



IL PROCESSO DI “CHEMICAL RISK ASSESSMENT” SECONDO IL REGOLAMENTO REACH

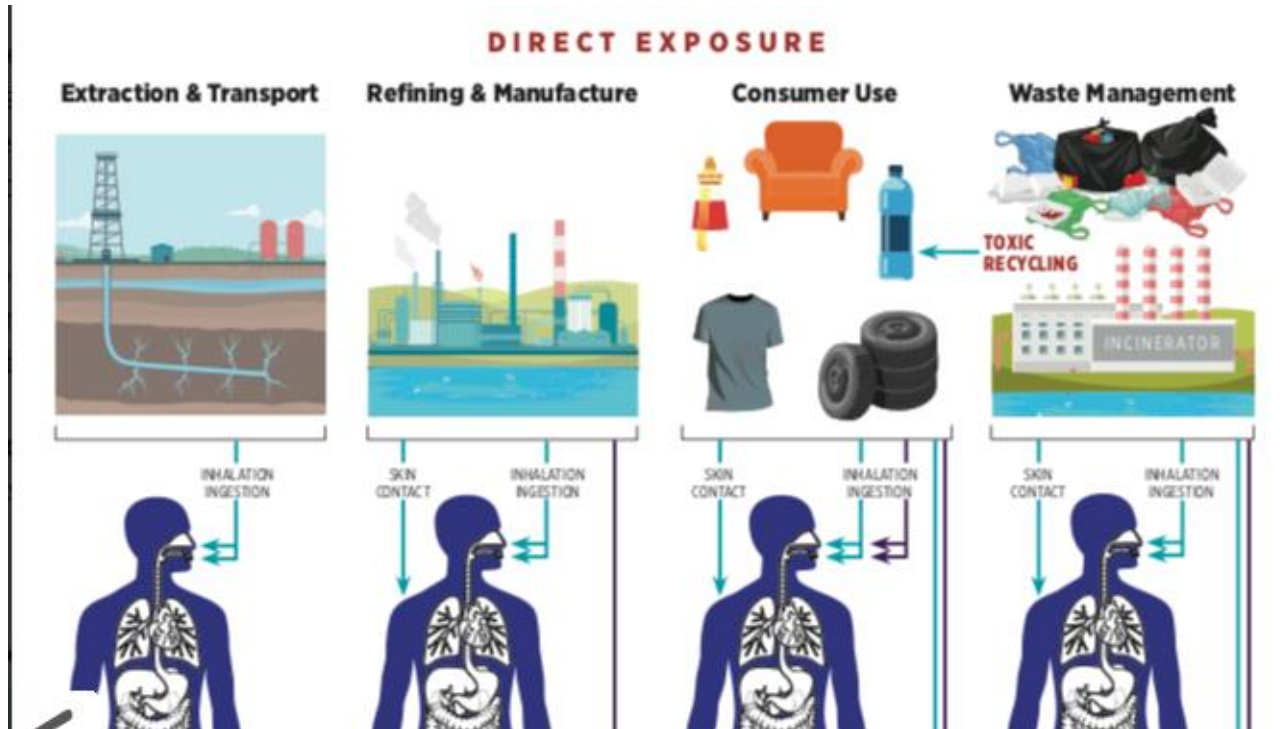
L'utilizzo delle informazioni di output nelle valutazioni di impatto ambientale e impatto sanitario.

Udine 7-8-9 ottobre 2019

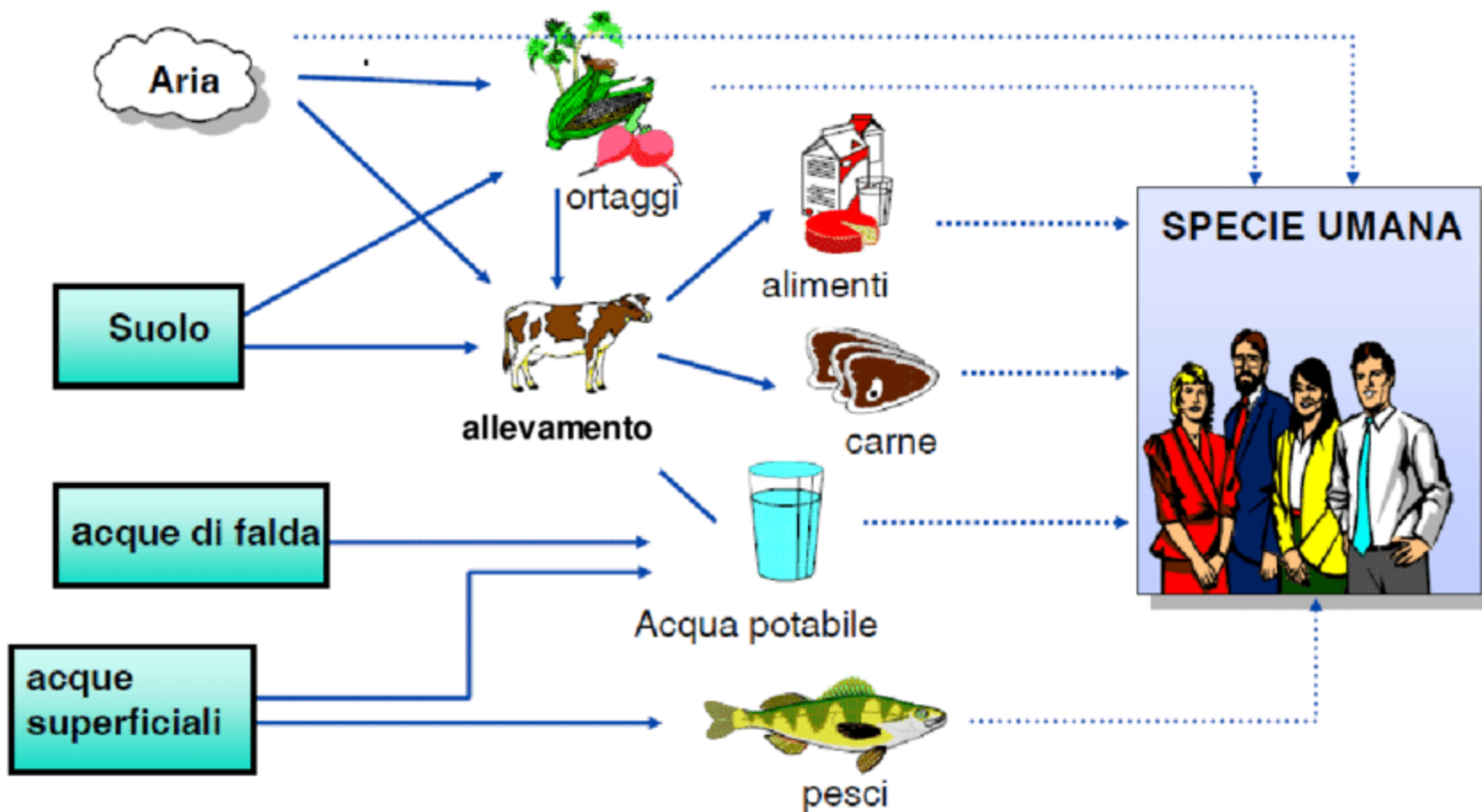
GLI APPLICATIVI DI SUPPORTO E UTILIZZO BANCHE DATI ECHA (CHESAR, EUSES, ECETOC, ...) Esercitazione in aula

Maria Antonietta Orrù e Leonello Attias
Istituto Superiore di Sanità

Esposizione umana



Esposizione ambientale



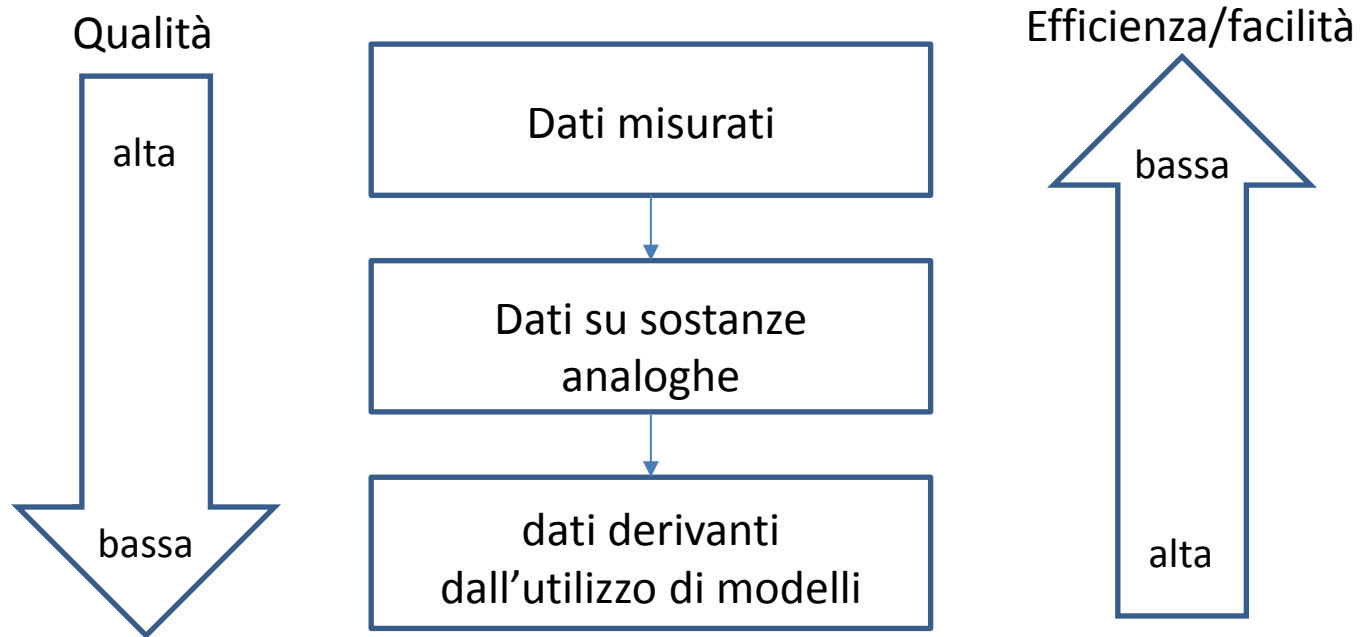
Strumenti

All. 1 par. 5.2.5 del [REACH](#)

“nella valutazione dell'esposizione sono presi in particolare considerazione, quando sono disponibili, i dati sull'esposizione rappresentativi e rilevati in modo adeguato. Modelli appropriati possono essere utilizzati per la stima dei livelli d'esposizione. Possono anche essere presi in considerazione dati di monitoraggio pertinenti, relativi a sostanze con uso e modalità di esposizione analoghi o proprietà analoghe”.



