



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

Eleonora Beccaloni

Istituto Superiore di Sanità



ROME
REASONABLE MAXIMUM EXPOSURE

Dicembre 2002

Versione 2.1



Versione 3.0
Aprile 2003



RISC₄

July, 2001

**RBCA
TOOL KIT**

**Chemical
Releases**

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

Registration No.: _____

Licensed to: _____

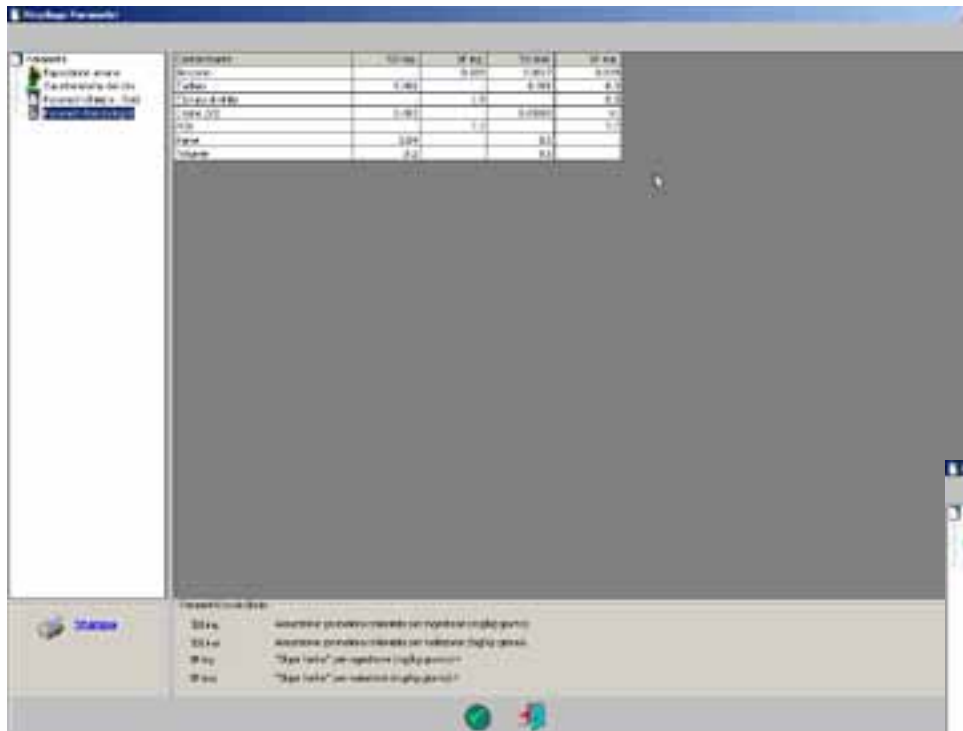
Version 1.3a

© 2000 All Rights Reserved.
2211 Norfolk St., Suite 1000
Houston, Texas 77090-4044
713.622.6414
<http://www.gsi-net.com>

