



Wallonie
environnement
SPW

SPAQuE



Polluants non normés

Sophie CREVECOEUR, ISSeP
Jean-François HEILIER, SPAQuE
Thomas LAMBRECHTS, SPW

Formation FEDEXSOL
14 novembre 2019

Points abordés

1. BD PNN nouveau format: comment bien utiliser l'outil ?
2. Sélection des polluants pertinents: comment bien élaborer son programme d'investigations et d'analyses ?
3. Sélection des VTR (valeurs toxicologiques de référence): présentation des principes d'une analyse approfondie via des cas concrets
4. Encodage dans S-Risk: présentation de certaines consignes via des cas concrets

1. BD PNN nouveau format: comment bien utiliser l'outil ?

- Disponible sur notre site internet:

<https://sol.environnement.wallonie.be/home/documents/le-coin-des-specialistes-experts-laboratoires/polluants-non-normes-pnn.html>

- Sera mise en ligne pour fin du mois de novembre (👉)
- Passage d'un fichier EXCEL à une base de données ACCESS



ACCUEIL SOL ACCUEIL DÉCHETS FORMULAIRES SOL FORMULAIRES DÉCHETS SOLS LÉGISLATION DOCUMENTS

DOCUMENTS

Vous êtes ici: Accueil > Documents > Le coin des spécialistes (experts, laboratoires, ...) > Polluants Non Normés (PNN)

Les Polluants Non-Normés (PNN)

Une base de données relative aux polluants non normés (BD PNN) est mise à disposition des experts agréés dans le cadre de la réalisation des études de sols en Région wallonne. Les données reprises dans cette base de données ont été élaborées conformément à l'Art II du décret sols, sur base des avis des vigiles désignés par le Gouvernement wallon, à savoir la SPAQuE et l'ISSeP.

Une mise à jour est prévue régulièrement. Il est donc important pour l'utilisateur de toujours consulter la dernière version à jour, disponible sur le site Internet de la DAS, et de référencer dans son étude la version de la base de données utilisée.

Base de données PNN - v1 - mars 2017

Base de données PNN - v2 - septembre 2017

La deuxième mise à jour de la base de données comprend les changements suivants :

- Ajout des PNN traités entre janvier et juillet 2017
- Calcul des valeurs limites avec S-RISK pour les PNN repris dans la base de données S-RISK
- Actualisation du protocole de sélection des paramètres physico-chimiques, en regard notamment des spécificités de S-RISK
- Conseils pour l'encodage de PNN dans S-RISK
- Correction d'erreurs mineures

Base de données PNN - v3 - juin 2018

La troisième mise à jour de la base de données comprend les changements suivants :

- Ajout des PNN qui ont fait l'objet d'une demande de la part d'un expert agréé entre septembre 2017 et avril 2018
- Actualisation des valeurs limites par le calcul au moyen de S-RISK WAL d'une série de PNN agréés prioritaires - PNN rencontrés le plus fréquemment
- Ajout des méthodes d'analyse et des limites de quantification pour la matrice eau souterraine
- Actualisation d'un protocole de sélection des paramètres physico-chimiques
- Ajout d'un protocole usant spécifiquement la sélection des VTR et la détermination du caractère cancérogène d'un polluant

Liens

Brochures explicatives et documentation générale

Fiches sur les dégradations des sols

Le coin des spécialistes (experts, laboratoires, ...)

Compendium et guides

Rapport de base

Newsletter Novum Sub Sole

Liste des formations

Les archives des formations

Recommandations de l'Administration

Astuces pour les experts

Projets d'assainissement approuvés

Matinées DSD

Polluants Non Normés (PNN)

1. BD PNN

03/12/2019

4

BD PNN-v3.xlsx - Excel

Fichier Accueil Insertion Mise en page Formules Données Révision Affichage Aide Dites-nous ce que vous voulez faire

Presses-papiers

AK132

Facteurs de transfert de risque - vulnérabilité

VL - synthèse VL - détail VLH (Risc Human) VL - détail VLH (S-Risk) VL - détail VLnappe VL - détail paramètres et VTR VL - PNN sans VL

- Nouvel outil plus convivial
- Fonctionne aussi avec ACCESS RUNTIME
- Encodage des demande d'avis depuis avril 2018 jusqu'à juin 2019
- **Démonstration**



menu général

Bienvenue sur la base de données des polluants non normés (PNN)

fermer la base de données

Vous consultez la version 4 de cette BD PNN, mise en ligne en novembre 2019

Cette base de données reprend des valeurs limites définies pour toute une série de polluants non repris dans l'AGW Normes.

Ces valeurs limites ont été élaborées conformément à l'Art 9 du décret sols, sur base des avis des organes désignés par le Gouvernement wallon, à savoir la SPAQuE et l'ISSeP.

La base de données reprend également des recommandations en termes de méthodes de prélèvement et d'analyse.

mode d'emploi

encodage de données

sélection et exportation

Mode d'emploi de la base de données PNN

Introduction

Cette base de données est mise à disposition des experts agréés en gestion des sols pollués.

Elle reprend des valeurs limites définies pour toute une série de polluants non repris dans l'AGW normes (PNN - polluant non normé). Ces valeurs limites ont été élaborées conformément à l'Art 9 du décret sols, sur base des avis des organes désignés par le Gouvernement wallon, à savoir la SPAQuE et l'ISSeP.

La base de données reprend également des recommandations en termes de méthodes de prélèvement et d'analyse.

Ces valeurs limites ne sont pas des normes au sens du décret sols. Il s'agit de recommandations à destination des experts. Il appartient à l'expert de :

- toujours analyser les hypothèses et procédures de calcul ayant mené à la détermination de ces valeurs ;
- se référer au CWBP en ce qui concerne la bonne utilisation de ces valeurs pour la réalisation des études de sols.

Cette base de données est évolutive et tient compte des retours d'expérience des experts. Une veille scientifique est également programmée pour cette base de données, avec une réévaluation des hypothèses de calcul: paramètres physico-chimiques, valeurs toxicologiques de référence, modèles, ...

En conséquence, la base de données est mise à jour régulièrement. L'utilisateur doit toujours consulter la dernière version à jour et référencer dans son étude la version de la base de données utilisée. En effet, une procédure d'assainissement entamée peut se poursuivre sur base des valeurs limites utilisées et acceptées dans le cadre de l'étude d'orientation.

questions/remarques ? --> votre contact: thomas.lambrechts@spw.wallonie.be

Protocoles

Les protocoles de calcul des valeurs limites et de sélection des méthodes analytiques sont disponibles sur notre site internet <http://dps.environnement.wallonie.be/home.html>

Vous trouverez également ci-contre les liens vers ces protocoles

[protocole](#) à compléter une fois les protocoles validés et mis en ligne

menu général mode emploi

Mode d'emploi de la base de données PNN

Rappel des règles de base

Pour les phases d'orientation et de caractérisation:

- la valeur limite pour le sol correspond au minimum entre la VLH pour l'usage sélectionné (valeur limite pour la santé humaine) et la VLN (valeur limite pour le risque de transport par lessivage vers la nappe)
- la valeur limite pour l'eau souterraine correspond à la VLnappe (valeur limite pour les risques d'utilisation de l'eau souterraine)

Des valeurs limites spécifiques sont également disponibles pour l'évaluation des risques

- VLnappe_non_exploitable: valeur limite pour les risques d'utilisation de l'eau souterraine, valable uniquement pour les nappes non exploitables
- VLnappe_volatilisation: valeur limite pour les risques pour la santé humaine par volatilisation des polluants depuis la nappe

FAQ

Quel est le modèle utilisé pour déterminer les VLH ?