Gerarchia di informazioni



Dati misurati/modelli

Pro

Misure

- Situazione reale
- Stima precisa
- Dettagli specifici

Modelli

- Facili da usare
- Veloci
- Sempre applicabili

Contro

Misure

- Tempo e risorse
- Non sempre fattibili
- Spesso manca un preciso inquadramento

Modelli

- Non sempre sicura applicabilità
- Conservativi
- Molto semplici

Modelli Tier 1

I modelli semplificano la realtà attraverso generalizzazioni che si traducono in valori di *default* (derivati dalla letteratura)



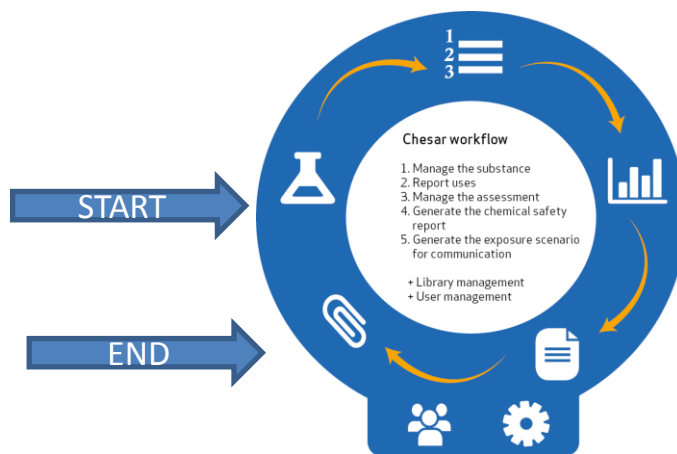
Poche variabili, *worst-case*
Semplici da utilizzare

Chesar

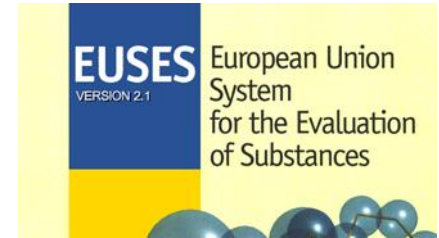
Chemical Safety Assessment and Reporting



Chesar è uno strumento sviluppato da ECHA per supportare i Registranti ad adempiere gli obblighi REACH. E' strutturato secondo una sequenza logica che permette di **valutare il rischio di esposizione nonché di caratterizzare il rischio**. Ciò permette la generazione di CSR (*Chemical Safety Report*) e Scenari di Esposizione (ES) atti ad essere comunicati.



Il flusso di lavoro è di natura consequenziale e logica così da permettere, se si hanno a disposizione le informazioni necessarie, di originare un CSR e degli ES accurati senza dover ricorrere a più strumenti.

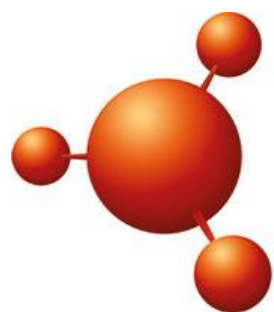


Per l'esposizione dei
lavoratori, dei consumatori e
l'ambiente

Per l'esposizione
ambientale

REACH AMBIENTE E SALUTE

Altro vantaggio di Chesar 3 è che comunica direttamente con Iuclid 6 dal quale è possibile caricare tutte le informazioni relative alla sostanza senza dover generare prima un file in formato Chesar come per il passato.



IUCLID 6



ECETOC TRA

L'algoritmo Targeted Risk Assessment (TRA) fu lanciato nel 2004 da ECETOC ed è costituito da 3 moduli che permettono di stimare l'esposizione per i lavoratori, per i consumatori e per l'ambiente.

In seguito il modello è stato migliorato con la versione 2 nel 2009 e la versione 3 nel 2012, mantenendo ferma l'impostazione che prevede l'inserimento di poche e semplici informazioni.

E

Microsoft Excel - ecetocTRAM.xls								
File Edit View Insert Format Tools Data Window Help ecetocTRAM								
Type a question for help								
Calibri 10 B I U								
A1 fx								
A	B	C	D	E	F	G	H	
28	Identification of Substance							
29								
30	SUBSTANCE (USE A UNIQUE NAME FOR EACH SUBSTANCE)		Test_1 for user guide		Identification of use		Use as an example	
31	General description/name				Assesment identifier		Test_example_version1	
32	CAS no.		1111-22-3		Assesment date		23Dec2011	
33	EC no.				Comments		Demo for user guide	

Identificazione della sostanza

Microsoft Excel - ecetocTRAM.xls													
File Edit View Insert Format Tools Data Window Help ecetocTRAM ecetocTRAM													
Type a question for help													
Calibri 10 B I U													
D46 fx													
A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	
37	Physical chemical properties - minimum input for Human Health and Environmental Assessment												
38													
39	Molecular weight		773	g.mol ⁻¹									
40	Vapour pressure (Pa OR hPa)		5.00E-05	Pa	conversion		5.00E-05	VP [Pa]	at °C				> HH and env
41	Water solubility		295	mg.L ⁻¹					at °C				> HH and env
42	Partition coefficient octanol-water [- OR Log(Kow)]		1.00E-00	logKow	conversion		1.00E+01	Kow [-]					> Env
43	Biodegradability test result		not biodegradable										> Env
44	Chemical class for Koc-QSAR												> Env
45	Koc (L.kg ⁻¹) OR Log(Koc)		1.00E+02	Koc			1.00E+02	L.kg ⁻¹					> Env
46	Partition coefficient k_{ow}			L.kg ⁻¹	optional - can be estimated by QSAR								> Env
47	Partition coefficient k_{ow}			L.kg ⁻¹	optional - can be estimated by QSAR								> Env
48	Partition coefficient to suspended solids			L.kg ⁻¹	optional								> Env
49													
50	Additional physico-chemical parameter input for refined environmental assessment (TIER 2)							Input of additional PC data: go to row 165 of datasheets					

ECETOC TRA dati di input per i lavoratori



No.	Scenario name	Process Category (PROC)	Type of setting (PROC 7 and 22 always industrial, PROC 11 and 20 always professional)	Is substance a solid? (y/n/c)	Ductiness of solids OR VP of volatile (Pa) at process temperature (clear entries if you change column F to "No")	Duration of activity (hours/day)	Use of ventilation? (address outdoor air, LEV and general ventilation)	Use of respiratory protection and, if so, minimum efficiency?	Substance in preparation? (applies to inhalation and dermal for volatile and solids)	Dermal PPE / Gloves	Consider LEV for dermal exposure? (conservative, default is "No")	
54		PROC 1	industrial	No		>4 hours (default)	Indoors	No	No	No	No	
55		PROC 2	professional	No		>4 hours (default)	Indoors with LEV	No	>25%	Gloves APF 5	No	
56		PROC 3	industrial	Yes	high	>4 hours (default)	Indoors with good general	No	>25%	Gloves APF 10	No	
57		PROC 4	professional	No		1 - 4 hours	Indoors with enhanced general ventilation	No	>25%	No	No	
58		PROC 5	industrial	No	100	>4 hours (default)	Indoors with LEV and enhanced general ventilation	No	5-25%	Gloves APF 20	Yes	
59		PROC 6	professional	No		>4 hours (default)	Indoors with LEV	No	5-25%	No	No	
60		PROC 7	industrial	No		>4 hours (default)	Indoors with LEV and enhanced general ventilation	95%	5-25%	No	No	
61		PROC 8a	professional	No		>4 hours (default)	Indoors with LEV	No	5-25%	No	No	
62		PROC 8b	industrial	No		>4 hours (default)	Indoors with LEV	No	5-25%	No	No	
63		PROC 9	professional	No		>4 hours (default)	Indoors with LEV	No	5-25%	No	No	
64		PROC 10	industrial	No		>4 hours (default)	Indoors with LEV	No	5-25%	No	No	
65		PROC 11	professional	No		>4 hours (default)	Indoors with LEV	No	5-25%	No	No	
66		PROC 12	professional	No		>4 hours (default)	Indoors with LEV and good general ventilation	100%	5-25%	No	No	
67		PROC 13	industrial	No		>4 hours (default)	Indoors with LEV	No	5-25%	No	No	
68		PROC 14	professional	No		>4 hours (default)	Indoors with LEV	No	5-25%	No	No	
69		PROC 15	industrial	No		>4 hours (default)	Indoors with LEV	No	5-25%	No	No	
70	for debugging scenario no. 1											
71	PROC glossary (text descriptions for reference): 4 - Use in batch and other process (synthesis) where opportunity for capture arises											
72	Manual entry of indicative reference values											
73	Reference value long-term inhalation - workers											
74	Reference value long-term dermal - workers											
75	Reference value short-term inhalation - workers											
76	Reference value long-term local dermal - workers											
77	Basic of reference values:											
78	OR											
79	1.00E+01 mg.m ⁻³ (8-hour average)											
80	2.00E+01 mg.m ⁻³ (15-minute average)											
81	5.00E+00 mg.kg ⁻¹ .day ⁻¹											
82	1.00E+00 mg.kg ⁻¹ .day ⁻¹											
83	1.00E-02 uug.cm ⁻²											

Il tasso di ventilazione è uno degli input che influisce fortemente sul valore di esposizione

