₂O₂) inferior al 0,005%.

Se propone realizar un método de ultrapurificación basado en columnas de intercambio iónico que eliminan los iones inorgánicos y proporcione al eluyente una mayor humedad, la cual podría ser eliminada mediante un deshidratante.

No se tendrá en cuenta la cantidad de peróxido en la muestra debido a que el mismo eluyente pero de calidad para HPLC contiene la misma cantidad de peróxidos, sin afectar estos a los resultados de la cromatografía.

5.3. Justificación de los métodos seleccionados

Al igual que ocurre con el acetonitrilo, las impurezas son inorgánicas y por ello, las resinas de intercambio son un método óptimo de ultrapurificación.



Se han escogido resinas de intercambio ácidas y básicas que intercambien los iones disueltos en el eluyente por protones e iones hidroxilo (H^+ y OH^- , respectivamente), que combinándose formarán nuevas moléculas de agua.

Según el análisis obtenido del disolvente, únicamente se tienen cationes como impurezas; sin embargo, toda carga debe estar compensada, por lo que existirán aniones OH^- en el disolvente. Con una resina de intercambio catiónica o básica sería suficiente para purificar. No obstante, resulta conveniente el empleo de ambas resinas (ácida y básica) como método de prevención.

De esta manera, la única impureza por eliminar será el agua, que mediante un deshidratante puede llevarse a cabo.

Finalmente, se realizará una filtración a través de un filtro de 0,2 μm , para darle al disolvente la calidad de ultrapuro.



CAPÍTULO 6

Métodos de ultrapurificación



CAPÍTULO 6. Métodos de ultrapurificación

6.1. Intercambio iónico

El intercambio iónico es una operación unitaria en la cual los iones (cationes o aniones) que se encuentran adheridos a una sustancia sólida se intercambian con iones del mismo signo de la solución alimentada. Es un proceso rápido y reversible en el que los iones impuros o impurezas son tomados por la fase sólida, que deberá ser regenerada posteriormente para restaurarla a su forma original previa a la separación.

Los materiales más utilizados para el proceso de intercambio iónico son las resinas poliméricas con grupos de carga unidos a ellas. Estas resinas son frecuentemente denominadas resinas de intercambio iónico, debido a que en un balance global tienen el mismo número de cargas positivas y negativas, es decir, son eléctricamente neutras. Por ello, no podría existir una resina capaz de intercambiar simultáneamente aniones y cationes, porque los cationes fijos de la resina estarían neutralizando los aniones fijos y no existiría intercambio con el disolvente.

Existen principalmente cuatro tipos de resinas de intercambio iónico en función de su carga y su grado de ionización. De esta manera, puede hablarse de resina aniónica y catiónica, fuerte (si está totalmente ionizada) y débil (si no está totalmente ionizada). La capacidad intercambiadora de las resinas débiles es inferior a la de las resinas fuertes y deben ser protegidas contra el ataque químico.

En la purificación de disolventes mediante intercambio iónico con resinas, se hace pasar el disolvente a través de una columna que contiene la resina. Se habla de que el intercambio iónico es un proceso cíclico pero no continuo. Una vez que la resina ha gastado todos los iones móviles que contiene, se debe pasar por la columna una solución que tenga alta concentración en esos iones (se producen reacciones inversas a las que han tenido lugar durante la purificación), para la regeneración de la resina.

La fase estacionaria está formada por perlas poliméricas de poliestireno entrecruzado con divinilbenceno. Este polímero tiene grupos fenilo libres unidos a la cadena que se pueden ser tratados para agregarles grupos funcionales.

El objetivo en la purificación de acetonitrilo y tetrahidrofurano es eliminar los cationes y aniones contenidos en dichos disolventes, por lo que no sería conveniente cambiar esos iones por otros distintos. Sin embargo, si se intercambian los cationes impuros disueltos por iones H^+ de la resina y los aniones por iones OH^- , protones e iones hidroxilo pueden combinarse para producir moléculas de agua.



Para conseguir esto, son necesarias resinas intercambiadoras de cationes en forma de H^+ y de aniones en forma de OH^- .

6.1.1. Modo de operación

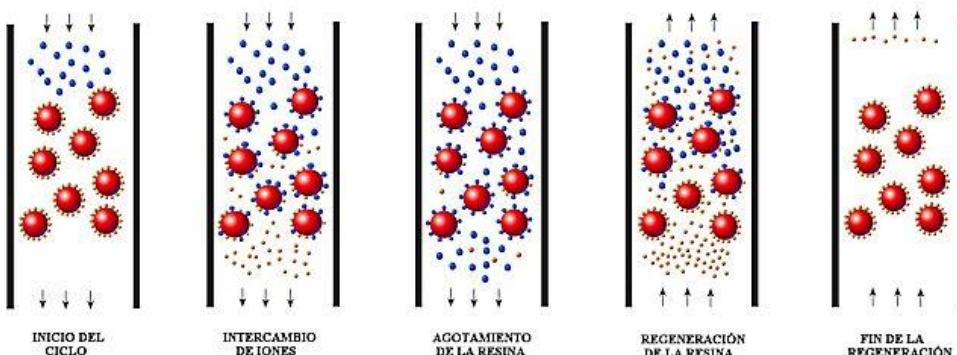


Figura 7. Proceso de intercambio iónico con resinas.

Como se ha comentado anteriormente, el intercambio iónico con resinas, se realiza en columnas. La solución que debe ser tratada pasa a través de una columna que contiene la resina de intercambio.

El proceso de purificación puede apreciarse en la Figura 7. Antes de la inyección del disolvente, la resina se encuentra fresca, posteriormente y de manera progresiva, los iones impuros (representados en color azul) van siendo intercambiados y la resina se carga de ellos, desprendiéndose los iones móviles de la resina (pequeñas esferas rojas). Al finalizar la operación, algunos de los iones impuros no han sido intercambiados y comienzan a salir en la solución tratada (aparición de fuga), esto indica el final de la fase de agotamiento.



Para que el intercambio iónico sea eficaz, es necesaria la existencia de una diferencia de afinidad entre los iones en la solución a tratar y el ion fijo inicial de la resina.

Este método de purificación es muy apropiado para eliminar impurezas en caso de que la concentración de estas impurezas en el disolvente a tratar sea baja. Para estos casos, el proceso puede durar entre unas horas y varias semanas o meses.

Por el contrario, si se trata de impurezas en altas concentraciones (del orden de varios gramos por litro de disolución) el ciclo es muy corto y la cantidad de regenerante se incrementa hasta alcanzar valores intolerables.

Tabla 2. Resumen de resinas. a) Dow Chemical Company, b)Mallinckrodt Chemical Works, c) J. T. Baker Chemical Company, d) Fischer Scientific Company, e) Matheson Coleman & Bell.

| | Tipo de intercambiador | Grupo funcional | Nombre comercial |
|-----------|------------------------|------------------------|---|
| Catiónico | Ácido fuerte | Ácido sulfónico | Dowex ^a 50; Amberlite ^b IR120; Rexyn ^d 101; Permutite Q |
| | Ácido débil | Ácido carboxílico | Amberlite IRC 50; Ionac CGC-270; Rexyn 102; Permutit H-70 |
| Aniónico | Base fuerte | Ion amonio cuaternario | Dowex 1; Amberlite IRA 400; Ionac AGA-542; Rexyn 201; Permutit S-1 |
| | Base débil | Grupo amonio | Dowex 3; Amberlite IR 45; Ionac AGA-316; Rexyn 203; |

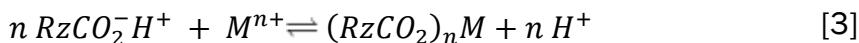
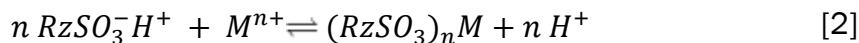
6.1.2. Resinas catiónicas

Poseen cargas negativas fijas y emiten iones hidrógeno u otros iones cargados positivamente como intercambio por cationes impuros presentes en el disolvente.

Contienen grupos funcionales ácidos unidos al anillo aromático de la resina. Los intercambiadores catiónicos fuertes tiene grupos sulfónicos , $-SO_3H$, ácidos fuertes similares al ácido sulfúrico.

Por otro lado, los intercambiadores catiónicos de ácidos débiles tienen grupos carboxilo, $-CO_2H$, parcialmente ionizados.

Para estos casos, los protones serían intercambiados con otros cationes, según:



En estas reacciones, la resina está representada por Rz . El equilibrio puede verse desplazado hacia la izquierda o derecha según aumenten las concentraciones $[H^+]$ o $[M^{n+}]$, respectivamente.

La capacidad de intercambio de una resina es la cantidad total de equivalentes de hidrógeno sustituibles por una unidad de volumen o por unidad de peso de la resina, viene determinada por la cantidad y la fuerza de los grupos iónicos fijos en la resina.

Las resinas catiónicas débiles sólo pueden utilizarse en intervalos de pH limitados, únicamente de pH 5 a pH 14, mientras que las fuertes se pueden utilizar en todo el rango de pH. Para valores bajos de pH, los intercambiadores ácidos débiles se unen a los protones intensamente evitando que pueda haber intercambio. De igual modo, los intercambiadores ácidos débiles no eliminan por completo los cationes de bases muy débiles, mientras que las fuertes sí que lo consiguen.

Es por ello, que las resinas ácidas débiles son utilizadas para separar sustancias iónicas fuertemente básicas o multifuncionales.

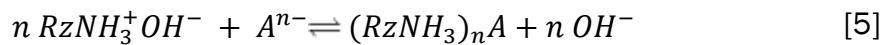
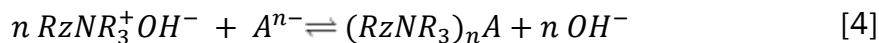
6.1.3. Resinas aniónicas

Las resinas de intercambio aniónico cuentan con cargas positivas fijas rodeadas de cargas negativas que participarán en el intercambio. Este tipo de resinas despedirán iones hidroxilo u otro tipo de iones cargados negativamente en intercambio por los iones impuros presentes en el disolvente.

Estas resinas contienen grupos básicos fuertes como grupos de amino cuaternario, o grupos básicos débiles, como grupos de amonio simples.



Las reacciones que se producen con estas resinas son las siguientes:



En estas reacciones, R representa un grupo orgánico; generalmente se trata de un grupo metilo.

Los intercambiadores básicos fuertes pueden ser usados para pH que van hasta valores de 12; sin embargo, los básicos débiles solo pueden utilizarse con pH comprendidos entre 0 y 9.

Las resinas básicas débiles no pueden eliminar ácidos muy débiles, aunque son preferibles para ácidos fuertes por su posibilidad de ser retenidos en las resinas básicas fuertes.



Figura 8. Resina de divinilbenceno para intercambio iónico.

6.1.4. Entrecruzamiento

El entrecruzamiento en la resina es directamente proporcional a las selectividades del proceso, cuanto mayor es el entrecruzamiento, mayor será la diferencia de selectividades.

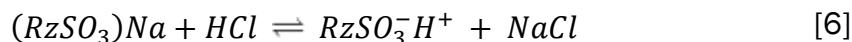
La medida de entrecruzamiento viene dada por el porcentaje de divinilbenceno en la resina. Habitualmente, contienen alrededor de un 8 o 10% de divinilbenceno.

De forma general, al aumentar el entrecruzamiento, aumenta la rigidez de la resina, se reduce su hinchamiento, su porosidad y su solubilidad. Los materiales de porosidad media son más adecuados para especies iónicas de peso molecular bajo.

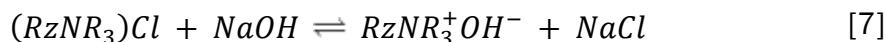
6.1.5. Regeneración

Cuando la resina se ha agotado, es necesario regenerarla para poder reanudar la operación de intercambio iónico, tal como se puede apreciar en las dos últimas ilustraciones de la Figura 7.

Para la regeneración de las resinas catiónicas se utilizan ácidos fuertes como el ácido clorhídrico (HCl) o el ácido sulfúrico (H_2SO_4), que pueden disociarse completamente y aportar los iones H^+ para reemplazar los iones cargados durante la fase de agotamiento de la resina. A continuación se muestra un ejemplo de reacción de regeneración:



De igual manera, para reemplazar los aniones eliminados gracias a la resina, se utilizan bases fuertes, generalmente sosa cáustica ($NaOH$), que aportan los iones OH^- . Un ejemplo de regeneración para una resina aniónica es el siguiente:



6.2. Desecación

El proceso de desecación se emplea para extraer o eliminar la humedad contenida en líquidos, soluciones y otras sustancias sólidas.



Los disolventes de alta pureza deben ser anhidros, con un contenido en agua inferior a 10 ppm que se mantenga constante sin la entrada de aire ni humedad al envase.

Típicamente la desecación de disolventes se lleva a cabo mediante la utilización de agentes desecantes capaces de captar la humedad presente en el disolvente o tamices moleculares.

La destilación sobre metales activos (como Na, K, Mg) es un método muy efectivo para el secado de los disolventes, aunque requiere de gran precisión. Otra opción es la utilización de columnas de zeolitas especiales que absorben el agua presente en el disolvente. Las zeolitas en forma de granos esféricos de 1 mm de diámetro, se introducen en la columna de acero, atravesada por el disolvente a presión. Esta técnica permite evitar el riesgo de incendio que implica la utilización de sodio o potasio a altas temperaturas.

Existen distintas sustancias desecantes, su utilización dependerá de la muestra que se quiere secar. Estas sustancias pueden ser ácidas, básicas o neutras.

- El ácido sulfúrico concentrado (H_2SO_4) se utiliza para cargar desecadores y para el secado de gases inertes, ácido clorhídrico concentrado, cloro o hidrocarburos alifáticos saturados, entre otros.
- Es común la utilización de aluminio (Al) y magnesio (Mg) en virutas cuando se trata de la desecación de alcoholes.
- El sulfato de sodio anhídrico (Na_2SO_4) es un desecante neutro. Tiene una gran capacidad deshidratante y es económico, pero lento. Forma una sal heptahidratada que a partir de 30°C se rompe, reduciendo la capacidad desecante a la mitad. Una gran ventaja que presenta este desecante es que permite su eliminación por decantación en lugar de por filtración por ser granular, además, permite saber la cantidad que hay que añadir ya que se aglomera en el fondo cuando tiene una gran cantidad de agua. Se utiliza principalmente para desecar disolventes orgánicos, como ácidos grasos, aldehídos, cetonas, etc.
- El cloruro de calcio anhídrico ($CaCl_2$) es menos eficaz que el anterior (no deseca por completo) y es bastante lento, pero es más barato. Puede reaccionar con alcoholes, fenoles, amidas y compuestos que contienen carbonilos. Este desecante, colocado en el interior de un tubo de vidrio, también es utilizado para evitar la entrada de humedad y mantener una atmósfera seca durante el transcurso de la reacción. No se emplea para la desecación de alcoholes ni aminas, ya que forman compuestos de adición.

- El hidróxido de potasio (KOH) o de sodio ($NaOH$) fundidos, son desecantes de acción rápida, no regenerables. Son utilizados para aminas y otras sustancias básicas.
- El sodio metálico (Na) se utiliza para éteres, hidrocarburos alifáticos saturados, hidrocarburos aromáticos y aminas terciarias; sin embargo, no es apropiado para alcoholes, ácidos, ésteres, aldehídos, cetonas, derivados halogenados y aminas primarias y secundarias.
- El sulfato de magnesio anhídrico ($MgSO_4$) es similar al sulfato de sodio: económico, de gran capacidad deshidratante, pero más rápido. La diferencia fundamental entre ambos es que el sulfato de magnesio reacciona como ácido de Lewis.
- El pentóxido de fósforo (P_2O_5) es el agente desecante más eficaz. Puede utilizarse para cargar desecadores y columnas de desecación. Por el contrario, es un producto difícil de manejar, además, forma una capa de ácido polifosfórico que atenúa su efecto desecante. Principalmente se emplea para desecar hidrocarburos, éteres, derivados halogenados y nitrilos.
No debe utilizarse para alcoholes, ácidos, aminas, aldehídos y cetonas.
- El gel de sílice (SiO_2) se utiliza para cargar desecadores con o sin indicador (cloruro de cobalto, $CoCl_2$). El indicador permite controlar el grado de adsorción de agua fácilmente de manera visual. El indicador tiene color azul, pero vira al rosa cuando la muestra está húmeda.
- Un tamiz molecular es una sustancia porosa y uniforme capaz de adsorber gases y líquidos. Moléculas pequeñas (como las moléculas de agua) son capaces de entrar en los poros y quedan adsorbidas. Los tamices moleculares más frecuentes son aluminosilicatos de calcio y sodio, con tamaños de 3 (especialmente para adsorber agua), 4 y 5 Å (para moléculas de mayor tamaño). Son muy eficaces y tienen una alta capacidad desecante. Para su regeneración, habitualmente se calientan a 350°C al vacío.

Los agentes desecantes más empleados para acetonitrilo son $CaCl_2$, P_2O_5 , K_2CO_3 o tamiz molecular de 3 Å; por otra parte, los utilizados para tetrahidrofurano son Na o tamiz molecular de 3 Å.



Figura 9. Agentes desecantes: CaCl_2 (izquierda) y tamiz molecular de 3 Å (derecha).

Un ejemplo de proceso de deshidratación del tetrahidrofurano, comienza con un pre-secado sobre MgSO_4 o Na_2SO_4 anhidros con un posterior filtrado.

Posteriormente, el disolvente es vertido a un matraz, se le añade Na (en pequeñas porciones o hilado) y una pequeña cantidad de benzofenona y es calentado a reflujo hasta que vira a un color azul intenso. Llegado ese momento, el THF condensado y seco es recogido.

6.3. Extracción en fase sólida

La extracción en fase sólida, conocida como SPE por sus siglas inglesas, es una técnica de separación cada vez más utilizada para la preparación de muestras.

La SPE surge para plantear soluciones a los problemas de la extracción líquido-líquido, como la separación incompleta de las fases, la eliminación de grandes volúmenes de solventes o la utilización de vidrios especiales y costosos. Sin embargo, esta técnica (SPE) es más eficiente, permitiendo reducir tanto el tiempo de extracción como el uso de disolventes. Además, cuenta con la ventaja de que puede ser automatizada.

De manera general, la fase sólida es colocada en un cartucho similar a una jeringa de plástico Figura 10; a continuación, la muestra es colocada en el cartucho y obligada a pasar a través de él por cualquiera de las siguientes formas:

- Un émbolo (presión positiva).
- Aplicando vacío (presión negativa).
- Por centrifugación.

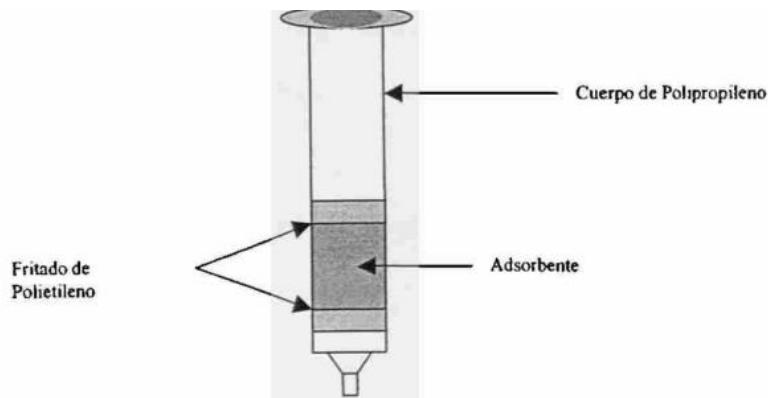


Figura 10. Cartucho de SPE.

El proceso de extracción en fase sólida conlleva 5 etapas:

1) Seleccionar el tubo o disco de SPE adecuado.

Según el volumen de la muestra a tratar, es recomendable utilizar tubo o disco de SPE. Dentro de estos, existen diferentes dimensiones.

2) Acondicionamiento del tubo o disco de SPE.

Para la activación del adsorbente y de los grupos funcionales, se hace pasar un volumen de solvente o una mezcla de solventes apropiado a través de la columna. De esta manera, los discos fritados de la columna se solvatan convenientemente.

El volumen recomendado es de 2 a 4 veces el volumen de lecho. Para asegurar que el cartucho no se seca entre el acondicionamiento y la adición de la muestra, se deja aproximadamente 1 mm, por encima del disco fritado, del solvente utilizado.

3) Adición de la muestra.

Se aplica la muestra en la parte superior del lecho del adsorbente, haciendo que la muestra pase a través del cartucho y el componente no deseado quede retenido en la fase sólida. Para obtener la máxima eficacia debe tenerse en cuenta el caudal de la muestra y mantenerlo bajo control.

4) Lavado del cartucho.

El lavado permite eliminar cualquier componente residual deseado que pueda quedar en el tubo y eliminarlo del material del disco. Además, arrastra cualquier otro componente que pueda estar interfiriendo en la extracción del analito.

Para este proceso puede utilizarse una mezcla de diferentes solventes para aumentar la eficacia del lavado.



Existen 4 tipos de extracción en fase sólida diferentes en función del sorbente utilizado:

– Fase inversa.

La fase líquida es polar y la fase sólida modificada es apolar. Se basa en interacciones hidrofóbicas: interacciones apolar-apolar y fuerzas de dispersión o de van der Waals.

– Fase normal.

La fase líquida es apolar y la fase sólida modificada es polar. Se basa en interacciones hidrofílicas: interacciones polar-polar, puentes de hidrógeno, interacciones pi-pi, dipolo-dipolo y dipolo-dipolo inducido.

– De intercambio iónico.

Se basa en la atracción electrostática existente entre el grupo presente en la muestra y un grupo en la superficie del sorbente.

– Adsorción.

Se basa en interacciones entre compuestos con materiales no modificados. Se pueden dar interacciones hidrofóbicas e hidrofílicas, dependiendo de la fase sólida utilizada.

Para la extracción de etilmetilcetona o butanona contenida en una matriz de etanol, la mejor opción en fase sólida es la de fase normal, ya que la butanona tiene mayor polaridad que el etanol:

$$\mu_{butanona} = 2,5 \text{ D} > \mu_{etanol} = 1,69 \text{ D}$$

En los siguientes párrafos se explica brevemente en qué consisten los procesos de SPE en fase normal, por ser la elegida en la ultrapurificación del etanol.

Normalmente, la fase normal implica compuestos a extraer polares en una matriz con una polaridad que va de media a no polar y una fase estacionaria polar.

La retención del compuesto (analito) en condiciones de fase normal es debida principalmente a las interacciones existentes entre los grupos funcionales polares del analito y los grupos polares de la superficie del adsorbente. Estos incluyen puentes de hidrógeno, interacciones pi-pi, dipolo-dipolo y dipolo-dipolo inducido, entre otros. Para extraer el componente del adsorbente, este se eluye mediante el paso de un solvente que interrumpe el mecanismo de unión (normalmente se trata de un solvente más polar que la matriz original de la muestra).