Le modèle utilisé pour la version 1 de la BD PNN était RISC-HUMAN.
Pour les versions suivantes, le modèle utilisé est S-RISK WAL.
Une actualisation des données est progressivement effectuée et, en cas de re-calcul avec S-RISK, les valeurs obtenues auparavant avec RISC-HUMAN ont été effacées.

Un protocole est disponible pour encoder des données "RISC HUMAN" dans S-RISK : [lien protocole à rajouter une fois les protocoles validés et mis en ligne](#)

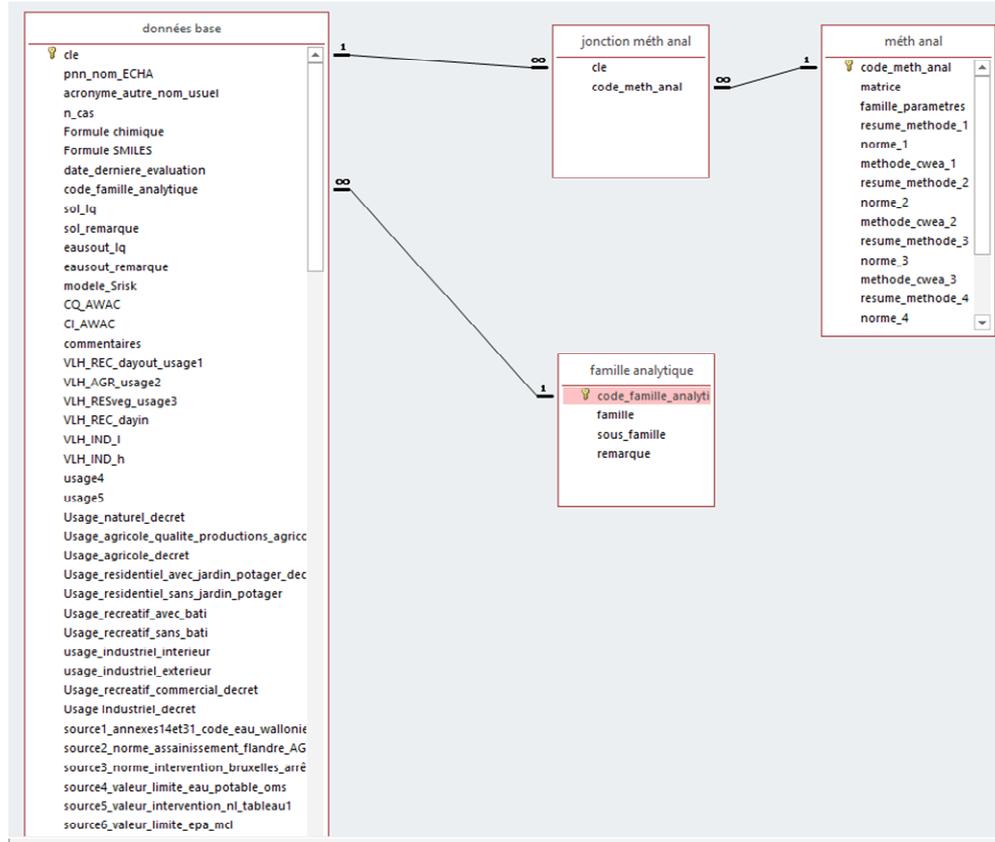
Pour les PNN dont les VLH ont été calculées uniquement avec le modèle RISC HUMAN, l'expert peut décider de recalculer ces valeurs limites avec S-RISK sur base des paramètres toxicologiques et physico-chimiques repris dans la BD PNN. Dans ce cas, l'expert doit mettre en évidence ce choix dans son étude et documenter les calculs.

Pourquoi les VLH type II (usage agricole) ne sont pas déterminées pour mon PNN ?

Les VLH calculées avec S-RISK comportent une VLH pour un usage de type II, à l'inverse des calculs avec RISC-HUMAN.
En cas d'absence de VLH de type II :

- en zone de protection de captage, l'expert peut en première approche considérer la valeur limite adaptée à l'usage de fait/de droit du terrain.
L'aspect risque de lessivage sera pris en compte via la VLN (non déclinée en fonction du type d'usage).
- pour un usage agricole hors zone de protection de captage, l'expert peut en première approche considérer un usage résidentiel ou passer directement à une étude détaillée des risques.

Pourquoi est-il mentionné que la valeur limite est indicative ?



Menu d'encodage des données



il est possible d'encoder directement des données dans les tables, ou alors de passer par des formulaires d'encodage.

Avantage des encodages dans une table: parfois plus rapide.

Avantage des encodages dans un formulaire: plus visuel, les unités sont précisées, de même que des consignes d'encodage.

Consignes d'encodage:

1) rajouter une nouvelle méthode d'analyse ou une nouvelle famille analytique

--> d'abord créer la nouvelle méthode dans la table "méth anal", ou la nouvelle famille analytique dans la table "famille analytique"

--> ensuite modifier le code "famille analytique" dans la table "données base"

--> ensuite modifier les jonctions entre le code du PNN et le code "méth anal" dans la table de jonction "jonction méth anal"

2) rajouter un nouveau PNN

--> d'abord créer les nouvelles données dans la table "données base"

--> rajouter ensuite les jonctions avec les méthodes d'analyse dans la table de jonction "jonction méth anal"

Encodage par les formulaires d'encodage

1e étape - ajout de nouvelles méthodes d'analyse ou de familles analytiques

Ouvrir formulaire "méthodes d'analyse"

Ouvrir formulaire "familles analytiques"

2e étape - encodage des données de base (toujours commencer par la partie 1)

Ouvrir formulaire "données de base - partie 1"

Ouvrir formulaire "données de base - partie 2"

3e étape - encodage des jonctions entre le code PNN et les codes de méthodes d'analyse

Ouvrir formulaire "jonction PNN - méthodes d'analyse"

menu général menu_selection

menu de sélection

cle     

pnn_nom_ECHA

acronyme_autre_nom_usuel

n_cas

Choix de l'état papier à visualiser et exportation

| | |
|-----------------------------------|----------|
| données générales | exporter |
| données VLnappe | exporter |
| données physico-chimiques | exporter |
| données toxicologiques S RISK | exporter |
| données toxicologiques Risc Human | exporter |
| données analytiques | exporter |

attention, on ne peut pas exporter vers un fichier excel la mise en page, seulement les noms et données des champs.

