

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

Dr.ssa Loredana Musmeci
Istituto Superiore di Sanità (ISS)

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 ISPELS-ISS

CRS_471	71432	Sostanza_471	Benzene	Classe sostanze in 471:	Aromatici	Conc.Limite_s1BR (mg/kg)	0.1
ID	26	TipoSel	Cancerogeno(rome)	1	Tabella 471	suoli	acqua
						Conc.Limite_s1BB (mg/kg)	2
						Conc.Limite_AccSoil (µg/L)	1

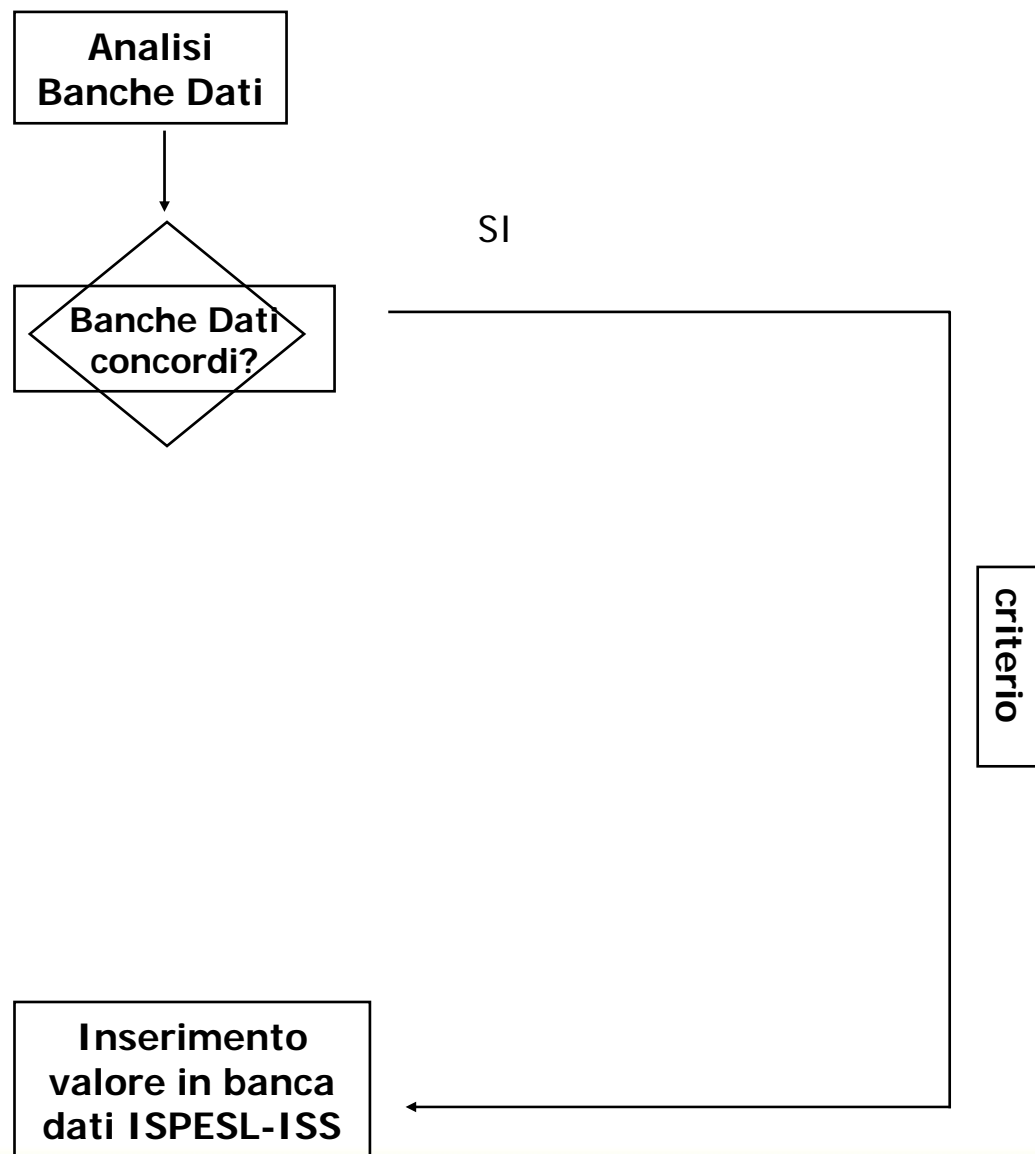
Ch - Fis Data	ROME	GIUDITTA	RISC	RBCA		extra RISC	extra RBCA		
Molec.Weight (g/mol)	70.1	70.1	70	70.1		Density (g/cm3)	0.877	acid pKa	-
Solubility (mg/L)	1.750	1.780	1.750	1.750		Uptake Factor for Plants	Use Kow	base pKb	-
VaporPres (mm Hg)	95.3	95.3	95.2	95.2		MaxContamLevel MCL (mg/L)	0.005	MaxContamLevel MCL (mg/L)	0.005
Henry's Cost. (unitless)	0.228	0.225	0.228	0.2288863		Degradation_high-end (1d)	0.07	Time-Weight Average (mg/kg)	3.25
rome_KocKd	62	giuditta_KocKd	62	Henry'sC-20C (unitless)	0.00555	Degradation_low-end (1d)	0.00096	AquaticLifePres. Criteria (mg/L)	-
			Koc (cm3/g)	58.9	Henry'sC-20C (strubc3)val	1.77	Oral-Soil Abs. Adjust. Factor	Bioconcentration Factor (L-water/kg-fish)	12.6
			Kd (mg/l)/(mg/kg)	ND	ScorptionCoef. logKoc or logKd (log L/kg)	Koc	Oral-Water Abs. Adjust. Factor	Dermal Rel.Absorp. Factor (unitless)	0.5
Diffusion Coeff. in Air-(cm2/s)	0.088	0.088	DiffusionCoefficients in air-(cm2/s)	0.088	logKoc or logKd	0.088	Dermal-Soil Abs. Adjust. Factor	Dermal Permeability Coeff (cm2/hr)	0.021
