

Banca dati ISPEL-ISS relativa alle proprietà chimico/fisiche e tossicologiche delle specie chimiche inquinanti

Eleonora Beccaloni
Istituto Superiore di Sanità (ISS)



ROME
REASONABLE MAXIMUM EXPOSURE

Dicembre 2002

Versione 2.1



Versione 3.0
Aprile 2003



RISC₄

July, 2001



Designed to Meet the Requirements of
ASTM PS-104: *Standard Provisional Guide
for Risk-Based Corrective Action*

Regulation No.: _____
Issued by: _____

Version 1.3a

© 2000. All Rights Reserved.
2211 Norfolk St., Suite 1000
Houston, Texas 77095-4044
713.622.5414
<http://www.gsi-net.com>


GROUNDWATER
SERVICES, INC.



118 sostanze di cui 90 della 152



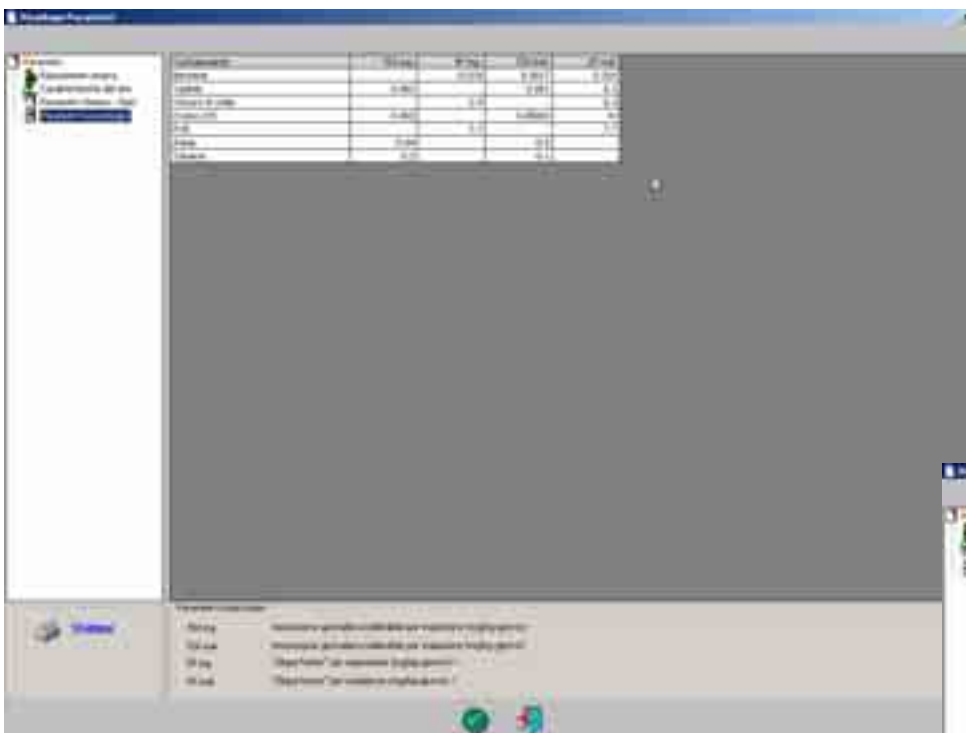
160 sostanze di cui 87 della 152



87 sostanze di cui 42 della 152

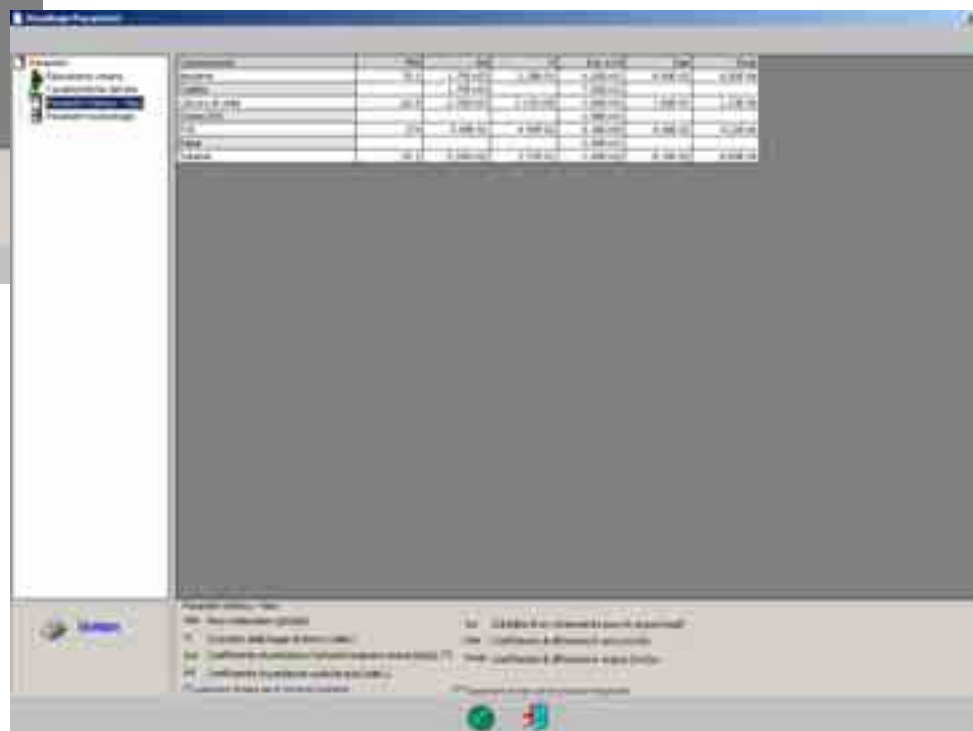


118 sostanze di cui 58 della 152



Substanz	Concentrazione	Concentrazione	Concentrazione	Concentrazione
...
...
...
...
...
...
...
...
...

118 sostanze
di cui 90
della 152/06



Substanz	Concentrazione	Concentrazione	Concentrazione	Concentrazione
...
...
...
...
...
...
...
...
...
...

