

Maj 2017

Sådan identificeres et stof, der fremstilles i forskellige kvaliteter

Indledning

Aroma AH består af flere isomerer. Det fremstilles i tre forskellige kvaliteter (kvalitet X, Y og Z), som er forskellige i forholdet mellem disse isomerer.

Sammensætning

Stoffet består af fem isomerer (A, B, C, D og E) og fremstilles med følgende sammensætning:

Bestanddele	Koncentrationsområde (%)			Samlet område (%)
	Kvalitet X	Kvalitet Y	Kvalitet Z	
Isomer A: 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-on	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
Isomer B: 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-on	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
Isomer C: [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
Isomer D: 1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4	0.5 - 4
Isomer E: 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	0,5-1,5	4 - 6	10 - 15	0.5 - 15

Maj 2017

Identifikation

Mulighed 1: Separate registreringer for hver kvalitet

Baseret på 80/10-reglen, der er beskrevet i [Vejledning om identifikation og benævnelse af stoffer i henhold til REACH og CLP](#), har de tre kvaliteter forskellige navne, som følger:

- Kvalitet X indeholder én hovedbestanddel (isomer A) i en koncentration af ≥ 80 %. Det benævnes derfor et stof med én bestanddel:

3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-on

- Kvalitet Y indeholder to hovedbestanddele (isomer A og C) i en koncentration af ≥ 10 % og < 80 %. Det benævnes derfor som et stof med flere bestanddele:

Reaktionsmasse af 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-on og [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on

- Kvalitet Z indeholder tre hovedbestanddele (isomer A, C og E) i en koncentration af ≥ 10 % og < 80 %. Det benævnes derfor som et stof med flere bestanddele:

Reaktionsmasse af 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-on, [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on og 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on

Mulighed 2: En enkelt registrering for alle kvaliteter (skal begrundes)

Stoffet kan identificeres som et stof med flere bestanddele på grundlag af de bestanddele, der er til stede i koncentrationer ≥ 10 % for alle tre kvaliteter (se tabel over samlede koncentrationer). Det vil derfor blive benævnt som en reaktionsmasse af fire isomerer (isomer A, B, C, E) som følger:

Reaktionsmasse af 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-on, 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-on, [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on og 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-on

Der kræves dog en begrundelse for denne fremgangsmåde pga. afvigelsen fra 80 % reglen og 10 % reglen som beskrevet i [Vejledning om identifikation og benævnelse af stoffer i henhold til REACH og CLP](#).

Følgende punkter skal være omhandlet af begrundelsen:

- de foreliggende testdata dækker variabiliteten af de tre kvaliteter
- alle kvaliteter har meget ensartede fysisk-kemiske egenskaber
- alle kvaliteter har samme fareklassifikation og -mærkning
- alle kvaliteter anvendes på tilsvarende måde og har tilsvarende eksponeringsscenerier (og dermed tilsvarende kemikaliesikkerhedsrapporter)