

maj 2017

Hur man identifierar ett ämne som framställs i olika kvaliteter

Inledning

Doftämne AH består av flera isomerer. Det framställs i tre olika kvaliteter (kvalitet X, Y och Z) som har olika förhållanden av dessa isomerer.

Sammansättning

Ämnet, som består av fem isomerer (A, B, C, D och E), framställs med följande sammansättning:

Beståndsdelar	Koncentrationsintervaller (%)			Totalintervall (%)
	Kvalitet X	Kvalitet Y	Kvalitet Z	
Isomer A: 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
Isomer B: 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
Isomer C: [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
Isomer D: 1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	0,5-1,5	2 - 4	2 - 4	0,5-4
Isomer E: 1-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	0,5-1,5	4 - 6	10 - 15	0.5 - 15

maj 2017

Identifiering

Alternativ 1: Separata registreringar för varje kvalitet

Baserat på 80/10-regeln som beskrivs i [Vägledning om identifiering och namngivning av ämnen enligt Reach och CLP](#) har de tre kvaliteterna olika namn, enligt följande:

- Kvalitet X innehåller en enda huvudbeståndsdel (isomer A) med en koncentration ≥ 80 procent. Det benämns därför monokomponentämne (ämne med en beståndsdel):

3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on

- Kvalitet Y innehåller två huvudbeståndsdelar (isomerer A och C) med en koncentration ≥ 10 procent och < 80 procent. Det benämns därför multikomponentämne (ämne med flera beståndsdelar):

Reaktionsblandning av 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on och [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on

- Kvalitet Z innehåller tre huvudbeståndsdelar (isomerer A, C och E) med en koncentration ≥ 10 procent och < 80 procent. Det benämns därför multikomponentämne (ämne med flera beståndsdelar):

Reaktionsblandning av 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on och [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on och 1-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on

Alternativ 2: En enda registrering för alla kvaliteter (motivering krävs)

Det är möjligt att identifiera ämnet som ett multikomponentämne baserat på de beståndsdelar som ingår vid koncentrationer ≥ 10 procent för alla tre kvaliteter (se tabellen för totalintervallet av koncentrationvärden). Det kommer därför att benämnas reaktionsblandning av fyra isomerer (isomerer A, B, C, E) enligt följande:

Reaktionsblandning av 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on och 3-metyl-4-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on och [R-(E)]-1-(2,6,6-trimetyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on och 1-(2,6,6-trimetyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on

En motivering krävs dock för detta tillvägagångssätt på grund av avvikelsen från 80-procentsregeln och 10-procentsregeln som beskrivs i [Vägledning om identifiering och namngivning av ämnen enligt Reach och CLP](#).

Följande frågor måste besvaras i motiveringen:

- Tillgängliga försöksdata omfattar variationen av de tre kvaliteterna.
- Alla kvaliteter har mycket liknande fysikalisk-kemiska egenskaper.
- Alla kvaliteter har samma faroklassificering och märkning.
- Alla kvaliteter används på ett liknande sätt och har liknande exponeringsscenarioer (och därmed liknande kemikaliesäkerhetsrapporter).