R O M E
ROME
REASONABLE MAXIMUM EXPOSURE
Dicembre 2002 Versione 2.1

160 sostanze
di cui 87 della 152/06

Stampa | Esporta Excel

Parametri chimici - lista

Contaminante	Inf	II	Inf/II	Inf/II	Inf/II	Valf (mg/g)	Inf (mg/g)	II (mg/g)
Cromo (VI)	0	0.00E+00	1.90E+01	0	1.70E+01	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Mercurio	0	0.00E+00	5.20E+01	0	2.50E+02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Nichel	0	0.00E+00	6.50E+01	0	1.00E+02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Piombo	0	0.00E+00	9.95E+01	0	5.00E+02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Rame	0	0.00E+00	1.00E+04	0	1.00E+02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Selenio	0	0.00E+00	2.73E+00	0	9.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Stagno	0	0.00E+00	1.00E+01	0	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Talio	0	0.00E+00	5.99E+04	0	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Vanadio	0	0.00E+00	1.00E+02	0	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Zinco	0	0.00E+00	1.64E+01	0	1.00E+02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Cianuri liberi	27	1.11E-06	9.90E+00	0	7.50E-02	3.08E-02	5.21E-01	2.28E-05
Argento	0	0.00E+00	8.35E+00	0	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Ferro	0	0.00E+00	1.65E+02	0	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Manganese	0	0.00E+00	5.00E+01	0	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Bismuto	78.1	2.25E-01	8.20E+01	2.13	1.78E+03	9.53E+01	9.00E-02	9.90E-06
Etilbenzene	106.2	3.59E-01	2.04E+02	3.13	1.53E+02	9.53E+01	1.60E-01	1.60E-04
Stirene	104.1	5.78E-02	5.13E+02	3.05	3.00E+02	6.00E+01	1.00E-01	1.00E-04
Toluene	92.1	2.79E-01	1.40E+02	2.83	5.55E+02	2.05E+01	1.00E-01	1.00E-04
Xilene	106.2	2.95E-01	1.96E+02	3.2	1.80E+02	8.25E+01	1.00E-01	1.00E-04
para-Diene	106.2	2.95E-01	1.96E+02	3.2	1.80E+02	8.25E+01	1.00E-01	1.00E-04
Benzodibenzene	236.3	2.39E-04	2.00E+05	5.91	1.10E+02	4.55E+01	1.00E-01	1.00E-04
Benzofluorantene	252.3	1.88E-05	1.03E+06	6.04	3.00E+03	1.60E+01	1.00E-01	1.00E-04
Benzopirene	252.3	1.00E-04	1.23E+06	5.9	1.50E+03	1.50E+01	1.00E-01	1.00E-04
Benzofluorantene	252.3	6.47E-06	1.23E+06	6	8.00E+04	3.09E+01	1.00E-01	1.00E-04
Benzofluorantene	268.36	1.03E-05	1.03E+07	5.5	2.60E+04	1.69E+01	1.00E-01	1.00E-04
Cisone	230.3	1.82E-04	1.86E+06	1.85	1.50E+03	8.03E+01	1.00E-01	1.00E-04
Dibenzofluorantene	278.4	3.88E-06	1.66E+06	6.75	2.49E+03	8.87E+01	1.00E-01	1.00E-04

Stampa | Esporta Excel

Parametri tossicologici

Contaminante	TCF (mg/kg/g/giorno)	VF (mg/kg/g/giorno)	TDI (mg/kg/g/giorno)	MF (mg/kg/g/giorno)
Antimonio	0.0004	0	0	0
Arsenico	0.0003	1.5	0	50
Berillio	0.002	4.2	0.0000057	8.4
Cadmio	0.0005	0	0.000057	8.4
Cobalto	0.00	0	0	0
Cromo totale	1.9	0	0	0
Cromo (VI)	0.000	0	0.0000296	41
Mercurio	0.0003	0	0.000006	0
Nichel	0.02	0	0	0
Piombo	0.0025	0	0	0
Rame	0.04	0	0	0
Selenio	0.006	0	0	0
Stagno	0.6	0	0	0
Talio	0.00006	0	0	0
Vanadio	0.002	0	0	0
Zinco	0.2	0	0	0
Cianuri liberi	0.02	0	0	0
Argento	0.005	0	0.005	0
Ferro	0.3	0	0	0
Manganese	0.02	0	0.000143	0
Bismuto	0	0.055	0	0.0273
Etilbenzene	0.1	0	0.29	0.0029
Stirene	0.2	0	0.296	0
Toluene	0.2	0	0.114	0
Xilene	2	0	2	0
para-Diene	2	0	2	0
Benzodibenzene	0	0.73	0	0.21



87 sostanze
di cui 42 della 152/06

RISC

File Information

Description:

Save Date:

Choose Chemical:

Chemical:	Benzene	1st Title Line:	Benzene	2nd:	-
Chemical Parameters	Value	Toxicity Parameters	Value		
CAS Number	71 43 2	EPA Carcinogenic Classification	A		
Molecular Weight [g/mole]	70	Ingestion Slope Factor [1/(mg/kg-day)]	2.9E-02		
Density [g/cm ³]	0.88	Inhalation Slope Factor [1/(mg/kg-day)]	2.7E-02		
Vapor Pressure [mmHg]	9.5E+01	Dermal Slope Factor [1/(mg/kg-day)]	2.9E-02		
Solubility [mg/l]	1.75E+03	Oral Reference Dose [mg/kg-day]	ND		
Henrys Law [(mg/l)/(mg/l)]	2.28E-01	Inhalation Reference Dose [mg/kg-day]	ND		
log Kow	2.1E+00	Dermal Reference Dose [mg/kg-day]	ND		
Koc [cm ³ /g]	5.9E+01	Oral-Soil Abs. Adjust. Factor [-]	1		
Kd [(mg/L)/(mg/kg)]	ND	Oral-Water Abs. Adjust. Factor [-]	1		
Diffusion in Air [cm ² /s]	8.8E-02	Dermal-Soil Abs. Adjust. Factor [-]	0.1		
Diffusion in Water [cm ² /s]	9.8E-06	Dermal-Water Abs. Adjust. Factor [-]	1		
Vegetable Uptake Factor [-]	Use Kow	Inhalation Abs. Adjust. Factor [-]	1		
Degradation (high-end) [1/d]	7.0E-02	Skin Permeability Coefficient [cm/hr]	2.1E-02		
Degradation (low-end) [1/d]	9.6E-04	MCL (Maximum Contaminant Level) [mg/l]	5.0E-03		



