

Mei 2017

Hoe moet een stof geïdentificeerd worden die in verschillende kwaliteiten geproduceerd wordt?

Inleiding

Geurstof AH bestaat uit diverse isomeren. De stof wordt geproduceerd in drie verschillende kwaliteiten (kwaliteit X, Y en Z), waarbij de verhouding van deze isomeren verschilt.

Samenstelling

De stof, die bestaat uit vijf isomeren (A, B, C, D en E), wordt geproduceerd met de volgende samenstelling:

Bestanddelen	Concentratiebereiken (in gewichtsprocenten)			Algemeen bereik (in gewichtsprocenten)
	Kwaliteit X	Kwaliteit Y	Kwaliteit Z	
Isomeer A: 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-on	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
Isomeer B: 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-on	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
Isomeer 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
Isomeer 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
Isomeer 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

Mei 2017

Identificatie

Optie 1: Aparte registraties voor elke kwaliteit

Op grond van de 80/10-regel die wordt beschreven in het [Richtsnoer voor de identificatie en naamgeving van stoffen in REACH en CLP](#) hebben de drie kwaliteiten verschillende namen, als volgt:

- Kwaliteit X bevat één hoofdbestanddeel (Isomeer A) met een concentratie ≥ 80 gewichtsprocent. Deze wordt derhalve benoemd als stof met één bestanddeel:

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

- Kwaliteit Y bevat twee hoofdbestanddelen (Isomeer A en C) met een concentratie ≥ 10 gewichtsprocent en < 80 gewichtsprocent. Deze wordt derhalve benoemd als stof met verscheidene bestanddelen:

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

- Kwaliteit Z bevat drie hoofdbestanddelen (Isomeer A, C en E) met een concentratie ≥ 10 gewichtsprocent en < 80 gewichtsprocent. Deze wordt derhalve benoemd als stof met verscheidene bestanddelen:

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

Optie 2: Een enkele registratie voor alle kwaliteiten (verantwoording vereist)

Het is mogelijk om de stof te identificeren als een stof met verscheidene bestanddelen op grond van de bestanddelen die aanwezig zijn in concentraties van ≥ 10 gewichtsprocent in alle drie de kwaliteiten (zie tabel voor concentratiewaarden algemeen bereik). De stof zal daarom worden benoemd als reactiemassa van vier isomeren (Isomeer A, B, C, E), als volgt:

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

Er dient echter verantwoording voor deze benadering te worden afgelegd vanwege de afwijking van de 80/10-regel die staat beschreven in het [Richtsnoer voor de identificatie en naamgeving van stoffen in REACH en CLP](#).

In de verantwoording moet aandacht worden besteed aan de volgende kwesties:

Mei 2017

- De beschikbare testgegevens dekken de variabiliteit van de drie kwaliteiten af;
- Alle kwaliteiten hebben zeer vergelijkbare fysico-chemische eigenschappen;
- Alle kwaliteiten hebben dezelfde gevarenindeling en etikettering; en
- Alle kwaliteiten worden op vergelijkbare wijze gebruikt en hebben vergelijkbare blootstellingsscenario's (en dus ook vergelijkbare chemischeveiligheidsrapporten).