Diffusion Coeff. in Water-(cm2/s)	9.8E-06	0.0000098	DiffusionCoefficients in water-(cm2/s)	9.8e-006		0.0000098	Dermal-Water Abs. Adjust. Factor	Log timeDermal Exposure (hr)	0.26
Tox Data			EPA Carcinogenic Class	A	EPA Weight of Evidenc Carcinogen	A	Abs. Adjust. Factor	CriticalExposure Time (hr)	0.63
					VERO	VERO	Skin Permeability Coefficient (cm/hr)	RelativeConc Dem Perm Coeff (unitless) Water/Skin	0.0733 917867
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	Detection Limits Groundwater (mg/L)	0.002	
			Dermal Slope Factors 1/(mg/kg/day)	0.029	Dermal Slope Factors 1/(mg/kg/day)	0.0298 969072	Detection Limits Soil (mg/kg)	0.005	
			Inhalation Slope Factors 1/(mg/kg/day)	0.027	Inhalation Unit Risk Factor -1/(µg/m3)	8.2857 142857	First-Order Decay Half LivesSaturated (days)	720	
Inal. Slope Factor 1/(mg/kg/day)	0.029	0.0273	Oral Reference Dose (mg/kg/day)	ND	Oral Reference Dose (mg/kg/day)	0.003	First-Order Decay Half LivesUnsaturated (days)	720	
Assunz. GismoToll. Ingest.(mg/kg/day)		0	Dermal Reference Dose (mg/kg/day)	ND	Dermal Reference Dose (mg/kg/day)	-			
			Inhalation Reference Dose (mg/kg/day)	ND	Inhalation Reference Conc. (mg/m3)	0.0059 5			
Assunz. GismoToll. Inalz. (mg/kg/day)	0.0017	0							

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)

Criteri adottati



I Criterio

II Criterio

III Criterio

IV Criterio

Se i valori proposti dalle cinque banche dati sono risultati tutti concordi, il valore è stato direttamente riportato nel database ISPESL-ISS.