RISC₄

July, 2001

118 sostanze
di cui 58 della 152/06



RBCA Tool Kit for Chemicals Database

User-Specified Custom Chemical Database

Chemical Name Benzene New Select
CAS No. 71-43-2 **Type** A

Physical Properties	Value	Reference
Molecular weight (g/mol)	78.1	PS
Solubility @ 20-25°C (mg/L)	1750	PS
Vapor pressure @ 20-25°C (mmHg)	95.2	PS
Henry's Law constant @ 20°C <input type="radio"/> (atm-m ³ /mol) <input checked="" type="radio"/> unless (-)	0.2288863	PS
Ionization/dissociation constants (pH units): acid pKa <input type="text" value="-"/> base pKb <input type="text" value="-"/>		
Sorption coefficient (log L/kg) <input checked="" type="radio"/> log Koc <input type="radio"/> log Kd	1.77	PS
Diffusion coefficient in air (cm ² /s)	0.000	PS
Diffusion coefficient in water (cm ² /s)	0.0000099	PS

Miscellaneous Parameters	Value	Reference
Analytical Detection Limits: Groundwater (mg/L) <input type="text" value="0.002"/> <input type="text" value="s"/> Soil (mg/kg) <input type="text" value="0.005"/> <input type="text" value="s"/>		
First-Order Decay Half Lives (days): Saturated <input type="text" value="720"/> Unsaturated <input type="text" value="720"/>		
Bioconcentration Factor (-)	12.6	

Toxicity Data	Value	Reference
EPA weight of evidence <input checked="" type="checkbox"/> Carcinogen	A	
Oral slope factor (1/(mg/kg/day))	0.029	PS
Dermal slope factor (1/(mg/kg/day))	0.0298969	TX
Inhalation unit risk factor (1/(µg/m ³))	8.286E-06	PS
Oral reference dose (mg/kg/day)	0.003	R
Dermal reference dose (mg/kg/day)	-	
Inhalation reference conc. (mg/m ³)	0.00595	R

Dermal Exposure	Value	Reference
Dermal relative adsorption factor (-)	0.5	D
Dermal permeability coefficient (cm/hr)	0.021	
Lag time for dermal exposure (hr)	0.26	
Critical dermal exposure time (hr)	0.63	
Relative contribution of perm. coeff. (-)	0.013	

Regulatory Standards	Value	Reference
Groundwater MCL (mg/L)	0.005	Ref
Air PEL/TWA (mg/m ³)	3.25	
Aquatic life prot. criterion (mg/L)	-	

Commands and Options

CRS_471	71432	Sostanza_471	Benzene	Classe sostanze in 471:	Aromatici	Conc.Limite_s18R (mg/kg)	0.1
ID	26	TipoSel	Cancerogeno(rome)	1	Tabella 471	suoli	acque
						Conc.Limite_s18B (mg/kg)	2
						Conc.Limite_AccSot (µg/L)	1

<i>Ch - Fis Data</i>	ROME	GIUDITTA	RISC	RBCA			
Molec.Weight (g/mol)	70.1	70.1	70	70.1	<i>extra RISC</i>		
Solubility (mg/L)	1.750	1.780	1.750	1.750	Density (g/cm3)	0.877	
VaporPres (mm Hg)	95.3	95.3	95.2	95.2	Uptake Factor for Plants	Use Kow	
Henry's Cost. (unitless)	0.228	0.225	0.228	0.2288863	MaxContamLevel MCL (mg/L)	0.005	
rome_KocKd	62	giuditta_KocKd	58.9	1.77	Degradation_high-end (1d)	0.07	
			Kd (mg/l)(mg/kg)	ND	Degradation_low-end (1d)	0.00096	
Diffusion Coeff. in Air (cm2/s)	0.088	0.088	0.088	0.088	Oral-Soil Abs. Adjust. Factor	1	
Diffusion Coeff. in Water (cm2/s)	9.8E-06	0.0000096	9.8e-006	0.0000098	Oral-Water Abs. Adjust. Factor	1	
<i>Tox Data</i>			EPA Carcinogenic Class	A	Dermal-Soil Abs. Adjust. Factor	0.1	
				EPA Weight of Evidence Carcinogen	VERO	Dermal-Water Abs. Adjust. Factor	1
Ing.Slope Factor 1(mg/kg/day)	0.029	0.055	Ingestion Slope Factor 1(mg/kg/day)	0.029	Oral Slope Factors 1(mg/kg/day)	0.029	
			Dermal Slope Factors 1(mg/kg/day)	0.029	Dermal Slope Factors 1(mg/kg/day)	0.0298 969072	
Inal. Slope Factor 1(mg/kg/day)	0.029	0.0273	Inhalation Slope Factors 1(mg/kg/day)	0.027	Inhalation Unit Risk Factor -1(µg/m3)	8.2857 142857	
Assunz. GiomoToll. Ingest.(mg/kg/day)		0	Oral Reference Dose (mg/kg/day)	ND	Oral Reference Dose (mg/kg/day)	0.003	
			Dermal Reference Dose (mg/kg/day)	ND	Dermal Reference Dose (mg/kg/day)	-	
Assunz. GiomoToll. Inalaz. (mg/kg/day)	0.0017	0	Inhalation Reference Dose (mg/kg/day)	ND	Inhalation Reference Conc. (mg/m3)	0.0059 5	
						<i>extra RBCA</i>	
						acid pKa	-
						base pKb	-
						MaxContamLevel MCL (mg/L)	0.005
						Time-Weight Average (mg/m3)	3.25
						AquaticLifeProt. Criteria (mg/L)	-
						Bioconcentration Factor (L-water/kg-fish)	12.6
						Dermal Rel.Absorp. Factor (unitless)	0.5
						Dermal Permeability Coeff (cm2/hr)	0.021
						Log timeDermal Exposure (hr)	0.26
						Critical Exposure Time (hr)	0.63
						RelativeCont Dem Perm Coeff (unitless) Water/Skin	0.013
						Detection Limits Groundwater (mg/L)	0.002
						Detection Limits Soil (mg/kg)	0.005
						First-Order Decay Half LivesSaturated (days)	720
						First-Order Decay Half LivesUnsaturated (days)	720