Los volúmenes de eluyente a tratar van de 50 L a 100 L, por lo que se utilizarán discos de SPE de un tamaño de 90 mm.

A fin de aprovechar de manera óptima la extracción en fase sólida, se hace necesario el estudio de las distintas fases estacionarias, sus masas y volúmenes, así como los volúmenes de acondicionamiento, lavado y elución.

Para la SPE en fase normal, las fases sólidas más utilizadas son sílices modificadas polarmente, se trata de partículas de 40 µm con poros de 60 Å. Algunos cartuchos comercializados por la empresa Sigma Aldrich para esta extracción son, por ejemplo, los denominados LC-CN, LC-NH₂, LC-Diol, LC-Si, LC-Florisil y ENVI-Florisil.

Los materiales LC-CN, LC-NH₂ y LC-Diol se utilizan para extraer compuestos polares, de forma general, cuando se utilizan en fase normal. Sin embargo, los materiales LC-Si, LC-Florisil y ENVI-Florisil se utilizan para compuestos como alcoholes, aldehídos, cetonas, pesticidas, herbicidas, drogas o colorantes, entre otros. Por eso, lo más correcto sería utilizar un material de los últimos citados, por ser más específicos con el compuesto que se desea eliminar.

De forma más concreta, la fase estacionaria LC-Si es extremadamente hidrofílica y debe mantenerse seca, por lo que las muestras así purificadas deben estar relativamente libres de agua.

Las sílices unidas tienen cadenas de alquilo cortas con grupos funcionales polares unidos a su superficie. Gracias a estos grupos funcionales polares, se trata de sílices más hidrofílicas que las de fase inversa.

El disolvente utilizado para la etapa de acondicionamiento en SPE de fase normal y con medios de adsorción polares es un disolvente orgánico en el que el componente no deseado existe.

6.4. Rectificación

Para poder entender la operación de rectificación, resulta necesario conocer el proceso de destilación.

La destilación Figura 11(a) es una operación unitaria basada en la separación de dos o más componentes de una mezcla líquida a partir de la diferencia de volatilidad de estos. Mediante el control de presión y temperatura se consiguen dos fases, una líquida y otra de vapor con diferentes concentraciones relativas. Cuanto mayor sea la diferencia de volatilidades

entre los compuestos, mayor será la diferencia de composición del líquido y vapor generados.

Cuando el grado de separación requerido es alto, se hace necesario someter a las corrientes de salida a sucesivas etapas de separación para enriquecerlas de los componentes deseados, mediante etapas de evaporación de la corriente líquida y condensación de la corriente vapor. Este proceso se denomina rectificación Figura 11(b) o destilación con reflujo.

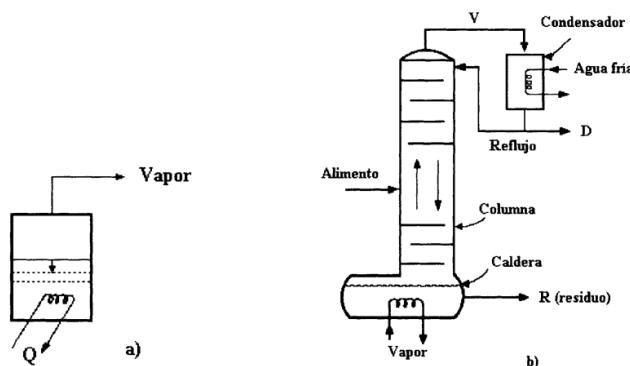


Figura 11. Procesos de destilación (a) y rectificación (b)

La rectificación se lleva a cabo en un equipo conocido como columna de rectificación; el vapor que abandona la cabeza de la columna se condensa y una fracción de este líquido se devuelve a la columna convirtiéndose en el reflujo de la columna, el resto se retira de la columna como destilado. En el interior de la columna, el vapor ascendente y el líquido descendente se ponen en contacto sin estar en equilibrio, produciéndose la transferencia de materia. Durante el contacto de ambas fases, los componentes más volátiles de la mezcla, se transfieren del líquido al vapor (de manera inversa sucede con los componentes menos volátiles); gracias a esto, el vapor se ve enriquecido en componentes volátiles a medida que se asciende en la columna.

6.4.1. Descripción del equipo

Generalmente, se trata de una columna de metal con un corte transversal circular, un calderín en la parte inferior en el cual se origina el calentamiento que produce la ebullición de la mezcla y un condensador de reflujo en la parte superior de la columna que produce el líquido que desciende por la columna.

Para asegurar el contacto entre las fases (indispensable en la transferencia de materia) existen dos caminos que proporcionan dos tipos de columnas: columnas de contacto continuo entre el vapor y el líquido (columnas de relleno) y columnas de contacto por etapas (columnas de platos).

- Columna de platos. Poseen unas superficies planas denominadas platos que dividen la columna en una serie de etapas. El fin de estos platos es retener una cantidad determinada de líquido en su superficie y burbujeante en ella el vapor ascendente, consiguiéndose un buen contacto entre las fases. El líquido de un plato cae al plato siguiente por un rebosadero situado en el extremo del plato, donde se mezcla íntimamente con el vapor. El vapor que asciende por los agujeros, evita que el líquido gotee y el vertedor metálico actúa como una represa que mantiene un nivel suficiente de líquido en el plato. El líquido que pasa sobre el vertedor es espumoso debido a la mezcla con el vapor. Este vapor se separa en la bajante, por donde el líquido pasa al plato de abajo; el espacio entre platos permite la separación entre vapor y líquido, es necesario que tenga la suficiente altura para evitar un arrastre excesivo (arrastre de líquido de una etapa a la siguiente). Este espacio tiende a ser mayor cuanto mayor es el diámetro de la columna.

Generalmente, son de platos de tapa circular o capucha, aunque también existen las columnas de platos de válvula o de orificios (también conocidas como malla). Los factores a tener en cuenta en estas columnas para la determinación de las etapas teóricas son: el diámetro de la columna, la eficiencia de operación de los platos, la pérdida de presión en cada plato, la forma de estos y su tamaño.

- Columna de relleno. Estas torres, también llamadas torres empaquetadas, consisten en una carcasa cilíndrica llena de elementos sólidos pequeños, inertes a las fases que circulan por la columna y distribuidos, bien al azar o bien de manera ordenada. El vapor y el líquido entran en contacto en una gran área en contracorriente. El relleno debe tener una serie de características (indicadas a continuación) para poder ser utilizado en esta técnica:
 - Baja pérdida de presión y alta capacidad. Para ello, deben tener un área transversal libre elevada.
 - Peso y retención de líquido bajas.
 - Gran superficie activa por unidad de volumen.
 - Gran volumen libre por unidad de volumen.
 - Alta durabilidad, resistencia a la corrosión elevada y bajo coste.

Atendiendo a las características anteriores, los rellenos aleatorios más utilizados son anillos Pall, Raschig o Lessing y silla Intalox o Berl; cuando el relleno es estructurado, típicamente se trata de anillos Raschig o partición cruzada.

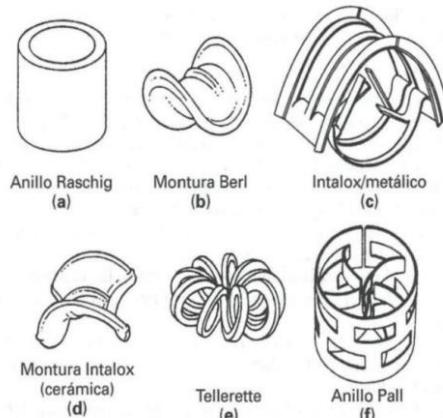


Figura 12. Rellenos para torres de rectificación.

6.4.2. Modo de operación

Una buena opción para la rectificación del etanol, es el desarrollo de una rectificación a vacío.

Este método solo se diferencia de una rectificación ordinaria en la presión reducida utilizada. Al igual que la rectificación o destilación, esta técnica separa los compuestos de una mezcla líquida en función de las diferencias en los puntos de ebullición, sin embargo, la utilización de una presión reducida disminuye los puntos de ebullición de los compuestos. Se utiliza cuando el punto de ebullición del compuesto de interés es difícil de lograr, o cuando existen componentes con puntos de ebullición cercanos al compuesto deseado, lo cual requiere muchas etapas de equilibrio.

Para conocer la reducción del punto de ebullición se puede utilizar un monograma de temperatura-presión con la relación Clausius-Clapeyron.

La rectificación se realizaría a una temperatura de 78,3°C (punto de ebullición del etanol). Para poder eliminar las impurezas de aldehídos, la primera porción obtenida de la rectificación será desechada. Se empezará a recoger muestra una vez alcanzada la temperatura de ebullición del metanol (64,7°C) para poder rechazar también impurezas de acetona y metanol.

6.5.3. Equipo comercial

Los equipos de rectificación más apropiados para la ultrapurificación de disolventes son de vidrio o cuarzo, ya que proporcionan una mayor limpieza, punto crítico para la ultrapurificación. Una propuesta de equipo comercial a utilizar es la mostrada en Figura 13.

Se trata de una columna de rectificación de etanol fabricada en vidrio, posee un evaporador rotatorio al vacío de 50 L y un condensador de tipo vertical y doble serpentín.



Figura 13. Columna de destilación con reflujo y evaporador rotatorio.

Este equipo está específicamente diseñado para la recuperación de disolventes. El evaporador rotativo es capaz de eliminar compuestos químicos orgánicos que presenten baja temperatura de ebullición (principalmente solventes) de una mezcla.

Posee un sistema de control en panel que indica la velocidad de rotación y la temperatura.

Para el baño de agua puede alcanzar los 99°C, mientras que para aceite la temperatura límite es de 170°C. En cuanto a la velocidad de rotación, el rango de funcionamiento se extiende desde 5 hasta 110 rpm.

6.5. Filtración

Se denomina filtración al proceso de separación en el cual los sólidos de una suspensión son separados a través de un medio mecánico poroso conocido como tamiz, criba o filtro. Este medio filtrante es el responsable de la retención de los sólidos de mayor tamaño que el de su porosidad,

permitiendo el paso del líquido (con partículas de un tamaño menor al de la porosidad del propio medio).

De forma general, se dice que el filtro solo actúa de manera eficiente después de una deposición inicial en el medio filtrante. Existen diferentes métodos de filtración, desde los embudos Buchner utilizados en filtraciones de laboratorio o la utilización de filtros cónicos de papel para casos simples, hasta filtraciones industriales que requieren de presiones determinadas y áreas de contacto (disolvente - medio filtrante) mayores. Un esquema de filtración básica es el que se muestra en la Figura 14.

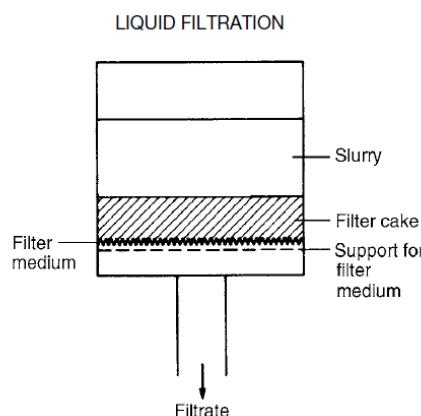


Figura 14. Principio de filtración.

6.5.1. Tipos de filtración

Pueden distinguirse dos tipos de procesos de filtración, aunque existen ocasiones en las que aparecen ambos.

El primero (Figura 15) es denominado filtración en superficie. Se utiliza cuando la concentración de los sólidos en la suspensión es elevada, las partículas se depositan en la superficie de un tabique poroso que, de forma ideal, ofrece una pequeña resistencia al fluido. A medida que los sólidos van depositándose en éste, las capas iniciales forman el medio filtrante, impidiendo que las partículas se incrusten en el propio filtro y asegurando la obtención de un filtrado libre de partículas.

El segundo tipo (Figura 16) es conocido como filtración en lecho profundo. Es utilizado para suspensiones muy diluidas en las que la recuperación de los sólidos no es necesaria. En este tipo, las partículas atraviesan los poros del medio filtrante, formando el medio filtrante gracias al impacto entre las partículas y la superficie del medio. El lecho se obstruye de forma gradual

hasta que la resistencia a la filtración se haya vuelto demasiado alta, es en este momento en el que se hace necesaria la eliminación de los sólidos. Para que esta labor resulte sencilla, suele utilizarse un lecho de partículas sólidas, como arena, que pueda ser limpiado a presión.

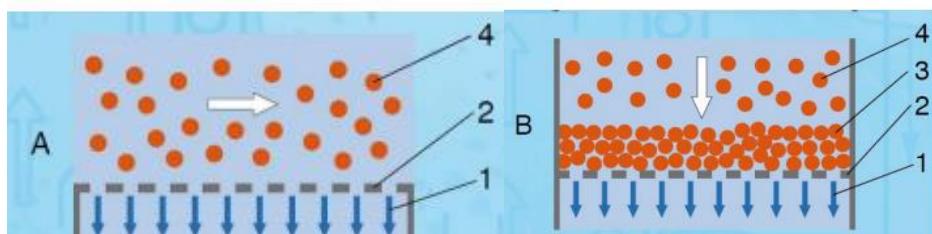


Figura 15. Filtración en superficie tangencial (A) y en torta (B).

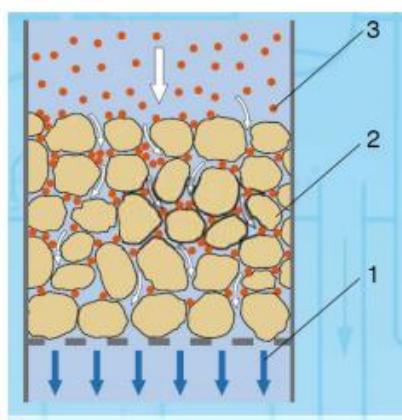


Figura 16. Filtración en lecho profundo.

6.5.2. Factores importantes en filtración

Existen diferentes dispositivos de filtración y tipos de filtros, algunos de los criterios establecidos para su clasificación son los siguientes:

- Mecanismo de filtración.
- Naturaleza de la mezcla a filtrar.
- Objetivo del proceso de filtración.
- Ciclo operacional.
- Fuerza impulsora responsable de la filtración.

A la hora de seleccionar el equipo más adecuado o las condiciones de operación, algunos de los factores decisivos son:



- Las propiedades del fluido a tratar. Más concretamente su viscosidad, densidad y propiedades corrosivas.
- La naturaleza del sólido, como su forma y tamaño o las características que presenta su acumulación.
- La concentración de sólidos en el fluido.
- El volumen de la suspensión que va a ser filtrada y su valor.
- El producto deseado final, bien sea el líquido, los sólidos o ambos.
- La posible necesidad de un lavado de sólidos posterior.
- Si el contacto entre la suspensión y el filtrado puede suponer contaminación para el producto.
- La posible necesidad de un pretratamiento que ayude a la filtración.

Por último, es necesario también tener en cuenta qué factores influyen en la eficacia de la filtración:

- La caída de presión existente entre la alimentación y el lado más alejado del medio filtrante.
- El área que presenta la superficie filtrante.
- La viscosidad del filtrado.
- La resistencia a la filtración producida por la torta filtrante.
- La resistencia que presenta el medio filtrante a la filtración.

6.5.3. Medio filtrante

El medio filtrante es el elemento primordial en una filtración, por ello, su elección es la consideración más importante para el correcto funcionamiento de la filtración.

Los criterios principales para la selección del medio son la compatibilidad y resistencia química con la mezcla, la permeabilidad al fluido y la resistencia a las presiones de la filtración, y la capacidad de retención de sólidos.

La variedad de medios porosos es muy diversa: telas y fibras tejidas, fieltros y telas no tejidas, sólidos porosos, membranas poliméricas, sólidos particulados, materiales cerámicos, fibras sintéticas...

6.5.4. Filtración con membranas

La utilización de membranas en el proceso de filtración se ha convertido en uno de los procesos de separación más importante en los últimos decenios.

La principal ventaja que presenta es que trabaja sin la necesidad de adición de otros productos químicos, además de que requiere de poca energía.

Para la filtración con membranas, se utiliza como medio filtrante una membrana semipermeable, que deja pasar el líquido y retiene los sólidos suspendidos y otras sustancias. La fuerza impulsora utilizada puede ser la alta presión aplicada, el gradiente de concentración de sólidos entre ambos lados de la membrana o la aplicación de un potencial eléctrico.

La efectividad de un proceso de filtración con membranas puede medirse mediante dos términos que dependen exclusivamente de la membrana: selectividad y productividad. Para la medida de la selectividad se utiliza un parámetro denominado factor de retención o de separación (en unidades de $\text{l/m}^2\text{h}$) y para la productividad se utiliza el parámetro flujo (en unidades de $\text{l/m}^2\text{h}$).

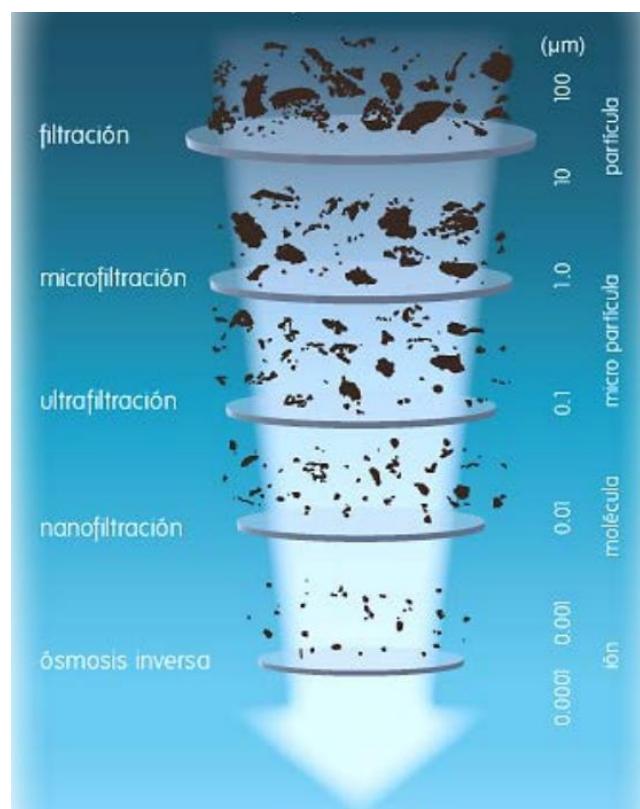


Figura 17. Tipos de filtración con membrana.

Teniendo en cuenta los diferentes tamaños de poro de la membrana, la fuerza impulsora responsable de la filtración y las presiones utilizadas, se encuentran diferentes tipos de filtración:

– **Microfiltración**

Se habla de microfiltración cuando el proceso de filtración se lleva a cabo mediante membranas con un tamaño de poro que varía entre 0,1 y 10 μm . Estas membranas son capaces de retener partículas que tengan tamaños dentro del rango de los poros o mayores, y dejan pasar las partículas con tamaños menores.

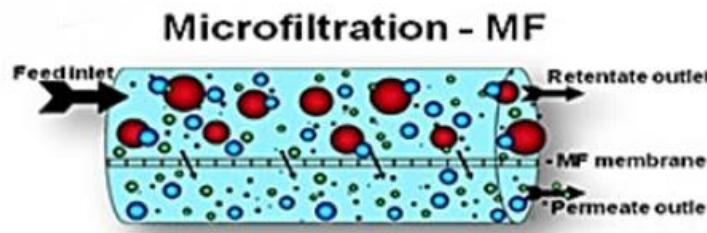


Figura 18. Proceso de microfiltración.

– **Ultrafiltración**

Se denomina ultrafiltración a la filtración realizada con membranas cuyos poros permiten separar moléculas de peso molecular superior a 10^3 Dalton/gmol. Son utilizadas para proteínas o desinfección de agua, reteniendo bacterias y virus.

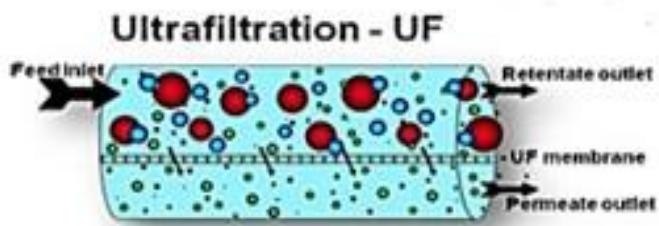


Figura 19. Proceso de ultrafiltración.

– **Nanofiltración**

En este proceso de filtración, las membranas retienen moléculas sin carga eléctrica con un peso molecular superior a 200 Dalton/gmol. Se utilizan para la concentración de compuestos orgánicos y desmineralizar parcialmente el solvente.

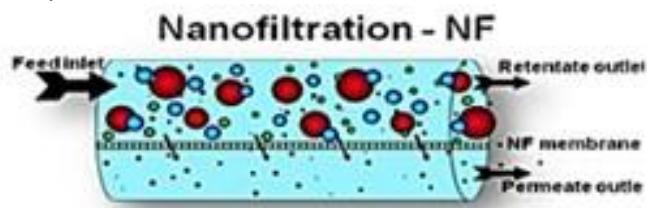


Figura 20. Proceso de nanofiltración.

Tabla 3. Resumen de tipos de procesos de filtración.

| Operación | Fuerza impulsora | Presiones (bar) | Tamaño de poro aproximado |
|-----------------|---------------------|-----------------|---------------------------|
| Permeación | Presión parcial | - | |
| Ósmosis inversa | Presión | 10-100 | No poroso |
| Nanofiltración | Presión | 3-20 | 0,0005-0,001 µm |
| Ultrafiltración | Presión | 1-10 | 0,001-0,1 µm |
| Microfiltración | Presión | <2 | 0,05-10 µm |
| Diálisis | Concentración | | 10-30 Å |
| Electrodiálisis | Potencial eléctrico | | |

6.5.5. Equipos de filtración con membranas

La selección del sistema de membrana depende de gran variedad de aspectos, como el coste, el riesgo de adaptación de las membranas o la facilidad de limpieza. Típicamente se trata de evitar la filtración en una única placa plana, ya que una gran superficie implica altos costes de inversión. Por ello, los sistemas suelen ser construidos de forma muy compacta, consiguiendo una gran superficie de contacto en un volumen mínimo.

Las membranas se aplican en varios tipos de módulos, siendo los dos explicados a continuación, los más importantes:

- Sistemas tubulares.

- **Membranas tubulares.** Debido a que las membranas tubulares se encuentran en el interior de un tubo, el flujo es generalmente de dentro hacia fuera. Tienen un diámetro de entre 5 y 15 mm, por ello, no es probable que se obstruyan; sin embargo, la densidad del empaquetamiento es baja, lo que hace que sean más caras.