1. BD PNN

03/12/2019

12

menu général menu_selection données base

cle
 pnn_nom_ECHA
 acronyme_autre_nom_usu
 n_cas
 sol_lq *limite de quantification pour la matrice sol ; unité: mg/kg MS*
 sol_remarque
 eausout_lq *limite de quantification pour la matrice eau souterraine ; unité: µg/l*
 eausout_remarque
 famille
 sous_famille
 remarque

ssetat methodes

méthodes analytiques

| | | | | | | |
|----|---|------------------------------------|------------------------------------|--|--|--|
| 18 | ESO | Digestion acide | ICP-MS | | | |
| | Métaux | | | | | |
| | A appliquer en fonction de la nature de l'eau | NBN EN ISO 15587-1 : 2002 ; NBN EN | NBN EN ISO 17294-1 : 2006 ; NBN EN | | | |
| | | | E-II-1.2.2 | | | |
| | ESO | Digestion acide | Dosage ICP OES | | | |
| | Métaux | | | | | |
| | A appliquer en fonction de la nature de l'eau | NBN EN ISO 15587-1 : 2002 ; NBN EN | NBN EN ISO 11885 : 2009 | | | |
| | | | E-II-1.2.1 | | | |
| | SOL | Extraction ETM eau régale | ICP-MS (sol) | | | |
| | Métaux | | | | | |
| | | NBN EN 16174 - 2019 | NBN EN 16171 - 2016 | | | |

The screenshot shows a web application interface with a header 'menu de sélection' and two tabs: 'menu général' and 'menu_selection'. Below the header, there are four input fields with labels: 'cle' (value: 18), 'pnn_nom_ECHA' (value: barium), 'acronyme_autre_nom_usuel' (empty), and 'n_cas' (value: 7440-39-3). To the right of these fields are three navigation buttons: a group icon, a right arrow, and a left arrow. Below the input fields is a section titled 'Choix de l'état papier à visualiser et exportation' containing six rows of data, each with a label and an 'exporter' button:

| Label | Action |
|-----------------------------------|----------|
| données générales | exporter |
| données VLnappe | exporter |
| données physico-chimiques | exporter |
| données toxicologiques S RISK | exporter |
| données toxicologiques Risc Human | exporter |
| données analytiques | exporter |

A 'Copier vers' dialog box is open, showing a list of export formats. The first option, 'Classeur Excel 97-2003 (*.xls)', is selected. Other options include 'Classeur Microsoft Excel 5.0/95 (*.xls)', 'Fichiers texte (*.txt)', 'Format de capture instantanée (*.snp)', 'Format PDF (*.pdf)', 'Format RTF (*.rtf)', 'Format XPS (*.xps)', 'HTML (*.htm; *.html)', and 'XML (*.xml)'. The dialog has 'OK' and 'Annuler' buttons, and a 'Copier' section with radio buttons for 'Tout' and 'Sélection'.

attention, on ne peut pas exporter vers un fichier excel la mise en page, seulement les noms et données des champs.

Annexes à la BD PNN

1. Les protocoles de sélection des données (y compris les anciennes versions)
 2. La procédure de demande d'avis + fichier excel pour méthodes d'analyse
- Une notice explicative pour l'encodage dans S-Risk
- Le glossaire

Ce glossaire reprend des informations complémentaires sur certains PNN. Quand un PNN est repris dans le glossaire, un renvoi est mentionné dans la base de données PNN (BD PNN).

Les PNN sont classés par clé d'identification dans la BD PNN.

Remarque importante

Les informations reprises dans ce glossaire sont issues des avis rendus par l'ISSeP (Institut Scientifique de Service Public) et SPAQuE (Société Publique d'Aide à la Qualité de l'Environnement) dans le cadre de la mise en application du Décret Sols.

Ces avis sont fondés sur des données scientifiques valides, citées dans le glossaire.

Cependant, ces avis doivent être remis dans un délai rapide, incompatible avec une analyse toxicologique exhaustive et approfondie. Les données n'ont par ailleurs pas fait l'objet d'une validation par un comité toxicologique.

Enfin, la philosophie de ces avis vise à éviter au maximum de se retrouver avec des PNN sans valeurs limites.

Index

| | | |
|------------------------------------|-----------------------------------|----|
| 1 | 330 – Yttrium | 12 |
| 107 – p-cymène | 331 – Zirconium | 13 |
| 133 – dioxine de Seveso | 333 – Cyazofamid | 15 |
| 140 – Cyanures totaux | 334 – diisopropyl phthalate | 18 |
| 3 | 335 – dipropyl phthalate | 18 |
| 322 - trichlorofluoromethane | 336 – dipentyl phthalate | 18 |
| 323 – dioctyl phthalate | 337 – diheptyl phthalate | 18 |
| 324 - Sulfite | 339 - Propiconazole | 24 |
| | 340 - Permethrin | 30 |

2. Sélection des polluants pertinents: comment bien élaborer son programme d'investigations et d'analyses ?

03/12/2019

16

Constat: certaines demandes d'avis PNN et études de sol s'apparentent à des « listes de courses »

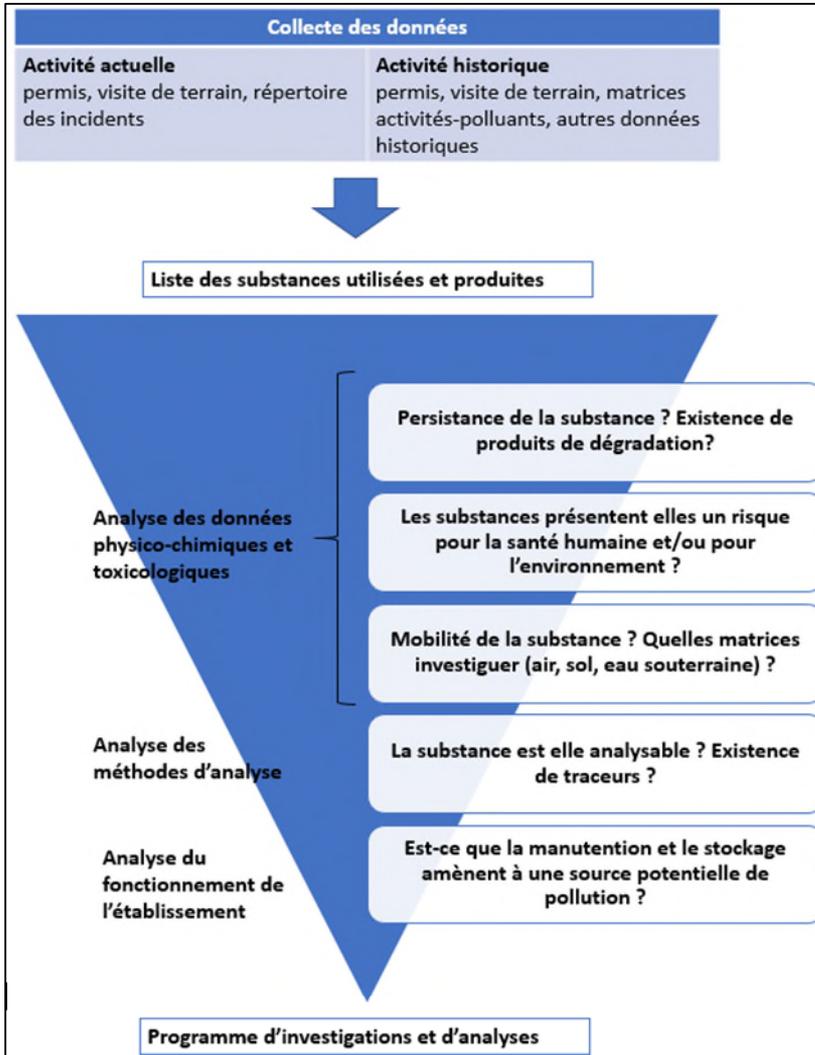
- Avis d'expert nécessaire pour sélectionner les polluants pertinents
- Pour des établissements/situations complexes, envisager des traceurs, analyser les fiches de données de sécurité, les pratiques de l'établissement, ...
- Minimiser les investigations tout en garantissant une analyse des risques complète et pertinente