SVILUPPO DEL LAVORO

Prima fase

analisi delle banche dati
e delle fonti disponibili



Seconda fase

confronto tra le banche dati e verifica dei valori forniti



Terza fase

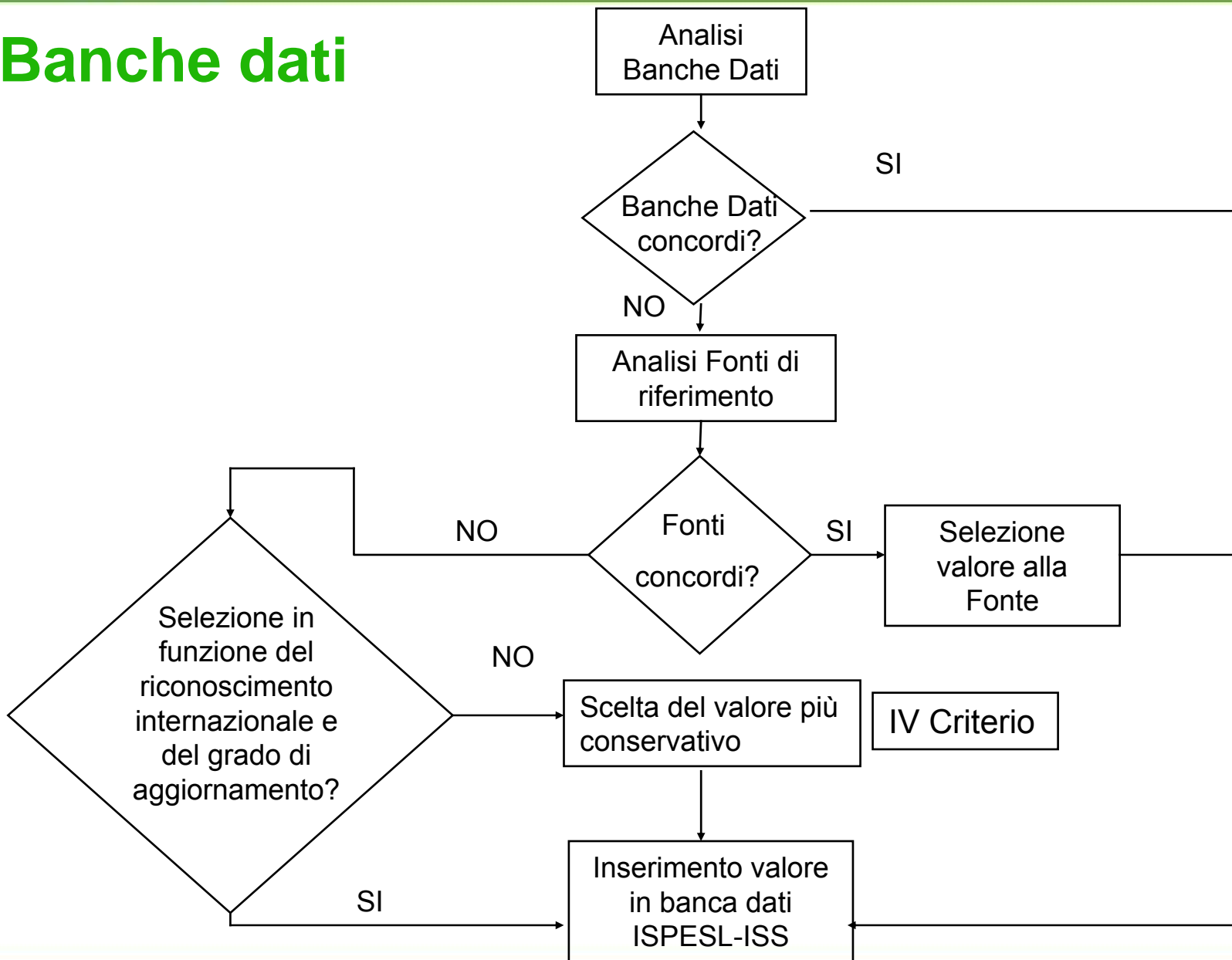
selezione dei valori e inserimento nella banca dati ispesl-iss

Banche dati

oltre alle banche dati riportate nei 4 software esaminati:

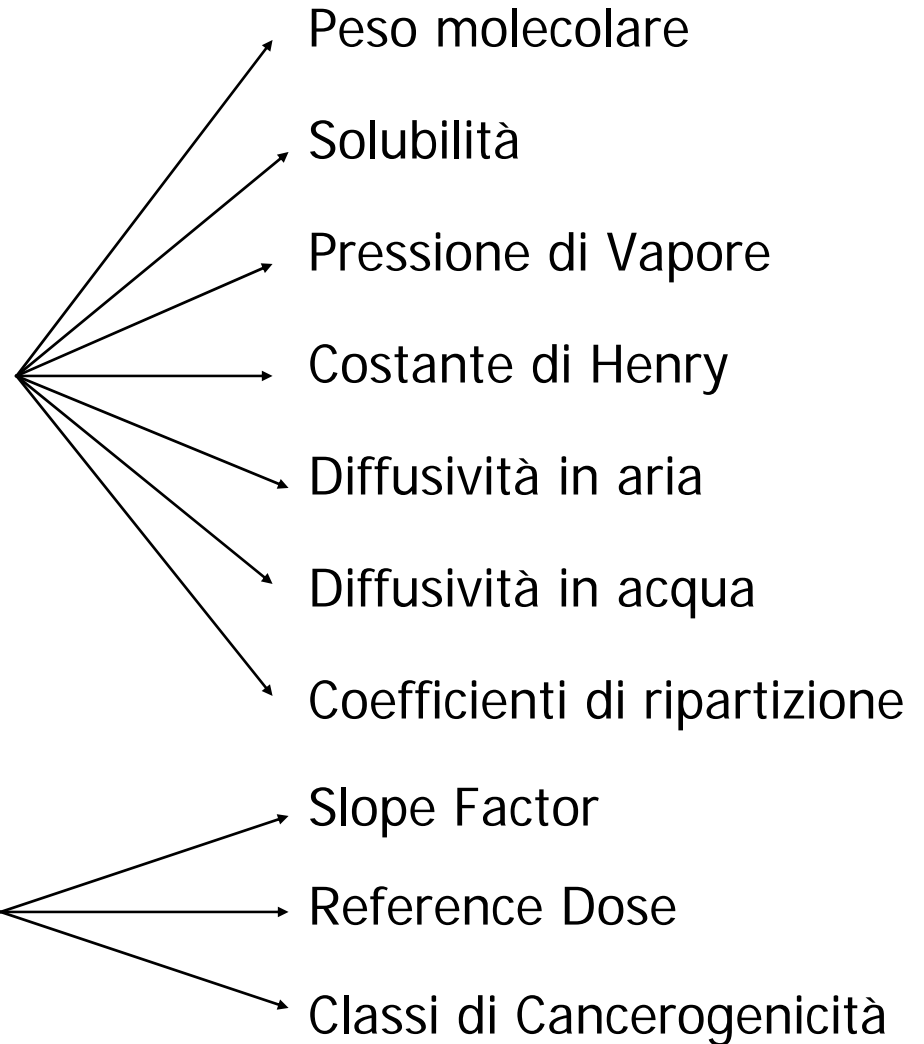
- ▶ U.S. EPA 1996 “Soil Screening Guidance: Fact Sheet
- ▶ IRIS (USEPA)
- ▶ HEAST (USEPA)
- ▶ RAIS (RISK Assessment Information System che utilizza dati USEPA)
- ▶ TEXAS
<http://www.tceq.state.tx.us/remediation/trrp/trrppces.html>
- ▶ ATSDR [//www.atsdr.cdc.gov/toxpro2.html](http://www.atsdr.cdc.gov/toxpro2.html)
- ▶ U.S.EPA cfpub.epa/ncea