Nell'applicazione del criterio 1 sono state trascurate le piccole differenze di approssimazione del dato.

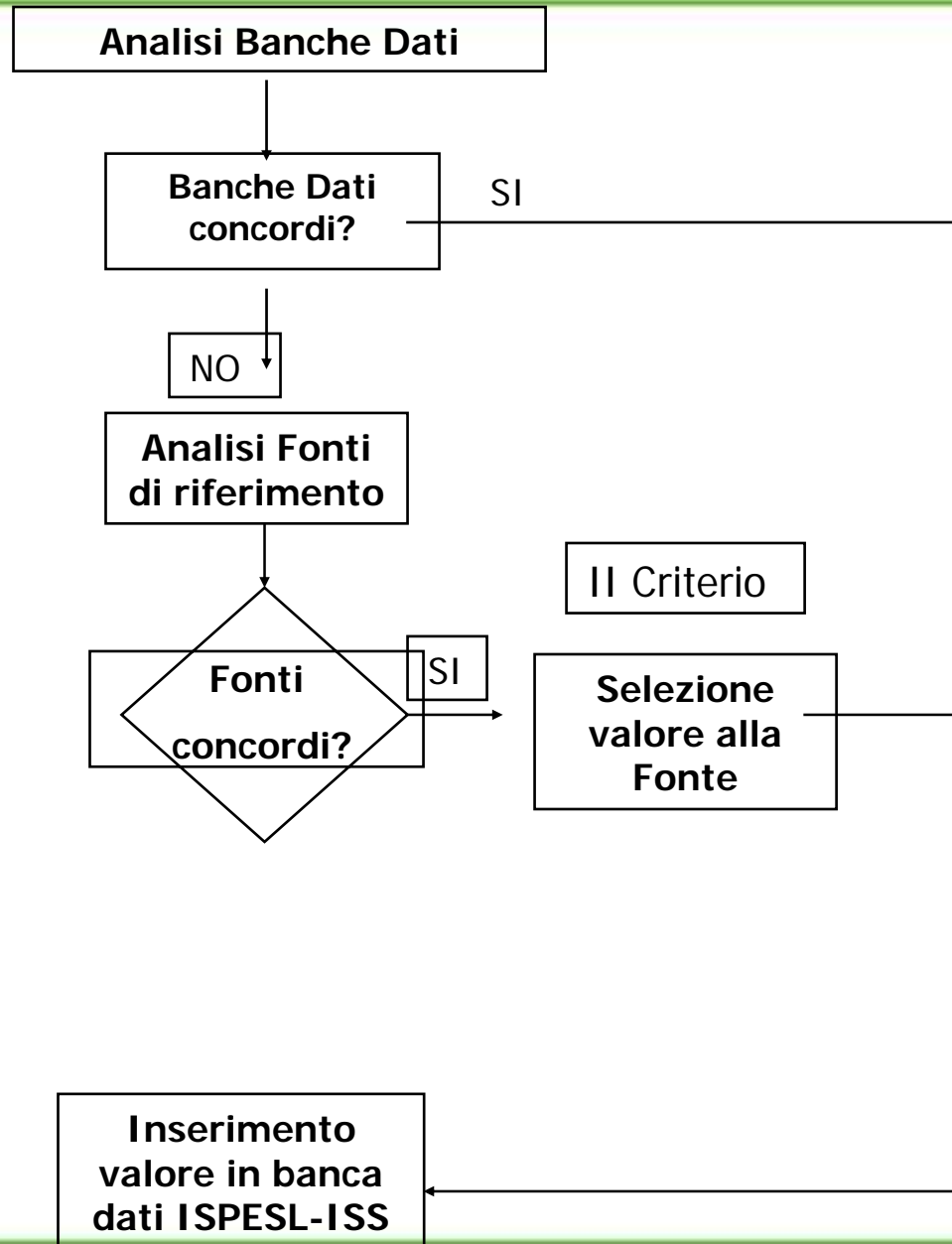
Es. 1: Diffusività in aria Benzo(a)antracene