2. Polluants pertinents

- Diagramme de réflexion proposé sur base de retours d'expériences pour plusieurs établissements du secteur chimique
- Diagramme repris dans le document « procédure de demande d'avis PNN »

NB: matrice activités-polluants du BRGM <http://ssp-infoterre.brgm.fr/matrice-activites-polluants>



Cas concret : établissement chimique et réalisation d'une EO

A. Demande d'avis PNN

- dossier complet (identification établissement, usages, activités, n° CAS, méthodes d'analyses), mais ...
- 42 substances !

B. Demande de complément: sélection critique des polluants pertinents

C. Réception analyse critique de l'expert: type de produit, comportement, traceur, produit de décomposition, ...

2. Polluants pertinents

03/12/2019

19

| A | C | E | F | G | H | I | K | L | M | N | O | Q | R | S | |
|----|---------|------------|--|---------------------------------------|--|--------------|----------------------------|-------------------|--------------------------|-------------------|--------------------------|-------|--|-------------------------------------|------|
| N | Contenu | Volume tot | Polluant normé (N)/ non normé avec données(P) / nécessité de faire une demande (D) | Type de produit | Etat T°C et Pression atmosphérique | n° CAS | composé analysé ou traceur | n° CAS du traceur | Référence du laboratoire | méthode d'analyse | limite de quantification | unité | produit de décomposition chimique | produits de décomposition thermique | Note |
| 2 | 1 | 37 m³ | D | matière première (peroxyde) | liquide mais réagit violemment avec l'eau | 36727-29-4 | pH | - | pH (pnr. 180) | conform NEN-EN | 0 | | | | |
| 4 | 3 | 37 m³ | D | matière première (peroxyde) | liquide mais réagit violemment avec l'eau | 760-67-8 | pH | - | pH (pnr. 180) | conform NEN-EN | 0 | | | | |
| 8 | 7 | 37 m³ | D | matière première (peroxyde) | liquide mais réagit violemment avec l'eau | 79-30-1 | pH | - | pH (pnr. 180) | conform NEN-EN | 0 | | | | |
| 9 | 8 | 100 m³ | N | flegmatissant (hydrocarbures C12) | liquide | 1174522-09-8 | Indice C10-C35 | - | Oil-GC | equivalent à NEN | 50 | ug/l | | | |
| 10 | 9 | 89 m³ | D | réactif (peroxyde) | liquide mais réagit violemment avec l'eau | 98-88-4 | pH | - | pH (pnr. 180) | conform NEN-EN | 0 | | acide chlorhydrique et acide benzoïque (cas 65 85 0) | | |
| 12 | 11 | 35 m³ | N | flegmatissant (hydrocarbures C12) | liquide | 9082-00-2 | Glycerol | 56-81-5 | | house method | 2 | mg/l | | | |
| 13 | 12 | 35 m³ | N | flegmatissant (hydrocarbures C12) | liquide | 31807-55-3 | Indice C10-C35 | - | Oil-GC | equivalent à NEN | 50 | ug/l | | | |
| 15 | 14 | 58 m³ | N | flegmatissant (hydrocarbures C10-C13) | liquide | 64771-72-8 | Indice C10-C35 | - | Oil-GC | equivalent à NEN | 50 | ug/l | | | |
| 19 | 18 | 100 m³ | D | peroxyde (produit) | liquide incolore à odeur acre | 75-91-2 | 2-methylpropan-2-ol | 75-65-0 | pnr. 65196 | own method (Pro | 50 | ug/l | | | |
| 22 | 21 | 40 m³ | - | fluide caloporteur non dangereux | liquide | | Potassium | 7440-09-7 | K (pnr. 12771) | Conform NEN-EN | 500 | ug/l | carbonate de potassium, hydroxyde de potassium | | |
| 25 | 24 | 34,5 m³ | - | réactif (peroxyde) | liquide | 7722-84-1 | Redox dans l'eau | - | O2 (pnr.182) | conform NEN-ISO | 0,1 | mg/l | eau et oxygène | | |
| 29 | 28 | 100 m³ | P | matière première (peroxyde) | liquide | 75-65-0 | 2-methylpropan-2-ol | 75-65-0 | pnr. 65196 | own method (Pro | 50 | ug/l | | | |
| 30 | 29 | 10 m³ | D | matière première (peroxyde) | liquide | 123-54-6 | screening volatil | - | pnr. 40696 | conform NEN-EN | 0,05 | mg/l | | | |
| 31 | 30 | 50 m³ | D | matière première (peroxyde) | liquide | 25167-70-8 | screening volatil | - | pnr. 40696 | conform NEN-EN ?? | | ug/l | | | |
| 32 | 31 | 75 m³ | P | flegmatissant | liquide | 131-11-3 | dimethyl phthalate | 131-11-3 | pnr. 11156 | house method | 1 | ug/l | | | |
| 35 | 34 | 34,7 m³ | D | matière première (peroxyde) | liquide | 123-42-2 | screening volatil | - | pnr. 40696 | house method (R | 0,1 | ug/l | | | |
| 36 | 35 | 34,7 m³ | P | matière première (peroxyde) | liquide incolore avec odeur caractéristique proche de l'acétone (densité=0,8) | 78-93-3 | Methyl ethyl cétone | 78-93-3 | MEK (pnr. 9062) | house method | 0,01 | mg/l | | | |
| 38 | 37 | 34,7 m³ | D | matière première (peroxyde) | liquide incolore avec odeur caractéristique proche de l'acétone et de la menthe poivrée (densité=0,94) | 108-94-1 | solvant polaire | - | pnr. 69296 | house method (P | 0,05 | mg/l | | | |
| 42 | 41 | 37 m³ | D | matière première (peroxyde) | liquide mais réagit violemment avec l'eau | 4092-82-8 | pH + chlorure dans l'eau | - | pH (pnr. 180)/ Cl (pnr | conform NEN-ISO | 1 | mg/l | | | |
| 43 | 42 | 37 m³ | D | matière première (peroxyde) | liquide mais réagit violemment avec l'eau (densité 0,98) | 3282-30-2 | pH + chlorure dans l'eau | - | pH (pnr. 180)/ Cl (pnr | conform NEN-ISO | 1 | mg/l | | | |
| 44 | 43 | 50 m³ | - | basse | liquide | | pH | - | pH (pnr. 180)/ K (127 | conform NEN-EN | 0/500 | ? | ug/l | | |
| 46 | 45 | 34,5 m³ | - | acide | liquide avec forte odeur d'acide acétique | 108-27-7 | pH | - | pH (pnr. 180) | conform NEN-EN | 0 | | acide acétique | | |
| 48 | 47 | 89m³ | D | matière première (peroxyde) | liquide (densité 0,98) | 24468-13-1 | pH | - | pH (pnr. 180) | conform NEN-EN | 0 | | | | |