Banche dati

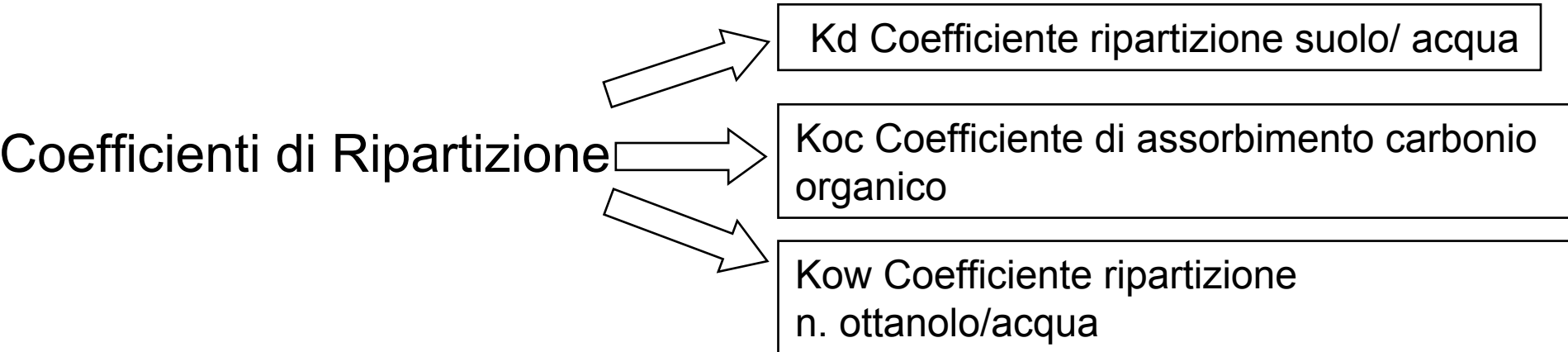


Parametri studiati per le sostanze contenute nel D.Lgs 152/06

proprietà chimico-fisiche

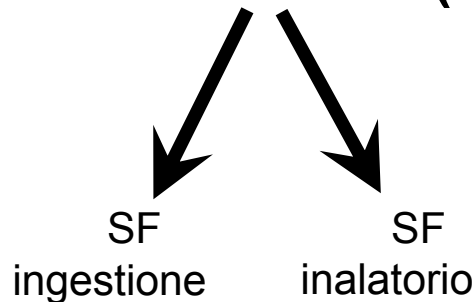


Parametri studiati per le sostanze indicate nel D.Lgs 152/06

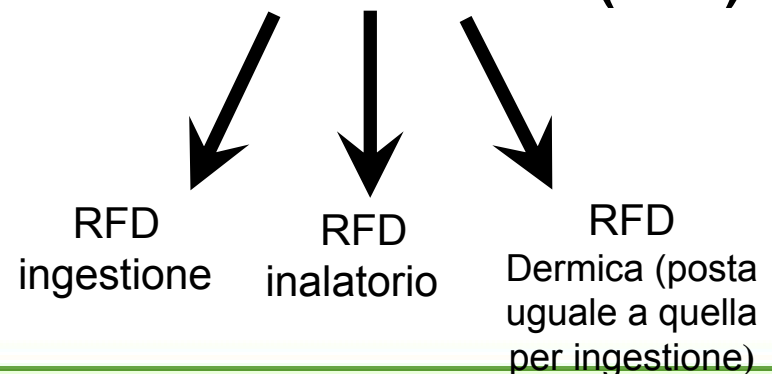


Tali parametri sono influenzati dal pH del terreno, dal potenziale Redox, ecc.

SLOPE FACTOR(SF)



REFERENCE DOSE(RFD)



SLOPE FACTOR

il valore di tossicità viene fornito sulla base della correlazione lineare dose-risposta mediante il **potenziale cancerogeno**:

SF(Cancer Slope Factor) Per le sostanze cancerogene

Quindi SF (Slope factor) è il coefficiente angolare del tratto rettilineo della relazione dose-risposta per le sostanze cancerogene.

RfD (Chronic Reference Dose) Per le sostanze non cancerogene

Per RfD (dose massima ammissibile) si intende la dose (concentrazione) di sostanza tossica per la quale, in letteratura, non vengono riportati effetti avversi per l'uomo esposto alla sostanza stessa.

Il concetto di RfD cronico è volto soprattutto a proteggere l'uomo dall'esposizioni a lungo termine (da 7 a 70 anni) nei confronti di una sostanza tossica. Recentemente è stato sviluppato anche il concetto di RfD subcronica che vale per esposizioni di breve termine (da 2 settimane a 7 anni).