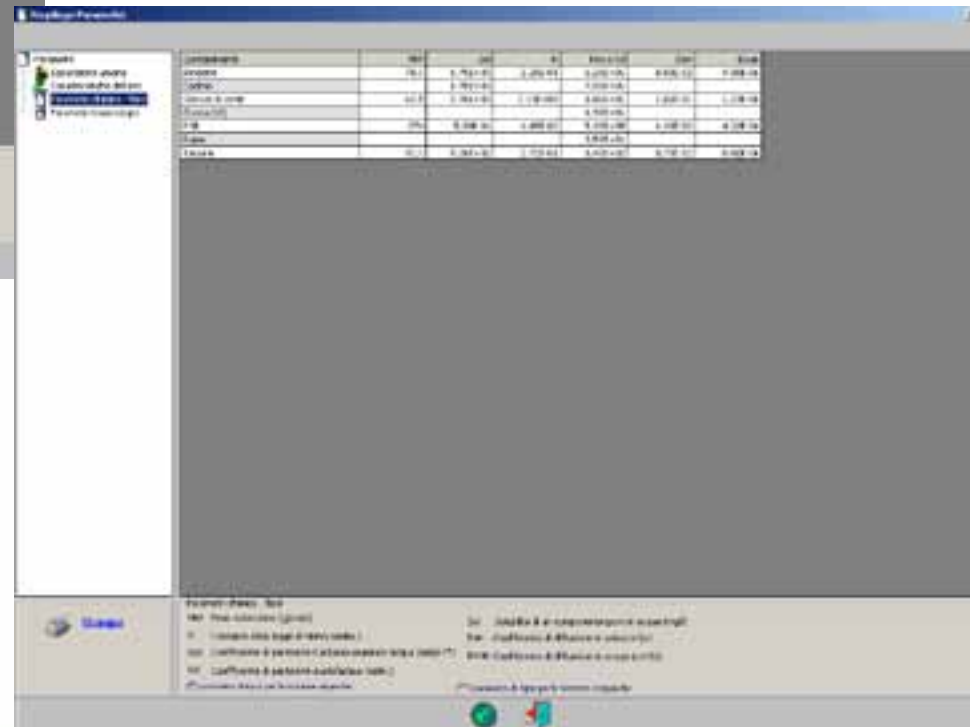


**GROUNDWATER
SERVICES, INC.**

118 sostanze
di cui 90
della 152/06



Contaminante	152/06	152/06	152/06	152/06
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001



Contaminante	152/06	152/06	152/06	152/06	152/06	152/06
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001
152/06	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001	0,001



160 sostanze
di cui 87 della 152/06

Giuditta 3.0 - Progetto corrente (proj3206) [Definisci gli parametri]

STAMPA Esporta in excel

Parametri chimico - fisico

Contaminante	MW	H	Koc/Kd	logKow	Sol (mg/l)	VaP (mmHg)	Dai (cm ² /s)	Dwal (cm ² /s)
Cromo (VI)	0	0.00E+00	1.90E+01	0	1.70E+01	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Mercuro	0	0.00E+00	5.25E+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	5.00E+01	0	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Tallio	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+03	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
Giancobri	27	1.13E-06	3.90E+00	0	7.60E+00	3.00E+02	5.21E-01	2.20E-05
Argento	0	0.00E+00	8.30E+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
Benzene	78.1	2.25E-01	6.20E+01	2.13	1.70E+03	9.53E+01	8.00E-02	9.00E-06
Etilbenzene	106.2	1.93E-01	2.04E+02	3.13	1.52E+03	9.53E+01	8.00E-02	9.00E-06
Stirene	104.1	9.78E-02	5.13E+02	3.05	3.00E+02	6.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Toluene	92.1	2.75E-01	1.40E+02	2.69	5.15E+02	2.85E+00	0.00E+00	0.00E+00
Xilene	106.2	2.95E-01	1.95E+02	3.2	1.60E+02	8.25E+00	0.00E+00	0.00E+00
p-xilene	106.2	2.95E-01	1.95E+02	3.2	1.60E+02	8.25E+00	0.00E+00	0.00E+00
Benzofluorantene	228.3	2.35E-04	2.00E+05	5.91	1.10E-02	4.59E-04	0.00E+00	0.00E+00
Benzofluorene	252.3	1.88E-05	1.82E+06	6.04	3.80E-03	1.60E-04	0.00E+00	0.00E+00
Benzofluorantene	252.3	5.00E-04	1.23E+06	5.8	1.50E-03	1.59E-04	0.00E+00	0.00E+00
Benzofluorantene	252.3	6.47E-06	1.23E+06	6	8.00E-04	3.09E-04	0.00E+00	0.00E+00
Benzofluorantene	268.36	3.03E-05	1.82E+07	6.5	2.60E-04	1.69E-04	0.00E+00	0.00E+00
Crione	228.3	1.62E-04	1.88E+06	1.85	1.50E-03	8.03E-04	0.00E+00	0.00E+00
Dibenzofluorene	278.4	3.08E-06	1.66E+06	6.75	2.49E-03	6.87E-04	0.00E+00	0.00E+00

Giuditta 3.0 - Progetto corrente (proj3206) [Definisci gli parametri]