D_{air} [cm ² /s]	ROME	Rif.	GIUDITTA	Rif.	BP-RISC	Rif.	EPA	Rif.	RBCA	Rif
Benzo(a)antracene	5,10E-02	1	5,10E-02	7	5,10E-02		5,10E-02		5,10E-02	20

1 "Soil Screening Guidance: Technical Background Document" (USEPA, 1996)

7 "Technical Background Document for Soil Screening Guidance – Review Draft" (US EPA. 1996)

20 USEPA, 1989: Hazardous Waste Treatment, Storage, and Disposal Facilities (TDSF) – USEPA, OAQPS, Air Emission Model.



I Criterio

II Criterio

III Criterio

IV Criterio

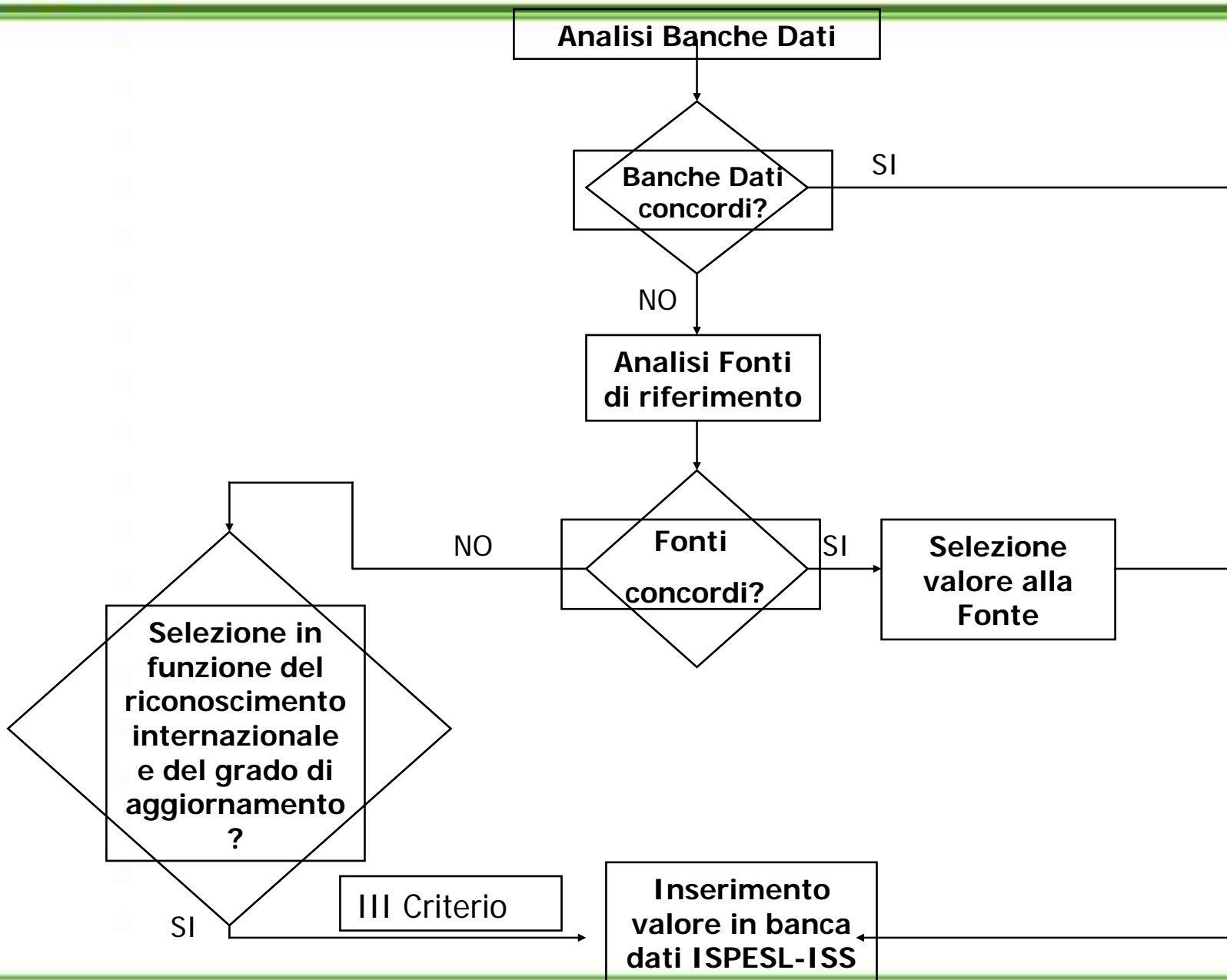
Se i valori proposti dalle cinque banche dati non sono risultati tutti concordi, seppur facenti riferimento alla stessa fonte bibliografica, è stata consultata quest'ultima per selezionare il valore fornito dalla fonte stessa.