ECETOC TRA output per i laboratori

Long-term Inhalative Exposure Estimate (ppm for volatiles) / (mg/m3 for solids)	Long-term Inhalative Exposure Estimate (mg/m3)	Long-term Dermal Exposure Estimate (mg/kg/day)	Short-term Inhalative Exposure Estimate (mg/m3)	Local Dermal Exposure Estimate (µg/cm2)	Notes/comments on exposure estimates:
1.00E+00	4.17E+00	2.74E-01	1.67E+01	4.00E+01	
5.00E+00	2.08E+01	6.86E-02	8.33E+01	1.00E+01	
1.00E+00	4.17E+00	6.86E-03	1.67E+01	1.00E+00	LEV efficiency Inhalation [%]: 90, LEV efficiency demal [%]: 90,
4.00E+00	1.67E+01	2.74E-02	6.67E+01	4.00E+00	LEV efficiency Inhalation [%]: 80, LEV efficiency demal [%]: 80,
1.50E-04	6.25E-04	6.86E-05	2.50E-02	1.00E-02	LEV efficiency Inhalation [%]: 90, LEV efficiency demal [%]: 90,
2.50E+02	1.04E+03	4.29E+01	4.17E+03	2.00E+03	note that the TRCA predicts vapour phase exposure; exposure by aerosols is not taken into account; if aerosol formation is relevant, refer to other information or models.
2.50E+02	1.04E+03	4.29E+01	4.17E+03	2.00E+03	note that the TRCA predicts vapour phase exposure; exposure by aerosols is not taken into account; if aerosol formation is relevant, refer to other information or models.
1.75E+02	7.29E+02	4.29E+01	2.92E+03	2.00E+03	note that the TRCA predicts vapour phase exposure; exposure by aerosols is not taken into account; if aerosol formation is relevant, refer to other information or models.

Risk Characterisation Ratio - Long-term Inhalation	Risk Characterisation Ratio -Long-term Dermal	Risk Characterisation Ratio - Long-term Total Exposure	Risk Characterisation Ratio - Short-term Inhalation	Risk Characterisation Ratio - Local Dermal
4.17E-01	5.49E-02	4.72E-01	8.33E-01	4.00E-01
2.08E+00	1.37E-02	2.10E+00	4.17E+00	1.00E-01
4.17E-01	1.37E-03	4.18E-01	8.33E-01	1.00E-02
1.67E+00	5.49E-03	1.67E+00	3.33E+00	4.00E-02
6.25E-05	1.37E-05	7.62E-05	1.25E-03	1.00E-04
1.04E+02	8.57E+00	1.13E+02	2.08E+02	2.00E+01
1.04E+02	8.57E+00	1.13E+02	2.08E+02	2.00E+01
7.29E+01	8.57E+00	8.15E+01	1.46E+02	2.00E+01

In verde RCR<1 rischio accettabile

In rosa RCR>1 rischio non accettabile

ECETOC TRA dati di input per i consumatori

Human Health Assessment - Consumer												
MUTUALLY CLEAR CELLS IF YOU MADE CHANGES TO THE PC/AC, PRODUCT/ARTICLE CATEGORY, OR SUBCATEGORY												
No.	Scenario name	(Remark: if "1" = 1: with in sub-	Product / Article category	PC / AC sub-category (optional for calculating subcat outcomes)	For PC only: Is product's spray?	Amount of product used per application (g)	Product ingredient fraction by weight (value must be: 0 < [value] < 1)	Skin surface area - dermal	Skin surface area - oral	Transfer factor ingestion (unitless - value must be: 0 < [value] < 1)	Transfer factor dermal (unitless - value must be: 0 < [value] < 1)	
82	1		PCL_Adhesives_sealants	Glees, hobby use		5	0.2		1: some fingertips		0.1	
84	2		PCL_Adhesives_sealants	Glees DIY-use (carpet glue, tile glue, wood glue from spray		500	0.3	2: inside hands / one hand / palm of hands		0.2		
85	3		PCL_Adhesives_sealants	Glees from spray		1	0.4		1: some fingertips			
86	4		PCL_Adhesives_sealants	Sealants		30	0.2	2: inside hands / one hand / palm of hands		0.05		
87	5		PCS_Air_care_products			10	0.3					
88	6		PCS_Air_care_products		yes	5	0.4					
89	1		PCS_Coatings_paints_t	kinners removers	no	5000	0.2					
90	0		PCS_Coatings_paints_t	kinners removers	yes	1000	0.1					
91	3		PCS_Coatings_paints_t	kinners removers		500	0.1					
92	10	I	PCL_Adhesives_sealants	PCL new1								
93												
94												
95												
96												
97												
98												
99												
100												
101												
102												
103												
104												
105												
106												
107												
108												
109												
110												

PC glossary (R12 incl. text descriptions for referenc	PC 20 Products such as pH-regulators, flocculants, precipitants, neutralization agents
AC glossary (R12 incl. text descriptions for referenc	AC 3-2 Electrical batteries and accumulators

Manual entry of indicative reference values					
reference value inhalation - consumer	5.00E+00	ng.m ⁻³	Basis of reference value	OR	mg.kg ⁻¹ .day ⁻¹
reference value dermal - consumer	1.00E+00	ng.kg ⁻¹ .day ⁻¹	DNEL		
reference value oral - consumer	5.00E-01	ng.kg ⁻¹ .day ⁻¹	DNEL		

Practical note: Reference values for consumers entered in this section are used in the environmental assessment to compare with oral and inhalation exposure of man via the environment.

ECETOC TRA output per i consumatori

Inhalation exposure (mg.kg-1.d-1)	Dermal exposure (mg.kg-1.day-1)	Oral exposure (mg.kg-1.day-1)	Inhalation exposure (mg.m-3)
1.34E-01	0.00E+00		1.47E+00
5.53E+00	0.00E+00		4.04E+01
5.38E-01	0.00E+00		5.88E+00
1.34E+00	0.00E+00		1.47E+01
2.02E-01	1.78E+01	7.42E-01	2.21E+00

Risk Characterisation Ratio - Inhalation	Risk Characterisation Ratio - Dermal	Risk Characterisation Ratio - Oral	Risk Characterisation Ratio - Total
1.34E-02	0.00E+00		1.34E-02
5.53E-01	0.00E+00		5.53E-01
5.38E-02	0.00E+00		5.38E-02
1.34E-01	0.00E+00		1.34E-01
2.02E-02	1.78E+00	7.42E-01	1.88E+00

In verde RCR<1 rischio accettabile

In rosa RCR>1 rischio non accettabile

ECETOC TRA dati di input per l'ambiente

Life cycle stage	Annual EU Tonnage (tonnes/year)	Fraction of tonnage to region (for ERCs 1-7 and 12a,12b = 1, ERC 8-11b = 0.1)*	Use ERC or spERC as release estimation approach	ERC (mandatory in all cases as use descriptor I)	for ERC approach
					STP for ERC (default is Yes, unless for ERC 1-7 and 12a, 12b direct discharge is given)
Manufacturing	1.00E+03	1	ERC	ERC1	yes
Formulation	3.00E+02	1	ERC	ERC2	yes
Formulation	3.00E+02	1	spERC	ERC2	yes
Formulation	3.00E+02	1	spERC	ERC2	yes
Processing	3.00E+02	1	ERC	ERC4	yes
Processing	3.00E+02	0.1	spERC	ERC8a	yes
Processing	3.00E+02	0.1	spERC	ERC8c	yes

Manual entry of reference values

Microorganisms in STP

Freshwater aquatic

Freshwater sediment

Marine water

Marine sediment

Terrestrial compartment

Secondary poisoning - for TIER II only

Freshwater aquatic, intermittent release - for TIER II only

Marine water, intermittent release - for TIER II only

Man via the environment (total daily intake)

The reference values for inhalation and oral from consumer part will be used unless a worst case consumer reference value (=lower of inhalation or oral in [mg.kgBW-1.d-1]) is entered [here](#).

	1.40E+02	mg L ⁻¹
	1.12E+01	mg L ⁻¹
	2.17E+01	mg kg _{dwt} ⁻¹
	1.12E+00	mg L ⁻¹
	2.17E+00	mg kg _{dwt} ⁻¹
	5.00E+00	mg kg _{dwt} ⁻¹
		mg kg _{food} ⁻¹
		mg L ⁻¹
		mg L ⁻¹
	4.80E+01	mg kg _{BW} ⁻¹ d ⁻¹