D. Phasage de la demande d'avis en 2 parties, après concertation avec expert

D.1. Validation du programme d'investigations et d'analyses par ISSeP

- Analyse de la grille d'investigation
- Visite de terrain en présence de: agent traitant DAS, ISSeP, expert, responsable environnement
- Envoi d'un premier avis par courriel et concertation avec expert
- Identification claire des PNN pour lesquels des VL doivent être calculées

D.2. Calcul des valeurs limites par ISSeP et SPAQuE **pour 6 PNN**

Qu'en retenir ?

- Importance de l'analyse critique de l'expert, permettant
 1. amélioration de la pertinence du programme d'investigations
 2. réduction des investigations et donc des coûts
 3. gain de temps pour l'administration

- Ce n'est pas à l'administration de faire le travail de sélection des polluants, mais la DAS est disponible pour une concertation

- Soyez proactifs, contactez nous en amont de l'introduction de l'étude !

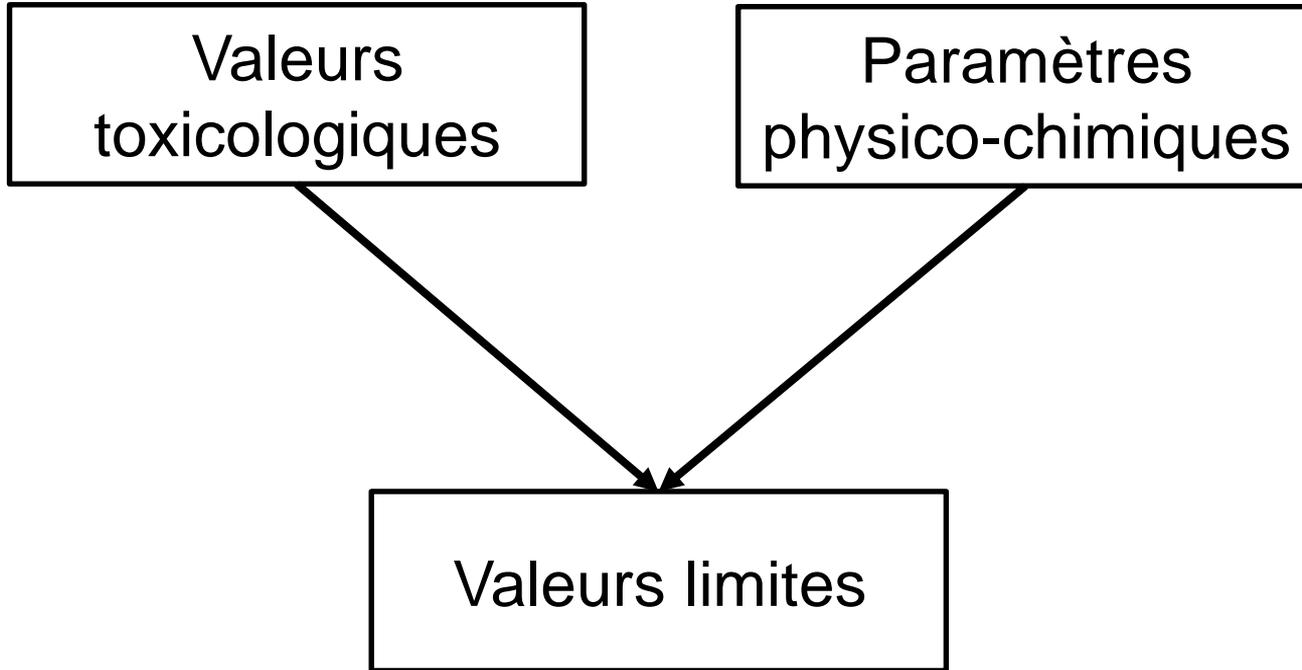


3. A la recherche de la VTR...

Jean-François HEILIER

Pharmacien-Toxicologue

SPAQUE – Centre d'expertises techniques



Valeur toxicologique de référence (VTR)

La VTR est une estimation de la concentration d'exposition à une substance chimique qui est théoriquement sans effet néfaste pour la santé humaine (INERIS, 2014).

Elle est établie à partir des données toxicologiques et épidémiologiques disponibles sur l'effet de la substance (potentiel dangereux).

Elle est spécifique d'un effet («à seuil» ou «sans seuil») et d'une durée d'exposition (exposition aiguë, sub-chronique ou chronique), et est généralement établie distinctement pour chacune des voies d'exposition (VTR_{inh} , VTR_{or} et $VTR_{contact\ cutané}$).

Glossaire du Code Wallon de Bonnes Pratiques Version 04

Décret du 1 mars 2018 relatif à la gestion et à l'assainissement des sols

Comment est construite une VTR ?

- Données épidémiologiques:
 - Exposition professionnelle:
 - apprécie l'exposition d'un groupe de travailleurs (durée, intensité, fréquence)
 - mesure un effet (sur la santé)
 - Exposition population générale
- Données expérimentales
 - *in vitro*: p.ex. modèles de culture cellulaires (p.ex: génotoxicité)
 - *in vivo*: expérimentation animale (p.ex: cancérogénicité)

Comment est construite une VTR ?

- Expérimentale - *in vivo*:
 - OECD *Guidelines for the Testing of Chemicals* (150 méthodes)
 - Limites
 - substance pure existe
 - exposition est possible
 - temps (étude de cancérogenèse chez le rongeur 18 mois à 24 mois)
 - coût

Comment est construite une VTR ? (p.ex. effet à seuil) 03/12/2019 27

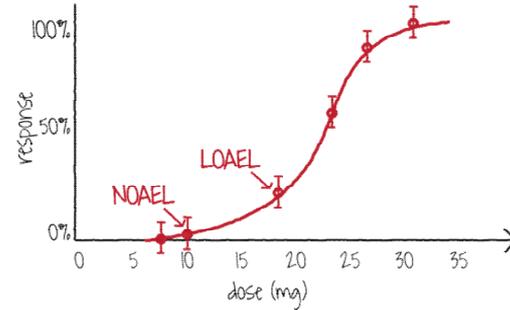
Dose - effet



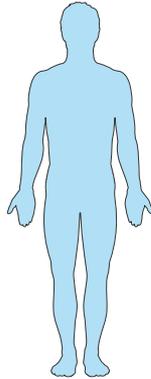
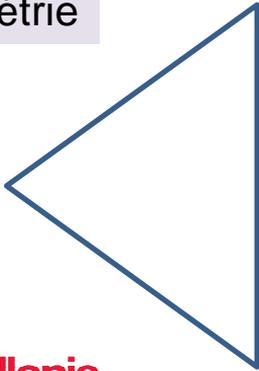
dose létale
effets irréversibles
effets réversibles
absence d'effet

Dose - réponse

Pour un effet critique



Allométrie



Facteurs d'incertitude (UF)

- Toxicocinétique
 - Toxicodynamique
 - Sensibilité de la population
 - Etudes subchroniques
 - Qualité des études
- } **VTR**

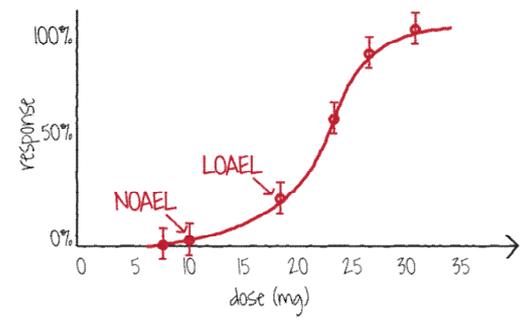
Comment est construite une VTR ?