Riferimenti per le proprietà chimico-fisiche:

- 1 "Soil Screening Guidance: Technical Background Document" (USEPA, 1996)
- 2 "Superfund Public Health Evaluation Manual" (USEPA, 1986)
- 3 "Selection of Representative TPH Fractions Based on Fate and Transport Consideration" (TPH Criteria working Group, vol III, 1997)
- 4 Mackay, D., Wan-Ying, S., Kuo-Ching, M. 1997 "Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate For Organic Chemicals". CRC Press LLC
- 5 Croner's Substances Hazardous to the Environment. Croner Publications Ltd
- 6 US EPA CHEMDAT 8 Model
- 7 "Technical Background Document for Soil Screening Guidance – Review Draft" (US EPA. 1996)
- 8 Calcolato dalla solubilità e peso molecolare dopo Chiou, CT, Peters, LJ. And Freed, VH. 1979 "A physical concept of soil-water equilibria for non-ionic organic compounds." Science 206, 831-832
- 9 Calcolato da volume molare di la Bas e da peso molecolare dopo Fuller, EN, Schettlr, PD and Giddings, JC. 1966 "new method for the prediction of binary gas-phase diffusion coefficients" Ind. En. Chem. 58, 19-27.
- 10 Calcolato dal volume molare di le Bas, dopo Hayduk, W, and Laudie, H. 1974 "Prediction of diffusion coefficients for non-electrolysis in dilute aqueous solutions" AIChE J20, 611-615
- 11 Calcolato dalla solubilità dopo Kenaga, EE and Goring, CAI. 1980 "Relationship between water solubility, soil sorption, octanol-water partitioning, and bioconcentration of chemicals in biota" Pubblicazione Tecnica Speciale 707. ASTM, Philadelphia, PA
- 12 Hern, J.D. 1989. "Study and Interpretation of the Chemical Characterists of Natural Water." USGS Water Supply Paper 2254. US Government Printing Office, Washington DC
- 13 Dragun, J. 1988 "The soil chemistry of hazardous materials." Haz. Mat. Res. Inst.

Segue riferimenti per le proprietà tossicologiche:

- 13 Dragun, J. 1988 "The soil chemistry of hazardous materials." Haz. Mat. Res. Inst.
- 14 Spitz, K, and Moreno, o , J. 1996. A pratical Guide to Groundwater and Solute Transport Modelling. John Wiley and Sons, Inc., New York.
- 15 Howard, P.H. 1991 "Handbook of Enviromental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals." Lewis Publisher. Michigan USA
- 16 USEPA, 1989: Hazardous Waste Treatment, Storage, and Disposal Facilities (TSDF) – USEPA, OAQPS, Air Emission Models
- 17 Verschueren, Karel, 1983: Handbook of Enviromental Data on Organic Chemicals, second ed., ISBN: 0-442-28802-
- 18 NIOSH, 1990: Pocket Guide to Chemical Hazards,(U.S. Dept. Of Health & Human Services, Public Health Services, Centers for Disease Control, National Institute for Occupational Safety and Health).
- 19 Based on Salt Solubilities in Table 3-120, R.H.Perry and D.W.Green, "Perry's Chemical Engineering Handbook" Sixt edition,(McGraw-Hill, New York), 1973
- 20 USEPA, 1989: Hazordous Waste Treatment, Storage, and Disposal Facilities (TDSF) – USEPA, OAQPS, Air Emission Model.
- 21 Verschueren, Karel 1983: Handbook of Enviromental data on organic Chemicals, Second ed.
- 22 Montgomery and Welkom, "Grounwater Chemical Desk Reference", Lewis Publishers, Chelsea, MI,1990
- 23 RAIS ("Risk Assessment Information System", 2005)
- 24 Sheppard and Thibault, "Default soil, soil/liquid partition coefficients, Kd, for mayor soil types: a compendium", 1990
- 25 "A Review and Analysis of Parameters for Assessing Transport of Environmental Released Radionuclides throuth Agriculture" (Baes et. Al, 1984)

Segue riferimenti per le proprietà tossicologiche:

- t TAC 350.53 – Chemical/Physical Parameter Values (State of Texas).
- c Calcolato da altri parametri
- d Valore di default (assumendo il caso peggiore)
- s Valore di un surrogato con caratteristiche simili
- PS Standard Provisional Guide for Risk-Based Corrective Action, ASTM PS 104-98
- I IRIS
- H HEAST
- E Altri dati USEPA
- M “Characterizing Risks posed by Petroleum Contaminated Sites: Implementation of the MADEP VPH/EPH Approach”, Policy WSC-02-411, Massachussets Department of Environmental Protection (MADEP, 2002)
- T “TPH Criteria Working Group” (1997)
- W “Drinking Water Guidelines” (WHO, 1993)
- B Basato sul valore del pirene
- R estrapolazione sulla base del valore di ingestione o inalazione
- TRI “Toxic Relase Inventory” (US EPA, 1997)
- CRI Californian EPA Office of Enviromental Healt Hazard Assessment. Criteria for Carcinogens 1994
- N “Nazional Center foe Enviromental Assessment) US EPA
- A “Agcy for Toxic Substances and Disease Registry” (ATSDR, 1999)
- TX TNRCC Risk-Based Corrective Action for Leaking Storage Tank Sites, 1994
- O “Technical Support Document for Describing Available Cancer Potency Factors” 1999

Aspetti specifici

Aspetti specifici riguardo alcune proprietà chimico-fisiche e tossicologiche:

per i metalli e i fenoli clorurati il valore di k_d varia sensibilmente al variare del ph. quindi, ove possibile è stato assunto un valore di k_d funzione del ph, facendo riferimento rispettivamente alla tabella c-4 e c-2 del documento "soil screening guidance: technical background document" (usepa, 1996).

nel caso in cui non sia noto il valore del ph, è uso comune riferirsi ai valori corrispondenti a $\text{ph} = 6,8$.

Aspetti specifici

- Per il Cromo totale sono stati assegnati, per i parametri chimico-fisici e tossicologici, i valori propri del Cromo III. Quindi, nel caso in cui si possa escludere la presenza del Cromo VI, fornendo prove e documentazione, si assegnerà al Cromo totale i valori propri (chimico-fisici e tossicologici) del Cromo III; altrimenti:
 - se è stata identificata quantitativamente la frazione di Cromo VI contenuta nel Cromo totale si assegneranno al Cromo VI i valori del Cromo VI e al Cromo totale i valori del Cromo III;
 - se non è stata identificata quantitativamente la frazione di Cromo VI contenuta nel Cromo totale si assegneranno al Cromo totale i valori relativi al Cromo VI.

Aspetti specifici

- Per quanto attiene alle classi di composti definiti nel D.Lgs 152/06 “Idrocarburi C <12” e “Idrocarburi C >12”, si rileva che nell'esecuzione dell'analisi di rischio bisognerà fare riferimento al raggruppamento in frazioni, adattato dall'approccio MADEP (Massachussets Department of Environmental Protection 2002), riportato nella banca dati.