STAMPA Esporta in excel

Parametri tossicologici

Contaminante	TDI (mg/kg/giorno)	SF (mg/kg/giorno)	TDI (mg/kg/giorno)	SF (mg/kg/giorno)
Antimonio	0.0004	0	0	0
Arsenico	0.0003	1.5	0	50
Bisfenolo	0.002	4.3	0.0000057	0.4
Cadmio	0.0005	0	0.000057	6.3
Cobalto	0.06	0	0	0
Cromo totale	1.5	0	0	0
Cromo (VI)	0.003	0	0.0000296	42
Mercuro	0.0003	0	0.000006	0
Nichel	0.02	0	0	0
Piombo	0.0036	0	0	0
Rame	0.04	0	0	0
Selenio	0.005	0	0	0
Stagno	0.8	0	0	0
Tallio	0.00008	0	0	0
Vanadio	0.007	0	0	0
Zinco	0.3	0	0	0
Giancobri	0.02	0	0	0
Argento	0.005	0	0.005	0
Ferro	0.3	0	0	0
Manganese	0.02	0	0.0000143	0
Benzene	8	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
p-xilene	2	0	2	0
Benzofluorantene	8	0.73	0	0.31



Versione 3.0
Aprile 2003

87 sostanze
di cui 42 della 152/06

RISC
File Information

Description:

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]	78	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
Henry's 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]	9.0E-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 Chemical Releases

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	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)	1.77	PS
Diffusion coefficient in air (cm ² /s) <input type="text" value="0.068"/> PS Diffusion coefficient in water (cm ² /s) <input type="text" value="0.0000098"/> PS		

Miscellaneous Parameters

Analytical Detection Limits:
 Groundwater (mg/L) s Soil (mg/kg) s
 First-Order Decay Half Lives (days):
 Saturated Unsaturated H
 Bioconcentration Factor (-)