Basis of reference value

PNEC

PNEC

PNEC

PNEC

PNEC

PNEC

PNEC

PNEC

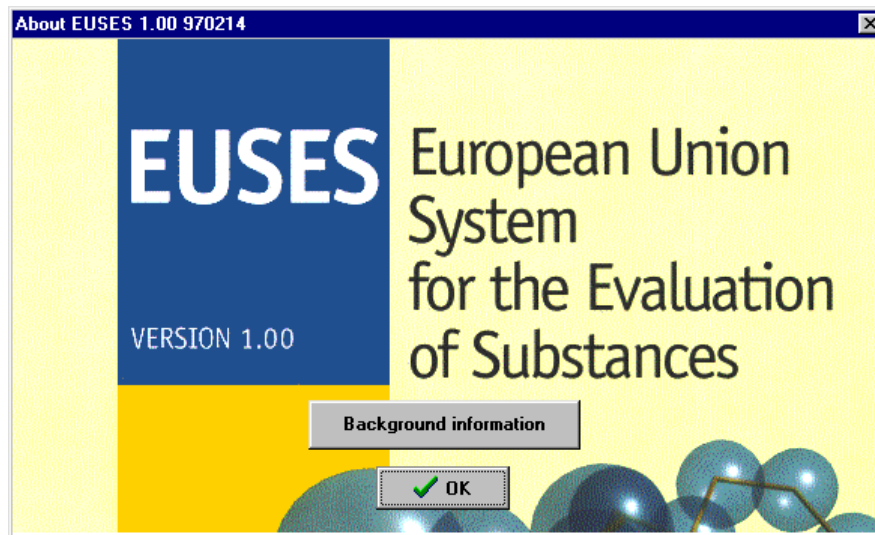
PNEC

PNEC

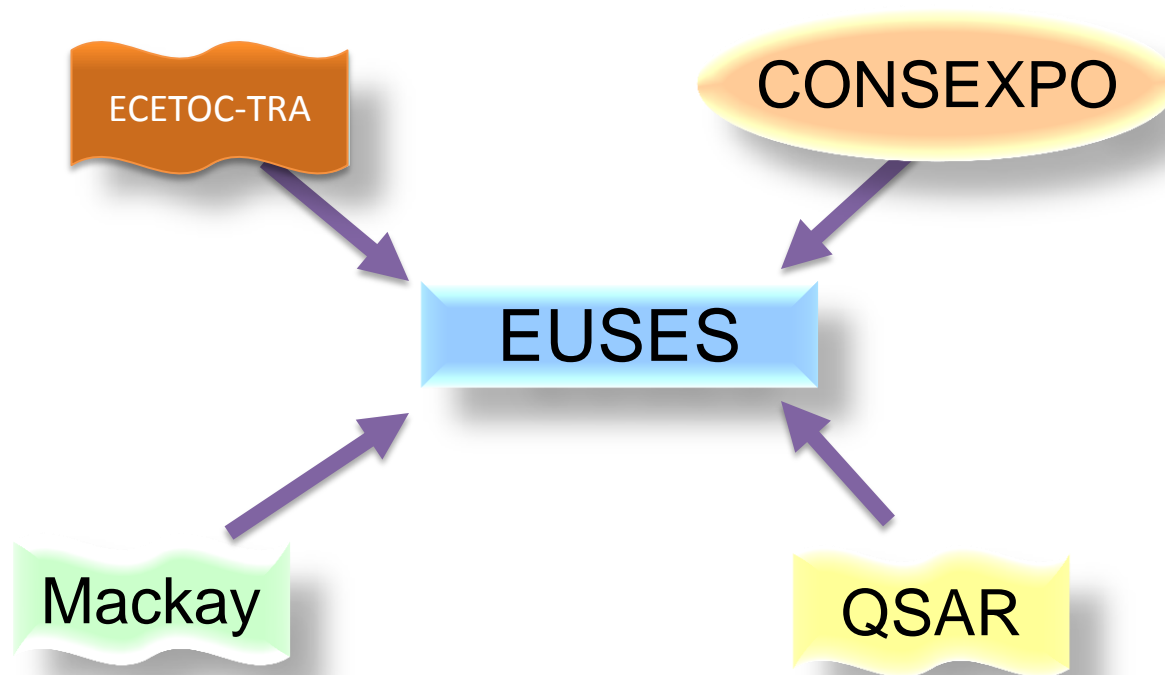
DNEL

ECETOC TRA output per l'ambiente

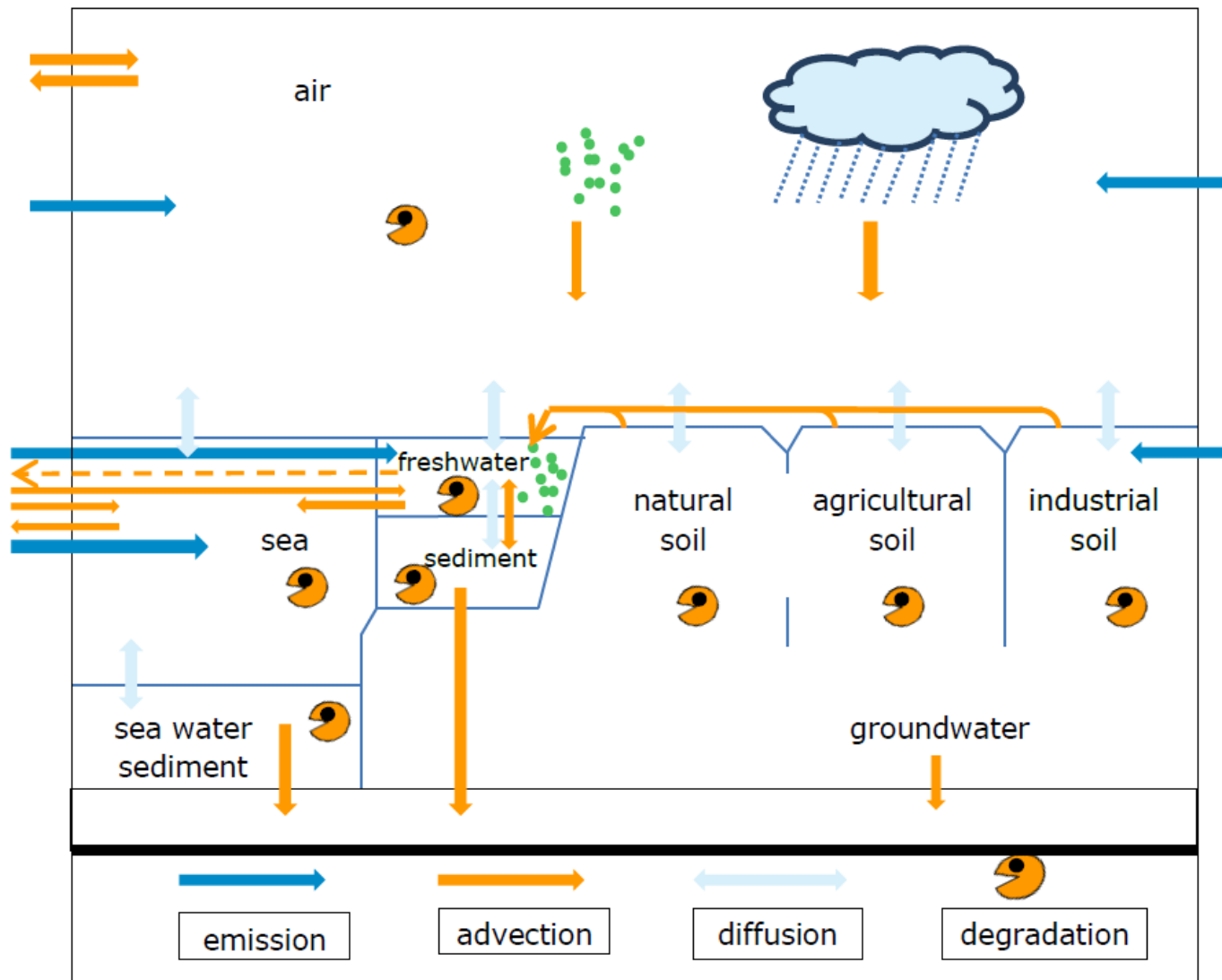
FEC in JTP (ng/L)	FEC for local freshwater (ng/L)	FEC for local freshwater sediment (ng/kg _{dw})	FEC for local zooplankton (ng/kg _{dw})	FEC for local marine water (ng/L)	FEC for local marine sediment (ng/kg _{dw})	Test daily intake man via the environment local (ng/kg _{bw} /day)	FEC in JTP	FEC for local freshwater	FEC for local freshwater sediment	FEC for local terrestrial environment	FEC for local marine water	FEC for local marine sediment	Intake in JTP (ng/day)	Intake freshwater (ng/day)	Intake freshwater sediments (ng/day)	Intake terrestrial (ng/day)	Intake marine water (ng/day)	Intake marine sediments (ng/day)	Intake humans (ng/day)
3.96E-02	1.98E-01	9.78E-01	7.85E-01	1.30E-01	6.76E-01	7.28E-01	3.77E-02	7.92E-02	4.82E-01	1.44E-01	7.35E-02	4.14E-01	5.12E-01	4.78E-01	3.05E-01	7.68E-01	1.47E-01	1.87E-01	1.28E-01
3.71E-01	1.83E-02	2.93E-01	3.87E-01	3.93E-01	1.69E-01	2.42E-01	6.81E-01	3.93E-01	1.35E-01	7.81E-01	1.35E-01	1.35E-01	1.17E-01	4.32E-01	5.32E-01	1.02E-01	4.85E-01	4.85E-01	4.85E-01
2.71E-01	1.15E-02	1.69E-01	7.41E-01	1.24E-01	1.72E-01	1.68E-01	1.42E-01	1.25E-01	3.78E-01	1.92E-01	1.24E-01	1.71E-01	1.71E-01	4.31E-01	1.41E-01	7.12E-01	1.71E-01	4.31E-01	1.71E-01
3.47E-01	1.77E-01	7.63E-01	6.33E-01	6.77E-01	7.87E-01	6.75E-01	1.71E-01	2.47E-01	3.18E-01	1.81E-01	2.47E-01	1.81E-01	1.81E-01	4.78E-01	3.18E-01	3.18E-01	4.78E-01	3.18E-01	3.18E-01
3.54E-01	1.93E-01	1.03E-01	7.88E-01	1.20E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01	1.86E-01
3.43E-01	1.47E-01	1.63E-01	1.47E-01	3.21E-01	1.33E-01	1.79E-01	3.21E-01	3.21E-01	3.21E-01	3.21E-01	3.21E-01	3.21E-01	3.21E-01	3.21E-01	3.21E-01	3.21E-01	3.21E-01	3.21E-01	3.21E-01
3.34E-01	1.89E-01	1.78E-01	1.54E-01	1.20E-01	1.98E-01	1.98E-01	1.20E-01	2.49E-01	4.84E-01	1.42E-01	2.49E-01	1.42E-01	1.42E-01	4.84E-01	4.84E-01	4.84E-01	4.84E-01	4.84E-01	4.84E-01
1.18E-01	1.97E-01	1.91E-01	1.21E-01	1.28E-01	1.94E-01	2.22E-01	8.82E-01	3.83E-01	1.18E-01	1.78E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01
2.71E-01	1.31E-01	1.67E-01	1.41E-01	1.23E-01	1.72E-01	1.44E-01	1.49E-01	1.25E-01	1.78E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01	1.80E-01
3.27E-01	1.87E-01	1.83E-01	1.88E-01	1.87E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01
3.28E-01	1.79E-01	1.91E-01	1.88E-01	1.81E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01	1.88E-01
3.18E-01	1.47E-01	1.82E-01	1.27E-01	1.43E-01	1.82E-01	1.82E-01	1.27E-01	1.27E-01	1.27E-01	1.27E-01	1.27E-01	1.27E-01	1.27E-01	1.27E-01	1.27E-01	1.27E-01	1.27E-01	1.27E-01	1.27E-01
3.33E-01	1.98E-01	1.73E-01	1.43E-01	1.39E-01	1.79E-01	1.79E-01	1.39E-01	1.39E-01	1.39E-01	1.39E-01	1.39E-01	1.39E-01	1.39E-01	1.39E-01	1.39E-01	1.39E-01	1.39E-01	1.39E-01	1.39E-01
1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.75E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01	1.83E-01
2.71E-01	1.15E-01	1.69E-01	1.81E-01	1.24E-01	1.72E-01	1.68E-01	1.42E-01	1.25E-01	3.78E-01	1.92E-01	1.24E-01	1.71E-01	1.71E-01	4.31E-01	1.41E-01	7.12E-01	1.71E-01	4.31E-01	1.71E-01