Un'incongruenza di questo tipo può essere dovuta ad un errore nella trascrizione del valore all'interno del database, oppure ad un diverso grado di aggiornamento dello stesso.

Es. 1: Slope Factor Inalazione Arsenico

SF _{ina} [mg/kg-d]	ROME	Rif.	GIUDITTA	Rif.	BP-RISC	Rif.	EPA	Rif.	RBCA	Rif.
Arsenico	1,50E+01	I	5,00E+01	I	1,50E+01		1,50E+01	I	1,50E+01	E

I IRIS



I Criterio

II Criterio

III Criterio

IV Criterio

Se i valori proposti dalle cinque banche dati non sono risultati tutti concordi, poiché estratti da diverse fonti bibliografiche, sono state consultate le stesse in modo da selezionare il valore proposto dalla fonte ritenuta più attendibile in termini di:

- riconoscimento internazionale;
- livello di aggiornamento del database .

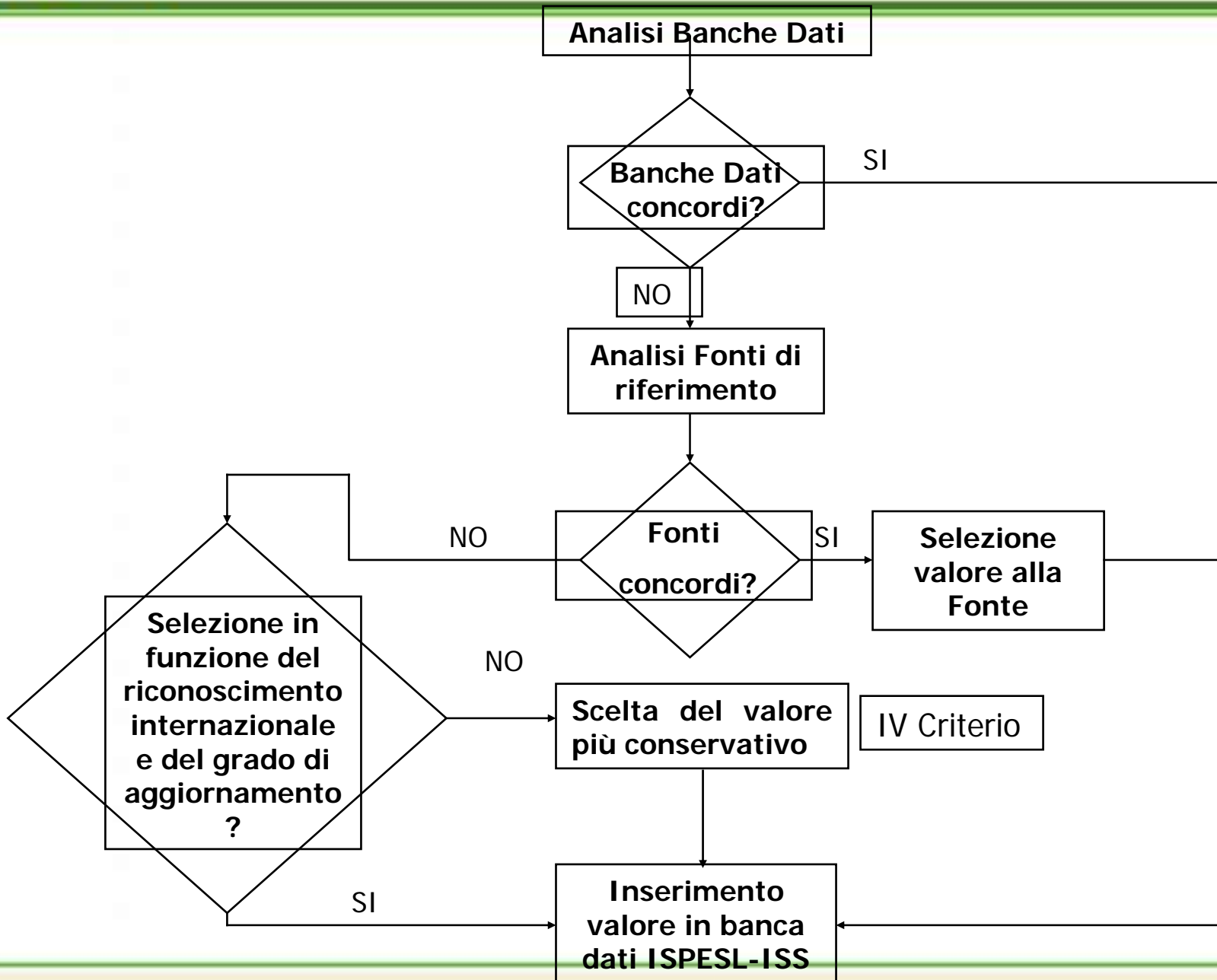
Es. 1: Reference Dose Inalazione

RfD _{ina} [kg-ef/mg]	ROME	Rif.	GIUDITTA	Rif.	BP-RISC	Rif.	EPA	Rif.	RBCA	Rif
Clorometano	8,60E-02	I	8,60E-02	N					6,27E-03	TX

I IRIS

N "Nazional Center foe Enviromental Assessment) US EPA

TX TNRCC Risk-Based Corrective Action for Leaking Storage Tank Sites, 1994



I Criterio**II Criterio****III Criterio****IV Criterio**

Il quarto criterio è stato applicato nei casi in cui ogni altro tipo di scelta non poteva essere operata.

La selezione del valore del dato parametro è stata effettuata seguendo due distinte modalità, elencate in ordine prioritario:

- analisi delle formule in cui il parametro entra direttamente in gioco e scelta del valore che garantisce il risultato più conservativo;
- **analisi** di sensibilità del rischio per la salute umana rispetto al parametro in questione, con selezione del valore più conservativo.

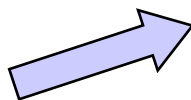
Banche dati

oltre alle banche dati riportate nei 4 software esaminati:

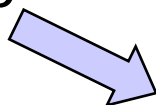
- ▶ U.S. EPA 1996 "Soil Screening Guidance: Fact Sheet
- ▶ IRIS (USEPA)
- ▶ HEAST (USEPA)
- ▶ RAIS (RISK Assessment Information System che utilizza dati USEPA)
- ▶ TEXAS <http://www.tceq.state.tx.us/remediation/trrp/trrppces.html>
- ▶ ATSDR [//www.atsdr.cdc.gov/toxpro2.html](http://www.atsdr.cdc.gov/toxpro2.html)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