- **Membranas capilares.** La propia membrana sirve como barrera selectiva capaz de resistir las presiones de filtración. El flujo a través de estas membranas puede ser de dentro hacia fuera y viceversa. Tienen un diámetro de entre 0,5 y 5 mm, tienen más tendencia a la obstrucción que las tubulares, pero su densidad de empaquetamiento es mayor.
- **Membranas de fibras huecas.** Poseen un diámetro inferior a 0,1 μm , por esto, la posibilidad de que se obstruyan es muy elevada. Suelen utilizarse exclusivamente para casos de nanofiltración y ósmosis inversa.
- **Sistemas de placas y marcos.**
 - **Membranas de espiral.** Consisten en dos capas de membrana, situadas en un tejido colector de permeados. Esta funda colectora de permeados envuelve un desagüe de permeados situado en el centro. La densidad de embalaje es alta. En cuanto a la obstrucción, trata de prevenirse introduciendo la alimentación a una altura moderada. Se utiliza este tipo de membranas para nanofiltración y ósmosis inversa.
 - **Membranas almohadiformes.** Se trata de placas planas, reciben este nombre debido a la forma de almohada que tienen dos membranas cuando son empaquetadas en una misma unidad. El disolvente va de dentro a fuera a través de las membranas y el permeado es recogido del espacio entre las membranas a través de conductos.

Los tres materiales poliméricos más apropiados, según los catálogos de la empresa española I.C.T, S.L., para la realización de la filtración son acetato de celulosa, nitrato de celulosa y teflón (PTFE).

- **Acetato de celulosa.** Se trata de un material muy fiable en filtración debido a su excelente estabilidad química frente a soluciones acuosas, en su mayoría alcoholes, hidrocarburos y aceites. Posee una baja adsorción, buena estabilidad térmica y una elevada velocidad de flujo. Sus especificaciones técnicas para un tamaño de poro de 0,2 μm se muestran en la Tabla 4.
- **Nitrato de celulosa.** Son membranas hidrofílicas de microestructura muy uniforme que hace posible una retención de partículas elevada y un buen comportamiento en tareas microbiológicas. Poseen una elevada adsorción. En la Tabla 4 se encuentra una recopilación de sus especificaciones.

Tabla 4. Especificaciones de materiales poliméricos para filtración con membranas.

| | Acetato de celulosa | Nitrato de celulosa |
|---|---------------------|---------------------|
| Poro (μm) | 0,2 | 0,2 |
| P. burbuja (kPa) | 350 | 420 |
| Vel. Flujo (cm^2 a 100 kPa) | 22 ml/min | 22 ml/min |
| Compatibilidad (pH) | 4 – 8 | 4 – 8 |
| Temp. Máx. ($^{\circ}\text{C}$) | 180 | 130 |
| Extractables (% agua) | <1 | <1 |
| Esterilización | Autoclave | Sí |
| | γ radiación | Sí |
| | Oxido etileno | Sí |



CAPÍTULO 7

Limpieza



CAPÍTULO 7. Limpieza

En todo proceso llevado a cabo en un laboratorio es imprescindible el uso de material limpio, ya que instrumentos y equipos sucios podrían provocar, casi con seguridad, resultados erróneos al estudio que está siendo realizado. Tratándose más específicamente, de un proceso de ultrapurificación, conviene extremar las medidas de limpieza.

Resulta imprescindible que el material utilizado durante todo el proceso se encuentre física y químicamente limpio y estéril (en muchas ocasiones).

Por otro lado, el laboratorio de estudio debe asegurar también varias condiciones de limpieza que eviten la contaminación tanto del material de trabajo como de los reactivos utilizados.

Un laboratorio de atmósfera limpia, sin partículas en suspensión, y con unas condiciones higiénicas aptas será suficiente para la realización del proceso de ultrapurificación.

7.1. Proceso de limpieza

Como ha sido mencionado anteriormente, la realización de una ultrapurificación conlleva procesos de limpieza más restrictivos. Es por ello, que la utilización de agua ultrapura como agente de limpieza sería lo idóneo.

El material utilizado durante todo el proceso debe ser lavado varias veces.

Primeramente, se utilizará agua destilada para arrastrar posibles residuos. El agua destilada es uno de los productos más utilizados en los laboratorios; con este reactivo se realizarán varios enjuagues. Tras los cuales, se realizará un último lavado con agua ultrapura, para asegurar la limpieza del equipo.

Una vez que el material ha sido lavado y para finalizar, se le realiza un enjuague con el disolvente que va a ser tratado. Con este proceso, se pretende homogeneizar el recipiente, eliminando los posibles rastros de agua ultrapura que pueda albergar el material.

7.2. Agua ultrapura

En un laboratorio es esencial la presencia de agua pura por su gran variedad de aplicaciones, entre las cuales se pueden encontrar desde la elaboración de blancos, muestras o disoluciones hasta su uso como eluyente en el lavado de los instrumentos. Es por ello que cualquier presencia de contaminante en cantidades de partes por billón (ppb), o incluso inferior, puede comprometer los resultados obtenidos.

Existen diferentes tipos de agua pura, clasificados de mayor a menor pureza como:

- **Tipo I.** Agua ultrapura utilizada en procedimientos que requieran de mucha exactitud y precisión.
- **Tipo II.** Agua pura de utilización en la mayoría de pruebas analíticas.
- **Tipo III.** Esta agua está recomendada para pruebas generales en el laboratorio, incluyendo la utilizada para el lavado de material de laboratorio (posteriormente enjuagado con el tipo de agua especificado para cada operación).
- **Tipo IV.** Se utiliza para la preparación de soluciones.

El agua ultrapura, también llamada agua de tipo I, se compone únicamente de moléculas de agua con protones e iones hidroxilo en equilibrio. Como es conocido, el agua se caracteriza por ser capaz de disolver casi todo tipo de compuestos químicos, lo que implica que su calidad está en constante amenaza. Entre las impurezas que pueden encontrarse disueltas se encuentran: partículas en suspensión, moléculas orgánicas, compuestos inorgánicos, microorganismos o gases disueltos.

Para la eliminación de estas impurezas, el agua debe ser sometida a procesos de ósmosis inversa, submicro y/o ultrafiltración, intercambio iónico y filtración con filtros electrostáticos.

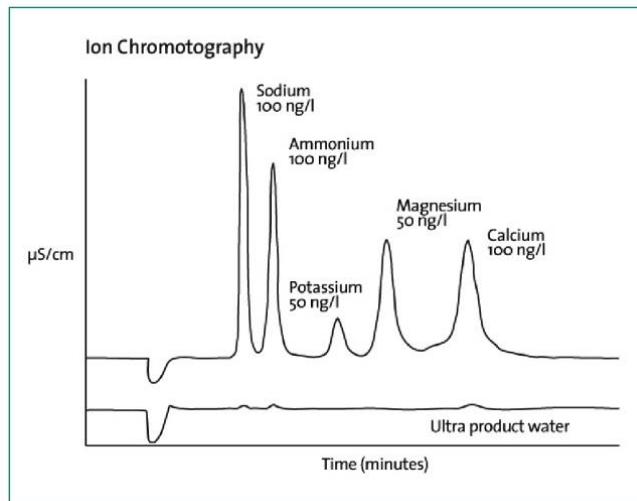


Figura 21. Análisis de agua ultrapura (tipo I) y agua pura (tipo II) mediante cromatografía iónica.

Para poder garantizar la calidad ultrapura del agua, es imprescindible el equipo utilizado en su obtención, su almacenamiento y su distribución.

En cuanto a su obtención, se utilizan equipos comerciales como Milli-Q (sistema de purificación de la empresa Merck). Este sistema proporciona agua de tipo I y II a partir de agua corriente, posee dispensadores y un depósito de almacenamiento. Contiene lámparas UV echaro carentes de mercurio, resinas de intercambio iónico IQnano y filtros específicos que permiten ajustar la calidad del agua en función del fin al que vaya a ser destinada.

Para su almacenamiento, se procura utilizar un depósito propio del equipo de obtención, para que pueda mantener su calidad de manera constante a lo largo del tiempo.

Su distribución resulta ser uno de los puntos críticos para la calidad del agua ultrapura. El transporte mediante tuberías poliméricas podría, por ejemplo, provocar la migración de componentes de esta tubería al agua. También es importante evitar, en la medida de lo posible, su contacto con el aire, ya que sus impurezas pueden afectarla.

Por todo ello, para garantizar la calidad del agua ultrapura, se debe utilizar un equipo de purificación bien diseñado para mantener la pureza y que contenga un sistema de distribución fácil de usar.



CAPÍTULO 8

Alternativas



CAPÍTULO 8. Alternativas

Como se ha comentado en capítulos previos, los métodos de ultrapurificación expuestos son válidos únicamente para los disolventes propuestos. Existe gran variedad de productos en el mercado, con diferentes impurezas originadas por el método de producción seguido. Es por ello, que este estudio de técnicas es aplicable únicamente a los disolventes seleccionados.

En el caso del etanol, por ejemplo, existe la posibilidad de que contenga una mayor cantidad de benceno, con el cual forma un azeótropo. También sería probable la presencia de agua en el etanol, en caso de no ser etanol absoluto, lo que podría generar un azeótropo entre el agua y el etanol e incluso en caso de alta presencia de isopropanol, se podría formar un azeótropo entre el agua y el isopropanol.

Para la separación de mezclas azeotrópicas, generalmente se suelen utilizar técnicas de destilación mejorada gracias a la adición de agentes externos o cambios en las condiciones del proceso. Entre estas técnicas destacan la destilación extractiva, la destilación con sales, la destilación con líquidos iónicos y la destilación por cambios de la presión de operación.

8.1. Destilación extractiva

Para la realización de este método, se utiliza un fluido auxiliar de volatilidad baja, capaz de cambiar la distribución de los componentes en las distintas fases. Este fluido, con un flujo másico de entre 5 y 8 veces superior al de la alimentación, es añadido a la torre en la parte superior y es extraído por el fondo.

8.2. Destilación por sales

En esta destilación, se adiciona una sal sólida soluble en las corrientes líquidas de la torre de destilación, actuando como agente de separación. Esta sal disuelta permite cambiar el equilibrio líquido-vapor generando una fase vapor libre con mayor concentración de componentes volátiles y sin presencia

de la sal. La corriente líquida de colas que contiene el agente separador, puede evaporarse para la recuperación de la sal.

No obstante, esta técnica no es comúnmente utilizada debido a la corrosión que provoca la sal en los equipos utilizados.

8.3. Destilación con líquidos iónicos

Resulta análoga a la destilación por sales, pero en este caso, los responsables de afectar al equilibrio líquido-vapor son los iones que componen el líquido. Por estar presentes en fase líquida, se opera de forma similar a los solventes de la destilación extractiva.

Este método no está completamente desarrollado actualmente, por lo que su aplicación industrial aún es limitada.

Por otra parte, presenta dos claras desventajas frente a otras técnicas: los largos tiempos requeridos y los altos costes que conlleva la síntesis de los líquidos iónicos. Asimismo, se trata de un aditivo difícil de recuperar y reutilizar en nuevos procesos de destilación.

8.4. Destilación por cambios de presión

La destilación por cambios de presión no utiliza la adición de sustancias externas para la separación, sino que aprovecha las variaciones del punto azeotrópico relacionado con los cambios en la presión.

Para la realización de esta técnica, se requiere de dos torres de destilación operando a diferentes presiones. De cada una de ellas, se obtienen productos puros.

Este método presenta varias desventajas, como la necesidad de la utilización de una torre adicional, la complejidad de los sistemas de control y los elevados costes generados en la operación.



Sin embargo, estas técnicas de separación descritas, presentan la clara desventaja de la introducción de nuevas sustancias externas, aumentando a su vez los costes operativos y energéticos.

Actualmente, se están realizando estudios sobre el empleo de nanopartículas de óxidos metálicos para la eliminación de compuestos en mezclas azeotrópicas.

No obstante, las técnicas o procesos de ultrapurificación más utilizados se basan en la rectificación (incluyendo sus variantes), la extracción en fase sólida y el intercambio iónico.



CAPÍTULO 9

Conclusiones



CAPÍTULO 9. Conclusiones

La realización de este Trabajo Fin de Grado ha permitido llegar a conocer cuáles son los mejores métodos para ultrapurificar tres de los disolventes más utilizados en HPLC.

Tras una primera búsqueda de los disolventes en catálogos de diferentes proveedores y la selección de uno de ellos, en este caso Sigma Aldrich, se compararon las impurezas contenidas para los mismos disolventes con calidad de análisis y con calidad para HPLC; todo ello, gracias a los certificados de análisis proporcionados por la misma empresa.

Posteriormente, se ha realizado un estudio exhaustivo de los disolventes propuestos, más especialmente de las impurezas que estos presentan y se han analizado varios métodos de separación que permitirían aportarle a dichos eluyentes la calidad necesaria para su uso en la cromatografía líquida de alta resolución.

Se ha comprobado que existen tres procesos básicos para este cometido: rectificación, extracción en fase sólida e intercambio iónico.

La rectificación resulta adecuada para eliminar las impurezas que presentan un punto de ebullición diferente al del disolvente a tratar. Realizando esta operación a la temperatura de ebullición del disolvente y eliminando la primera porción de vapor obtenido, se consigue una primera purificación del eluyente.

Por otra parte, la extracción en fase sólida, cada vez más utilizada en el campo de la cromatografía para la concentración y purificación de muestras, se vuelve indispensable para conseguir la eliminación de las impurezas que poseen una notable diferencia de polaridad con el disolvente deseado.

En último lugar se encuentra el intercambio iónico. Este método es requerido cuando el disolvente contiene trazas de iones inorgánicos. La base del intercambio iónico se encuentra en la utilización de columnas con resinas ácidas y/o básicas capaces de captar los iones presentes en el disolvente e intercambiarlos por los iones móviles que presentan. En el caso estudiado, las resinas aniónicas y catiónicas aportan protones e iones hidroxilo, cuyo enlace provoca la aparición de moléculas de agua en el disolvente.

Otros procesos que deben realizarse son la desecación y la filtración.

La adición de agentes desecantes elimina la presencia de agua del eluyente, tanto del agua presente en forma de impureza como del agua producida por las resinas de intercambio iónico. Existen diferentes agentes desecantes, se deberá elegir el más adecuado según el disolvente a tratar.

El último proceso que debe realizarse a un disolvente es una filtración, como método de prevención que permite asegurar la pureza de la mezcla. Lo más adecuado resulta ser la utilización de membranas con un tamaño de poro propio de la microfiltración.

Una vez expuestos los métodos que permiten la separación de impurezas, se ha adaptado cada uno de ellos a los disolventes analizados en este trabajo.

Se ha concluido que para la ultrapurificación del etanol se debe realizar una rectificación a 78,3°C controlando la temperatura y desechar la primera porción obtenida. A continuación, se realiza una SPE en fase normal y finalmente, una microfiltración con membrana de 0,2 µm.

Para ultrapurificar el tetrahidrofurano y el acetonitrilo, se realiza un intercambio iónico en columna con resinas ácidas y básicas. Posteriormente, se añade un agente desecante y se filtra en membrana con un tamaño de poro de 0,2 µm.



BIBLIOGRAFÍA



BIBLIOGRAFÍA

- Alcohol etílico o etanol.* (n.d.). Recuperado el 17 de abril de 2019, de <http://www.quidelta.com.mx/Farmoquimicos/Alcohol-Etilico-Etanol#>
- Berrueta, L. A., Gallo, B., & Vicente, F. (1995). A review of solid phase extraction: Basic principles and new developments. *Chromatographia*, 40(7-8), 474-483. Recuperado el 4 de abril de 2019, de <https://doi.org/10.1007/BF02269916>
- Capítulo I. Fundamentos de procesos de destilación.* (n.d.). Recuperado el 30 de abril de 2019, de http://www.biblioteca.udep.edu.pe/bibvirudep/tesis/pdf/1_188_184_136_1785.pdf
- Christian, Gary D. (2009). *Química Analítica* (Sexta Edición). Capítulo 18, págs: 547-550. Capítulo 21, págs: 623. McGraw-Hill.
- Columna de Destilación al vacío para recuperación de disolventes. (n.d.). Recuperado el 30 de mayo de 2019, de <https://spanish.alibaba.com/product-detail/ethanol-distillation-column-vacuum-rotary-evaporator-50l-for-lab-solvent-recovery-62045849282.html?spm=a2700.8699010.normalList.5.3c8f68b0JD4gcQ&s=p>
- Coulson, J. M., & Richardson, J. F. (2012). *Ingeniería química: operaciones básicas* (Quinta Edición). Volumen 2. Capítulo 7. Reverté.
- Cromlab S.L. (n.d.). Extracción en Fase Sólida EFS-SPE. Recuperado el 22 de abril de 2019, de http://www.cromlab.es/EFS_Principal.htm
- De la Iglesia Ceballos, J. M. (n.d.). *Operaciones Unitarias Importantes: Operaciones y Procesos*. Recuperado el 30 de abril de 2019, de <https://ocw.unican.es/pluginfile.php/1313/course/section/1616/BLOQUE2-OyP.pdf>
- Desecación y Agentes Desecantes.* (n.d.). Recuperado el 27 de mayo de 2019, de <http://sisbib.unmsm.edu.pe/BibVirtualData/Libros/Quimica/pigmentos/archivos PDF/appendice2.pdf>
- Díaz, R. (n.d.). Alcohol Etílico: Fórmula, Propiedades, Riesgos y Usos - Lifeder. Recuperado el 17 de abril de 2019, de https://www.lifeder.com/alcohol-etilico/#Propiedades_fisicas_y_quimicas

Disolventes anhidros | Técnicas y operaciones avanzadas en el laboratorio químico (TALQ). (n.d.). Recuperado el 30 de abril de 2019, de <http://www.ub.edu/talq/es/node/202>

Etanol - EcuRed. (2017). Recuperado el 17 de abril de 2019, de https://www.ecured.cu/Etanol#Principales_caracter.C3.ADsticas

Gómez Rupérez, A. (2018). Recomendaciones para la limpieza del material de vidrio. Recuperado el 31 de mayo de 2019, de <https://www.guialab.com.ar/notas-tecnicas/recomendaciones-para-la-limpieza-del-material-de-vidrio/>

MÉTODO DE SEPARACIÓN DE MEZCLAS AZEOTRÓPICAS MEDIANTE ADICIÓN DE NANOPARTÍCULAS. Solicitud internacional publicada en virtud del tratado de cooperación en materia de patentes. WO 2017/122065 A1. 2016-11-21.

Intercambio iónico: información general y principios. (2018). Recuperado el 26 de abril de 2019, de http://dardel.info/IX/IX_Intro_ES.html

Marcilla Gomis, A. (n.d.). *INTRODUCCIÓN A LAS OPERACIONES DE SEPARACIÓN. Cálculo por etapas de equilibrio.* Recuperado el 30 de abril de 2019, de https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/4329/1/Marcilla_Gomis_Cálculo_por_etapas.pdf

Membranas Tubulares. (n.d.). Recuperado el 27 de mayo de 2019, de <https://www.lenntech.es/membranas-tubulares.htm>

Microfiltración. (2009). Recuperado el 27 de mayo de 2019, de www.ictsl.net

Muhye, A. (n.d.). Acetonitrilo (C₂H₃N): Estructura, Propiedades, Usos - Lifeder. Recuperado el 17 de abril de 2019, de <https://www.lifeder.com/acetonitrilo/>

Obtención THF (2010). Recuperado el 17 de abril de 2019, de <https://poica2010a.wordpress.com/2010/04/15/obtencion-thf/>

Operaciones Básicas en el Laboratorio de Química. Secado. Agentes Desecantes. (n.d.). Recuperado el 30 de abril de 2019, de http://www.ub.edu/obtq/obtq_castellano/dessecacio_agents.html#

Perry, R. H., Green, D. W., & Maloney, J. O. (1992). *Perry: manual del ingeniero químico.* McGraw-Hill.

Pollak, P., Romeder, G., Hagedorn, F., & Gelbke, H.-P. (2000). Nitriles. In *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry.* https://doi.org/10.1002/14356007.a17_363



- Purificación y Tratamiento de agua por intercambio iónico (2010). Recuperado el 25 de abril de 2019, de <http://aguapurificacion.blogspot.com/2010/08/tratamiento-de-agua-por-intercambio.html>
- Sanchez Trujillo, K. (2015). *Destilacion manual* (pp. 10-11). pp. 10-11. Recuperado el 30 de abril de 2019, de https://www.academia.edu/37522603/Destilacion_manual_pdf
- Sistema de purificación de agua purificada y de agua ultrapura para laboratorio. (n.d.). Recuperado el 31 de mayo de 2019, de <http://www.merckmillipore.com/ES/es/products/water-purification/type-1/milli-q-iq-7003-7005-7010-7015/sPWb.qB.epcAAAFmBrUSPOVj.nav>
- Sistemas de membranas de placa y marco. (n.d.). Recuperado el 27 de mayo de 2019, de <https://www.lenntech.es/sistemas-de-membrana-de-placa-y-marco.htm>
- Supelco. (1998). *SPE theory*. Recuperado el 24 de abril de 2019, de <https://www.sigmaaldrich.com/Graphics/Supelco/objects/4600/4538.pdf>
- Tecnología de membrana. (n.d.). Recuperado el 15 de mayo de 2019, de <https://www.lenntech.es/tecnologia-de-membrana.htm>
- Valdivia Medina, R. Y., Pedro Valdés, S., & Laurel Gómez, M. (2010). *Boletín Científico Técnico INIMET*. Recuperado el 31 de mayo de 2019, de <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=223017807002>
- Vollhardt, K. P. C., Albericio Palomera, F., Andreu Martínez, D., & Pons Vallès, M. (1990). *Química orgánica*. Omega.
- Wankat, P. C. (2008). *Ingeniería de Procesos de Separación* (Segunda Edición). Capítulo 16, págs: 535-544. Capítulo 17, págs: 663-672. Prentice Hall.
- Whitehead, P. (n.d.). *Cómo conseguir los mejores resultados con agua ultrapura*. Recuperado el 31 de mayo de 2019, de http://www.veoliawatertechnologies.es/vwst-iberica/ressources/documents/1/18156,Tecnicas-de-Laboratorio_Sept2011.pdf



ANEXOS



ANEXO 1. Hojas de seguridad

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Fecha de revisión 19.02.2019

Versión 21.10

SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa**1.1 Identificador del producto**

Artículo número 100983

Denominación Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur

Número de registro 01-2119457610-43-XXXX
REACH

No. CAS 64-17-5

1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejadosUsos identificados Análisis químico, Producción química
En cumplimiento de las condiciones descritas en el anexo a esta hoja de datos de seguridad.**1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**

Compañía Merck KGaA * 64271 Darmstadt * Alemania * Tel: +49 6151 72-0

Departamento LS-QHC * e-mail: prodsafe@merckgroup.com
Responsable**1.4 Teléfono de emergencia** **Instituto Nacional de Toxicología * Madrid * Tel: 91 562 04 20****SECCIÓN 2. Identificación de los peligros****2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla****Clasificación (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)**

Líquido inflamable, Categoría 2, H225

Irritación ocular, Categoría 2, H319

Para el texto integral de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 Líquido y vapores muy inflamables.
H319 Provoca irritación ocular grave.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Etiquetado reducido (≤125 ml)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Consejos de prudencia

P210 Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

No. Indice 603-002-00-5

2.3 Otros peligros

Ninguna conocida.