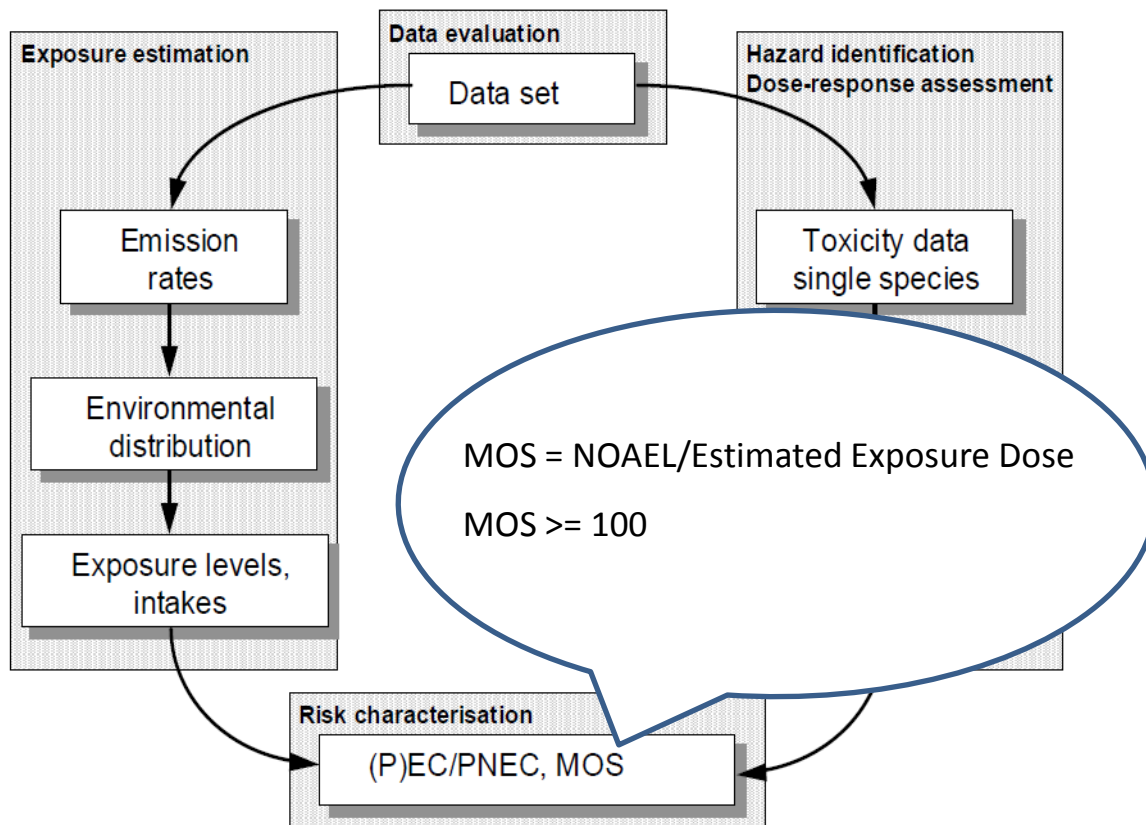
REACH AMBIENTE E SALUTE

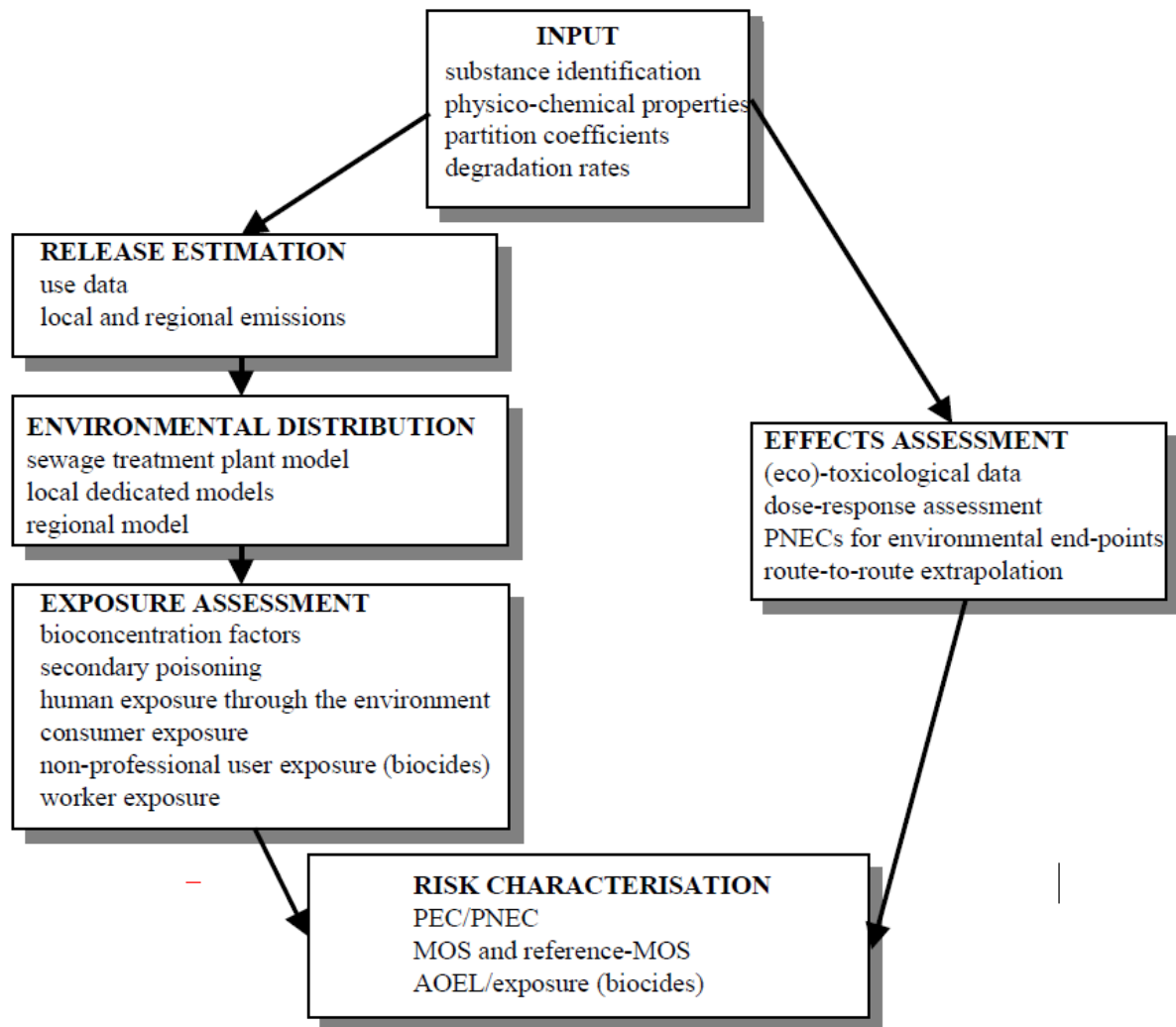


<https://ec.europa.eu/jrc/en/scientific-tool/european-union-system-evaluation-substances>