Toxicity Data

EPA weight of evidence Carcinogen

	Value	Reference
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

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

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

Commands and Options



Prima fase

analisi delle banche dati
e delle fonti disponibili



Seconda fase

confronto tra le banche dati e verifica dei valori forniti

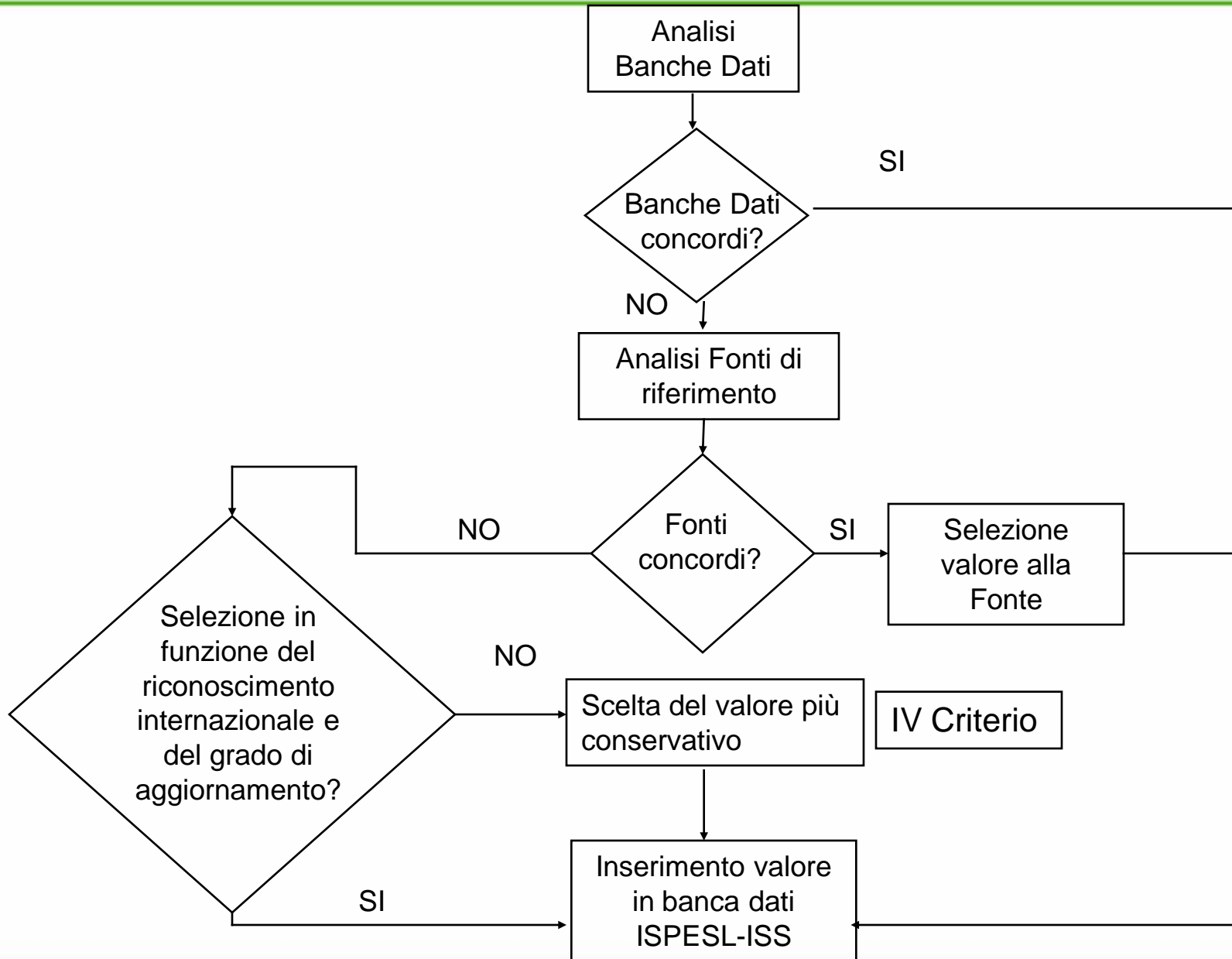


Terza fase

selezione dei valori e inserimento nella banca dati ispesl-iss

CRG_471	71432	Sostanza_471	Benzene	Classe sostanza in 471:	Aromatici	Conc.Limite_18A (mg/kg)	0.1
ID	26	TipoSel	Cancerogeno(ome)	1	Tabella 471	suoi	acqua
						Conc.Limite_18B (mg/kg)	2
						Conc.Limite_AcqSat (µg/L)	1

<i>Ch - Fis Data</i>	ROME	GIUDITTA	RISC	RBCA			
Molec.Weight (g/mol)	78.1	78.1	78	78.1	<i>extra RISC</i>		
Solubility (mg/L)	1750	1700	1750	1750	Density (g/cm3)	0.877	
VaporPres (mm Hg)	95.3	95.3	95.2	95.2	Uptake Factor for Plants	Use Kow	
Henry's Const. (unitless)	0.228	0.225	0.228	0.2288863	MaxContamLevel MCL (mg/L)	0.005	
rome_KocKd	62	giuditta_KocKd	50.9	1.77	Degradation_high-end (1/d)	0.07	
			Kd (mg/L)(mg/kg)	ND	Degradation_low-end (1/d)	0.00095	
Diffusion Coeff. in Air (cm2/s)	0.088	0.088	DiffusionCoefficients in air (cm2/s)	0.088	Oral-Soil Abs. Adjust. Factor	1	
Diffusion Coeff. in Water (cm2/s)	9.8E-06	0.0000098	DiffusionCoefficients in water (cm2/s)	9.8E-006	Oral Water Abs. Adjust. Factor	1	
<i>Tox Data</i>					<i>extra RBCA</i>		
			EPA Carcinogenic Class	A	acid pKa	-	
				EPA Weight of Evidence Carcinogen	base pKa	-	
				Oral Slope Factors 1(mg/kg/day)	0.029	MinContamLevel MCL (mg/L)	0.005
				Dermal Slope Factors 1(mg/kg/day)	0.029	Time Weig. Average (mg/m3)	3.25
				Inhalation Slope Factors 1(mg/kg/day)	0.027	AquaticLifeProt. Criteria (mg/L)	-
				Oral Reference Dose (mg/kg/day)	ND	Bioconcentration Factor (L-water/kg-fish)	12.6
				Dermal Reference Dose (mg/kg/day)	ND	Dermal Rel Absorp. Factor (unitless)	0.5
				Inhalation Reference Dose (mg/kg/day)	ND	Dermal Permeability Coeff. (cm/hr)	0.021
				Oral Reference Dose (mg/kg/day)	0.003	Lag timeDermal Exposure (hr)	0.26
				Dermal Reference Dose (mg/kg/day)	-	CriticalExposure Time (hr)	0.63
				Inhalation Reference Conc. (mg/m3)	5	RelativeContr Dem Perm Coeff. (unitless) Water/Skin	0.0733 917867
						Detection Limits Groundwater (mg/L)	0.002
						Detection Limits Soil (mg/kg)	0.005
						First-Order Decay Half Lives/Saturated (days)	720
						First-Order Decay Half Lives/Unsaturated (days)	720