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

Coefficienti di Ripartizione

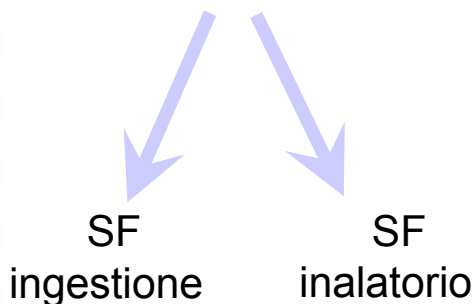


Kd Coefficiente ripartizione suolo/ acqua

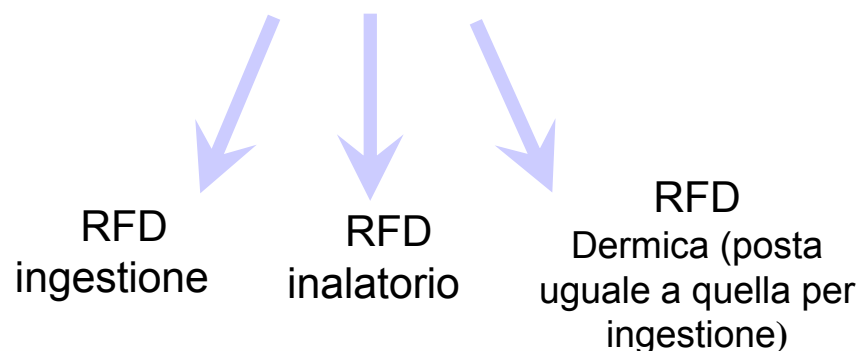


Koc Coefficiente di assorbimento carbonio organico

SLOPE FACTOR(SF)



REFERENCE DOSE(RFD)



Nota 18 GIUGNO 2008

Osservazioni

Alla luce delle valutazioni condotte congiuntamente da APAT ed ISS su dataset analitici utilizzati per l'applicazione dell'analisi di rischio sito-specifica ai sensi del DLgs 152/06, si ritiene opportuno che il metodo sperimentale APAT-ISS di cui alla nota APAT Prot.011376 del 4 Aprile 2007 ("Metodo per la determinazione sperimentale del coefficiente di ripartizione solido-liquido ai fini dell'utilizzo nei software per l'applicazione dell'analisi di rischio sanitario-ambientale sitospecifica ai siti contaminati") venga applicato esclusivamente per la valutazione del coefficiente di ripartizione solido-liquido per matrici solide contaminate da metalli, in attesa di ulteriori approfondimenti sulla validità della metodica analitica per i composti organici.

Osservazioni

Si ritiene quindi opportuno, in attesa delle suddette verifiche, l'utilizzo, per i composti organici, dei valori di foc determinati su base sito-specifica secondo le modalità indicate nel "Documento di riferimento per la determinazione e la validazione dei parametri sito-specifici" e dei valori di Koc riportati nella Banca-Dati ISS-ISPEL. Per i composti organici per i quali il parametro Koc è funzione del pH, si richiede l'utilizzo dei valori riportati nell'APPENDICE O del manuale "Criteri metodologici per l'applicazione dell'analisi assoluta di rischio ai siti contaminati" elaborato da APAT-ARPA-ISS-ISPEL e disponibile sul sito dell'APAT nella sua versione più aggiornata alla pagina sopra indicata.

Si sottolinea che tutti i documenti sopra citati e la Banca-Dati ISS-ISPEL sono disponibili sul sito dell'APAT nella loro versione più aggiornata alla pagina

http://www.apat.gov.it/site/it/IT/Servizi_per_l'Ambiente/Siti_contaminati/Analisi_di_rischio/

Classificazione CEE (direttiva 93/21/CEE)

Categoria 1

sostanze note per gli effetti cancerogeni sull'uomo. Esistono prove sufficienti per stabilire un nesso casuale tra l'esposizione dell'uomo ad una sostanza e lo sviluppo di tumori.

Categoria 2

sostanze che dovrebbero considerarsi cancerogene per l'uomo. Esistono elementi sufficienti per ritenere verosimile che l'esposizione dell'uomo ad una sostanza possa provocare lo sviluppo di tumori, in generale sulla base di:

adeguati studi a lungo termine effettuati su animali altre informazioni specifiche.