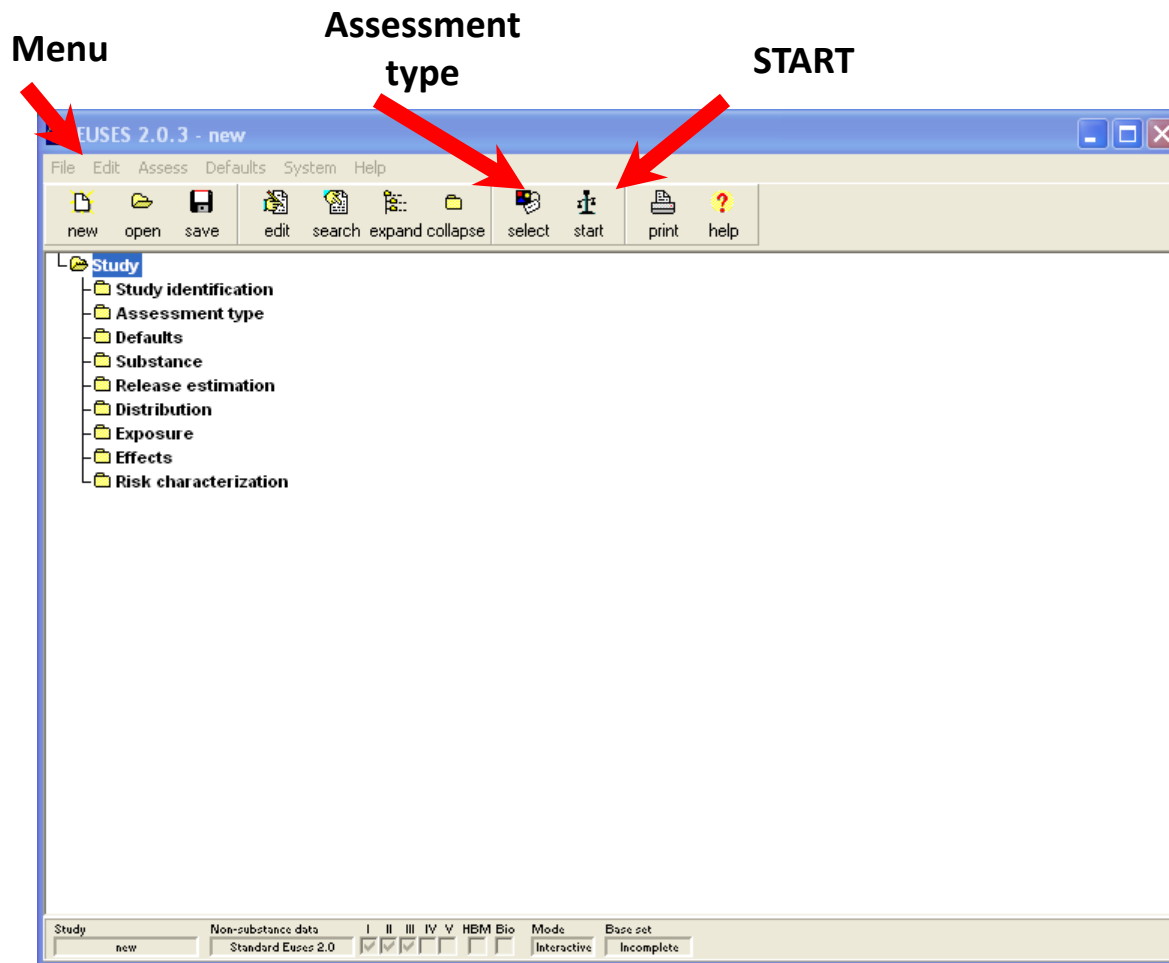


- "ambiente standard", ovvero dimensioni dei diversi comparti, caratteristiche (come la quantità di materia sospesa in acqua, la
- quantità di carbonio organico nei sedimenti ...). e destino della sostanza (ripartizione, degradazione, accumulo).

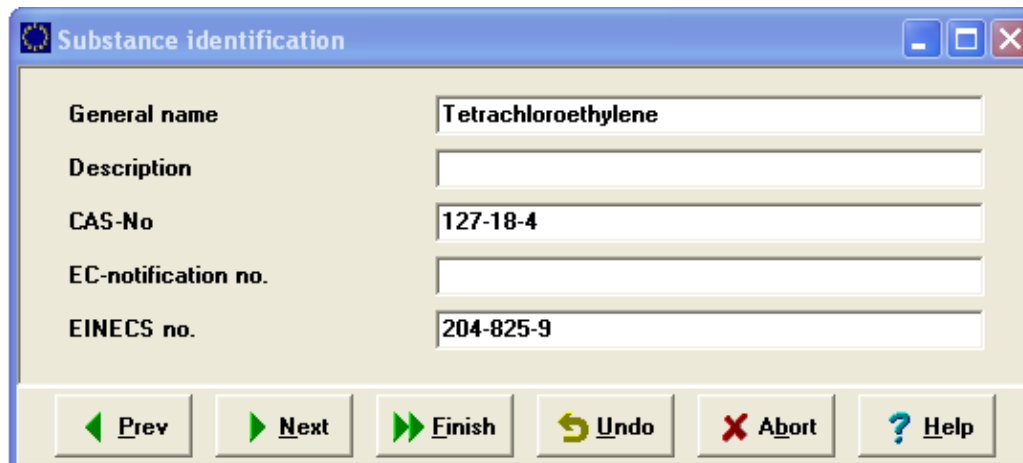




L'esposizione umana correlata al consumo di alimenti mostra variazioni apprezzabili tra i diversi paesi dell'UE ma anche all'interno dei paesi. Allo stesso modo, possono verificarsi grandi variazioni tra gli individui. Anche la distribuzione e l'intensità delle fonti locali di esposizione variano tra i paesi dell'UE. Di conseguenza, è probabile che l'esposizione indiretta vari notevolmente all'interno di una determinata popolazione. Pertanto, il modello di esposizione, avrà un'influenza notevole sul risultato della valutazione. Questa scelta del modello di esposizione sarà sempre un compromesso tra realismo e sforzo, poiché una soluzione realistica è difficile da ottenere (ciò comporterebbe un'elaborata valutazione statistica dell'approvvigionamento umano e del comportamento di mobilità, nonché della distribuzione e dell'intensità di tutte le fonti locali di esposizione).



Dati iniziali di input



The image shows a software dialog box titled "Substance identification" with a blue header bar containing a small European Union flag icon and standard window control buttons (minimize, maximize, close). The main area is a light beige form with several input fields. The fields are labeled on the left and contain text on the right. At the bottom, there is a row of six buttons: "Prev", "Next", "Finish", "Undo", "Abort", and "Help".

General name	Tetrachloroethylene
Description	
CAS-No	127-18-4
EC-notification no.	
EINECS no.	204-825-9

Navigation buttons: **Prev**, **Next**, **Finish**, **Undo**, **Abort**, **Help**

Dati iniziali di input

Physico-chemical properties

Molecular weight	165.85	[g.mol-1]	s
Melting point	-22	[oC]	s
Boiling point	121.2	[oC]	s
Vapour pressure at test temperature	??	[Pa]	u
Temperature at which vapour pressure was measured	25	[oC]	d
Vapour pressure at 25 [oC]	1.9	[kPa]	s
Water solubility at test temperature	??	[mg.l-1]	u
Temperature at which solubility was measured	25	[oC]	d
Water solubility at 25 [oC]	149	[mg.l-1]	s
Octanol-water partition coefficient	2.53	[log10]	s

For advised range, consult the help screen

◀ Prev ▶ Next ▶▶ Finish ↶ Undo ✖ Abort ? Help

Uso della sostanza

15/0 Others	▼
55/0 Others	▼
31 Impregnation agents	▲
32 Insulating materials	
33 Intermediates	
34 Laboratory chemicals	
35 Lubricants and additives	
36 Odour agents	
37 Oxidizing agents	
38 Plant protection products, agricultural	
39 Biocides, non-agricultural	
40 PH-regulating agents	
41 Pharmaceuticals	
42 Photochemicals	
43 Process regulators	
44 Reducing agents	
45 Reprographic agents	
46 Semiconductors	▼
III Non-dispersive use	▼

Uso della sostanza

Emission input data

Usage/production title

Use pattern | Tonnages

Industry category: 13 Textile processing industry s

Use category: 48 Solvents s

Extra details on use category: No extra details necessary d

Extra details on use category: No extra details necessary d

Production

Formulation

Industrial use

Private use

Service life

Waste treatment

Industrial Use

Use specific emission scenario

Emission tables: A3.14 (specific uses), B3.12 (general table)

Emission scenario: no special scenario selected/available

Main category industrial use: III Non-dispersive use d

Scenario choice for biocides: No extra details necessary d

Additional scenario information: No extra details necessary d

OK Cancel Help

Calcolo delle emissioni locali

Usage	Step	Emis. Air	Emis. Water	Show	Intermittent
1 "" (13/48)	3 Indus	421.201 [kg.d-1]	2.106E+03 [kg.d-1]	Yes	No

Se le *Industry category* e *Use category* non sono disponibile il valore emissione dovrà essere inserito manualmente attingendo dalle *Environmental Release Category* (ERC)

ERC

Environmental Release Category

Sono concepite per definire le caratteristiche di un uso sulla base di diversi aspetti di interesse dal punto di vista ambientale:

1. La fase del ciclo di vita durante la quale si svolge l'uso.
2. Il destino tecnico (la destinazione) della sostanza risultante dall'uso.
3. L'uso in ambienti interni o esterni di una sostanza indica se può essere preso in considerazione il rilascio diretto in acque superficiali o suoli non industriali. Per gli articoli, segnala anche la possibilità di un incremento del rilascio dalla matrice dell'articolo in virtù delle condizioni atmosferiche.
4. Indicazione se gli articoli sono usati in condizioni che favoriscono il rilascio (come l'abrasione nei pneumatici o nelle pastiglie dei freni) o se il rilascio di sostanze è intenzionale (ad esempio, negli articoli profumati).

Codice	Denominazione
LCS: fabbricazione	
ERC1	Fabbricazione della sostanza
LCS: formulazione o reimballaggio	
ERC2	Formulazione di miscela
ERC3	Formulazione in matrice solida
LCS: uso presso siti industriali	
ERC4	Uso industriale di coadiuvanti tecnologici non reattivi (senza inclusione all'interno o sulla superficie dell'articolo)
ERC6b	Uso industriale di coadiuvanti tecnologici reattivi (senza inclusione all'interno o sulla superficie dell'articolo)
ERC6a	Uso di sostanze intermedie
ERC6c	Uso industriale di monomeri in processi di polimerizzazione (con o senza inclusione all'interno o sulla superficie dell'articolo)
ERC6d	Uso industriale di regolatori dei processi di reazione nella polimerizzazione (con o senza inclusione all'interno o sulla superficie di un articolo)
ERC5	Uso industriale con conseguente inclusione all'interno o sulla superficie di un articolo
ERC7	Uso industriale di fluidi funzionali
LCS: Uso generalizzato da parte di operatori professionali e LCS: uso al consumo	
ERC8a	Uso generalizzato di coadiuvanti tecnologici non reattivi (senza all'interno o sulla superficie di un articolo, uso in interni)
ERC8d	Uso generalizzato di coadiuvanti tecnologici non reattivi (senza inclusione all'interno o sulla superficie di un articolo, uso in esterni)
ERC8b	Uso generalizzato di coadiuvanti tecnologici reattivi (senza inclusione all'interno o sulla superficie di un articolo, uso in interni)
ERC8e	Uso generalizzato di coadiuvanti tecnologici reattivi (senza inclusione all'interno o sulla superficie di un articolo, uso in esterni)
ERC8c	Uso generalizzato con conseguente inclusione all'interno o sulla superficie di un articolo (uso in interni)
ERC8f	Uso generalizzato con conseguente inclusione all'interno o sulla superficie di un articolo (uso in esterni)
ERC9a	Uso generalizzato di fluidi funzionali (uso in interni)
ERC9b	Uso generalizzato di fluidi funzionali (in esterni)
LCS: durata d'uso	
ERC10a	Uso generalizzato di articoli a basso rilascio (uso in esterni)
ERC11a	Uso generalizzato di articoli a basso rilascio (uso in interni)
ERC10b	Uso generalizzato di articoli a rilascio elevato o intenzionale (uso in esterni)
ERC11b	Uso generalizzato di articoli a rilascio elevato o intenzionale (uso in interni)
ERC12a	Lavorazione di articoli presso siti industriali a basso rilascio
ERC12b	Lavorazione di articoli presso siti industriali a rilascio elevato
ERC12c	Uso di articoli presso siti industriali a basso rilascio

SpERC

Specific Environmental Release Category

Essi corrispondono ad insiemi di informazioni che descrivono le condizioni specifiche di uso e le corrispondenti stime di rilascio (per acqua, aria, suolo e rifiuti). Essi sono stati sviluppati da gruppi del settore dell'industria chimica e da loro industrie clienti poste a valle, al fine di affinare le stime delle emissioni ottenute in base alle categorie di rilascio nell'ambiente (ERC) fattori di rilascio.

