

mai 2017

Comment identifier une substance produite dans des qualités différentes

Introduction

Fragrance AH est constituée de plusieurs isomères. Cette substance est produite en trois qualités différentes (qualités X, Y et Z), pour lesquelles le ratio de ces isomères est différent.

Composition

La substance produite, qui comprend cinq isomères (A, B, C, D et E), présente la composition suivante:

| Constituants | Plages de concentration (%) | | | Intervalle total (%) |
|---|-----------------------------|-----------|-----------|----------------------|
| | Qualité X | Qualité Y | Qualité Z | |
| Isomère A: 3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)-3-butène-2-one | 80 - 85 | 65 - 75 | 50 - 60 | 50 - 85 |
| Isomère B: 3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-1-cyclohexène-1-yl)-3-butène-2-one | 6 - 10 | 3 - 7 | 3 - 7 | 3 - 10 |
| Isomère C: [R-(E)]-1-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)pent-1-ène-3-one | 3 - 11 | 10 - 20 | 20 - 30 | 3 - 30 |
| Isomère D: 1-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexen-1-yl)pent-1-ène-3-one | 0,5 - 1,5 | 2 - 4 | 2 - 4 | 0,5 - 4 |
| Isomère E: 1-(2,6,6-triméthyl-1-cyclohexen-1-yl)pent-1-ène-3-one | 0,5 - 1,5 | 4 - 6 | 10 - 15 | 0.5 - 15 |

mai 2017

Identification

Option 1: Un enregistrement distinct pour chaque qualité

Selon la règle du 80/10 décrite dans le [Guide pour l'identification et la désignation des substances dans le cadre de REACH et du CLP](#), les trois qualités recevront trois noms différents, comme suit:

- La qualité X contient un constituant principal (l'isomère A) à une concentration ≥ 80 %. Elle est donc désignée en tant que substance monoconstituant:

3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)-3-butène-2-one

- La qualité Y contient deux constituants principaux (les isomères A et C) à une concentration ≥ 10 % et < 80 %. Elle est donc désignée en tant que substance multiconstituant:

Masse de réaction de 3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)-3-butène-2-one et [R-(E)]-1-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)pent-1-ène-3-one

- La qualité Z contient trois constituants principaux (les isomères A, C et E) à une concentration ≥ 10 % et < 80 %. Elle est donc désignée en tant que substance multiconstituant:

Masse de réaction de 3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)-3-butène-2-one, [R-(E)]-1-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)pent-1-ène-3-one et 1-(2,6,6-triméthyl-1-cyclohexène-1-yl)pent-1-ène-3-one

Option 2: Un enregistrement unique pour toutes les qualités (justification nécessaire)

La substance peut être identifiée en tant que substance multiconstituant sur la base des constituants présents à des concentrations ≥ 10 % dans au moins une des trois qualités (se reporter au tableau pour les valeurs de concentration de l'intervalle total). Elle sera donc désignée en tant que masse de réaction de quatre isomères (les isomères A, B, C et E), comme suit:

Masse de réaction de 3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)-3-butène-2-one, 3-méthyl-4-(2,6,6-triméthyl-1-cyclohexène-1-yl)-3-butène-2-one, [R-(E)]-1-(2,6,6-triméthyl-2-cyclohexène-1-yl)pent-1-ène-3-one et 1-(2,6,6-triméthyl-1-cyclohexène-1-yl)pent-1-ène-3-one

Cependant, cette approche nécessite une justification en raison de l'écart par rapport à la règle des 80 % et à la règle des 10 % décrites dans le [Guide pour l'identification et la désignation des substances dans le cadre de REACH et du CLP](#).

mai 2017

La justification devra couvrir les aspects suivants:

- Les données d'essais disponibles couvrent la variabilité des trois qualités;
- toutes les qualités ont des propriétés physicochimiques très proches;
- toutes les qualités ont les mêmes classification et étiquetage des dangers; et
- toutes les qualités ont une utilisation et des scénarios d'exposition similaires (par conséquent, des rapports sur la sécurité chimique similaires).