SECCIÓN 3. Composición/ información sobre los componentes

3.1 Sustancia

| | | |
|---------|----------------------------------|--|
| Formula | C ₂ H ₅ OH | C ₂ H ₆ O (Hill) |
|---------|----------------------------------|--|

Página 2 de 23

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS, ISO, Reag. Ph Eur |

| | |
|------------|--------------|
| No. Indice | 603-002-00-5 |
| No. CE | 200-578-6 |
| Masa molar | 46,07 g/mol |

Componentes peligrosos (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Nombre químico (Concentración)

No. CAS Número de registro Clasificación

Etanol (<= 100 %)

La sustancia no cumple los criterios de PBT o mPmB según el Reglamento (CE) núm. 1907/2006, anexo XIII.

| | | |
|---------|----------------|---|
| 64-17-5 | 01-2119457610- | |
| | 43-XXXX | Líquido inflamable, Categoría 2, H225 Irritación ocular, Categoría 2, H319 |

Para el texto integral de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

3.2 Mezcla

No aplicable

SECCIÓN 4. Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios

Tras inhalación: aire fresco.

En caso de contacto con la piel: Quitar inmediatamente todas las prendas contaminadas. Aclararse la piel con agua/ducharse.

Tras contacto con los ojos: aclarar con abundante agua. Consultar al oftalmólogo. Retirar las lentillas.

Tras ingestión: hacer beber agua inmediatamente (máximo 2 vasos). Consultar a un médico.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

efectos irritantes, parálisis respiratoria, Vértigo, narcosis, borrachera, euforia, Náusea, Vómitos

4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

No hay información disponible.

SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Dióxido de carbono (CO2), Espuma, Polvo seco, Agua

Medios de extinción no apropiados

No existen limitaciones de agentes extinguidores para esta sustancia/mezcla.

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Inflamable.

Prestar atención al retorno de la llama.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

Son posibles mezclas explosivas con el aire a temperaturas normales.
Los vapores son más pesados que el aire y pueden expandirse a lo largo del suelo.
En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios
En caso de fuego, protéjase con un equipo respiratorio autónomo.

Otros datos

Separar el recipiente de la zona de peligro y refrigerarlo con agua. Impedir la contaminación de las aguas superficiales o subterráneas por el agua que ha servido a la extinción de incendios.

SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Indicaciones para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia: No respirar los vapores, aerosoles. Evitar el contacto con la sustancia. Asegúrese una ventilación apropiada. Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición. Evacúe el área de peligro, respete los procedimientos de emergencia, con sulte con expertos.

Consejos para el personal de emergencia:

Equipo protector véase sección 8.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado. Riesgo de explosión.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Cubra las alcantarillas. Recoja, una y aspire los derrames. Observe posibles restricciones de materiales (véanse indicaciones en las secciones 7 o 10). Recoger con materiales absorbentes, p. ej. con Chemizorb®. Proceder a la eliminación de los residuos. Aclarar.

6.4 Referencia a otras secciones

Para indicaciones sobre el tratamiento de residuos, véase sección 13.

SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura

Consejos para una manipulación segura
Observar las indicaciones de la etiqueta.

Indicaciones para la protección contra incendio y explosión
Mantener apartado de las llamas abiertas, de las superficies calientes y de los focos de ignición. Tomar medidas de precaución contra descargas electrostáticas.

Medidas de higiene
Sustituir la ropa contaminada. Lavar manos al término del trabajo.

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Condiciones de almacenamiento

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado.
Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición.

Temperatura de almacenaje recomendada indicada en la etiqueta del producto.

7.3 Usos específicos finales

Véase el escenario de exposición en el anexo de ésta FDS.

SECCIÓN 8. Controles de exposición/ protección individual

8.1 Parámetros de control

Componentes con valores límite ambientales de exposición profesional.

Componentes

| Base | Valor | Limites umbrales | Observaciones |
|------|-------|------------------|---------------|
|------|-------|------------------|---------------|

Etanol (64-17-5)

| | | | |
|----------|--|-----------|-------------------------|
| VLA (ES) | Valor Límite Ambiental-Exposición de Corta Duración (VLA-EC) | 1.000 ppm | 1.910 mg/m ³ |
|----------|--|-----------|-------------------------|

Nivel sin efecto derivado (DNEL)

| | | | |
|-----------------------------|--------------------|------------|-------------------------|
| DNEL trabajador, agudo | Efectos locales | inhalativo | 1900 mg/m ³ |
| DNEL trabajador, crónico | efectos sistémicos | dérmica | 343 mg/kg Peso corporal |
| DNEL trabajador, crónico | efectos sistémicos | inhalativo | 950 mg/m ³ |
| DNEL consumidor, agudo | Efectos locales | inhalativo | 950 mg/m ³ |
| DNEL consumidor, prolongado | efectos sistémicos | dérmica | 206 mg/kg Peso corporal |
| DNEL consumidor, prolongado | efectos sistémicos | inhalativo | 114 mg/m ³ |
| DNEL consumidor, prolongado | efectos sistémicos | oral | 87 mg/kg Peso corporal |

Procedimientos de control recomendados

Los métodos para la medición de la atmósfera del puesto de trabajo deben cumplir con los requisitos de las normas DIN EN 482 y DIN EN 689.

Concentración prevista sin efecto (PNEC)

| | |
|--|------------|
| PNEC Agua dulce | 0,96 mg/l |
| PNEC Agua de mar | 0,79 mg/l |
| PNEC Sedimento de agua dulce | 3,6 mg/kg |
| PNEC Suelo | 0,63 mg/kg |
| PNEC Liberación periódica al agua | 2,75 mg/l |
| PNEC sistema de depuración de aguas residuales | 580 mg/l |
| PNEC oral | 720 mg/kg |

8.2 Controles de la exposición

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

Medidas de ingeniería

Medidas técnicas y observación de métodos adecuados de trabajo tienen prioridad ante el uso de equipos de protección personal.

Véase sección 7.1.

Medidas de protección individual

Los tipos de auxiliares para protección del cuerpo deben elegirse específicamente según el puesto de trabajo en función de la concentración y cantidad de la sustancia peligrosa. Debería aclararse con el suministrador la estabilidad de los medios protectores frente a los productos químicos.

Protección de los ojos/ la cara

Gafas de seguridad

Protección de las manos

Sumersión:

Material del guante: goma butílica
Espesor del guante: 0,7 mm
Tiempo de penetración: > 480 min

Salpicaduras:

Material del guante: Caugo nitrilo
Espesor del guante: 0,40 mm
Tiempo de penetración: > 120 min

Los guantes de protección indicados deben cumplir con las especificaciones de la Directiva 89/686/EEC y con su norma resultante EN374, por ejemplo KCL 898 Butoject® (Sumersión), KCL 730 Camatril® -Velours (Salpicaduras).

Los tiempos de ruptura mencionados anteriormente han sido determinados con muestras de material de los tipos de guantes recomendados en mediciones de laboratorio de KCL según EN374.

Esta recomendación solo es válida para el producto mencionado en la ficha de datos de seguridad, suministrado por nosotros y para el fin indicado. Al disolver o mezclar en otras sustancias y cuando las condiciones difieran de las indicadas en EN374, debe dirigirse al suministrador de guantes con distintivo CE (por ejem. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet: www.kcl.de)

Otras medidas de protección

Vestimenta protectora antiestática retardante de la flama.

Protección respiratoria

necesaria en presencia de vapores/aerosoles.

Tipo de Filtro recomendado: Filtro A

El empresario debe garantizar que el mantenimiento, la limpieza y la prueba técnica de los protectores respiratorios se hagan según las instrucciones del productor de las mismas. Éstas medidas deben ser documentadas debidamente.

Controles de exposición medioambiental

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

Riesgo de explosión.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

| | |
|---------------------------------------|--|
| Forma | líquido |
| Color | incoloro |
| Olor | alcoólico alcohólico |
| Umbral olfativo | 0,1 - 5058,5 ppm |
| pH | 7,0 a 10 g/l 20 °C |
| Punto de fusión | -114,5 °C |
| Punto /intervalo de ebullición | 78,3 °C a 1.013 hPa |
| Punto de inflamación | 12 °C Método: c.c. |
| Tasa de evaporación | No hay información disponible. |
| Inflamabilidad (sólido, gas) | No hay información disponible. |
| Límites inferior de explosividad | 3,1 %(v) |
| Límite superior de explosividad | 27,7 %(v) |
| Presión de vapor | 59 hPa a 20 °C |
| Densidad relativa del vapor | 1,6 |
| Densidad | 0,790 - 0,793 g/cm ³ a 20 °C |
| Densidad relativa | No hay información disponible. |
| Solubilidad en agua | a 20 °C totalmente miscible |
| Coeficiente de reparto n-octanol/agua | log Pow: -0,31 (experimentalmente) (Literatura) No es de esperar una bioacumulación. |
| Temperatura de auto-inflamación | No hay información disponible. |

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|-------------------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |
| Temperatura de descomposición | No hay información disponible. |
| Viscosidad, dinámica | 1,2 mPa.s a 20 °C |
| Propiedades explosivas | No clasificado/a como explosivo/a. |
| Propiedades comburentes | ningún |

9.2 Otros datos

| | |
|-------------------------|-----------------------------|
| Temperatura de ignición | 425 °C Método: DIN 51794 |
| Conductibilidad | < 1 µS/cm |

SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad

Los vapores pueden formar una mezcla explosiva con el aire.

10.2 Estabilidad química

El producto es químicamente estable bajo condiciones normales (a temperatura ambiental).

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Riesgo de explosión/reacción exotérmica con:

peróxido de hidrógeno/agua oxigenada, percloratos, ácido perclórico, Ácido nítrico, mercurio(II) nitrato, ácido permangánico, Nitrilos, peróxidos, Agentes oxidantes fuertes, nitrosilos, Peróxidos, sodio, Potasio, halogenóxidos, Hipoclorito de calcio, dióxido de nitrógeno, óxidos metálicos, hexafluoruro de uranio, yoduros, Cloro, Metales alcalinos, Metales alcalinotérreos, óxidos alcalinos, Óxido de etileno
plata, con, Ácido nítrico

compuestos de plata, con, Amoniaco

permanganato de potasio, con, ácido sulfúrico concentrado

Peligro de ignición o de formación de gases o vapores combustibles con:

halogenuros de halógeno, cromo(VI)óxido, cromilo cloruro, Flúor, hidruros, Oxidos de fósforo, platino

Ácido nítrico, con, permanganato de potasio

10.4 Condiciones que deben evitarse

Calentamiento.

10.5 Materiales incompatibles

goma, plásticos diversos

10.6 Productos de descomposición peligrosos

información no disponible

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

SECCIÓN 11. Información toxicológica

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad oral aguda

DL50 Rata: 10.470 mg/kg

Diretrices de ensayo 401 del OECD

Síntomas: Náusea, Vómitos

Toxicidad aguda por inhalación

CL50 Rata: 124,7 mg/l; 4 h ; vapor

Diretrices de ensayo 403 del OECD

Síntomas: leves irritaciones de las mucosas

Toxicidad cutánea aguda

Esta información no está disponible.

Irritación de la piel

Conejo

Resultado: No irrita la piel

Diretrices de ensayo 404 del OECD

Una exposición repetida o prolongada puede causar irritación de la piel y dermatitis debido a las propiedades desengrasantes del producto.

Irritación ocular

Conejo

Resultado: Irritación ocular

Diretrices de ensayo 405 del OECD

Provoca irritación ocular grave.

Sensibilización

Local lymph node assay (LLNA) Ratón

Resultado: negativo

Método: OECD TG 429

Mutagenicidad en células germinales

Genotoxicidad in vitro

Prueba de Ames

Salmonella typhimurium

Resultado: negativo

Método: Diretrices de ensayo 471 del OECD

Ensayo de mutación genética de células de mamífero in vitro

Mouse lymphoma test

Resultado: negativo

Método: OECD TG 476

Carcinogenicidad

Esta información no está disponible.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

Toxicidad para la reproducción

Vía de aplicación: Oral

Ratón

Método: Directrices de ensayo 416 del OECD

Teratogenicidad

Esta información no está disponible.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

Esta información no está disponible.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas

Esta información no está disponible.

Peligro de aspiración

Esta información no está disponible.

11.2 Otros datos

Efectos sistémicos:

euforia

Tras absorción:

Vértigo, borrachera, narcosis, parálisis respiratoria

Las otras propiedades peligrosas no pueden ser excluidas.

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

SECCIÓN 12. Información ecológica

12.1 Toxicidad

Toxicidad para los peces

Ensayo dinámico CE50 Pimephales promelas (Piscardo de cabeza gorda): 15.300 mg/l; 96 h

Controlo analítico: si

US-EPA

Toxicidad para las dafnias y otros invertebrados acuáticos

CE50 Daphnia magna (Pulga de mar grande): 9.268 - 14.221 mg/l; 48 h (IUCLID)

Toxicidad para las algas

IC5 Scenedesmus quadricauda (alga verde): 5.000 mg/l; 7 d (Literatura)

Toxicidad para las bacterias

EC5 Pseudomonas putida: 6.500 mg/l; 16 h (IUCLID)

Toxicidad para las dafnias y otros invertebrados acuáticos (Toxicidad crónica)

Ensayo semiestático NOEC Daphnia magna (Pulga de mar grande): 9,6 mg/l; 9 d (ECHA)

12.2 Persistencia y degradabilidad

Biodegradabilidad

94 %

OECD TG 301E

Fácilmente biodegradable.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

Demanda bioquímica de oxígeno (DBO)
930 - 1.670 mg/g (5 d)

(Literatura)

Demanda teórica de oxígeno (DTO)
2.100 mg/g

(Literatura)

Ratio COD/ThBOD

90 %

(Literatura)

12.3 Potencial de bioacumulación

Coeficiente de reparto n-octanol/agua
log Pow: -0,31
(experimentalmente)

(Literatura) No es de esperar una bioacumulación.

12.4 Movilidad en el suelo

No hay información disponible.

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

La sustancia no cumple los criterios de PBT o mPmB según el Reglamento (CE) núm. 1907/2006, anexo XIII.

12.6 Otros efectos adversos

Información ecológica complementaria

No deben esperarse interferencias en depuradoras si se usa adecuadamente.

La descarga en el ambiente debe ser evitada.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

SECCIÓN 13. Consideraciones relativas a la eliminación

Métodos para el tratamiento de residuos

Directiva sobre residuos 2008/98 nota / CE.

Los residuos deben eliminarse de acuerdo con normativas locales y nacionales. Deje los productos químicos en sus recipientes originales. No los mezcle con otros residuos. Maneje los recipientes sucios como el propio producto.

Consulte en www.retrologistik.com sobre procesos relativos a la devolución de productos químicos o recipientes, o contáctenos si tiene más preguntas.

SECCIÓN 14. Información relativa al transporte

Transporte por carretera (ADR/RID)

14.1 Número ONU UN 1170

14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas

14.3 Clase 3

14.4 Grupo de embalaje II

14.5 Peligrosas ambientalmente --

14.6 Precauciones particulares para los usuarios si

Código de restricciones en túneles D/E

Transporte fluvial (ADN)

No relevante

Transporte aéreo (IATA)

14.1 Número ONU UN 1170

14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas

14.3 Clase 3

14.4 Grupo de embalaje II

14.5 Peligrosas ambientalmente --

14.6 Precauciones particulares para los usuarios no

Transporte marítimo (IMDG)

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

14.1 Número ONU UN 1170

14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas ETHANOL

14.3 Clase 3

14.4 Grupo de embalaje II

14.5 Peligrosas ambientalmente --

14.6 Precauciones particulares para los usuarios si

EmS F-E S-D

14.7 Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC

No relevante

SECCIÓN 15. Información reglamentaria

15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Disposiciones legales de la CE

Legislación sobre Riesgos SEVESO III
de Accidentes Graves LÍQUIDOS INFLAMABLES
P5c
Cantidad 1: 5.000 t
Cantidad 2: 50.000 t

Restricciones profesionales Tomar nota de la Directiva 94/33/CEE sobre la protección laboral de los jóvenes.

Reglamento 1005/2009/CE relativo a sustancias que agotan la capa de ozono no regulado

Reglamento (CE) nº 850/2004 del Parlamento Europeo y del Consejo de 29 de abril de 2004 sobre contaminantes orgánicos persistentes que modifica la Directiva 79/117/CEE no regulado

Sustancias extremadamente preocupantes (SVHC) Este producto no contiene sustancias extremadamente preocupantes por encima del límite legal de concentración correspondiente ($\geq 0,1\% p/p$) según la normativa CE nº 1907/2006 (REACH), artículo 57.

Legislación nacional

Clase de almacenamiento 3

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

15.2 Evaluación de la seguridad química

Para éste producto no se realizó una valoración de la seguridad química.

SECCIÓN 16. Otra información

Texto íntegro de las Declaraciones-H referidas en las secciones 2 y 3.

| | |
|------|------------------------------------|
| H225 | Líquido y vapores muy inflamables. |
| H319 | Provoca irritación ocular grave. |

Consejos relativos a la formación

Debe disponer a los trabajadores la información y la formación práctica suficientes.

Etiquetado

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H319 Provoca irritación ocular grave.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes.
No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Una explicación de las abreviaturas y los acrónimos utilizados en la ficha de datos de seguridad

Puede consultar las abreviaturas y acrónimos utilizados en www.wikipedia.org.

Representante regional

Merck Chemical and Life Science, S.A. |
C/ María de Molina, 40 | 28006 Madrid - España |

Página 14 de 23

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

Tel: +34 935655500 | Fax: +34 935440000 |
email:SCM.Chemicals.ES@merckgroup.com |
www.merck.es

Los datos suministrados en ésta ficha de seguridad se basan a nuestro actual conocimiento. Describen tan sólo las medidas de seguridad en el manejo de éste producto y no representan una garantía sobre las propiedades descritas del mismo.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

ESCENARIOS DE EXPOSICIÓN 1 (Uso industrial)

1. Uso industrial Análisis químico, Producción química)

Sectores de uso final

- SU 3* Usos industriales: Usos de sustancias como tales o en preparados en emplazamientos industriales
SU9 Fabricación de productos químicos finos
SU 10 Formulación [mezcla] de preparados y/ o reenvasado (sin incluir aleaciones)

Categoría de productos químicos

- PC19* Sustancias intermedias
PC21 Productos químicos de laboratorio

Categorías de proceso

- PROC1* Uso en procesos cerrados, exposición improbable
PROC2 Utilización en procesos cerrados y continuos con exposición ocasional controlada
PROC3 Uso en procesos por lotes cerrados (síntesis o formulación)
PROC4 Utilización en procesos por lotes y de otro tipo (síntesis) en los que se puede producir la exposición
PROC5 Mezclado en procesos por lotes para la formulación de preparados y artículos (fases múltiples y/ o contacto significativo)
PROC8a Transferencia de sustancias o preparados (carga/ descarga) de o hacia buques o grandes contenedores en instalaciones no especializadas
PROC8b Transferencia de sustancias o preparados (carga/ descarga) de o hacia buques o grandes contenedores en instalaciones especializadas
PROC9 Transferencia de sustancias o preparados en pequeños contenedores (líneas de llenado especializadas, incluido el pesaje)
PROC10 Aplicación mediante rodillo o brocha
PROC14 Producción de preparados o artículos por tableteado, compresión, extrusión, peletización
PROC15 Uso como reactivo de laboratorio

Categorías de emisión al medio ambiente

- ERC1* Fabricación de sustancias
ERC2 Formulación de preparados
ERC4 Uso industrial de auxiliares tecnológicos en procesos y productos, que no forman parte de artículos
ERC6a Uso industrial que da lugar a la fabricación de otra sustancia (uso de sustancias intermedias)

2. Escenario contributivo: condiciones de operación y medidas de gestión de riesgos

2.1 Escenario de contribución que controla la exposición ambiental para: ERC1, ERC4, ERC6a

Cantidad utilizada

Cantidad anual por sitio 400000 t

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

Factores ambientales no influenciados por la gestión de riesgos

Velocidad de flujo 18.000 000043

Otras condiciones operacionales dadas que afectan la exposición ambiental

Número de días de emisión al año 350
Factor de emisión o de descarga: Aire 70 %
Factor de emisión o de descarga: Agua 87 %

Condiciones y medidas relacionadas con la planta municipal de tratamiento de aguas residuales

Tipo de Planta de Tratamiento de Aguas Residuales Planta municipal de tratamiento de aguas residuales
Eficacia (de una medida) 90 %

2.2 Escenario de contribución que controla la exposición ambiental para: ERC2

Cantidad utilizada

Cantidad anual por sitio 75000 t

Factores ambientales no influenciados por la gestión de riesgos

Velocidad de flujo 18.000 000043

Otras condiciones operacionales dadas que afectan la exposición ambiental

Número de días de emisión al año 300

Condiciones y medidas relacionadas con la planta municipal de tratamiento de aguas residuales

Tipo de Planta de Tratamiento de Aguas Residuales Planta municipal de tratamiento de aguas residuales
Eficacia (de una medida) 90 %

2.3 Escenario de contribución que controla la exposición de los trabajadores para: PROC1, PROC2, PROC3, PROC4, PROC5, PROC8a, PROC8b, PROC9, PROC10, PROC14, PROC15

Características del producto

Concentración de la sustancia en la Mezcla/Artículo Cubre un porcentaje de 100% de sustancia en el producto (a menos que se indique lo contrario).
Forma física (en el momento del uso) Líquido altamente volátil

Frecuencia y duración del uso

Frecuencia de uso 8 horas / día

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

Otras condiciones operacionales que afectan a la exposición de los trabajadores

Al exterior / Al Interior Zona interior sin aspiración local (LEV)

Consejos adicionales para las buenas prácticas más allá de la Evaluación de Seguridad

Química REACH

Asesoramiento adicional sobre buenas prácticas Utilice guantes adecuados (conforme a EN374) y protección para los ojos.

