

Mai 2017

Identifizierung eines Stoffes, der in unterschiedlichen Qualitäten produziert wird

Einleitung

Der Duftstoff AH besteht aus verschiedenen Isomeren. Er wird in drei unterschiedlichen Qualitäten (Qualität X, Y und Z) produziert, die sich hinsichtlich des Isomerenverhältnisses voneinander unterscheiden.

Zusammensetzung

Der Stoff, der aus fünf Isomeren besteht (A, B, C, D und E), wird in der folgenden Zusammensetzung hergestellt:

Bestandteile	Konzentrationsbereich (%)			Gesamtbereich (%)
	Qualität X	Qualität Y	Qualität Z	
Isomer A: 3-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
Isomer B: 3-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	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-one	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
Isomer D: 1-(2,6,6-Trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one	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-one	0,5–1,5	4 - 6	10 - 15	0.5 - 15

Mai 2017

Identifizierung

Option 1: Separate Registrierungen nach Qualität

Auf Grundlage der in den [Leitlinien zur Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen gemäß REACH und CLP](#) beschriebenen 80/10-Regel haben die drei Qualitäten unterschiedliche Namen wie folgt:

- Qualität X enthält einen Hauptbestandteil (Isomer A) in einer Konzentration von ≥ 80 %. Sie wird daher als einkomponentiger Stoff bezeichnet:

3-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one

- Qualität Y enthält zwei Hauptbestandteile (Isomere A und C) in einer Konzentration zwischen ≥ 10 % und < 80 %. Sie wird daher als mehrkomponentiger Stoff bezeichnet:

Reaktionsmasse aus 3-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one und [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one

- Qualität Z enthält drei Hauptbestandteile (Isomere A, C und E) in einer Konzentration zwischen ≥ 10 % und < 80 %. Sie wird daher als mehrkomponentiger Stoff bezeichnet:

Reaktionsmasse aus 3-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one und [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one und 1-(2,6,6-Trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one

Option 2: Eine einzelne Registrierung für alle Qualitäten (Begründung erforderlich)

Es ist möglich, den Stoff als mehrkomponentigen Stoff auf Grundlage der Bestandteile zu identifizieren, die in Konzentrationen von ≥ 10 % bei allen drei Qualitäten vorliegen (siehe Tabelle für die Konzentrationswerte des Gesamtbereiches). Er wird daher wie folgt als Reaktionsmasse aus vier Isomeren (Isomere A, B, C, E) bezeichnet:

Reaktionsmasse aus 3-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one und 3-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)but-3-en-2-one und [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one und 1-(2,6,6-Trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-en-3-one

Allerdings ist bei diesem Ansatz aufgrund der Abweichung von der 80%-Regel und der 10%-Regel, die in den [Leitlinien zur Identifizierung und Bezeichnung von Stoffen gemäß REACH und CLP](#) beschrieben sind, eine Begründung erforderlich.

In der Begründung muss auf die folgenden Punkte eingegangen werden:

- Die vorhandenen Prüfdaten decken die Variabilität der drei Qualitäten ab.
- Alle Qualitäten haben sehr ähnliche physikalisch-chemische Eigenschaften.
- Alle Qualitäten haben die gleiche Gefahreneinstufung und -kennzeichnung.
- Alle Qualitäten werden in ähnlicher Weise verwendet und haben ähnliche Expositionsszenarien (und somit Stoffsicherheitsberichte).