Categoria 3

sostanze da considerarsi con sospetto per i possibili effetti cancerogeni sull'uomo per le quali tuttavia le informazioni disponibili sono sufficienti per procedere ad una valutazione soddisfacente. Esistono alcune prove ottenute da adeguati studi sugli animali che non bastano tuttavia per classificare la sostanza nella categoria 2.

Classificazione dell'Environmental Protection Agency (EPA). (US EPA; 1986)

Gruppo A cancerogeno per l'uomo, vi è sufficiente evidenza di cancerogenicità negli studi epidemiologici.

Gruppo B il gruppo B si divide in due parti:

B1 probabile cancerogeno per l'uomo con evidenza limitata di cancerogenicità in studi epidemiologici ed evidenza sufficiente in studi su animali

B2 probabile cancerogeno per l'uomo con evidenza sufficiente di cancerogenicità in studi su animali ed evidenza inadeguata o assenza di dati in studi sull'uomo.

Classificazione dell'Environmental Protection Agency (EPA). (US EPA; 1986)

- Gruppo C** sospetto cancerogeno per l'uomo con evidenza limitata di cancerogenicità in studi su animali in assenza di dati sull'uomo.
- Gruppo D** non classificabile come cancerogeno, per evidenza inadeguata sia nell'uomo che negli animali da esperimento o sostanza per cui non sono disponibili dati.
- Gruppo E** nessuna evidenza di cancerogenicità nell'uomo, in assenza di evidenza di cancerogenicità sia negli animali da esperimento che studi sull'uomo

Classificazione dell'International Agency for Research on Cancer (IARC)

Gruppo 1 Cancerogeno accertato per l'uomo: vi è sufficiente evidenza di cancerogenicità nell'uomo in studi epidemiologici adeguati.

Gruppo 2 il gruppo si divide in due sotto gruppi

2A probabile cancerogeno per l'uomo, sulla base di evidenza limitata nell'uomo ed evidenza sufficiente negli animali da esperimento.

2B sospetti cancerogeni per l'uomo, sulla base di evidenza limitata nell'uomo e evidenza non del tutto sufficiente negli animali da esperimento oppure di evidenza sufficiente negli animali ed evidenza inadeguata nell'uomo.

Classificazione dell'International Agency for Research on Cancer (IARC)

Gruppo 3 non classificati per cancerogenicità sull'uomo (tutto ciò che non rientra nei gruppi precedenti, viene posto in questo gruppo).

Gruppo 4 probabilmente non cancerogeno per l'uomo sulla base di evidenze che indicano l'assenza di cancerogenicità nell'uomo e negli animali da esperimento e, in alcuni casi, sulla base di evidenze inadeguate o in assenza di dati sull'uomo, ma assenza cancerogenicità negli animali da esperimento in presenza di un ampio numero di dati sperimentali.

ESEMPI PARAMETRI TOSSICOLOGICI BANCA DATI ISS-ISPESL

Composti	Numero CAS	Cat. Carc. UE	Classe Cancer. EPA	SF Ing. [mg/kg-giorno] ⁻¹	SF Inal. [mg/kg-giorno] ⁻¹	RfD Ing. (mg/kg-d)	RfD Inal. (mg/kg-d)
Berillio	7440-41-7	2	B2 - B1	4.30E+00	8.40E+00	2.00E-03	5.70E-06
Piombo	7439-92-1	1/3 ⁽¹⁾	B2			3.50E-03	3.50E-02
Esacloro butadiene	87-68-3	-	C	7.80E-02	7.80E-02	2.00E-04	2.00E-04
1,1-Dicloroetano	75-34-3	-	C			1.00E-01	1.40E-01
Etilbenzene	100-41-4	-	D		3.85E-03	1.00E-01	2.85E-01
Toluene*	108-88-3	-/3	D			8.00E-02	1.14E-01

* Classificato attualmente dall'U.E. cancerogeno di categoria 3