3. VTR

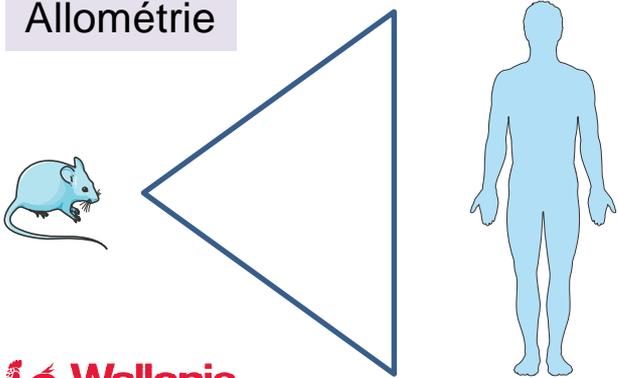
Dose - réponse

Pour un effet

$$VTR = \frac{NOAEL}{F_{Allométrie} \times UF}$$



Allométrie



Facteurs d'incertitude (UF)

- Toxicocinétique
 - Toxicodynamique
 - Sensibilité de la population
 - Etudes subchroniques
 - Qualité des études
- } VTR

A la recherche de la VTR... pour un PNN

SPAQUE



Version Mars 2018

Protocole pour la démarche d'élaboration des
Valeurs Limites (VL_H , VL_N et VL_{nappe})

Cas des PNN (Polluants Non Normés)

Version 3 - Utilisation du modèle S-RISK® - Mars 2018

PNN est « connu »
⇒ VTR

PNN est « inconnu »
pas VTR

1. *Est-il Prioritaire ?*
2. *Peux-t-on construire / sélectionner une VTR ?*

Prioritaire ? Screening à l'aide de la fiche de données de sécurité

03/12/2019
30

Rubrique 2: Identification des dangers

Toxicité chronique:

- H34x : mutagénicité
- H35x : cancer
- H36x : reprotoxicité
- H37x : organotoxicité

Rubrique 9: Propriétés physiques et chimiques

Physico-chimie :

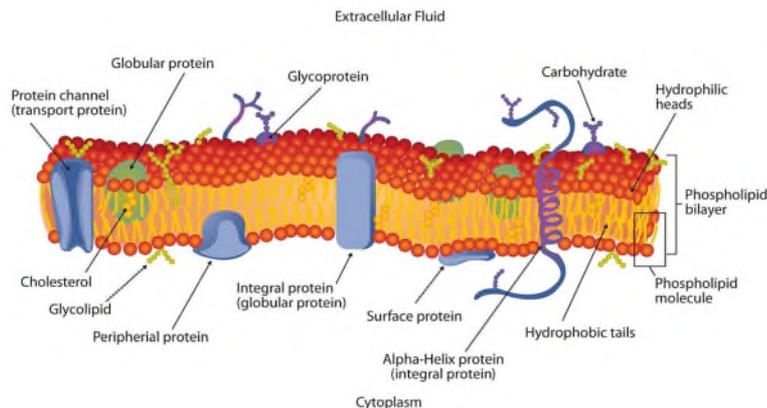
- Volatilité (P_{vap})
- Solubilité (S)
- Lipophilie (K_{ow})

Rubrique 11: Informations toxicologiques

Toxicité aiguë :

- DL_{50} orale rongeur

C.M.R.



A la recherche de la VTR ...

Le PNN est inconnu & prioritaire => approche approfondie ou pragmatique



Sélectionner / construire VTR en quelques jours

⇒ écrire monographie, revue de la littérature

⇒ VTR pour calculer des VL (raisonnablement précautionneuses)