3. Estimación de la exposición y referencia a su fuente

Medio Ambiente

| CS | Descriptor de uso | Mseguro | Compartimento | RCR | Método de Evaluación de la exposición |
|-----|-------------------|---------|---------------|--------|---------------------------------------|
| 2.1 | ERC1 | | Agua dulce | < 0,01 | ECETOC TRA |
| | | | Agua de mar | < 0,01 | ECETOC TRA |
| | | | Suelo | < 0,01 | ECETOC TRA |
| 2.1 | ERC4 | | Agua dulce | < 0,01 | ECETOC TRA |
| | | | Agua de mar | < 0,01 | ECETOC TRA |
| | | | Suelo | < 0,01 | ECETOC TRA |
| 2.1 | ERC6a | | Agua dulce | < 0,01 | ECETOC TRA |
| | | | Agua de mar | < 0,01 | ECETOC TRA |
| | | | Suelo | < 0,01 | ECETOC TRA |
| 2.2 | ERC2 | | Agua dulce | 0,11 | ECETOC TRA |
| | | | Agua de mar | 0,01 | ECETOC TRA |
| | | | Suelo | < 0,01 | ECETOC TRA |

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

Trabajadores

| CS | Descriptor de uso | Duración de la exposición, ruta, efecto | RCR | Método de Evaluación de la exposición |
|-----|-------------------|---|--------|---------------------------------------|
| 2.3 | PROC1 | larga duración, inhalativo, sistémico | < 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | < 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | < 0,01 | |
| 2.3 | PROC2 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,05 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | < 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,05 | |
| 2.3 | PROC3 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,10 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | < 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,10 | |
| 2.3 | PROC4 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,20 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,02 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,22 | |
| 2.3 | PROC5 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,50 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,04 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,54 | |
| 2.3 | PROC8a | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,50 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,04 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,54 | |
| 2.3 | PROC8b | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,30 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,04 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,34 | |
| 2.3 | PROC9 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,40 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,02 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,42 | |
| 2.3 | PROC10 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,50 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,08 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,58 | |
| 2.3 | PROC14 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,50 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,51 | |
| 2.3 | PROC15 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,10 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | < 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,10 | |

Los parámetros patrones y las eficiencias del modelo de evaluación de la exposición aplicada fueron utilizados para el cálculo (a menos que se indique otra cosa).

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

4. Orientación al Usuario Intermedio para evaluar si trabaja dentro de los límites fijados por el Escenario de Exposición

Consulte los documentos siguientes: ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.12: Use descriptor system; ECHA Guidance for downstream users; ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment Part D: Exposure Scenario Building, Part E: Risk Characterisation and Part G: Extending the SDS; VCI/Cefic REACH Practical Guides on Exposure Assessment and Communications in the Supply Chain; CEFIC Guidance Specific Environmental Release Categories (SPERCs).

Para escalar la evaluación de la exposición laboral conducida con ECETOC TRA consulte la herramienta de Merck ScIDeEx® bajo www.merckmillipore.com/scideex.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

ESCENARIOS DE EXPOSICIÓN 2 (Uso profesional)

1. Uso profesional Análisis químico, Producción química)

Sectores de uso final

SU 22 Usos profesionales: Ámbito público (administración, educación, espectáculos, servicios, artesanía)

Categoría de productos químicos

PC21 Productos químicos de laboratorio

Categorías de proceso

PROC15 Uso como reactivo de laboratorio

Categorías de emisión al medio ambiente

ERC2 Formulación de preparados

ERC6a Uso industrial que da lugar a la fabricación de otra sustancia (uso de sustancias intermedias)

2. Escenario contributivo: condiciones de operación y medidas de gestión de riesgos

2.1 Escenario de contribución que controla la exposición ambiental para: ERC2

Cantidad utilizada

Cantidad anual por sitio 75000 t

Factores ambientales no influenciados por la gestión de riesgos

Velocidad de flujo 18.000 000043

Otras condiciones operacionales dadas que afectan la exposición ambiental

Número de días de emisión al año 300

Condiciones y medidas relacionadas con la planta municipal de tratamiento de aguas residuales

Tipo de Planta de Tratamiento de Aguas Residuales Planta municipal de tratamiento de aguas residuales
Eficacia (de una medida) 90 %

2.2 Escenario de contribución que controla la exposición ambiental para: ERC6a

Cantidad utilizada

Cantidad anual por sitio 400000 t

Factores ambientales no influenciados por la gestión de riesgos

Velocidad de flujo 18.000 000043

Otras condiciones operacionales dadas que afectan la exposición ambiental

Número de días de emisión al año 350
Factor de emisión o de 70 %

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

descarga: Aire
Factor de emisión o de
descarga: Agua 87 %

Condiciones y medidas relacionadas con la planta municipal de tratamiento de aguas residuales

Tipo de Planta de Tratamiento de Aguas Residuales Planta municipal de tratamiento de aguas residuales
Eficacia (de una medida) 90 %

2.3 Escenario de contribución que controla la exposición de los trabajadores para: PROC15

Características del producto

Concentración de la sustancia en la Mezcla/Artículo Cubre un porcentaje de 100% de sustancia en el producto (a menos que se indique lo contrario).
Forma física (en el momento del uso) Líquido altamente volátil

Frecuencia y duración del uso

Frecuencia de uso 8 horas / día

Otras condiciones operacionales que afectan a la exposición de los trabajadores

Al exterior / Al Interior Zona interior sin aspiración local (LEV)

Consejos adicionales para las buenas prácticas más allá de la Evaluación de Seguridad Química REACH

Asesoramiento adicional sobre buenas prácticas Utilice guantes adecuados (conforme a EN374) y protección para los ojos.

3. Estimación de la exposición y referencia a su fuente

Medio Ambiente

| CS | Descriptor de uso | Mseguro | Compartimento | RCR | Método de Evaluación de la exposición |
|-----|-------------------|---------|---------------|--------|---------------------------------------|
| 2.1 | ERC2 | | Agua dulce | 0,11 | ECETOC TRA |
| | | | Agua de mar | 0,01 | ECETOC TRA |
| | | | Suelo | < 0,01 | ECETOC TRA |
| 2.2 | ERC6a | | Agua dulce | < 0,01 | ECETOC TRA |
| | | | Agua de mar | < 0,01 | ECETOC TRA |
| | | | Suelo | < 0,01 | ECETOC TRA |

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100983 |
| Nombre del producto | Etanol absoluto para análisis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur |

Trabajadores

| CS | Descriptor de uso | Duración de la exposición, ruta, efecto | RCR | Método de Evaluación de la exposición |
|-----|-------------------|---|--------|---------------------------------------|
| 2.3 | PROC15 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,10 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | < 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, combinado, sistémico | 0,10 | |

Los parámetros patrones y las eficiencias del modelo de evaluación de la exposición aplicada fueron utilizados para el cálculo (a menos que se indique otra cosa).

4. Orientación al Usuario Intermedio para evaluar si trabaja dentro de los límites fijados por el Escenario de Exposición

Consulte los documentos siguientes: ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.12: Use descriptor system; ECHA Guidance for downstream users; ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment Part D: Exposure Scenario Building, Part E: Risk Characterisation and Part G: Extending the SDS; VCI/Cefic REACH Practical Guides on Exposure Assessment and Communications in the Supply Chain; CEFIC Guidance Specific Environmental Release Categories (SPERCs).

Para escalar la evaluación de la exposición laboral conducida con ECETOC TRA consulte la herramienta de Merck ScIDEEx® bajo www.merckmillipore.com/scideex.

La marca que aparece en el encabezado y/o el pie de página de este documento puede no coincidir visualmente con el producto adquirido mientras hacemos la transición de nuestra marca. Sin embargo, toda la información del documento relativa al producto permanece sin cambios y coincide con el producto solicitado. Para más información, póngase en contacto con mlsbranding@sial.com

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Fecha de revisión 19.12.2018

Versión 22.3

SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa**1.1 Identificador del producto**

Artículo número

100003

Denominación

Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Número de registro
REACH

01-2119471307-38-XXXX

No. CAS

75-05-8

1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Usos identificados

Análisis químico, Producción química

En cumplimiento de las condiciones descritas en el anexo a
esta hoja de datos de seguridad.**1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**

Compañía

Merck KGaA * 64271 Darmstadt * Alemania * Tel: +49 6151
72-0Departamento
Responsable

PM-OQR * e-mail: PM_SDS_Supply@merckgroup.com

**1.4 Teléfono de
emergencia****Instituto Nacional de Toxicología * Madrid * Tel: 91
562 04 20****SECCIÓN 2. Identificación de los peligros****2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla****Clasificación (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)**

Líquido inflamable, Categoría 2, H225

Toxicidad aguda, Categoría 4, Oral, H302

Toxicidad aguda, Categoría 4, Inhalación, H332

Toxicidad aguda, Categoría 4, Cutáneo, H312

Irritación ocular, Categoría 2, H319

Para el texto íntegro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 100003
Nombre del producto Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H302 + H312 + H332 Nocivo en caso de ingestión, contacto con la piel o inhalación.

H319 Provoca irritación ocular grave.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes.

No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

P302 + P352 EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL: Lavar con agua y jabón abundantes.

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Etiquetado reducido (≤125 ml)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

No. Indice 608-001-00-3

2.3 Otros peligros

Ninguno conocido.

SECCIÓN 3. Composición/ información sobre los componentes

3.1 Sustancia

Formula CH₃CN C₂H₃N (Hill)
No. Indice 608-001-00-3

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

| | |
|------------|-------------|
| No. CE | 200-835-2 |
| Masa molar | 41,05 g/mol |

Componentes peligrosos (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Nombre químico (Concentración)

No. CAS Número de registro Clasificación

Acetonitrilo (<= 100 %)

La sustancia no cumple los criterios de PBT o mPmB según el Reglamento (CE) núm. 1907/2006, anexo XIII.

| | | |
|---------|----------------|---------------------------------------|
| 75-05-8 | 01-2119471307- | Líquido inflamable, Categoría 2, H225 |
| | 38-XXXX | Toxicidad aguda, Categoría 4, H302 |
| | | Toxicidad aguda, Categoría 4, H332 |
| | | Toxicidad aguda, Categoría 4, H312 |
| | | Irritación ocular, Categoría 2, H319 |

Para el texto integral de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

3.2 Mezcla

No aplicable

SECCIÓN 4. Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios

Tras inhalación: aire fresco. En caso de parada respiratoria: Respiración asistida o por medios instrumentales. ¡Suministro de oxígeno en caso necesario! Llamar inmediatamente al médico.

En caso de contacto con la piel: Quitar inmediatamente todas las prendas contaminadas. Aclararse la piel con agua/ducharse. Consultar a un médico.

Tras contacto con los ojos: aclarar con abundante agua. Consultar al oftalmólogo. Retirar las lentillas.

Tras ingestión: hacer beber agua inmediatamente (máximo 2 vasos). Consultar a un médico.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Puede producir dolor de cabeza y mareo.

Para cianocompuestos y nitrilos en general: ¡Máxima precaución! Posibilidad de desprendimiento de cianhídrico. Bloqueo de la respiración celular. Afecciones cardiovasculares, dificultad respiratoria, pérdida del conocimiento.

Efectos irritantes, Náusea, Vómitos, Convulsiones, Insuficiencia respiratoria, paro respiratorio, paro cardíaco, Inconsciencia

4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

No hay información disponible.

SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Página 3 de 30

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Agua, Espuma, Dióxido de carbono (CO₂), Polvo seco

Medios de extinción no apropiados

No existen limitaciones de agentes extinguidores para esta sustancia/mezcla.

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Inflamable.

Prestar atención al retorno de la llama.

Son posibles mezclas explosivas con el aire a temperaturas normales.

Los vapores son más pesados que el aire y pueden expandirse a lo largo del suelo.

En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

El fuego puede provocar emanaciones de:

óxidos de nitrógeno, Ácido cianhídrico (cianuro de hidrógeno)

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios

Permanencia en el área de riesgo sólo con sistemas de respiración artificiales e independientes del ambiente. Protección de la piel mediante observación de una distancia de seguridad y uso de ropa protectora adecuada .

Otros datos

Separar el recipiente de la zona de peligro y refrigerarlo con agua. Reprimir los gases/vapores/neblinas con agua pulverizada. Impedir la contaminación de las aguas superficiales o subterráneas por el agua que ha servido a la extinción de incendios.

SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Indicaciones para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia: No respirar los vapores, aerosoles. Evitar el contacto con la sustancia. Asegúrese una ventilación apropiada. Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición. Evacúe el área de peligro, respete los procedimientos de emergencia, con sulte con expertos.

Consejos para el personal de emergencia:

Equipo protector véase sección 8.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado. Riesgo de explosión.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Cubra las alcantarillas. Recoja, una y aspire los derrames. Observe posibles restricciones de materiales (véanse indicaciones en las secciones 7 o 10). Recoger con materiales absorbentes, p. ej. con Chemizorb®. Proceder a la eliminación de los residuos. Aclarar.

6.4 Referencia a otras secciones

Para indicaciones sobre el tratamiento de residuos, véase sección 13.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura

Consejos para una manipulación segura

Observar las indicaciones de la etiqueta.

Trabajar bajo campana extractora. No inhalar la sustancia/la mezcla. Evítese la generación de vapores/aerosoles.

Indicaciones para la protección contra incendio y explosión

Mantener apartado de las llamas abiertas, de las superficies calientes y de los focos de ignición. Tomar medidas de precaución contra descargas electrostáticas.

Medidas de higiene

Sustituir inmediatamente la ropa contaminada. Protección preventiva de la piel.

Lavar cara y manos al término del trabajo.

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Condiciones de almacenamiento

Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado.

Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición.

Temperatura de almacenaje recomendada indicada en la etiqueta del producto.

7.3 Usos específicos finales

Véase el escenario de exposición en el anexo de ésta FDS.

SECCIÓN 8. Controles de exposición/ protección individual

8.1 Parámetros de control

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 100003
Nombre del producto Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Componentes con valores límite ambientales de exposición profesional.

Componentes

| Base | Valor | Limites umbrales | Observaciones |
|-------------------------------|---|--------------------------------|--|
| Acetonitrilo (75-05-8) | | | |
| EU ELV | Clasificación de riesgo a la piel: Límite máximo permisible de exposición promedio ponderado en tiempo | 40 ppm 70 mg/m ³ | Absorción potencial a través de la piel. |
| VLA (ES) | Clasificación de riesgo a la piel: Valor Límite Ambiental-Exposición Diaria (VLA-ED) | 40 ppm 68 mg/m ³ | Absorción potencial a través de la piel. |

Nivel sin efecto derivado (DNEL)

| | | | |
|--------------------------|--------------------|------------|--------------------------|
| DNEL trabajador, agudo | efectos sistémicos | inhalativo | 68 mg/m ³ |
| DNEL trabajador, agudo | Efectos locales | inhalativo | 68 mg/m ³ |
| DNEL trabajador, crónico | efectos sistémicos | dérmbica | 32,2 mg/kg Peso corporal |
| DNEL trabajador, crónico | efectos sistémicos | inhalativo | 68 mg/m ³ |
| DNEL trabajador, crónico | Efectos locales | inhalativo | 68 mg/m ³ |

Procedimientos de control recomendados

Los métodos para la medición de la atmósfera del puesto de trabajo deben cumplir con los requisitos de las normas DIN EN 482 y DIN EN 689.

Concentración prevista sin efecto (PNEC)

| | |
|--|------------|
| PNEC Agua dulce | 10 mg/l |
| PNEC Agua de mar | 1 mg/l |
| PNEC Liberación periódica al agua | 10 mg/l |
| PNEC sistema de depuración de aguas residuales | 32 mg/l |
| PNEC Suelo | 3,02 mg/kg |
| PNEC Sedimento de agua dulce | 45 mg/kg |
| PNEC Sedimento marino | 4,5 mg/kg |

8.2 Controles de la exposición

Medidas de ingeniería

Medidas técnicas y observación de métodos adecuados de trabajo tienen prioridad ante el uso de equipos de protección personal.

Véase sección 7.1.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 100003
Nombre del producto Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Medidas de protección individual

Los tipos de auxiliares para protección del cuerpo deben elegirse específicamente según el puesto de trabajo en función de la concentración y cantidad de la sustancia peligrosa. Debería aclararse con el suministrador la estabilidad de los medios protectores frente a los productos químicos.

Protección de los ojos/ la cara

Gafas de seguridad

Protección de las manos

Sumerción:

Material del guante: goma butílica
Espesor del guante: 0,7 mm
Tiempo de penetración: > 480 min

Salpicaduras:

Material del guante: Polícloropreno
Espesor del guante: 0,65 mm
Tiempo de penetración: > 30 min

Los guantes de protección indicados deben cumplir con las especificaciones de la Directiva 89/686/EEC y con su norma resultante EN374, por ejemplo KCL 898 Butoject® (Sumersión), KCL 720 Camapren® (Salpicaduras).

Los tiempos de ruptura mencionados anteriormente han sido determinados con muestras de material de los tipos de guantes recomendados en mediciones de laboratorio de KCL según EN374.

Esta recomendación solo es válida para el producto mencionado en la ficha de datos de seguridad, suministrado por nosotros y para el fin indicado. Al disolver o mezclar en otras sustancias y cuando las condiciones difieran de las indicadas en EN374, debe dirigirse al suministrador de guantes con distintivo CE (por ejem. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet: www.kcl.de)

Otras medidas de protección

Vestimenta protectora antiestática retardante de la flama.

Protección respiratoria

necesaria en presencia de vapores/aerosoles.

Tipo de Filtro recomendado: Filtro A

El empresario debe garantizar que el mantenimiento, la limpieza y la prueba técnica de los protectores respiratorios se hagan según las instrucciones del productor de las mismas. Éstas medidas deben ser documentadas debidamente.

Controles de exposición medioambiental

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

Riesgo de explosión.

SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Forma líquido

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------------------------|---|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |
| Color | incoloro |
| Olor | etérico |
| Umbral olfativo | 39,8 ppm |
| pH | No hay información disponible. |
| Punto de fusión | -45,7 °C |
| Punto /intervalo de ebullición | 81,6 °C a 1.013 hPa |
| Punto de inflamación | 2 °C Método: c.c. |
| Tasa de evaporación | No hay información disponible. |
| Inflamabilidad (sólido, gas) | No hay información disponible. |
| Límites inferior de explosividad | 3,0 %(v) |
| Límite superior de explosividad | 17 %(v) |
| Presión de vapor | 97 hPa a 20 °C |
| Densidad relativa del vapor | 1,42 |
| Densidad | 0,786 g/cm ³ a 20 °C |
| Densidad relativa | No hay información disponible. |
| Solubilidad en agua | a 20 °C soluble |
| Coeficiente de reparto n-octanol/agua | log Pow: -0,34 (IUCLID) No es de esperar una bioacumulación. |
| Temperatura de auto-inflamación | No hay información disponible. |
| Temperatura de descomposición | Destilable sin descomposición a presión normal. |
| Viscosidad, dinámica | 0,316 mPa.s a 25 °C |
| Propiedades explosivas | No clasificado/a como explosivo/a. |
| Propiedades comburentes | ningún |

9.2 Otros datos

Página 8 de 30

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|-------------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |
| Temperatura de ignición | 524 °C |

SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad

Los vapores pueden formar una mezcla explosiva con el aire.

10.2 Estabilidad química

sensible al calor

Destilable sin descomposición a presión normal.

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Posibles reacciones violentas con:

Bases fuertes, reductores fuertes

Riesgo de explosión con:

nitratos, percloratos, ácido perclórico

ácido sulfúrico concentrado, con, Calor.

Peligro de ignición o de formación de gases o vapores combustibles con:

Oxidantes, Ácido nítrico

dióxido de nitrógeno, con, Catalizador

Desprendimiento de gases o vapores peligrosos con:

Ácidos

10.4 Condiciones que deben evitarse

Calentamiento.

10.5 Materiales incompatibles

goma, plásticos diversos

10.6 Productos de descomposición peligrosos

en caso de incendio: véase sección 5.

SECCIÓN 11. Información toxicológica

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad oral aguda

DL50 Ratón: 617 mg/kg

Diretrices de ensayo 401 del OECD

Síntomas: Náusea, Vómitos

Toxicidad aguda por inhalación

Síntomas: Consecuencias posibles:, irritación de las mucosas

Toxicidad cutánea aguda

Esta información no está disponible.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Irritación de la piel

Conejo

Resultado: No irrita la piel

Directrices de ensayo 404 del OECD

Irritación ocular

Conejo

Resultado: Irritación ocular

Directrices de ensayo 405 del OECD

Provoca irritación ocular grave.

Sensibilización

Buehler Test Conejillo de indias

Resultado: negativo

Método: Directrices de ensayo 406 del OECD

Mutagenicidad en células germinales

Genotoxicidad in vivo

Prueba de micronúcleos in vivo

Ratón

machos y hembras

intraperitoneal

Resultado: negativo

Método: OECD TG 474

Genotoxicidad in vitro

Prueba de Ames

Salmonella typhimurium

Resultado: negativo

(Ficha de datos de Seguridad externa)

Mutagenicidad (ensayo de células de mamífero):

Mouse lymphoma test

Resultado: negativo

Método: OECD TG 476

Carcinogenicidad

Esta información no está disponible.

Toxicidad para la reproducción

Esta información no está disponible.

Teratogenicidad

Esta información no está disponible.

Efectos CMR

Carcinogenicidad:

Los datos disponibles no permiten efectuar una clasificación.

Mutagenicidad:

Los datos disponibles no permiten efectuar una clasificación.

Teratogenicidad:

Los datos disponibles no permiten efectuar una clasificación.

Toxicidad para la reproducción:

Los datos disponibles no permiten efectuar una clasificación.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

La sustancia o mezcla no se clasifica como tóxica específica de órganos diana, exposición única.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas

La sustancia o mezcla no se clasifica como tóxica específica de órganos diana, exposición repetida.

Peligro de aspiración

Esta información no está disponible.

11.2 Otros datos

Tras absorción:

Efectos sistémicos:

Insuficiencia respiratoria, Dolor de cabeza, Vértigo, Náusea, Convulsiones, paro respiratorio, paro cardíaco, Inconsciencia

Los síntomas pueden retrasarse.

Para cianocompuestos y nitrilos en general: ¡Máxima precaución! Posibilidad de desprendimiento de cianhídrico. Bloqueo de la respiración celular. Afecciones cardiovasculares, dificultad respiratoria, pérdida del conocimiento.

Las otras propiedades peligrosas no pueden ser excluidas.