- Sviluppate da associazioni di categoria
- Raffinamento dei fattori di rilascio di default (vs ERCs)
- Utilizzabili da registranti per la loro CSA
- Generici a sufficienza da coprire un ampio spettro di usi da parte di DUs
- Contengono: **descrizione uso** (inc. processo), **campo applicabilità**, **OC/RMM che determinano i rilasci ambientali**, **fattori di rilascio** (origine/giustificazione), **quantità utilizzate**.

Calcolo dei coefficienti di ripartizione

Partition coefficients and bioconcentration factors

Solids-water | Air-water | Bioconcentration factors | Biota-water

Chemical class for Koc-QSAR: Non-hydrophobics (default QSAR) [d]

Organic carbon-water partition coefficient	141.147	[l.kg-1]	[s]
Solids-water partition coefficient in soil	2.82	[l.kg-1]	[o]
Solids-water partition coefficient in sediment	7.06	[l.kg-1]	[o]
Solids-water partition coefficient suspended matter	14.1	[l.kg-1]	[o]
Solids-water partition coefficient in raw sewage sludge	42.3	[l.kg-1]	[o]
Solids-water partition coefficient in settled sewage sludge	42.3	[l.kg-1]	[o]
Solids-water partition coefficient in activated sewage sludge	52.2	[l.kg-1]	[o]
Solids-water partition coefficient in effluent sewage sludge	52.2	[l.kg-1]	[o]
Soil-water partition coefficient	4.61	[m3.m-3]	[o]
Suspended matter-water partition coefficient	4.43	[m3.m-3]	[o]
Sediment-water partition coefficient	4.33	[m3.m-3]	[o]

◀ Prev ▶ Next ▶▶ Finish ↶ Undo ✖ Abort ? Help

Concentrazioni locali nei vari comparti

Local PECs [1 "", IC=13/UC=48] [Industrial use]

Annual average local PEC in air (total)	0.446	[mg.m-3]	<input type="radio"/>
Local PEC in surface water during emission episode (dissolved)	6.99	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
Qualitative assessment might be needed (TGD Part II, 5.6)		No	<input type="radio"/>
Annual average local PEC in surface water (dissolved)	5.76	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
Local PEC in fresh-water sediment during emission episode	26.9	[mg.kgwwt-1]	<input type="radio"/>
Local PEC in sea water during emission episode (dissolved)	10.5	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
Qualitative assessment might be needed (TGD Part II, 5.6)		No	<input type="radio"/>
Annual average local PEC in sea water (dissolved)	8.66	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
Local PEC in marine sediment during emission episode	40.6	[mg.kgwwt-1]	<input type="radio"/>
Local PEC in agric. soil (total) averaged over 30 days	3.54	[mg.kgwwt-1]	<input type="radio"/>
Local PEC in agric. soil (total) averaged over 180 days	0.593	[mg.kgwwt-1]	<input type="radio"/>
Local PEC in grassland (total) averaged over 180 days	0.122	[mg.kgwwt-1]	<input type="radio"/>
Local PEC in pore water of agricultural soil	0.219	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
Local PEC in pore water of grassland	0.0451	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
Local PEC in groundwater under agricultural soil	0.219	[mg.l-1]	<input type="radio"/>



I valori di esposizione per l'uomo vengono calcolati a partire da . . .

Local exposure - daily human doses [1 "", IC=13/UC=48] [Industrial use]

	Dose		Fraction
Daily dose through intake of drinking water	0.0822	[mg.kg-1.d-1] o	0.171
Daily dose through intake of fish	0.267	[mg.kg-1.d-1] o	0.553
Daily dose through intake of leaf crops	4.23E-05	[mg.kg-1.d-1] o	8.77E-05
Daily dose through intake of root crops	5.45E-03	[mg.kg-1.d-1] o	0.0113
Daily dose through intake of meat	7.79E-06	[mg.kg-1.d-1] o	1.62E-05
Daily dose through intake of milk	1.36E-05	[mg.kg-1.d-1] o	2.81E-05
Daily dose through intake of air	0.128	[mg.kg-1.d-1] o	0.265
Local total daily intake for humans	0.482	[mg.kg-1.d-1] o	

◀ Prev ▶ Next ▶▶ Finish ↶ Undo ✖ Abort ? Help

....valori di concentrazione negli alimenti

Local concentrations in human intake media [1 "", IC=13/JC=48] [Indust...]

Fish, plants | Milk, meat

Local concentration in wet fish	162	[mg.kg-1]	o
Local concentration in root tissue of plant	0.994	[mg.kg-1]	o
Local concentration in leaves of plant	2.47E-03	[mg.kg-1]	o
Local concentration in grass (wet weight)	2.46E-03	[mg.kg-1]	o
Fraction of total uptake by crops from pore water	7.05E-04	[-]	o
Fraction of total uptake by crops from air	0.999	[-]	o
Fraction of total uptake by grass from pore water	1.45E-04	[-]	o
Fraction of total uptake by grass from air	1	[-]	o
Local concentration in drinking water	2.88	[mg.l-1]	o
Annual average local PEC in air (total)	0.446	[mg.m-3]	o

◀ Prev ▶ Next ▶▶ Finish ↶ Undo ✖ Abort ? Help

I dati ecotossicologici . . .

Aquatic effects input

Fresh water | Marine | Fresh water sediment | Marine sediment

L(E)C50 short-term tests

LC50 for fish	5	[mg.l-1]	s
L(E)C50 for Daphnia	8.5	[mg.l-1]	s
EC50 for algae	3.64	[mg.l-1]	s
LC50 for additional taxonomic group	??	[mg.l-1]	u
Aquatic species	other		

NOEC long-term tests

NOEC for fish	1.99	[mg.l-1]	s
NOEC for Daphnia	0.51	[mg.l-1]	s
NOEC for algae	16	[mg.l-1]	s
NOEC for additional taxonomic group	??	[mg.l-1]	u
NOEC for additional taxonomic group	??	[mg.l-1]	u
NOEC for additional taxonomic group	??	[mg.l-1]	u
NOEC for additional taxonomic group	??	[mg.l-1]	u

◀ Prev ▶ Next ▶▶ Finish ↶ Undo ✖ Abort ? Help

. . . con l'uso degli appropriati "Assessment Factors . . .



Environmental PNECs

Fresh water | Marine | Fresh water sediment | Marine sediment | Terrestrial | Secondary poisoning | STP

Same taxonomic group for LC50 and NOEC		Yes	<input type="radio"/>
Toxicological data used for extrapolation to PNEC Aqua	0.51	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
Assessment factor applied in extrapolation to PNEC Aqua	10	[-]	<input type="radio"/>
PNEC for aquatic organisms	0.051	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
Intermittent releases			
Toxicological data used for extrapolation to PNEC Aqua	3.64	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
Assessment factor applied in extrapolation to PNEC Aqua	100	[-]	<input type="radio"/>
PNEC for aquatic organisms, intermittent releases	0.0364	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
Statistical			
PNEC for aquatic organisms with statistical method	??	[mg.l-1]	<input type="checkbox"/>

◀ Prev ▶ Next ▶▶ Finish ↶ Undo ✖ Abort ? Help



... permettono di calcolare le PNECs

PNEC Category	Value	Unit	Radio
PNEC for aquatic organisms	0.051	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
PNEC for aquatic organisms, intermittent releases	0.0364	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
PNEC for micro-organisms in a STP	10	[mg.l-1]	<input type="radio"/>
PNEC for secondary poisoning of birds and mammals	10	[mg.kg-1]	<input type="radio"/>
PNEC for aquatic organisms with statistical method	??	[mg.l-1]	<input type="radio"/>

Navigation buttons:

... ed effettuare la caratterizzazione del rischio (PEC/PNEC) per l'ambiente e per la popolazione esposta indirettamente attraverso l'ambiente



Risk characterization result table for the environment

Usage/step	Report	Fr. water	IM	Marine	Fr. sed.	*10	Mar. sed.	*10	Soil	*10	STP	Fish	Mar. fish	Mar. top	Worm
1 "", Indus	Yes	137		2.07E+03	137		2.07E+03		25.6		69.4	??	??	??	??
Regional	Yes	1.07		0.908	1.13		0.912		0.033						

I dati tossicologici confrontati con i valori di esposizione umana permettono la caratterizzazione del rischio per i lavoratori e i consumatori