Données inexistantes ou incomplètes

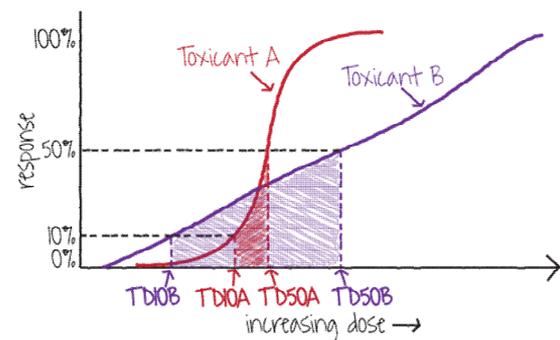
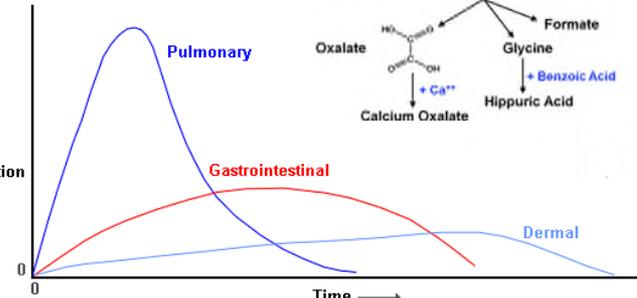
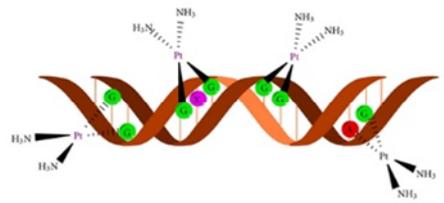
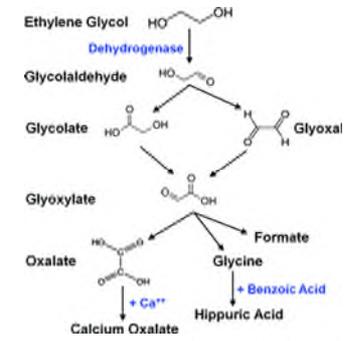
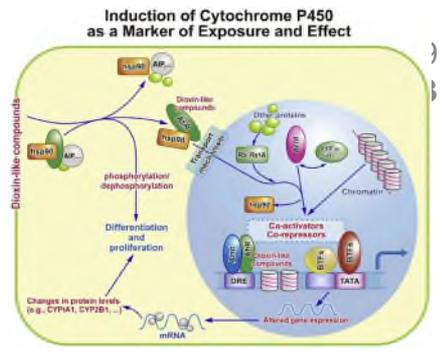
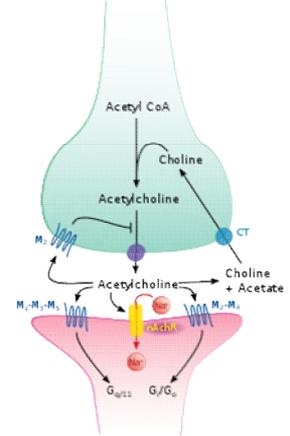
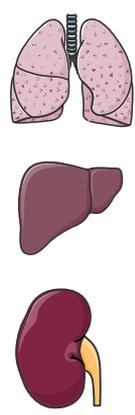
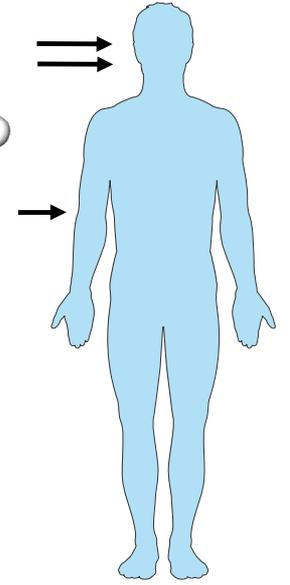
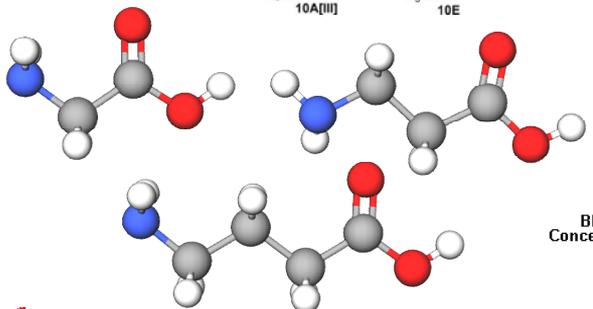
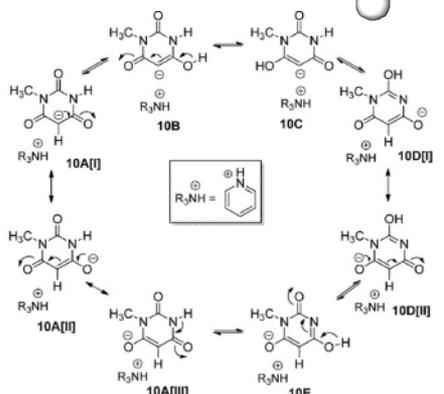
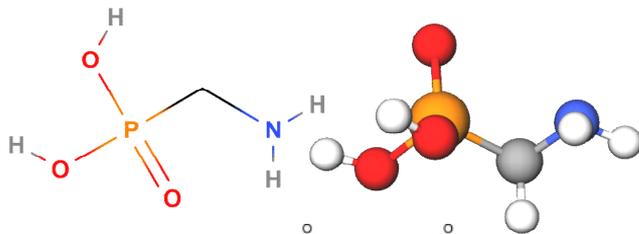


| Threshold effects | | | |
|---|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|
| <input type="checkbox"/> Systemic effects | | | |
| | 1 | 2 | 3 |
| 1-<3 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 3-<6 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 6-<10 | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 10-<15 | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| >15 | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> |
| TDI/TCA | | | |
| inhalation | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| oral | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| dermal | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Units: | | | |
| Oral TDI: mg/(kg bw.d) | | | |
| Inhalation TCA: mg/m ³ | | | |
| Dermal TDU: mg/(kg bw.d) | | | |
| <input type="checkbox"/> Local effects | | | |
| | 1 | 2 | 3 |
| 1-<3 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 3-<6 | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 6-<10 | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 10-<15 | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| >15 | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> |
| TDI/TCA | | | |
| inhalation | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| oral | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |

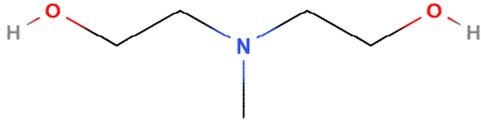
| Non-threshold effects | | | |
|---|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| <input type="checkbox"/> Systemic effects | | | |
| | 1 | 2 | 3 |
| 1-<3 | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 3-<6 | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 6-<10 | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 10-<15 | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| >15 | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| SF/UR | | | |
| inhalation | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| oral | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| dermal | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| Units: | | | |
| Oral SF: 1 / (mg/(kg bw.d)) | | | |
| Inhalation UR: 1 / (mg/m ³) | | | |
| Dermal SF: 1 / (mg/(kg bw.d)) | | | |
| <input type="checkbox"/> Local effects | | | |
| | 1 | 2 | 3 |
| 1-<3 | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 3-<6 | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 6-<10 | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 10-<15 | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| >15 | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| SF/UR | | | |
| inhalation | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| oral | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |

Pour les effets systémiques:
VTR respiratoire + VTR orale

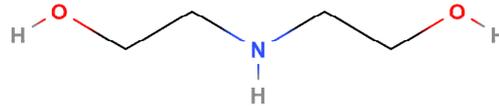
Pour les effets locaux:
VTR respiratoire et/ou VTR orale



Mécanisme d'action: la *N*-méthyldiéthanolamine



N-methyldiéthanolamine

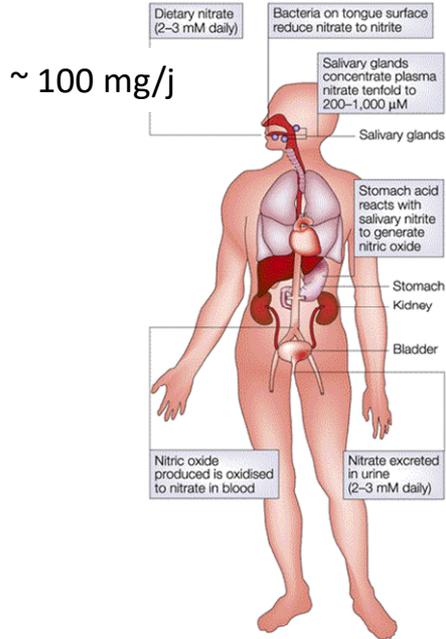


diéthanolamine

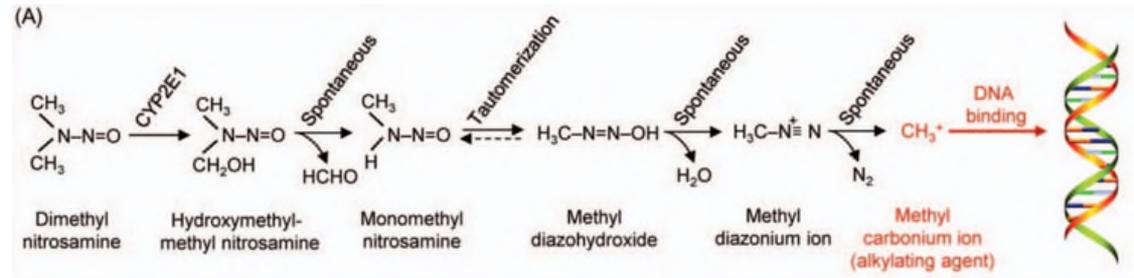
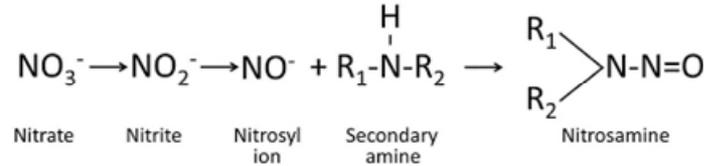