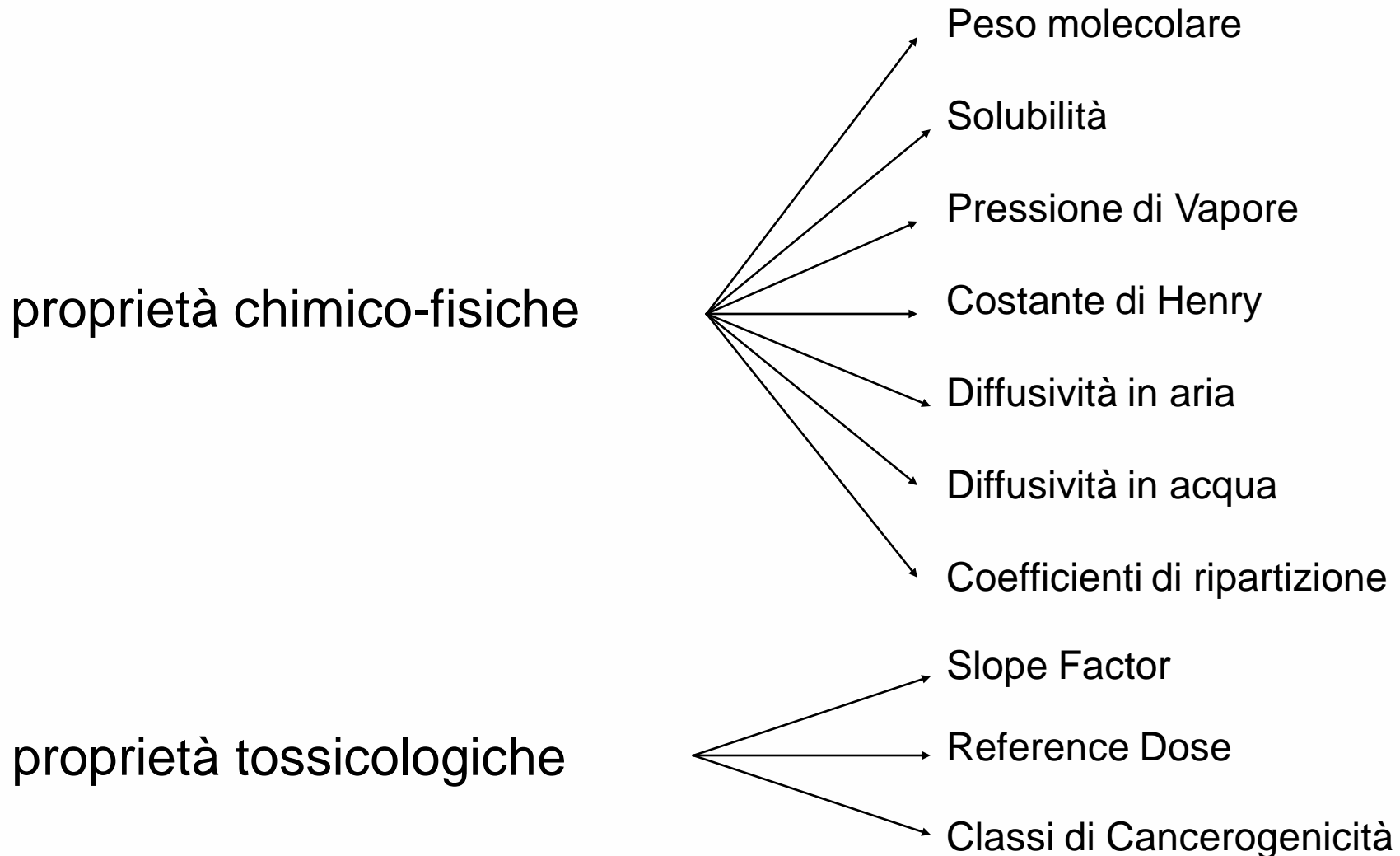


Banche Dati

oltre alle banche dati riportate nei 4 software esaminati:

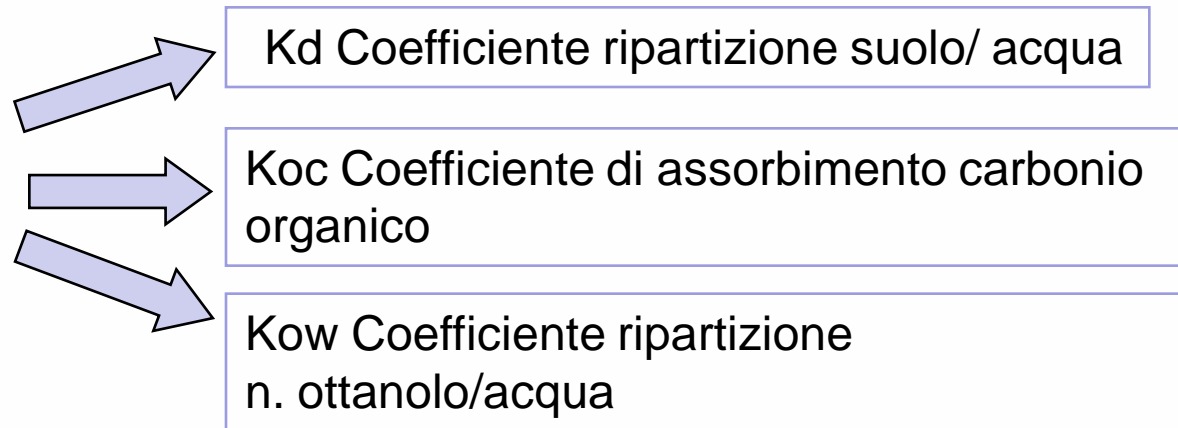
- ▶ U.S. EPA 1996 “Soil Screening Guidance: Fact Sheet
- ▶ IRIS (USEPA)
- ▶ HEAST (USEPA)
- ▶ RAIS (RISk Assessment Information System che utilizza dati USEPA)
- ▶ TEXAS <http://www.tceq.state.tx.us/remediation/trrp/trrppces.html>
- ▶ ATSDR [//www.atsdr.cdc.gov/toxpro2.html](http://www.atsdr.cdc.gov/toxpro2.html)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

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



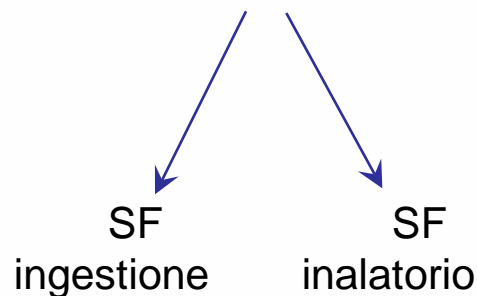
Parametri studiati per le sostanze indicate nel D.Lgs 152/06

Coefficienti di Ripartizione

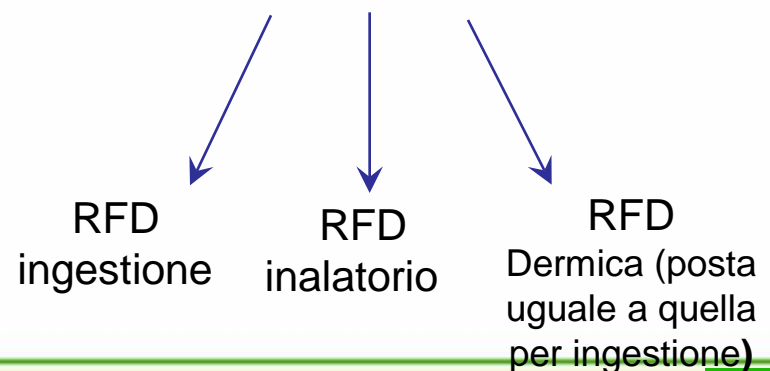


Tali parametri sono influenzati dal pH del terreno, dal potenziale Redox, ecc.

SLOPE FACTOR(SF)



REFERENCE DOSE(RFD)



PARAMETRI SITO SPECIFICI

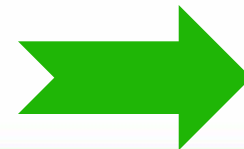
Parametri definiti analiticamente:

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

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.



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/

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

- n 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

- n 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 (Massachusetts 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

- n 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

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 in 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	-	D			8.00E-02	1.14E-01

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



Solubilità

Test di cessione : Metodo definito dalla norma ISO 10802
in Acqua deionizzata rapporto solido/liquido 1:10

Sali specifici : come riportato dalla banca dati ATSDR.