

květen 2017

Jak identifikovat látku vyráběnou v různých kvalitách

Úvod

Vonná látka AH se skládá z několika izomerů. Vyrábí se ve třech různých kvalitách (kvality X, Y a Z), které se liší poměrem těchto izomerů.

Složení

Látka obsahující pět izomerů (A, B, C, D a E) se vyrábí s tímto složením:

Složky látky	Koncentrační rozmezí (%)			Celkové rozmezí (%)
	Kvalita X	Kvalita Y	Kvalita Z	
izomer A: 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on	80 - 85	65 - 75	50 - 60	50 - 85
izomer B: 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on	6 - 10	3 - 7	3 - 7	3 - 10
izomer C: [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	3 - 11	10 - 20	20 - 30	3 - 30
izomer D: 1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	0,5–1,5	2 - 4	2 - 4	0,5–4
izomer E: 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on	0,5–1,5	4 - 6	10 - 15	0.5 - 15

Identifikace

květen 2017

Možnost 1: Samostatné registrace pro každou kvalitu

Podle pravidla 80/10, které popisují [Pokyny pro identifikaci a pojmenovávání látek podle nařízení REACH a CLP](#), mají uvedené tři kvality odlišné názvy:

- Kvalita X obsahuje jednu hlavní složku (izomer A) v koncentraci ≥ 80 %. Proto je pojmenována jako jednosložková látka:

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

- Kvalita Y obsahuje dvě hlavní složky (izomery A a C) v koncentraci ≥ 10 % a < 80 %. Proto je pojmenována jako vícesložková látka:

reakční směs 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on
a [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on

- Kvalita Z obsahuje tři hlavní složky (izomery A, C a E) v koncentraci ≥ 10 % a < 80 %. Proto je pojmenována jako vícesložková látka:

reakční směs 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)-3-buten-2-on a [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on a 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on

Možnost 2: Jediná registrace pro všechny kvality (je vyžadováno odůvodnění)

Je možné identifikovat látku jako látku vícesložkovou na základě složek přítomných v koncentracích ≥ 10 % pro všechny tři kvality (celková rozmezí hodnot koncentrace viz tabulka). Látka bude tudíž pojmenována jako reakční směs čtyř izomerů (izomery A, B, C, E):

reakční směs 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on a 3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)but-3-en-2-on a [R-(E)]-1-(2,6,6-trimethyl-2-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on a 1-(2,6,6-trimethyl-1-cyklohexen-1-yl)pent-1-en-3-on

Tento přístup však vyžaduje odůvodnění kvůli odchylce od pravidla 80 % a pravidla 10 %, které popisují [Pokyny pro identifikaci a pojmenovávání látek podle nařízení REACH a CLP](#).

Odůvodnění musí zahrnovat tyto aspekty:

- dostupné údaje ze zkoušek se vztahují na proměnlivost všech tří kvalit,
- všechny kvality mají velmi podobné fyzikálně-chemické vlastnosti,
- všechny kvality mají stejnou klasifikaci nebezpečnosti a označení a
- všechny kvality se používají podobným způsobem a mají podobné scénáře expozice (a tudíž i podobné zprávy o chemické bezpečnosti).