Alifatici C5-C8

Aromatici C9-C10

Alifatici C9-C18

Alifatici C19-C36

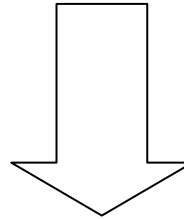
Aromatici C11-C22

Aspetti specifici

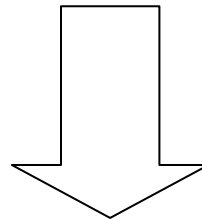
- Per il parametro N-Esano (tab.2) l'interpretazione autentica fornita dal MATT afferma che esso va inteso come *“Idrocarburi totali espressi come n-esano”*.

Pertanto al parametro “n-esano” si applicherà lo stesso criterio (MADEP) scelto per gli idrocarburi

PCDDs/PCDFs



Si prendono in considerazione unicamente i congeneri considerati tossici, ossia quelli sostituiti nelle posizioni 2,3,7,8



- 7** Policlorodibenzo-p-diossine
- 10** Policlorodibenzofurani

Parametri chimico- fisici

	n.CAS	Peso molec. (g/mol)	Solubilità (mg/l) 25°C	Pressione vapore 25°C (mm Hg)	Costante Henry 25°C (atm m ³ /mol)	Log kow
PCDDs						
2,3,7,8-TCDD	1746016	322	2×10 ⁻³	7.9×10 ⁻⁶ -3.2×10 ⁻⁴	(7-101)×10 ⁻⁶	7.02
1,2,3,7,8-PeCDD	40321764	356.4	1.18×10 ⁻⁴	6.6×10 ⁻¹⁰	2.6×10 ⁻⁶	8.64-9.48
1,2,3,4,7,8-HxCDD	39227286	390.9	4.42×10 ⁻⁶	3.8×10 ⁻¹¹	44.6×10 ⁻⁶	9.19-10.4
1,2,3,6,7,8-HxCDD *	57653857	390.9	4.42×10 ⁻⁶ *	3.8×10 ⁻¹¹ *	44.6×10 ⁻⁶ *	9.19-10.4 *
1,2,3,7,8,9-HxCDD *	19408743	390.9	4.42×10 ⁻⁶ *	3.8×10 ⁻¹¹ *	44.6×10 ⁻⁶ *	9.19-10.4 *
1,2,3,4,6,7,8-HpCDD	35822469	453.3	2.4×10 ⁻⁶	5.6×10 ⁻¹²	1.31×10 ⁻⁶	9.69-11.38
OCDD	3268879	459.8	7.4×10 ⁻⁸	8.25×10 ⁻¹³	6.74×10 ⁻⁶	10-12
PCDFs						
2,3,7,8-TCDF	51207319	305.96	4.2×10 ⁻⁴	9.21×10 ⁻⁷	1.48×10 ⁻⁵	5.82
2,3,4,7,8- PeCDF	57117314	340.42	2.4×10 ⁻⁴	1.63×10 ⁻⁷	2.63×10 ⁻⁵	6.92
1,2,3,7,8- PeCDF *	57117416	340.42	2.4×10 ⁻⁴ *	1.63×10 ⁻⁷ *	2.63×10 ⁻⁵ *	6.92 *
1,2,3,6,7,8- HxCDF	57117449	374.87	1.8×10 ⁻⁵	6.07×10 ⁻⁸	2.78×10 ⁻⁵	7.58 **
1,2,3,4,7,8- HxCDF *	70648269	374.87	1.8×10 ⁻⁵ *	6.07×10 ⁻⁸ *	2.78×10 ⁻⁵ *	7.58 *
1,2,3,7,8,9- HxCDF *	72918219	374.87	1.8×10 ⁻⁵ *	6.07×10 ⁻⁸ *	2.78×10 ⁻⁵ *	7.58 *
2,3,4,6,7,8- HxCDF *	60851345	374.87	1.8×10 ⁻⁵ *	6.07×10 ⁻⁸ *	2.78×10 ⁻⁵ *	7.58 *
1,2,3,4,6,7,8- HpCDF	67562394	409.31	1.4×10 ⁻⁵	1.68×10 ⁻⁸	4.1×10 ⁻⁶	7.92
1,2,3,4,7,8,9-HpCDF*	55673867	409.31	1.4×10 ⁻⁵ *	1.68×10 ⁻⁸ *	4.1×10 ⁻⁶ *	7.92 *
OCDF	39001020	443.76	1.2×10 ⁻⁶	3.75×10 ⁻¹²	1.7×10 ⁻⁶	8.20

si fa riferimento ai valori riportati nel data base ATSDR (Agency for Toxic Substances and Disease Registry)

* I parametri chimico-fisici relativi ai congeneri contrassegnati dall'asterisco non sono riportati nella banca dati ATSDR, ma, assumendo che la diversa disposizione degli atomi di cloro non comporti una grossa variazione di tali parametri, è possibile far riferimento all'isomero della loro classe omologa per il quale i valori sono riportati.

** Valore riportato nella banca dati RAIS (assente nella banca dati ATSDR)

Aspetti specifici

	n.CAS	Koc calcolato con il software EPISUITE *
PCDDs		
2,3,7,8-TCDD	1746016	1.46×10 ⁵
1,2,3,7,8-PeCDD	40321764	2.47×10 ⁵
1,2,3,4,7,8-HxCDD	39227286	4.17×10 ⁵
1,2,3,6,7,8-HxCDD *	57653857	4.17×10 ⁵ *
1,2,3,7,8,9-HxCDD *	19408743	4.17×10 ⁵ *
1,2,3,4,6,7,8-HpCDD	35822469	7.03×10 ⁵
OCDF	39001020	1.19×10 ⁵
PCDFs		
2,3,7,8-TCDF	51207319	8.1×10 ⁴
2,3,4,7,8- PeCDF	57117314	1.37×10 ⁵
1,2,3,7,8- PeCDF *	57117416	1.37×10 ⁵ *
1,2,3,6,7,8- HxCDF	57117449	2.31×10 ⁵
1,2,3,4,7,8- HxCDF*	70648269	2.31×10 ⁵ *
1,2,3,7,8,9- HxCDF *	72918219	2.31×10 ⁵ *
2,3,4,6,7,8- HxCDF *	60851345	2.31×10 ⁵ *
1,2,3,4,6,7,8- HpCDF	67562394	3.89×10 ⁵
1,2,3,4,7,8,9-HpCDF *	55673867	3.89×10 ⁵ *
OCDF	39001020	6.57×10 ⁵

Il software riconosce la sostanza tramite inserimento del numero CAS e calcola il Koc attraverso una formula matematica