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

SECCIÓN 12. Información ecológica

12.1 Toxicidad

Toxicidad para los peces

Ensayo semiestático CL50 Oryzias latipes (Ciprinodontidae de color rojo-naranja): > 100 mg/l; 96 h

Diretrices de ensayo 203 del OECD

Toxicidad para las dafnias y otros invertebrados acuáticos

Ensayo semiestático CE50 Daphnia magna (Pulga de mar grande): > 1.000 mg/l; 48 h

OECD TG 202

Ensayo semiestático NOEC Daphnia magna (Pulga de mar grande): 960 mg/l; 21 d
OECD TG 202

Toxicidad para las algas

Ensayo estático CE50 Pseudokirchneriella subcapitata (alga verde): > 1.000 mg/l; 72 h

OECD TG 201

Ensayo estático NOEC Pseudokirchneriella subcapitata (alga verde): > 1.000 mg/l; 72 h

OECD TG 201

IC5 Scenedesmus quadricauda (alga verde): 7.300 mg/l; 8 d
(IUCLID) (concentración tóxica límite)

Toxicidad para las bacterias

EC5 Pseudomonas putida: 680 mg/l; 16 h
(IUCLID) (concentración tóxica límite)

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

12.2 Persistencia y degradabilidad

Biodegradabilidad

70 %; 21 d

OECD TG 310

Fácilmente biodegradable.

12.3 Potencial de bioacumulación

Coeficiente de reparto n-octanol/agua

log Pow: -0,34

(IUCLID) No es de esperar una bioacumulación.

Bioacumulación

Factor de bioconcentración (FBC): 0,3

Lepomis macrochirus (Pez-luna Blugill)

No se acumula significativamente en organismos.

Información procedente de los trabajos de referencia y de la literatura.

12.4 Movilidad en el suelo

Distribución entre compartimentos medioambientales

Absorción/Suelo

log Koc: 1,21

Móvil en suelos (Literatura)

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

La sustancia no cumple los criterios de PBT o mPmB según el Reglamento (CE) núm. 1907/2006, anexo XIII.

12.6 Otros efectos adversos

Estabilidad en el agua

DT50

> 9.999 d

a pH: 7

(calculado) Hidroliza lentamente.

Información ecológica complementaria

Efectos biológicos:

Peligroso para el agua potable.

La descarga en el ambiente debe ser evitada.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

SECCIÓN 13. Consideraciones relativas a la eliminación

Métodos para el tratamiento de residuos

Directiva sobre residuos 2008/98 nota / CE.

Los residuos deben eliminarse de acuerdo con normativas locales y nacionales. Deje los productos químicos en sus recipientes originales. No los mezcle con otros residuos. Maneje los recipientes sucios como el propio producto.

Consulte en www.retrologistik.com sobre procesos relativos a la devolución de productos químicos o recipientes, o contáctenos si tiene más preguntas.

SECCIÓN 14. Información relativa al transporte

Transporte por carretera (ADR/RID)

| | |
|--|--------------|
| 14.1 Número ONU | UN 1648 |
| 14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas | Acetonitrilo |
| 14.3 Clase | 3 |
| 14.4 Grupo de embalaje | II |
| 14.5 Peligrosas ambientalmente | -- |
| 14.6 Precauciones particulares para los usuarios | si |
| Código de restricciones en túneles | D/E |

Transporte fluvial (ADN)

No relevante

Transporte aéreo (IATA)

| | |
|--|--------------|
| 14.1 Número ONU | UN 1648 |
| 14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas | ACETONITRILE |
| 14.3 Clase | 3 |
| 14.4 Grupo de embalaje | II |
| 14.5 Peligrosas ambientalmente | -- |
| 14.6 Precauciones particulares para los usuarios | no |

Transporte marítimo (IMDG)

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

| | |
|--|--------------|
| 14.1 Número ONU | UN 1648 |
| 14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas | ACETONITRILE |
| 14.3 Clase | 3 |
| 14.4 Grupo de embalaje | II |
| 14.5 Peligrosas ambientalmente | -- |
| 14.6 Precauciones particulares para los usuarios | si |
| EmS | F-E S-D |

14.7 Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC

No relevante

SECCIÓN 15. Información reglamentaria

15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Disposiciones legales de la CE

| | |
|--|----------------------|
| Legislación sobre Riesgos de Accidentes Graves | SEVESO III |
| | LÍQUIDOS INFLAMABLES |
| | P5c |
| | Cantidad 1: 5.000 t |
| | Cantidad 2: 50.000 t |

| | |
|-----------------------------|--|
| Restricciones profesionales | Tomar nota de la Directiva 94/33/CEE sobre la protección laboral de los jóvenes. Obsérvense las restricciones considerando la protección maternal de acuerdo con la Directiva del Consejo 92/85/CEE o regulaciones más rigurosas nacionales. |
|-----------------------------|--|

| | |
|---|-------------|
| Reglamento 1005/2009/CE relativo a sustancias que agotan la capa de ozono | no regulado |
|---|-------------|

| | |
|---|-------------|
| Reglamento (CE) nº 850/2004 del Parlamento Europeo y del Consejo de 29 de abril de 2004 sobre contaminantes orgánicos persistentes que modifica la Directiva 79/117/CEE | no regulado |
|---|-------------|

| | |
|---|---|
| Sustancias extremadamente preocupantes (SVHC) | Este producto no contiene sustancias extremadamente preocupantes por encima del límite legal de concentración correspondiente ($\geq 0,1\% \text{ p/p}$) según la normativa CE nº 1907/2006 (REACH), artículo 57. |
|---|---|

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 100003
Nombre del producto Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Legislación nacional
Clase de 3
almacenamiento

15.2 Evaluación de la seguridad química

Se ha realizado una Valoración de la Seguridad Química para esta sustancia.

SECCIÓN 16. Otra información

Texto íntegro de las Declaraciones-H referidas en las secciones 2 y 3.

| | |
|------|------------------------------------|
| H225 | Líquido y vapores muy inflamables. |
| H302 | Nocivo en caso de ingestión. |
| H312 | Nocivo en contacto con la piel. |
| H319 | Provoca irritación ocular grave. |
| H332 | Nocivo en caso de inhalación. |

Consejos relativos a la formación

Debe disponer a los trabajadores la información y la formación práctica suficientes.

Etiquetado

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia
Peligro

Indicaciones de peligro

H225 Líquido y vapores muy inflamables.
H302 + H312 + H332 Nocivo en caso de ingestión, contacto con la piel o inhalación.
H319 Provoca irritación ocular grave.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes.

No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

P302 + P352 EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL: Lavar con agua y jabón abundantes.

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Una explicación de las abreviaturas y los acrónimos utilizados en la ficha de datos de seguridad

Puede consultar las abreviaturas y acrónimos utilizados en www.wikipedia.org.

Representante regional

Merck Chemical and Life Science, S.A.|
C/ María de Molina, 40|28006 Madrid - España |
Tel: +34 935655500 | Fax: +34 935440000 |
email:SCM.Chemicals.ES@merckgroup.com |
www.merck.es

Los datos suministrados en ésta ficha de seguridad se basan a nuestro actual conocimiento. Describen tan sólo las medidas de seguridad en el manejo de éste producto y no representan una garantía sobre las propiedades descritas del mismo.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

ESCENARIOS DE EXPOSICIÓN 1 (Uso industrial)

1. Uso industrial Análisis químico, Producción química)

Sectores de uso final

- SU 3* Usos industriales: Usos de sustancias como tales o en preparados en emplazamientos industriales
SU9 Fabricación de productos químicos finos
SU 10 Formulación [mezcla] de preparados y/ o reenvasado (sin incluir aleaciones)

Categoría de productos químicos

- PC19* Sustancias intermedias
PC21 Productos químicos de laboratorio

Categorías de proceso

- PROC1* Uso en procesos cerrados, exposición improbable
PROC2 Utilización en procesos cerrados y continuos con exposición ocasional controlada
PROC3 Uso en procesos por lotes cerrados (síntesis o formulación)
PROC4 Utilización en procesos por lotes y de otro tipo (síntesis) en los que se puede producir la exposición
PROC5 Mezclado en procesos por lotes para la formulación de preparados y artículos (fases múltiples y/ o contacto significativo)
PROC8a Transferencia de sustancias o preparados (carga/ descarga) de o hacia buques o grandes contenedores en instalaciones no especializadas
PROC8b Transferencia de sustancias o preparados (carga/ descarga) de o hacia buques o grandes contenedores en instalaciones especializadas
PROC9 Transferencia de sustancias o preparados en pequeños contenedores (líneas de llenado especializadas, incluido el pesaje)
PROC15 Uso como reactivo de laboratorio

Categorías de emisión al medio ambiente

- ERC1* Fabricación de sustancias
ERC2 Formulación de preparados
ERC4 Uso industrial de auxiliares tecnológicos en procesos y productos, que no forman parte de artículos
ERC6a Uso industrial que da lugar a la fabricación de otra sustancia (uso de sustancias intermedias)
ERC6b Uso industrial de auxiliares tecnológicos reactivos

2. Escenario contributivo: condiciones de operación y medidas de gestión de riesgos

2.1 Escenario de contribución que controla la exposición ambiental para: ERC1, SpERC ESVOC 1

Cantidad utilizada

Cantidad anual por sitio 8500 t

Otras condiciones operacionales dadas que afectan la exposición ambiental

Número de días de emisión al 300

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

| | |
|--|--------|
| año | |
| Factor de emisión o de descarga: Aire | 0,5 % |
| Factor de emisión o de descarga: Agua | 1 % |
| Factor de emisión o de descarga: Suelo | 0,01 % |

Condiciones y medidas relacionadas con la planta municipal de tratamiento de aguas residuales

| | |
|---|---|
| Tipo de Planta de Tratamiento de Aguas Residuales | Planta de tratamiento de aguas residuales in situ |
| Velocidad de flujo del efluente en la planta de tratamiento de aguas residuales | 2.000 000043 |
| Tratamiento de Lodos | Lodos residuales no deben ser desechados a la naturaleza. |

2.2 Escenario de contribución que controla la exposición ambiental para: ERC2

Cantidad utilizada

| | |
|--------------------------|-----|
| Cantidad anual por sitio | 5 t |
|--------------------------|-----|

Otras condiciones operacionales dadas que afectan la exposición ambiental

| | |
|--|--------|
| Número de días de emisión al año | 20 |
| Factor de emisión o de descarga: Aire | 2,5 % |
| Factor de emisión o de descarga: Agua | 2 % |
| Factor de emisión o de descarga: Suelo | 0,01 % |

Condiciones y medidas relacionadas con la planta municipal de tratamiento de aguas residuales

| | |
|---|---|
| Tipo de Planta de Tratamiento de Aguas Residuales | Planta municipal de tratamiento de aguas residuales |
| Velocidad de flujo del efluente en la planta de tratamiento de aguas residuales | 2.000 000043 |
| Tratamiento de Lodos | Por propagación como el peor escenario |

2.3 Escenario de contribución que controla la exposición ambiental para: ERC4

Cantidad utilizada

| | |
|--------------------------|-------|
| Cantidad anual por sitio | 500 t |
|--------------------------|-------|

Otras condiciones operacionales dadas que afectan la exposición ambiental

| | |
|----------------------------------|-----|
| Número de días de emisión al año | 200 |
|----------------------------------|-----|

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

| | |
|--|-------|
| año | |
| Factor de emisión o de descarga: Aire | 100 % |
| Factor de emisión o de descarga: Agua | 100 % |
| Factor de emisión o de descarga: Suelo | 5 % |

Condiciones y medidas relacionadas con la planta municipal de tratamiento de aguas residuales

| | |
|---|---|
| Tipo de Planta de Tratamiento de Aguas Residuales | Planta municipal de tratamiento de aguas residuales |
| Velocidad de flujo del efluente en la planta de tratamiento de aguas residuales | 2.000 000043 |
| Tratamiento de Lodos | Por propagación como el peor escenario |
| Observaciones | La concentración en la planta de tratamiento de aguas debe ser inferior al valor PNEC STP |

2.4 Escenario de contribución que controla la exposición ambiental para: ERC6a

Cantidad utilizada

| | |
|--------------------------|--------|
| Cantidad anual por sitio | 1000 t |
|--------------------------|--------|

Otras condiciones operacionales dadas que afectan la exposición ambiental

| | |
|--|--------|
| Número de días de emisión al año | 100 |
| Factor de emisión o de descarga: Aire | 5 % |
| Factor de emisión o de descarga: Agua | 2 % |
| Factor de emisión o de descarga: Suelo | 0,10 % |

Condiciones y medidas relacionadas con la planta municipal de tratamiento de aguas residuales

| | |
|---|---|
| Tipo de Planta de Tratamiento de Aguas Residuales | Planta municipal de tratamiento de aguas residuales |
| Velocidad de flujo del efluente en la planta de tratamiento de aguas residuales | 2.000 000043 |
| Tratamiento de Lodos | Por propagación como el peor escenario |

2.5 Escenario de contribución que controla la exposición ambiental para: ERC6b

Cantidad utilizada

| | |
|--------------------------|--------|
| Cantidad anual por sitio | 1000 t |
|--------------------------|--------|

Otras condiciones operacionales dadas que afectan la exposición ambiental

Página 19 de 30

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

| | |
|--|---------|
| Número de días de emisión al año | 100 |
| Factor de emisión o de descarga: Aire | 0,10 % |
| Factor de emisión o de descarga: Agua | 5 % |
| Factor de emisión o de descarga: Suelo | 0,025 % |

Condiciones y medidas relacionadas con la planta municipal de tratamiento de aguas residuales

| | |
|---|---|
| Tipo de Planta de Tratamiento de Aguas Residuales | Planta municipal de tratamiento de aguas residuales |
| Velocidad de flujo del efluente en la planta de tratamiento de aguas residuales | 2.000 000043 |
| Tratamiento de Lodos | Por propagación como el peor escenario |

2.6 Escenario de contribución que controla la exposición de los trabajadores para: PROC1, PROC2, PROC3, PROC4, PROC8b, PROC15

Características del producto

| | |
|---|--|
| Concentración de la sustancia en la Mezcla/Artículo | Cubre un porcentaje de 100% de sustancia en el producto. |
| Forma física (en el momento del uso) | Líquido, moderadamente volátil |
| Temperatura de procesos | < 20 °C |

Frecuencia y duración del uso

| | |
|-------------------|---------------|
| Frecuencia de uso | 8 horas / día |
|-------------------|---------------|

Otras condiciones operacionales que afectan a la exposición de los trabajadores

| | |
|---------------------------|--|
| Al exterior / Al Interior | Zona interior sin aspiración local (LEV) |
|---------------------------|--|

Medidas y condiciones técnicas

Proporcione un buen nivel de ventilación general.

Medidas organizativas para prevenir/limitar emisiones, dispersión y exposición

Cubre exposiciones diarias de hasta 8 horas.

Condiciones y medidas relacionadas con la protección personal, la higiene y la evaluación de la salud

Utilice guantes adecuados aprobados por EN374.

Consejos adicionales para las buenas prácticas más allá de la Evaluación de Seguridad Química REACH

| | |
|--|--|
| Asesoramiento adicional sobre buenas prácticas | Utilice protección adecuada para los ojos. Utilice indumentaria adecuada para evitar la exposición de la piel. |
|--|--|

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

2.7 Escenario de contribución que controla la exposición de los trabajadores para: PROC5, PROC8a, PROC9

Características del producto

| | |
|---|--|
| Concentración de la sustancia en la Mezcla/Artículo | Cubre un porcentaje de 100% de sustancia en el producto. |
| Forma física (en el momento del uso) | Líquido, moderadamente volátil |
| Temperatura de procesos | < 20 °C |

Frecuencia y duración del uso

| | |
|-------------------|---------------|
| Frecuencia de uso | 8 horas / día |
|-------------------|---------------|

Otras condiciones operacionales que afectan a la exposición de los trabajadores

| | |
|---------------------------|--|
| Al exterior / Al Interior | Zona interior con aspiración local (LEV) |
| Observaciones | No se ha usado un factor de reducción de ventilación de escape local (VE L) para calcular las estimaciones de la exposición dérmica. |

Medidas y condiciones técnicas

Proporcione un buen nivel de ventilación general.

Medidas organizativas para prevenir/limitar emisiones, dispersión y exposición

Cubre exposiciones diarias de hasta 8 horas.

Condiciones y medidas relacionadas con la protección personal, la higiene y la evaluación de la salud

Utilice guantes adecuados aprobados por EN374.

Consejos adicionales para las buenas prácticas más allá de la Evaluación de Seguridad Química REACH

| | |
|--|--|
| Asesoramiento adicional sobre buenas prácticas | Utilice protección adecuada para los ojos. Utilice indumentaria adecuada para evitar la exposición de la piel. |
|--|--|

3. Estimación de la exposición y referencia a su fuente

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 100003
 Nombre del producto Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Medio Ambiente

| CS | Descriptor de uso | Mseguro | Compartimento | RCR | Método de Evaluación de la exposición |
|-----|-------------------|---------|---|--------|---------------------------------------|
| 2.1 | ERC1 | | Agua dulce | 0,175 | EUSES |
| | | | Sedimento de agua dulce | 0,175 | EUSES |
| | | | Agua de mar | 0,175 | EUSES |
| | | | Sedimento marino | 0,175 | EUSES |
| | | | Suelo | < 0,01 | EUSES |
| | | | sistema de depuración de aguas residuales | < 0,01 | EUSES |
| 2.2 | ERC2 | | Agua dulce | < 0,01 | EUSES |
| | | | Sedimento de agua dulce | < 0,01 | EUSES |
| | | | Agua de mar | < 0,01 | EUSES |
| | | | Sedimento marino | < 0,01 | EUSES |
| | | | Suelo | < 0,01 | EUSES |
| | | | sistema de depuración de aguas residuales | < 0,01 | EUSES |
| 2.3 | ERC4 | | Agua dulce | 0,32 | EUSES |
| | | | Sedimento de agua dulce | 0,32 | EUSES |
| | | | Agua de mar | 0,32 | EUSES |
| | | | Sedimento marino | 0,32 | EUSES |
| | | | Suelo | 0,82 | EUSES |
| | | | sistema de depuración de aguas residuales | 1 | EUSES |
| 2.4 | ERC6a | | Agua dulce | 0,12 | EUSES |
| | | | Sedimento de agua dulce | 0,12 | EUSES |
| | | | Agua de mar | 0,12 | EUSES |
| | | | Sedimento marino | 0,12 | EUSES |
| | | | Suelo | 0,66 | EUSES |
| | | | sistema de depuración de aguas residuales | 0,39 | EUSES |
| 2.5 | ERC6b | | Agua dulce | 0,30 | EUSES |
| | | | Sedimento de agua dulce | 0,30 | EUSES |
| | | | Agua de mar | 0,30 | EUSES |
| | | | Sedimento marino | 0,30 | EUSES |
| | | | Suelo | 0,16 | EUSES |
| | | | sistema de depuración de aguas residuales | 0,97 | EUSES |

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 100003
 Nombre del producto Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Trabajadores

| CS | Descriptor de uso | Duración de la exposición, ruta, efecto | RCR | Método de Evaluación de la exposición |
|-----|-------------------|---|--------|---------------------------------------|
| 2.6 | PROC1 | larga duración, inhalativo, sistémico | < 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | < 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | < 0,01 | |
| 2.6 | PROC2 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,13 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | < 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,13 | |
| 2.6 | PROC3 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,25 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | < 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,25 | |
| 2.6 | PROC4 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,50 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,04 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,55 | |
| 2.6 | PROC8b | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,63 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,09 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,71 | |
| 2.6 | PROC15 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,25 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | < 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,25 | |
| 2.7 | PROC5 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,13 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,09 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,21 | |
| 2.7 | PROC8a | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,13 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,09 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,21 | |
| 2.7 | PROC9 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,13 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,04 | ECETOC TRA 3 |
| | | <u>larga duración, combinado, sistémico</u> | 0,17 | |

Los parámetros patrones y las eficiencias del modelo de evaluación de la exposición aplicada fueron utilizados para el cálculo (a menos que se indique otra cosa).

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 100003
Nombre del producto Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

4. Orientación al Usuario Intermedio para evaluar si trabaja dentro de los límites fijados por el Escenario de Exposición

Consulte los documentos siguientes: ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.12: Use descriptor system; ECHA Guidance for downstream users; ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment Part D: Exposure Scenario Building, Part E: Risk Characterisation and Part G: Extending the SDS; VCI/Cefic REACH Practical Guides on Exposure Assessment and Communications in the Supply Chain; CEFIC Guidance Specific Environmental Release Categories (SPERCs).

Página 24 de 30

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD
de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 100003
Nombre del producto Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Para escalar la evaluación de la exposición laboral conducida con ECETOC TRA consulte la herramienta de Merck ScIDeEx® bajo www.merckmillipore.com/scideex.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

ESCENARIOS DE EXPOSICIÓN 2 (Uso profesional)

1. Uso profesional Análisis químico, Producción química)

Sectores de uso final

SU 22 Usos profesionales: Ámbito público (administración, educación, espectáculos, servicios, artesanía)

Categoría de productos químicos

PC21 Productos químicos de laboratorio

Categorías de proceso

PROC15 Uso como reactivo de laboratorio

Categorías de emisión al medio ambiente

ERC2 Formulación de preparados

ERC6a Uso industrial que da lugar a la fabricación de otra sustancia (uso de sustancias intermedias)

ERC6b Uso industrial de auxiliares tecnológicos reactivos

2. Escenario contributivo: condiciones de operación y medidas de gestión de riesgos

2.1 Escenario de contribución que controla la exposición ambiental para: ERC2

Cantidad utilizada

Cantidad anual por sitio 5 t

Otras condiciones operacionales dadas que afectan la exposición ambiental

Número de días de emisión al año 20

Factor de emisión o de descarga: Aire 2,5 %

Factor de emisión o de descarga: Agua 2 %

Factor de emisión o de descarga: Suelo 0,01 %

Condiciones y medidas relacionadas con la planta municipal de tratamiento de aguas residuales

Tipo de Planta de Tratamiento de Aguas Residuales Planta municipal de tratamiento de aguas residuales

Velocidad de flujo del efluente en la planta de tratamiento de aguas residuales 2.000 000043

Tratamiento de Lodos Por propagación como el peor escenario

2.2 Escenario de contribución que controla la exposición ambiental para: ERC6a

Cantidad utilizada

Cantidad anual por sitio 1000 t

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Otras condiciones operacionales dadas que afectan la exposición ambiental

| | |
|--|--------|
| Número de días de emisión al año | 100 |
| Factor de emisión o de descarga: Aire | 5 % |
| Factor de emisión o de descarga: Agua | 2 % |
| Factor de emisión o de descarga: Suelo | 0,10 % |

Condiciones y medidas relacionadas con la planta municipal de tratamiento de aguas residuales

| | |
|---|---|
| Tipo de Planta de Tratamiento de Aguas Residuales | Planta municipal de tratamiento de aguas residuales |
| Velocidad de flujo del efluente en la planta de tratamiento de aguas residuales | 2.000 000043 |
| Tratamiento de Lodos | Por propagación como el peor escenario |

2.3 Escenario de contribución que controla la exposición ambiental para: ERC6b

Cantidad utilizada

| | |
|--------------------------|--------|
| Cantidad anual por sitio | 1000 t |
|--------------------------|--------|

Otras condiciones operacionales dadas que afectan la exposición ambiental

| | |
|--|---------|
| Número de días de emisión al año | 100 |
| Factor de emisión o de descarga: Aire | 0,10 % |
| Factor de emisión o de descarga: Agua | 5 % |
| Factor de emisión o de descarga: Suelo | 0,025 % |

Condiciones y medidas relacionadas con la planta municipal de tratamiento de aguas residuales

| | |
|---|---|
| Tipo de Planta de Tratamiento de Aguas Residuales | Planta municipal de tratamiento de aguas residuales |
| Velocidad de flujo del efluente en la planta de tratamiento de aguas residuales | 2.000 000043 |
| Tratamiento de Lodos | Por propagación como el peor escenario |

2.4 Escenario de contribución que controla la exposición de los trabajadores para: PROC15

Características del producto

| | |
|-------------------------------|--|
| Concentración de la sustancia | Cubre un porcentaje de 100% de sustancia en el |
|-------------------------------|--|

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

| | |
|--------------------------------------|--------------------------------|
| en la Mezcla/Artículo | producto. |
| Forma física (en el momento del uso) | Líquido, moderadamente volátil |
| Temperatura de procesos | < 20 °C |

Frecuencia y duración del uso

| | |
|-------------------|---------------|
| Frecuencia de uso | 8 horas / día |
|-------------------|---------------|

Otras condiciones operacionales que afectan a la exposición de los trabajadores

| | |
|---------------------------|--|
| Al exterior / Al Interior | Zona interior sin aspiración local (LEV) |
|---------------------------|--|

Medidas y condiciones técnicas

Proporcione un buen nivel de ventilación general.