Mammalian effects input

Acute **(Sub)chronic**

Oral NOAEL	<input type="text" value="100"/>	[mg.kg-1.d-1]	<input type="button" value="s"/>
Oral LOAEL	<input type="text" value="??"/>	[mg.kg-1.d-1]	<input type="button" value="o"/>
Inhalatory NOAEL	<input type="text" value="75"/>	[mg.m-3]	<input type="button" value="s"/>
Inhalatory LOAEL	<input type="text" value="??"/>	[mg.m-3]	<input type="button" value="o"/>
Dermal NOAEL	<input type="text" value="100"/>	[mg.kg-1.d-1]	<input type="button" value="o"/>
Dermal LOAEL	<input type="text" value="??"/>	[mg.kg-1.d-1]	<input type="button" value="o"/>
NOEC via food	<input type="text" value="1E+03"/>	[mg.kg-1]	<input type="button" value="o"/>
LOEC via food	<input type="text" value="??"/>	[mg.kg-1]	<input type="button" value="d"/>
Duration of (sub-)chronic oral test	<input type="text" value="28 days"/>		<input type="button" value="d"/>
Species for conversion of NOAEL to NOEC	<input type="text" value="Rattus norvegicus (<6 weeks)"/>		<input type="button" value="s"/>
Conversion factor NOAEL to NOEC	<input type="text" value="10"/>	[kg.d.kg-1]	<input type="button" value="o"/>
Fibres			
Inhalatory (fibre) NOAEL	<input type="text" value="??"/>	[fibres.m-3]	<input type="button" value="d"/>
Inhalatory (fibre) LOAEL	<input type="text" value="??"/>	[fibres.m-3]	<input type="button" value="d"/>

Esercizio EUSES

BLUEDYE RISK ASSESSMENT: ENVIRONMENT

In EU the substance is used as colouring agent (UC 10) in textile industry (IC 13). The total production of the substance occurs in Switzerland and about 15 tonnes/y are imported in EU. The risk assessment takes into account the use of the substance as colouring agent (processing) as formulation and production occur in an extra-UE country. The PEC values are calculated on the basis of the upper limit of 100 tonnes/y. The substance is widely used so the regional tonnage is 10% of the total tonnage i.e. 10 tonnes/y. The substance is used in dyeing of synthetic nylon fibres and wool. The emission factor for release in water is calculated with the equation of the emission scenario document IC13 of the Guidance on information requirements and Chemical Safety Assessment Chapter R.16: Environmental exposure assessment Version 3.0 February 2016.

Physico-chemical properties

log_Kow	0.65	log(10)
MW	456	g/mol
S	2010	mg/l
MP	>400	°C
BP	>400	°C
VP	1×10^{-6}	Pa

Local emissions

Q_{product} is the mass of fabric processed per day = 12.8 t/day [Table 13 of the emission scenario (IC 13) Companies total (generic)]

F_{dye} is the fraction of fabric dyed with one dyestuff per day = 0.3

Q_{dye} is the mass of dyestuff-preparation used per mass of fabric = 13 kg/t (information by the notifier)

C_{dye} is the content of Bluedye in the preparation = 0.147 (information by the notifier)

F_{fixation} is the degree of fixation = 98% (according to the notifier)

Biodegradation

In a modified Zahn-Wellens test the substance has shown to be inherently biodegradable (83% of elimination rate within 28 days) and a rate constant for biodegradation in STP of 0.1 hr^{-1} must be used.

Partition coefficients

The Koc value is calculated using the QSAR for non-hydrophobic substances (TGD, 2003):

$$\log K_{oc} = 0.52 \log K_{ow} + 1.02$$

Effects assessment

Microorganisms in STP

The influence of BLUEDYE on the respiration rate of activated sludge is null at the lowest dose 3.2 mg/l (NOEC); the EC₅₀ value was determined to be 80.5 mg/l.

Aquatic organisms

Daphnia magna

The 48h-EC₅₀ was calculated to be nominally 4.99 mg/l with 95% confidence interval ranging from 4.13 to 5.95 mg/l.

The NOEC after 21 days was 0.602 mg/l

Fish

The LC₅₀ at 96 hr in *Brachydanio rerio* was 4.09 mg/l

The NOEC after 21 days was 0.019 mg/l

Algae

After 72h the effect concentration on biomass (EbC₅₀) was 2.4 mg/l and on growth (ErC₅₀) was 9.1.

The NOEC for both effects was reported to be 0.9 mg/l

PNEC calculation

PNECmicroorganisms-stp

$$\text{NOEC} = 3.2 \text{ mg/l}$$

$$\text{AF} = 10$$

$$\text{PNEC}_{\text{STP}} = 0.32 \text{ mg/l}$$

PNECwater

$$\text{NOEC algae} = 0.019 \text{ mg/l.}$$

$$\text{AF} = 10.$$

$$\text{PNEC}_{\text{water}} = 0.0019 \text{ mg/l.}$$

PNECsediment (EPM)

$$\text{PNEC}_{\text{sediment}} = K_{\text{susp-water}} / \text{RHO}_{\text{susp}} * \text{PNEC}_{\text{water}} * 1000 = 2.43 \times 10^{-3} \text{ mg/kgwwt}$$

ConsExpo

E' indirizzato alla valutazione dell'esposizione dei consumatori nei vari comparti. Come grado di approfondimento è collocato oltre il Tier1 poiché possiede numerosi parametri di input, inoltre questi possono essere gestiti in modo molto flessibile.

ConsExpo presenta 4 database dei prodotti: Pulizia e lavaggio, Prodotti Antiparassitari, Cosmetici, Disinfettanti. All'interno dei 4 database si possono selezionare complessivamente 35 categorie di prodotto e al loro interno è possibile selezionare 117 prodotti finiti.

Se l'utente non dispone delle informazioni richieste allora il modello ConsExpo mette a disposizione valori di default.

Per la parte Inalatoria si possono selezionare vari modi di rilascio della sostanza: istantaneo, velocità costante, evaporazione.

Per la parte dermica si possono selezionare vari modi di rilascio della sostanza: istantaneo, velocità costante, sfregamento, migrazione, diffusione.

Maggiore è la richiesta di parametri di input maggiore sarà il grado di raffinamento della elaborazione, viceversa ad una maggiore semplicità di uso corrisponde un maggior livello di conservatività.

Esercizio CONSEXPO

STIMA DELL'ESPOSIZIONE E VALUTAZIONE DEL RISCHIO ASSOCIATI ALL'UTILIZZO DEL PRODOTTO ZANZAKILLER PIASTRINE.

Stima dell'esposizione

Il prodotto in esame è costituito da una piastrina insetticida contenente 40 mg di d-zanzarina (Zanzarin Forte). Tale sostanza viene rilasciata mediante un'apposita piastra riscaldante.

Nelle istruzioni d'uso è riportato che un fornello è sufficiente per una stanza di 20 m³.

Ai fini di una valutazione conservativa si assume l'esposizione alla sostanza durante il periodo di 12 ore di emissione. Si considera un tasso di ventilazione nella stanza (numero di ricambi di aria per ora) pari a 0,5 1/h.

MW	302 g/mol
Vp	1,65 x 10 ⁻⁴ Pa
logKow	4,95

Considerazioni tossicologiche

In uno studio a 90 giorni su ratti esposti alla sostanza in esame per via inalatoria, è stato derivato un NOEC di 50 mg/m³ (WHO Specifications and Evaluations for Public Health Pesticides - d-ZANZARINA, 2002).

Considerando un fattore di incertezza di 2.5 per le differenze interspecifiche e un fattore di 10 per le differenze intraspecifiche si ricava un DNEL (Derived No Effect Level).

DNEL = ???

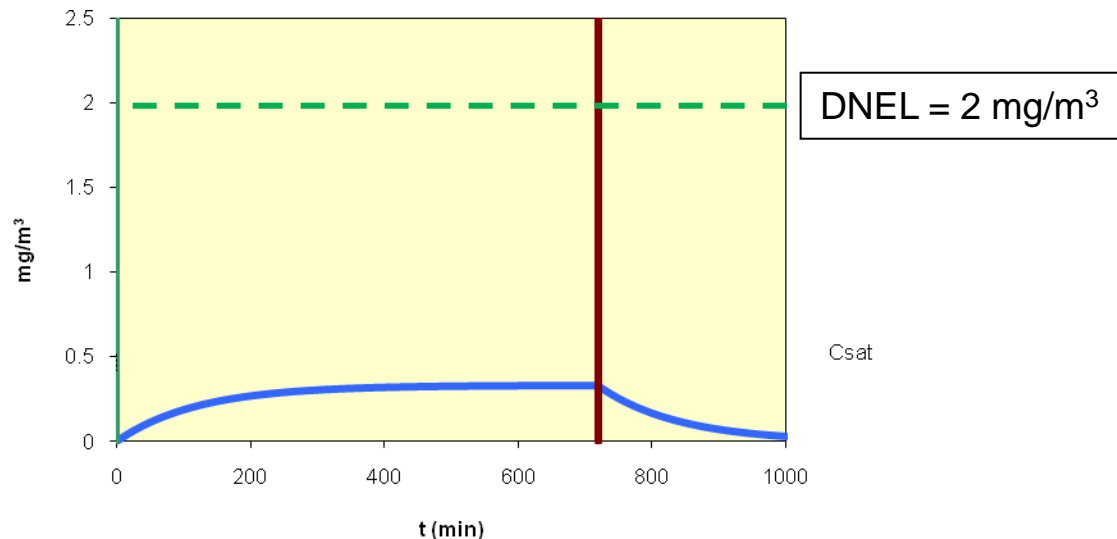
$$\text{DNEL} = \text{NOEC}/\text{Af}_{\text{intra}} \times \text{Af}_{\text{inter}} = 50/2.5 \times 10 = 2 \text{ mg/m}^3$$

Non si ritiene necessario considerare ulteriori fattori di incertezza legati alle differenze di durata tra l'esposizione delle specie testate e la potenziale durata dell'esposizione umana poiché lo studio può essere considerato rappresentativo di un'esposizione sub cronica.

Conclusioni

Per la stima del rischio sono state considerate condizioni piuttosto conservative, ovvero il periodo di esposizione è stato considerato contemporaneo al periodo di rilascio.

La concentrazione in aria calcolata con il modello sopra descritto è costantemente inferiore al DNEL derivato dallo studio tossicologico.



Grazie per l'attenzione!