Aspetti specifici

Parametri Tossicologici



criterio della tossicità equivalente (teq): i congeneri non hanno tutti la stessa tossicità; si fa riferimento alla 2,3,7,8-tcdd che è il congenere più tossico, riportando la concentrazione di ogni congenere in $teq = \text{concentrazione} \times \text{fattore di tossicità equivalente (tef)}$ ed applicando quindi i parametri tossicologici relativi alla 2,3,7,8-tcdd. il tef è un valore attribuito ad ogni congenere per evidenziarne la diversa tossicità rispetto alla 2,3,7,8-tcdd

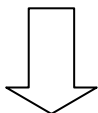
2,4,7,8-TCDD		
Oral Slope Factor (SFo) (mg TEQ/kg/g) ⁻¹	Inhalation Slope Factor (SFi) (mg TEQ/kg/g) ⁻¹	Dermal Slope Factor (SFd) (mg TEQ/kg/g) ⁻¹
1.50×10 ⁵	1.16×10 ⁵	3×10 ⁵

	I-TEF
PCDFs	
2,3,7,8-TCDD	1
1,2,3,7,8-PeCDD	0.5
1,2,3,4,7,8-HxCDD	0.1
1,2,3,6,7,8-HxCDD	0.1
1,2,3,7,8,9-HxCDD	0.1
1,2,3,4,6,7,8-HpCDD	0.01
OCDD	0.001
PCDFs	
2,3,7,8-TCDF	0.1
2,3,4,7,8- PeCDF	0.5
1,2,3,7,8- PeCDF	0.05
1,2,3,6,7,8- HxCDF	0.1
1,2,3,4,7,8- HxCDF	0.1
1,2,3,7,8,9- HxCDF	0.1
2,3,4,6,7,8- HxCDF	0.1
1,2,3,4,6,7,8- HpCDF	0.01
1,2,3,4,7,8,9-HpCDF	0.01
OCDF	0.001

Aspetti specifici

PCBs

Parametri chimico-fisici



si prendono in considerazione i valori riportati nel data base del software RBCA

* data base RAIS concordante con data base RISC, preso in considerazione al posto del valore zero dell'RBCA, in virtù del fatto che studi presenti in letteratura riportano una volatilità, seppur minima, per alcuni PCBs.

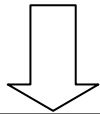
** data base RAIS (assente in RBCA)

Peso molecolare (g/mol)	290
Solubilità 20-25°C (mg/l)	0.2
Pressione di vapore 20-25°C (mm Hg) *	0,0000863
Costante di Henry 20°C adimensionale	0.012
Costante di Henry 20°C (atm/m ³)mol	0.000294
Log Koc (log L/kg)	5.2
Log kow **	6.29
Coefficiente diffusione in aria (cm ² /s)	0.104
Coefficiente diffusione in acqua (cm ² /s)	0.00001

PCBs

Aspetti specifici

Parametri tossicologici



Oral Slope Factor (SFo) 1/(mg/kg/giorno) *	Oral Reference Dose (RfDo) (mg/kg/giorno) **
2	2e-005

* valore riportato nella banca dati RBCA, RAIS ed EPA regione III.

Si fa riferimento allo slope factor se durante le analisi viene riscontrata la presenza anche di un solo PCB diossina-like.

** valore riportato nella banca dati EPA Regione III e maggiormente conservativo del valore riportato nella banca dati RBCA.

Si fa riferimento a questo parametro se si esclude la presenza di PCB diossina like.

Aspetti specifici

Aspetti specifici riguardo alcune proprietà chimico-fisiche e tossicologiche:

I valori di SF e RfD inalatorio non rinvenibili sono stati estrapolati da quelli per ingestione.

I valori SF e RfD dermico sono nella gran parte dei casi estrapolati dal corrispondente valore relativo alla ingestione.

PARAMETRI SITO SPECIFICI

Parametri definiti analiticamente:

- Umidità
- pH (adim) Metodo APAT-IRSA CNR 2060, Man. 29/3: 2003
- Coefficiente di diffusione nel suolo K_d (adim) Metodo APAT - ISS
- Densità del suolo ρ_s (g/cm³)
- Frazione di Carbonio Organico foc (adim) Metodo Ufficiale n° VII.2 (ISO 14235)

PARAMETRI SITO SPECIFICI

Parametri estrapolati e/o ottenuti mediante supervisione di enti di controllo:

- Frazione areale di fratture **h (adim)**
- Velocità del vento **U_{air} (cm/s)**
- Soggiacenza della falda **LF (cm)**
- Conducibilità idraulica **K_{sat} (cm/anno)**
- Gradiente idraulico **i (adim)**
- Infiltrazione efficace **l_{ef} (cm/anno)**
- Spessore zona insatura **h_v (cm)**
- Spessore della falda **da (cm)**
- Spessore sorgente nel suolo profondo (insaturo) **ds (cm)**
- Spessore sorgente nel suolo superficiale (insaturo) **d (cm)**
- Profondità del piano di falda **LGW (cm)**
- Estensione della sorgente nella direzione del flusso di falda **W (cm)**
- Estensione della sorgente nella direzione ortogonale al flusso di falda **SW (cm)**
- Area della sorgente (rispetto alla direzione del flusso di falda) **A (cm²)**

PARAMETRI SITO SPECIFICI

Parametri estrapolati e/o ottenuti mediante supervisione di enti di controllo:

- Estensione della sorgente di contaminazione nella direzione principale del vento **W'** (cm)
- Estensione della sorgente di contaminazione nella direzione ortogonale a quella principale del vento **Sw'** (cm)
- Area della sorgente (rispetto alla direzione prevalente del vento) **A'** (cm²)
- Profondità del top della sorgente nel suolo superficiale rispetto al p.c. **Ls (SS)** (cm)
- Profondità del top della sorgente nel suolo profondo rispetto al p.c. **Ls (SP)** (cm)
- Profondità della base della sorgente rispetto al p.c. **Lf** (cm)
- Velocità di Darcy **vgw** (cm/anno)
- Superficie totale coinvolta nell'infiltrazione **Ab** (cm²)
- Spessore delle fondazioni/muri **Lcrack** (cm)
- Distanza tra il top della sorgente nel suolo insaturo (in falda) e la base delle fondazioni **LT** (cm)
- Profondità delle fondazioni **Zcrack** (cm)