Medidas organizativas para prevenir/limitar emisiones, dispersión y exposición

Cubre exposiciones diarias de hasta 8 horas.

Condiciones y medidas relacionadas con la protección personal, la higiene y la evaluación de la salud

Utilice guantes adecuados aprobados por EN374.

Consejos adicionales para las buenas prácticas más allá de la Evaluación de Seguridad Química REACH

| | |
|--|--|
| Asesoramiento adicional sobre buenas prácticas | Utilice protección adecuada para los ojos. Utilice indumentaria adecuada para evitar la exposición de la piel. |
|--|--|

3. Estimación de la exposición y referencia a su fuente

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 100003
 Nombre del producto Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Medio Ambiente

| CS | Descriptor de uso | Mseguro | Compartimento | RCR | Método de Evaluación de la exposición |
|-----|-------------------|---------|---|--------|---------------------------------------|
| 2.1 | ERC2 | | Agua dulce | < 0,01 | EUSES |
| | | | Sedimento de agua dulce | < 0,01 | EUSES |
| | | | Agua de mar | < 0,01 | EUSES |
| | | | Sedimento marino | < 0,01 | EUSES |
| | | | Suelo | < 0,01 | EUSES |
| | | | sistema de depuración de aguas residuales | < 0,01 | EUSES |
| 2.2 | ERC6a | | Agua dulce | 0,12 | EUSES |
| | | | Sedimento de agua dulce | 0,12 | EUSES |
| | | | Agua de mar | 0,12 | EUSES |
| | | | Sedimento marino | 0,12 | EUSES |
| | | | Suelo | 0,66 | EUSES |
| | | | sistema de depuración de aguas residuales | 0,39 | EUSES |
| 2.3 | ERC6b | | Agua dulce | 0,30 | EUSES |
| | | | Sedimento de agua dulce | 0,30 | EUSES |
| | | | Agua de mar | 0,30 | EUSES |
| | | | Sedimento marino | 0,30 | EUSES |
| | | | Suelo | 0,16 | EUSES |
| | | | sistema de depuración de aguas residuales | 0,97 | EUSES |

Trabajadores

| CS | Descriptor de uso | Duración de la exposición, ruta, efecto | RCR | Método de Evaluación de la exposición |
|-----|-------------------|---|--------|---------------------------------------|
| 2.4 | PROC15 | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,25 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, dermal, sistémico | < 0,01 | ECETOC TRA 3 |
| | | larga duración, combinado, sistémico | 0,25 | |

Los parámetros patrones y las eficiencias del modelo de evaluación de la exposición aplicada fueron utilizados para el cálculo (a menos que se indique otra cosa).

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|--|
| Artículo número | 100003 |
| Nombre del producto | Acetonitrilo p.a. EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

4. Orientación al Usuario Intermedio para evaluar si trabaja dentro de los límites fijados por el Escenario de Exposición

Consulte los documentos siguientes: ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.12: Use descriptor system; ECHA Guidance for downstream users; ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment Part D: Exposure Scenario Building, Part E: Risk Characterisation and Part G: Extending the SDS; VCI/Cefic REACH Practical Guides on Exposure Assessment and Communications in the Supply Chain; CEFIC Guidance Specific Environmental Release Categories (SPERCs).

Para escalar la evaluación de la exposición laboral conducida con ECETOC TRA consulte la herramienta de Merck ScIDeEx® bajo www.merckmillipore.com/scideex.

La marca que aparece en el encabezado y/o el pie de página de este documento puede no coincidir visualmente con el producto adquirido mientras hacemos la transición de nuestra marca. Sin embargo, toda la información del documento relativa al producto permanece sin cambios y coincide con el producto solicitado. Para más información, póngase en contacto con mlsbranding@sial.com

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Fecha de revisión 31.07.2018

Versión 15.5

SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

1.1 Identificador del producto

Artículo número 109731

Denominación Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Número de registro REACH 01-2119444314-46-XXXX

No. CAS 109-99-9

1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Usos identificados Análisis químico

En cumplimiento de las condiciones descritas en el anexo a esta hoja de datos de seguridad.

1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Compañía Merck KGaA * 64271 Darmstadt * Alemania * Tel: +49 6151 72-0

Departamento Responsable LS-QHC * e-mail: prodsafe@merckgroup.com

1.4 Teléfono de emergencia Instituto Nacional de Toxicología * Madrid * Tel: 91 562 04 20

SECCIÓN 2. Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Líquido inflamable, Categoría 2, H225

Toxicidad aguda, Categoría 4, Oral, H302

Irritación ocular, Categoría 2, H319

Carcinogenicidad, Categoría 2, H351

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única, Categoría 3, Sistema respiratorio, H335

Para el texto integral de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H302 Nocivo en caso de ingestión.

H319 Provoca irritación ocular grave.

H335 Puede irritar las vías respiratorias.

H351 Se sospecha que provoca cáncer.

EUH019 Puede formar peróxidos explosivos.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.

P308 + P313 EN CASO DE exposición manifiesta o presunta: Consultar a un médico.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Etiquetado reducido (≤125 ml)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H351 Se sospecha que provoca cáncer.

Consejos de prudencia

P210 Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

P308 + P313 EN CASO DE exposición manifiesta o presunta: Consultar a un médico.

No. Índice 603-025-00-0

2.3 Otros peligros

Ninguno conocido.

SECCIÓN 3. Composición/ información sobre los componentes

3.1 Sustancia

| | | |
|------------|---------------------------------|--|
| Formula | C ₄ H ₈ O | C ₄ H ₈ O (Hill) |
| No. Índice | 603-025-00-0 | |
| No. CE | 203-726-8 | |
| Masa molar | 72,11 g/mol | |

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Componentes peligrosos (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Nombre químico (Concentración)

No. CAS Número de registro Clasificación

Tetrahidrofurano (>= 50 % - <= 100 %)

La sustancia no cumple los criterios de PBT o mPmB según el Reglamento (CE) núm. 1907/2006, anexo XIII.

| | | |
|----------|-------------------|--|
| 109-99-9 | 01-2119444314-46- | |
| | XXXX | Líquido inflamable, Categoría 2, H225 |
| | | Toxicidad aguda, Categoría 4, H302 |
| | | Irritación ocular, Categoría 2, H319 |
| | | Carcinogenicidad, Categoría 2, H351 |
| | | Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única, Categoría 3, H335 |

Para el texto integral de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

3.2 Mezcla

No aplicable

SECCIÓN 4. Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios

Tras inhalación: aire fresco. Llamar al médico.

En caso de contacto con la piel: Quitar inmediatamente todas las prendas contaminadas.

Aclararse la piel con agua/ducharse. Consultar a un médico.

Tras contacto con los ojos: aclarar con abundante agua. Consultar al oftalmólogo. Retirar las lentillas.

Tras ingestión: hacer beber agua inmediatamente (máximo 2 vasos). Consultar a un médico.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

efectos irritantes, Tos, Insuficiencia respiratoria, narcosis, sueño

4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

No hay información disponible.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Aqua, Espuma, Dióxido de carbono (CO2), Polvo seco

Medios de extinción no apropiados

No existen limitaciones de agentes extinguidores para esta sustancia/mezcla.

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Inflamable.

Los vapores son más pesados que el aire y pueden expandirse a lo largo del suelo.

Son posibles mezclas explosivas con el aire a temperaturas normales.

Prestar atención al retorno de la llama.

En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios

Permanencia en el área de riesgo sólo con sistemas de respiración artificiales e independientes del ambiente. Protección de la piel mediante observación de una distancia de seguridad y uso de ropa protectora adecuada .

Otros datos

Separar el recipiente de la zona de peligro y refrigerarlo con agua. Impedir la contaminación de las aguas superficiales o subterráneas por el agua que ha servido a la extinción de incendios.

SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Indicaciones para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia: No respirar los vapores, aerosoles. Evitar el contacto con la sustancia. Asegúrese una ventilación apropiada.

Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición. Evacúe el área de peligro, respete los procedimientos de emergencia, con sulte con expertos.

Consejos para el personal de emergencia:

Equipo protector véase sección 8.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

Las Fichas de Datos de Seguridad para artículos del catálogo también se obtienen en www.merckgroup.com

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado. Riesgo de explosión.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Cubra las alcantarillas. Recoja, una y aspire los derrames. Observe posibles restricciones de materiales (véanse indicaciones en las secciones 7 o 10). Recoger cuidadosamente con agentes absorbentes de líquidos, p.ej. Chemizorb®. Añadir a residuos a tratar. Aclarar.

6.4 Referencia a otras secciones

Para indicaciones sobre el tratamiento de residuos, véase sección 13.

SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura

Consejos para una manipulación segura

Trabajar bajo campana extractora. No inhalar la sustancia/la mezcla. Evítese la generación de vapores/aerosoles.

Observar las indicaciones de la etiqueta.

Indicaciones para la protección contra incendio y explosión

Mantener apartado de las llamas abiertas, de las superficies calientes y de los focos de ignición.

Tomar medidas de precaución contra descargas electrostáticas.

Medidas de higiene

Sustituir inmediatamente la ropa contaminada. Protección preventiva de la piel. Lavar cara y manos al término del trabajo.

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Condiciones de almacenamiento

Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado. Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición. Protejido de la luz.

Temperatura de almacenaje recomendada indicada en la etiqueta del producto.

7.3 Usos específicos finales

Véase el escenario de exposición en el anexo de ésta FDS.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

SECCIÓN 8. Controles de exposición/ protección individual

8.1 Parámetros de control

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Componentes con valores límite ambientales de exposición profesional.

Componentes

| Base | Valor | Límites umbrales | Observaciones |
|------|-------|---------------------|---------------|
|------|-------|---------------------|---------------|

Tetrahidrofurano (109-99-9)

| | | | |
|--------|--|----------------------------------|--|
| EU ELV | Límite máximo permisible de exposición promedio ponderado en tiempo | 50 ppm 150 mg/m ³ | |
| | Límite Permisible Temporal: | 100 ppm 300 mg/m ³ | |

| | | |
|----------|---|--|
| VLA (ES) | Clasificación de riesgo a la piel: | Absorción potencial a través de la piel. |
| | Clasificación de riesgo a la piel: | Absorción potencial a través de la piel. |
| | Valor Límite Ambiental- Exposición de Corta Duración (VLA-EC) | 100 ppm 300 mg/m ³ |
| | Valor Límite Ambiental- Exposición Diaria (VLA- ED) | 50 ppm 150 mg/m ³ |

Nivel sin efecto derivado (DNEL)

| | | | |
|--------------------------------|--------------------|------------|------------------------|
| DNEL trabajador, crónico | Efectos locales | inhalativo | 150 mg/m ³ |
| DNEL trabajador, crónico | efectos sistémicos | inhalativo | 150 mg/m ³ |
| DNEL trabajador, crónico | efectos sistémicos | dérmica | 25 mg/kg Peso corporal |
| DNEL consumidor, prolongado | efectos sistémicos | inhalativo | 62 mg/m ³ |
| DNEL consumidor, prolongado | efectos sistémicos | dérmica | 15 mg/kg Peso corporal |
| DNEL consumidor, agudo | Efectos locales | inhalativo | 150 mg/m ³ |
| DNEL consumidor, agudo | efectos sistémicos | inhalativo | 150 mg/m ³ |

Procedimientos de control recomendados

Los métodos para la medición de la atmósfera del puesto de trabajo deben cumplir con los requisitos de las normas DIN EN 482 y DIN EN 689.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Concentración prevista sin efecto (PNEC)

| | |
|--|------------|
| PNEC Agua dulce | 4,32 mg/l |
| PNEC Sedimento de agua dulce | 23,3 mg/kg |
| PNEC Agua de mar | 0,432 mg/l |
| PNEC Sedimento marino | 2,33 mg/kg |
| PNEC sistema de depuración de aguas residuales | 4,6 mg/l |
| PNEC Suelo | 2,13 mg/kg |
| PNEC Liberación periódica al agua | 21,6 mg/l |

8.2 Controles de la exposición

Medidas de ingeniería

Medidas técnicas y observación de métodos adecuados de trabajo tienen prioridad ante el uso de equipos de protección personal.

Véase sección 7.1.

Medidas de protección individual

Los tipos de auxiliares para protección del cuerpo deben elegirse específicamente según el puesto de trabajo en función de la concentración y cantidad de la sustancia peligrosa. Debería aclararse con el suministrador la estabilidad de los medios protectores frente a los productos químicos.

Protección de los ojos/ la cara

Gafas de seguridad

Protección de las manos

Salpicaduras:

| | |
|------------------------|---------------|
| Material del guante: | goma butílica |
| Espesor del guante: | 0,7 mm |
| Tiempo de penetración: | > 10 min |

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Los guantes de protección indicados deben cumplir con las especificaciones de la Directiva 89/686/EEC y con su norma resultante EN374, por ejemplo KCL 898 Butoject® (Salpicaduras).

Los tiempos de ruptura mencionados anteriormente han sido determinados con muestras de material de los tipos de guantes recomendados en mediciones de laboratorio de KCL según EN374.

Esta recomendación solo es válida para el producto mencionado en la ficha de datos de seguridad, suministrado por nosotros y para el fin indicado. Al disolver o mezclar en otras sustancias y cuando las condiciones difieran de las indicadas en EN374, debe dirigirse al suministrador de guantes con distintivo CE (por ejem. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet: www.kcl.de)

Otras medidas de protección

Vestimenta protectora antiestática retardante de la flama.

Protección respiratoria

necesaria en presencia de vapores/aerosoles.

Tipo de Filtro recomendado: Filtro A

El empresario debe garantizar que el mantenimiento, la limpieza y la prueba técnica de los protectores respiratorios se hagan según las instrucciones del productor de las mismas. Éstas medidas deben ser documentadas debidamente.

Controles de exposición medioambiental

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

Riesgo de explosión.

SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Forma líquido

Color incoloro

Olor etérico

Umbral olfativo No hay información disponible.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número

109731

Nombre del producto

Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

pH 7 - 8

a 200 g/l

20 °C

Punto de fusión -108,5 °C

Punto /intervalo de ebullición 65 - 66 °C
a 1.013 hPa

Punto de inflamación -21,5 °C
Método: c.c.

Tasa de evaporación No hay información disponible.

Inflamabilidad (sólido, gas) No hay información disponible.

Límites inferior de explosividad 1,5 %(v)

Límite superior de explosividad 12,4 %(v)

Presión de vapor 173 hPa
a 20 °C

Densidad relativa del vapor 2,5

Densidad 0,89 g/cm3
a 20 °C

Densidad relativa No hay información disponible.

Solubilidad en agua a 20 °C
soluble

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Coeficiente de reparto n-octanol/agua log Pow: 0,45 (25 °C)
Directrices de ensayo 107 del OECD
No es de esperar una bioacumulación.

Temperatura de auto-inflamación 215 °C
Método: DIN 51794

Temperatura de descomposición Destilable sin descomposición a presión normal.

Viscosidad, dinámica 0,48 mPa.s
a 20 °C

Propiedades explosivas No clasificado/a como explosivo/a.

Propiedades comburentes ningún

Peróxidos Puede formar peróxidos explosivos.

9.2 Otros datos

ningún

SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad

Los vapores pueden formar una mezcla explosiva con el aire.

Formación posible de peróxidos.

10.2 Estabilidad química

Sensibilidad a la luz

Sensible al aire.

Estabilizador

Butilhidroxitolueno

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Con las siguientes sustancias existe peligro de explosión y/o de formación de gases tóxicos:

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

hidróxidos alcalinos, Bromo, Hidruro cálcico, hidruros, Potasio, hidruro de aluminio y litio, Tionilo cloruro, Oxidantes, Oxígeno

Aminofenol, con, Peróxidos

Reacción exotérmica con:

Ácidos, Tetracloruro de titanio, halogenuros, peróxidos

10.4 Condiciones que deben evitarse

Calentamiento.

Destilación (peligro de explosión).

10.5 Materiales incompatibles

goma, plásticos diversos, Estaño

10.6 Productos de descomposición peligrosos

Peróxidos

SECCIÓN 11. Información toxicológica

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad oral aguda

DL50 Rata: 1.650 mg/kg

(ECHA)

Síntomas: Irritación de las membranas mucosas

Toxicidad aguda por inhalación

Síntomas: irritación de las mucosas, Tos, Insuficiencia respiratoria, Consecuencias posibles:, perjudica las vías respiratorias

Toxicidad cutánea aguda

Esta información no está disponible.

Irritación de la piel

Una exposición repetida o prolongada puede causar irritación de la piel y dermatitis debido a las propiedades desengrasantes del producto.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Irritación ocular

Conejo

Resultado: Irritación ocular

(IUCLID)

Provoca irritación ocular grave.

Sensibilización

Test de sensibilización: Conejillo de indias

Resultado: negativo

(IUCLID)

Experiencia humana

Resultado: negativo

(IUCLID)

Mutagenicidad en células germinales

Genotoxicidad in vitro

Prueba de Ames

Resultado: negativo

(IUCLID)

Carcinogenicidad

Esta información no está disponible.

Toxicidad para la reproducción

No hay sospecha de que perjudique la capacidad reproductora. (Literatura)

Teratogenicidad

Esta información no está disponible.

Efectos CMR

Carcinogenicidad:

Se sospecha que provoca cáncer.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

Puede irritar las vías respiratorias.

Órganos diana: Sistema respiratorio

Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas

Esta información no está disponible.

Peligro de aspiración

Esta información no está disponible.

11.2 Otros datos

A dosis elevadas:

sueño, narcosis

Las otras propiedades peligrosas no pueden ser excluidas.

El producto debe manejarse con especial cuidado.

SECCIÓN 12. Información ecológica

12.1 Toxicidad

Toxicidad para los peces

Ensayo dinámico CL50 Pimephales promelas (Piscardo de cabeza gorda): 2.160 mg/l; 96 h

Directrices de ensayo 203 del OECD

Toxicidad para las dafnias y otros invertebrados acuáticos

Ensayo estático CE50 Daphnia magna (Pulga de mar grande): 3.485 mg/l; 48 h

OECD TG 202

Toxicidad para las algas

Prueba de inhibición de multiplicación celular IC5 Scenedesmus quadricauda (alga verde): 3.700 mg/l; 8 d

(concentración tóxica límite)

Toxicidad para las bacterias

Ensayo estático CI50 lodo activado: 460 mg/l; 3 h

OECD TG 209

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Toxicidad para los peces (Toxicidad crónica)

Ensayo dinámico NOEC Pimephales promelas (Piscardo de cabeza gorda): 216 mg/l; 33 d

Controlo analítico: si

(ECHA)

12.2 Persistencia y degradabilidad

Biodegradabilidad

39 %; 28 d; aeróbico Demanda bioquímica de oxígeno

OECD TG 301D

No es fácilmente biodegradable.

12.3 Potencial de bioacumulación

Coeficiente de reparto n-octanol/agua

log Pow: 0,45 (25 °C)

Directrices de ensayo 107 del OECD

No es de esperar una bioacumulación.

12.4 Movilidad en el suelo

No hay información disponible.

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

La sustancia no cumple los criterios de PBT o mPmB según el Reglamento (CE) núm.

1907/2006, anexo XIII.

12.6 Otros efectos adversos

La descarga en el ambiente debe ser evitada.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

SECCIÓN 13. Consideraciones relativas a la eliminación

Métodos para el tratamiento de residuos

Directiva sobre residuos 2008/98 nota / CE.

Los residuos deben eliminarse de acuerdo con normativas locales y nacionales. Deje los productos químicos en sus recipientes originales. No los mezcle con otros residuos. Maneje los recipientes sucios como el propio producto.

Consulte en www.retrologistik.com sobre procesos relativos a la devolución de productos químicos o recipientes, o contáctenos si tiene más preguntas.

SECCIÓN 14. Información relativa al transporte

Transporte por carretera (ADR/RID)

14.1 Número ONU UN 2056

14.2 Designación oficial de Tetrahidrofurano
transporte de las Naciones
Unidas

14.3 Clase 3

14.4 Grupo de embalaje II

14.5 Peligrosas ambientalmente --

14.6 Precauciones particulares si
para los usuarios

Código de restricciones en D/E
túneles

Transporte fluvial (ADN)

No relevante

Transporte aéreo (IATA)

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

14.1 Número ONU UN 2056

14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas

14.3 Clase 3

14.4 Grupo de embalaje II

14.5 Peligrosas ambientalmente --

14.6 Precauciones particulares para los usuarios no

Transporte marítimo (IMDG)

14.1 Número ONU UN 2056

14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas

14.3 Clase 3

14.4 Grupo de embalaje II

14.5 Peligrosas ambientalmente --

14.6 Precauciones particulares para los usuarios si

EmS F-E S-D

14.7 Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio Marpol 73/78 y del Código IBC

No relevante

SECCIÓN 15. Información reglamentaria

15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Disposiciones legales de la CE

Legislación sobre Riesgos SEVESO III

de Accidentes Graves LÍQUIDOS INFLAMABLES

P5c

Cantidad 1: 5.000 t

Cantidad 2: 50.000 t

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Restricciones profesionales Tomar nota de la Directiva 94/33/CEE sobre la protección laboral de los jóvenes. Obsérvense las restricciones considerando la protección maternal de acuerdo con la Directiva del Consejo 92/85/CEE o regulaciones más rigurosas nacionales.

Reglamento 1005/2009/CE relativo a sustancias que agotan la capa de ozono no regulado

Reglamento (CE) nº 850/2004 del Parlamento Europeo y del Consejo de 29 de abril de 2004 sobre contaminantes orgánicos persistentes que modifica la Directiva 79/117/CEE no regulado

Sustancias extremadamente preocupantes (SVHC) Este producto no contiene sustancias extremadamente preocupantes por encima del límite legal de concentración correspondiente ($\geq 0,1\% \text{ p/p}$) según la normativa CE nº 1907/2006 (REACH), artículo 57.

Legislación nacional

Clase de almacenamiento 3

15.2 Evaluación de la seguridad química

Para éste producto no se realizó una valoración de la seguridad química.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

SECCIÓN 16. Otra información

Texto íntegro de las Declaraciones-H referidas en las secciones 2 y 3.

- | | |
|------|---------------------------------------|
| H225 | Líquido y vapores muy inflamables. |
| H302 | Nocivo en caso de ingestión. |
| H319 | Provoca irritación ocular grave. |
| H335 | Puede irritar las vías respiratorias. |
| H351 | Se sospecha que provoca cáncer. |

Consejos relativos a la formación

Debe disponer a los trabajadores la información y la formación práctica suficientes.

Etiquetado

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

- H225 Líquido y vapores muy inflamables.
H302 Nocivo en caso de ingestión.
H319 Provoca irritación ocular grave.
H335 Puede irritar las vías respiratorias.
H351 Se sospecha que provoca cáncer.
EUH019 Puede formar peróxidos explosivos.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.

P308 + P313 EN CASO DE exposición manifiesta o presunta: Consultar a un médico.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

Una explicación de las abreviaturas y los acrónimos utilizados en la ficha de datos de seguridad

Puede consultar las abreviaturas y acrónimos utilizados en www.wikipedia.org.

Representante regional

Merck Chemical and Life Science, S.A.
C/ María de Molina, 40|28006 Madrid - España |
Tel: +34 935655500 | Fax: +34 935440000 | email:SCM.Chemicals.ES@merckgroup.com |
www.merck.es

Los datos suministrados en ésta ficha de seguridad se basan a nuestro actual conocimiento. Describen tan sólo las medidas de seguridad en el manejo de éste producto y no representan una garantía sobre las propiedades descritas del mismo.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

ESCENARIOS DE EXPOSICIÓN 1 (Uso industrial)

1. Uso industrial Análisis químico)

Sectores de uso final

- SU 3* Usos industriales: Usos de sustancias como tales o en preparados en emplazamientos industriales
- SU 9* Fabricación de productos químicos finos
- SU 10* Formulación [mezcla] de preparados y/ o reenvasado (sin incluir aleaciones)

Categoría de productos químicos

- PC21* Productos químicos de laboratorio

Categorías de proceso

- PROC1* Uso en procesos cerrados, exposición improbable
- PROC2* Utilización en procesos cerrados y continuos con exposición ocasional controlada
- PROC3* Uso en procesos por lotes cerrados (síntesis o formulación)
- PROC4* Utilización en procesos por lotes y de otro tipo (síntesis) en los que se puede producir la exposición
- PROC5* Mezclado en procesos por lotes para la formulación de preparados y artículos (fases múltiples y/ o contacto significativo)
- PROC8a* Transferencia de sustancias o preparados (carga/ descarga) de o hacia buques o grandes contenedores en instalaciones no especializadas
- PROC8b* Transferencia de sustancias o preparados (carga/ descarga) de o hacia buques o grandes contenedores en instalaciones especializadas
- PROC9* Transferencia de sustancias o preparados en pequeños contenedores (líneas de llenado especializadas, incluido el pesaje)
- PROC10* Aplicación mediante rodillo o brocha
- PROC15* Uso como reactivo de laboratorio

Categorías de emisión al medio ambiente

- ERC1* Fabricación de sustancias
- ERC2* Formulación de preparados
- ERC6a* Uso industrial que da lugar a la fabricación de otra sustancia (uso de sustancias intermedias)

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

ERC6b Uso industrial de auxiliares tecnológicos reactivos

2. Escenario contributivo: condiciones de operación y medidas de gestión de riesgos

2.1 Escenario de contribución que controla la exposición de los trabajadores para: PROC1

Características del producto

| | |
|---|--|
| Concentración de la sustancia en la Mezcla/Artículo | Cubre un porcentaje de 100% de sustancia en el producto. |
| Forma física (en el momento del uso) | Líquido altamente volátil |

Frecuencia y duración del uso

| | |
|-------------------|-----------------|
| Frecuencia de uso | 5 días / semana |
| Frecuencia de uso | 8 horas / día |

Otras condiciones operacionales que afectan a la exposición de los trabajadores

| | |
|---------------------------|----------------------------|
| Al exterior / Al Interior | Actividades en el interior |
|---------------------------|----------------------------|

Medidas organizativas para prevenir/limitar emisiones, dispersión y exposición

Cubre exposiciones diarias de hasta 8 horas.

Consejos adicionales para las buenas prácticas más allá de la Evaluación de Seguridad Química REACH

| | |
|--|--|
| Asesoramiento adicional sobre buenas prácticas | Utilice guantes adecuados aprobados por EN374. |
|--|--|

2.2 Escenario de contribución que controla la exposición de los trabajadores para: PROC2, PROC3, PROC4, PROC5, PROC9, PROC10, PROC15

Características del producto

| | |
|---|--|
| Concentración de la sustancia en la Mezcla/Artículo | Cubre un porcentaje de 100% de sustancia en el producto. |
| Forma física (en el momento del uso) | Líquido altamente volátil |

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Frecuencia y duración del uso

| | |
|-------------------|-----------------|
| Frecuencia de uso | 5 días / semana |
| Frecuencia de uso | 8 horas / día |

Otras condiciones operacionales que afectan a la exposición de los trabajadores

| | |
|---------------------------|--|
| Al exterior / Al Interior | Zona interior con aspiración local (LEV) |
|---------------------------|--|

Medidas y condiciones técnicas

Proporcione ventilación por extracción en los puntos donde se produzcan las emisiones. (Eficacia (de una medida): 90 %)

Medidas organizativas para prevenir/limitar emisiones, dispersión y exposición

Cubre exposiciones diarias de hasta 8 horas.

Consejos adicionales para las buenas prácticas más allá de la Evaluación de Seguridad Química REACH

| | |
|--|--|
| Asesoramiento adicional sobre buenas prácticas | Utilice guantes adecuados aprobados por EN374. |
|--|--|

2.3 Escenario de contribución que controla la exposición de los trabajadores para: PROC8a

Características del producto

| | |
|---|--|
| Concentración de la sustancia en la Mezcla/Artículo | Cubre un porcentaje de 100% de sustancia en el producto. |
| Forma física (en el momento del uso) | Líquido altamente volátil |

Frecuencia y duración del uso

| | |
|-------------------|-----------------|
| Frecuencia de uso | 5 días / semana |
| Frecuencia de uso | 8 horas / día |

Otras condiciones operacionales que afectan a la exposición de los trabajadores

| | |
|---------------------------|--|
| Al exterior / Al Interior | Zona interior con aspiración local (LEV) |
|---------------------------|--|

Medidas organizativas para prevenir/limitar emisiones, dispersión y exposición

Cubre exposiciones diarias de hasta 8 horas.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Condiciones y medidas relacionadas con la protección personal, la higiene y la evaluación de la salud

Llevar equipo de protección respiratoria. Eficacia (de una medida): 90 %

Consejos adicionales para las buenas prácticas más allá de la Evaluación de Seguridad Química REACH

Asesoramiento adicional sobre buenas prácticas Utilice guantes adecuados aprobados por EN374.

2.4 Escenario de contribución que controla la exposición de los trabajadores para: PROC8b

Características del producto

| | |
|---|--|
| Concentración de la sustancia en la Mezcla/Artículo | Cubre un porcentaje de 100% de sustancia en el producto. |
| Forma física (en el momento del uso) | Líquido altamente volátil |

Frecuencia y duración del uso

| | |
|-------------------|-----------------|
| Frecuencia de uso | 5 días / semana |
| Frecuencia de uso | 8 horas / día |

Otras condiciones operacionales que afectan a la exposición de los trabajadores

Al exterior / Al Interior Zona interior con aspiración local (LEV)

Medidas y condiciones técnicas

Proporcione ventilación por extracción en los puntos donde se produzcan las emisiones. (Eficacia (de una medida): 97 %)

Medidas organizativas para prevenir/limitar emisiones, dispersión y exposición

Cubre exposiciones diarias de hasta 8 horas.

Consejos adicionales para las buenas prácticas más allá de la Evaluación de Seguridad Química REACH

Asesoramiento adicional sobre buenas prácticas Utilice guantes adecuados aprobados por EN374.

3. Estimación de la exposición y referencia a su fuente

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

Medio Ambiente

Se realizo una valoración de la seguridad química según Artículo 14 (3) y Anexo I, Párrafo 3 (valoración del peligro para el medio ambiente) y 4 (valoración PBT y MPMB) de REACH. Como no se identificaron peligros no son necesarias una estimación de la exposición ni una caracterización del riesgo (REACH, Anexo I, Párrafo 5.0).

Trabajadores

| CS | Descriptor de uso | Duración de la exposición, ruta, efecto | RCR | Método de Evaluación de la exposición |
|-----|-------------------|---|---------|---------------------------------------|
| 2.1 | PROC1 | larga duración, inhalatorio, local | < 0,001 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, inhalativo, sistémico | < 0,001 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,01 | ECETOC TRA |
| 2.2 | PROC2 | larga duración, inhalatorio, local | 0,1 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,1 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,006 | ECETOC TRA |
| 2.2 | PROC3 | larga duración, inhalatorio, local | 0,2 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,2 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,001 | ECETOC TRA |
| 2.2 | PROC4 | larga duración, inhalatorio, local | 0,2 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,2 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,03 | ECETOC TRA |
| 2.2 | PROC5 | larga duración, inhalatorio, local | 0,5 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,5 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,003 | ECETOC TRA |
| 2.2 | PROC9 | larga duración, inhalatorio, local | 0,4 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,4 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,03 | ECETOC TRA |
| 2.2 | PROC10 | larga duración, inhalatorio, local | 0,5 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,5 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,1 | ECETOC TRA |
| 2.2 | PROC15 | larga duración, inhalatorio, local | 0,1 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,1 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,001 | ECETOC TRA |
| 2.3 | PROC8a | larga duración, inhalatorio, local | 0,4 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,4 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,5 | ECETOC TRA |

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número

109731

Nombre del producto

Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

| | | | | |
|-----|--------|---------------------------------------|------|------------|
| 2.4 | PROC8b | larga duración, inhalatorio, local | 0,1 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,1 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,03 | ECETOC TRA |

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

4. Orientación al Usuario Intermedio para evaluar si trabaja dentro de los límites fijados por el Escenario de Exposición

Consulte los documentos siguientes: ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.12: Use descriptor system; ECHA Guidance for downstream users; ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment Part D: Exposure Scenario Building, Part E: Risk Characterisation and Part G: Extending the SDS; VCI/Cefic REACH Practical Guides on Exposure Assessment and Communications in the Supply Chain; CEFIC Guidance Specific Environmental Release Categories (SPERCs).

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 109731

Nombre del producto Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

ESCENARIOS DE EXPOSICIÓN 2 (Uso profesional)

1. Uso profesional Análisis químico)

Sectores de uso final

SU 22 Usos profesionales: Ámbito público (administración, educación, espectáculos, servicios, artesanía)

Categoría de productos químicos

PC21 Productos químicos de laboratorio

Categorías de proceso

PROC15 Uso como reactivo de laboratorio

Categorías de emisión al medio ambiente

ERC2 Formulación de preparados

ERC6a Uso industrial que da lugar a la fabricación de otra sustancia (uso de sustancias intermedias)

ERC6b Uso industrial de auxiliares tecnológicos reactivos

2. Escenario contributivo: condiciones de operación y medidas de gestión de riesgos

2.1 Escenario de contribución que controla la exposición de los trabajadores para: PROC15

Características del producto

Concentración de la sustancia en la Mezcla/Artículo Cubre un porcentaje de 100% de sustancia en el producto.

Forma física (en el momento del uso) Líquido altamente volátil

Frecuencia y duración del uso

Frecuencia de uso 5 días / semana
Frecuencia de uso 8 horas / día

Otras condiciones operacionales que afectan a la exposición de los trabajadores

Al exterior / Al Interior Zona interior con aspiración local (LEV)

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

Medidas y condiciones técnicas

Proporcione ventilación por extracción en los puntos donde se produzcan las emisiones. (Eficacia (de una medida): 80 %)

Medidas organizativas para prevenir/limitar emisiones, dispersión y exposición

Cubre exposiciones diarias de hasta 8 horas.

Consejos adicionales para las buenas prácticas más allá de la Evaluación de Seguridad Química REACH

Asesoramiento adicional sobre buenas prácticas Utilice guantes adecuados aprobados por EN374. Evite las salpicaduras.

3. Estimación de la exposición y referencia a su fuente

Medio Ambiente

Se realizo una valoración de la seguridad química según Artículo 14 (3) y Anexo I, Párrafo 3 (valoración del peligro para el medio ambiente) y 4 (valoración PBT y MPMB) de REACH. Como no se identificaron peligros no son necesarias una estimación de la exposición ni una caracterización del riesgo (REACH, Anexo I, Párrafo 5.0).

Trabajadores

| CS | Descriptor de uso | Duración de la exposición, ruta, efecto | RCR | Método de Evaluación de la exposición |
|-----|-------------------|---|------|---------------------------------------|
| 2.1 | PROC8b | larga duración, inhalatorio, local | 0,1 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, inhalativo, sistémico | 0,1 | ECETOC TRA |
| | | larga duración, dermal, sistémico | 0,03 | ECETOC TRA |

4. Orientación al Usuario Intermedio para evaluar si trabaja dentro de los límites fijados por el Escenario de Exposición

Consulte los documentos siguientes: ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.12: Use descriptor system; ECHA Guidance for downstream users;

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

| | |
|---------------------|---|
| Artículo número | 109731 |
| Nombre del producto | Tetrahidrofurano para análisis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur |

ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment Part D: Exposure Scenario Building, Part E: Risk Characterisation and Part G: Extending the SDS; VCI/Cefic REACH Practical Guides on Exposure Assessment and Communications in the Supply Chain; CEFIC Guidance Specific Environmental Release Categories (SPERCs).



ANEXO 2. Certificado de análisis



Specification

1.00983.1000 Ethanol absolute for analysis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur

| Specification | | |
|--|---------------|-------|
| Purity (GC) | ≥ 99.9 | % |
| Identity (IR) | conforms | |
| Appearance | conforms | |
| Color | ≤ 10 | Hazen |
| Solubility in water | conforms | |
| Acidity or alkalinity | ≤ 30 | ppm |
| Titrable acid | ≤ 0.0002 | meq/g |
| Titrable base | ≤ 0.0002 | meq/g |
| Density (d 20 °C/20 °C) | 0.790 - 0.793 | |
| UV absorption | conforms | |
| Aldehydes (as Acetaldehyd) | ≤ 0.001 | % |
| Fusel oils | conforms | |
| Substances reducing potassium permanganate (as O) | ≤ 0.0002 | % |
| Substances reducing permanganate (ACS) | conforms | |
| Carbonyl compounds (as CO) | ≤ 0.003 | % |
| Readily carbonizable substances | conforms | |
| Acetone, Isopropyl Alcohol (ACS) | conforms | |
| Acetone (GC) | ≤ 0.001 | % |
| Ethylmethylketone (GC) | ≤ 0.02 | % |
| Isoamyl alcohol (GC) | ≤ 0.05 | % |
| 2-Propanol (GC) | ≤ 0.01 | % |
| Higher alcohols (GC) | ≤ 0.01 | % |
| Volatile impurities (GC) (Acetaldehyde and Acetal) | ≤ 10 | ppm |
| Volatile impurities (GC) (Benzene) | ≤ 2 | ppm |
| Volatile impurities (GC) (Methanol) | ≤ 100 | ppm |
| Volatile impurities (GC) (Total of other impurities) | ≤ 300 | ppm |
| Volatile impurities (GC) (disregard limit) | ≤ 9 | ppm |
| Chloride (Cl) | ≤ 0.3 | ppm |
| Nitrate (NO ₃) | ≤ 0.3 | ppm |
| Phosphate (PO ₄) | ≤ 0.3 | ppm |
| Sulfate (SO ₄) | ≤ 0.3 | ppm |
| Ag (Silver) | ≤ 0.000002 | % |
| Al (Aluminium) | ≤ 0.00005 | % |
| As (Arsenic) | ≤ 0.000002 | % |
| Au (Gold) | ≤ 0.000002 | % |
| Ba (Barium) | ≤ 0.00001 | % |
| Be (Beryllium) | ≤ 0.000002 | % |
| Bi (Bismuth) | ≤ 0.000002 | % |
| Ca (Calcium) | ≤ 0.00005 | % |

Specification

1.00983.1000 Ethanol absolute for analysis EMSURE® ACS,ISO,Reag. Ph Eur

| | | |
|---------------------|------------|---|
| Cd (Cadmium) | ≤ 0.000005 | % |
| Co (Cobalt) | ≤ 0.000002 | % |
| Cr (Chromium) | ≤ 0.000002 | % |
| Cu (Copper) | ≤ 0.000002 | % |
| Fe (Iron) | ≤ 0.00001 | % |
| Ga (Gallium) | ≤ 0.000002 | % |
| In (Indium) | ≤ 0.000002 | % |
| Li (Lithium) | ≤ 0.000002 | % |
| Mg (Magnesium) | ≤ 0.00001 | % |
| Mn (Manganese) | ≤ 0.000002 | % |
| Mo (Molybdenum) | ≤ 0.000002 | % |
| Ni (Nickel) | ≤ 0.000002 | % |
| Pb (Lead) | ≤ 0.00001 | % |
| Pt (Platinum) | ≤ 0.000002 | % |
| Sb (Antimony) | ≤ 0.000002 | % |
| Sn (Tin) | ≤ 0.00001 | % |
| Ti (Titanium) | ≤ 0.000002 | % |
| Tl (Thallium) | ≤ 0.000002 | % |
| V (Vanadium) | ≤ 0.000002 | % |
| Zn (Zinc) | ≤ 0.00001 | % |
| Zr (Zirconium) | ≤ 0.000002 | % |
| Evaporation residue | ≤ 0.0005 | % |
| Water | ≤ 0.1 | % |

Jeannette David
Responsible laboratory manager quality control

This document has been produced electronically and is valid without a signature.



Specification

1.00003.1000 Acetonitrile for analysis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

| Specification | | |
|---------------------------|---------------|---------|
| Purity (GC) | ≥ 99.5 | % |
| Identity (IR) | conforms | |
| Appearance | clear | |
| Color | ≤ 10 | Hazen |
| Acidity | ≤ 0.0002 | meq/g |
| Alkalinity | ≤ 0.0001 | meq/g |
| Density (d 20 °C/20 °C) | 0.782 - 0.783 | |
| Refractive index (n 20/D) | 1.343 - 1.345 | |
| Boiling range (80-82°C) | ≥ 95 | % (v/v) |
| Cyanide (CN) | ≤ 0.005 | % |
| Al (Aluminium) | ≤ 0.00005 | % |
| B (Boron) | ≤ 0.000002 | % |
| Ba (Barium) | ≤ 0.00001 | % |
| Ca (Calcium) | ≤ 0.00005 | % |
| Cd (Cadmium) | ≤ 0.000005 | % |
| Co (Cobalt) | ≤ 0.000002 | % |
| Cr (Chromium) | ≤ 0.000002 | % |
| Cu (Copper) | ≤ 0.000002 | % |
| Fe (Iron) | ≤ 0.00001 | % |
| Mg (Magnesium) | ≤ 0.00001 | % |
| Mn (Manganese) | ≤ 0.000002 | % |
| Ni (Nickel) | ≤ 0.000002 | % |
| Pb (Lead) | ≤ 0.00001 | % |
| Sn (Tin) | ≤ 0.00001 | % |
| Zn (Zinc) | ≤ 0.00001 | % |
| Evaporation residue | ≤ 0.001 | % |
| Water | ≤ 0.1 | % |

ACS, Ph Eur-reagent

Jeannette David
Responsible laboratory manager quality control

This document has been produced electronically and is valid without a signature.



Specification

1.09731.1000 Tetrahydrofuran for analysis EMSURE® ACS,Reag. Ph Eur

| Specification | | |
|--|---------------|-------|
| Purity (GC) | ≥ 99.8 | % |
| Identity (IR) | conforms | |
| Appearance | clear | |
| Color | ≤ 10 | Hazen |
| Density (d 20 °C/20 °C) | 0.885 - 0.895 | |
| Acidity | ≤ 0.0003 | meq/g |
| Alkalinity | ≤ 0.0002 | meq/g |
| Peroxides | conforms | |
| Peroxide (as H ₂ O ₂) | ≤ 0.005 | % |
| Al (Aluminium) | ≤ 0.00005 | % |
| B (Boron) | ≤ 0.000002 | % |
| Ba (Barium) | ≤ 0.00001 | % |
| Ca (Calcium) | ≤ 0.00005 | % |
| Cd (Cadmium) | ≤ 0.000005 | % |
| Co (Cobalt) | ≤ 0.000002 | % |
| Cr (Chromium) | ≤ 0.000002 | % |
| Cu (Copper) | ≤ 0.000002 | % |
| Fe (Iron) | ≤ 0.00001 | % |
| Mg (Magnesium) | ≤ 0.000002 | % |
| Mn (Manganese) | ≤ 0.000002 | % |
| Ni (Nickel) | ≤ 0.000002 | % |
| Pb (Lead) | ≤ 0.00001 | % |
| Sn (Tin) | ≤ 0.00001 | % |
| Zn (Zinc) | ≤ 0.00001 | % |
| Evaporation residue | ≤ 0.0005 | % |
| Water | ≤ 0.03 | % |

Stabilized with 2,6-Di-tert-butyl-4-methylphenol (BHT).

Jeannette David
Responsible laboratory manager quality control

This document has been produced electronically and is valid without a signature.