IARC 2B

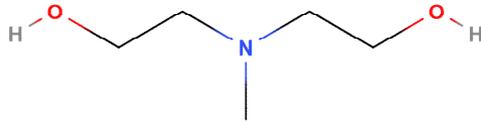
Mécanisme d'action: formation de nitrosamines



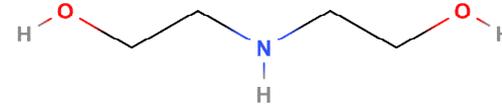
Nature Reviews | Microbiology



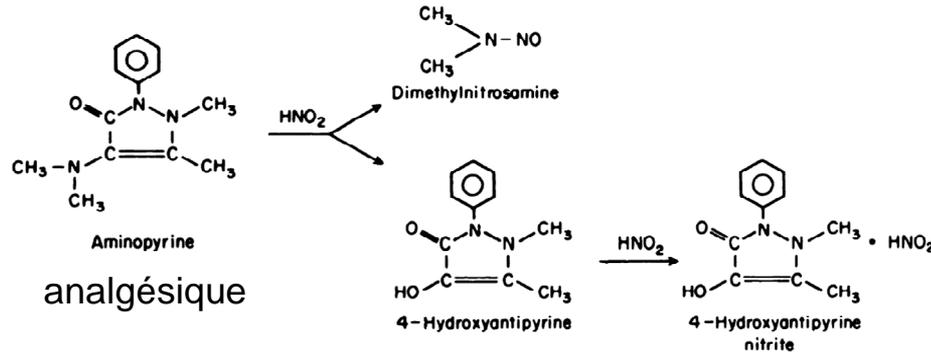
Mécanisme d'action: la *N*-méthyldiéthanolamine peut-elle former des nitrosamines ?



amine tertiaire



amine secondaire

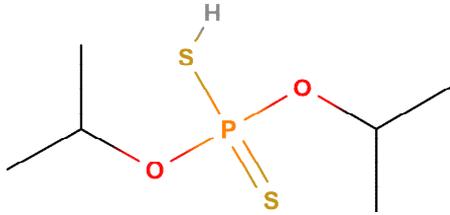


N-déalkylation nitrosante ⇒ formation d'une nitrosamine

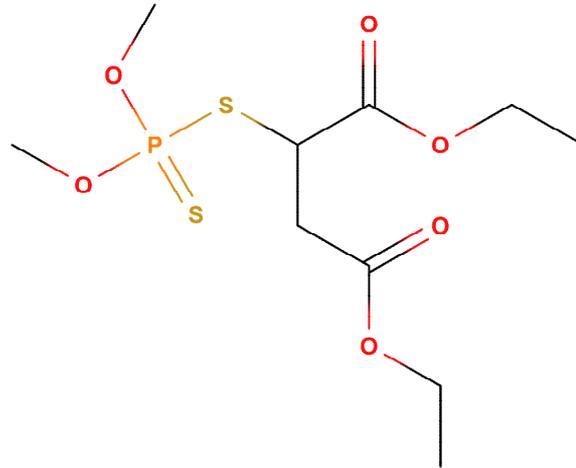
**Approche précautionneuse:
Considérer que la *N*-
méthyldiéthanolamine est
potentiellement cancérigène**

Toxicophore: o,o-Diisopropyldithiophosphate

Molécule chimique ou partie d'une molécule (groupe fonctionnel)
qui est liée aux propriétés toxiques de la substance



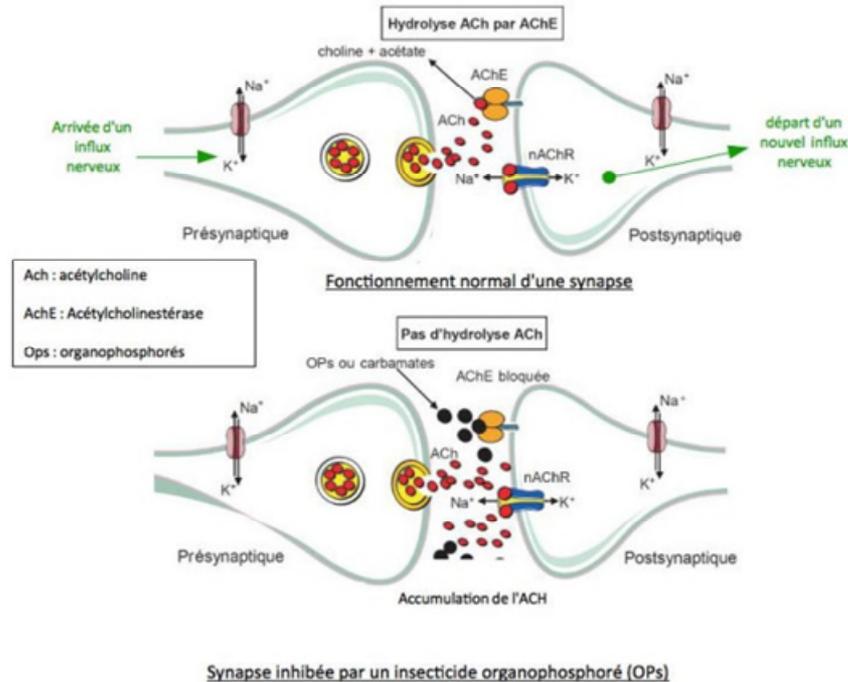
o,o-diisopropyldithiophosphate



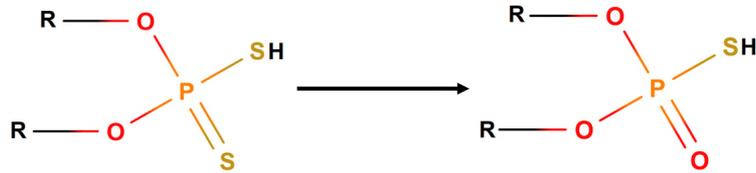
Malathion

Toxicophore: inhibiteur des cholinestérases

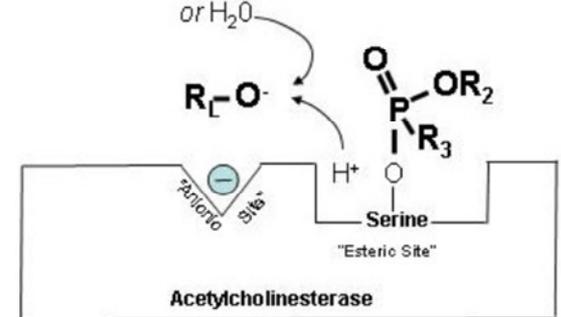
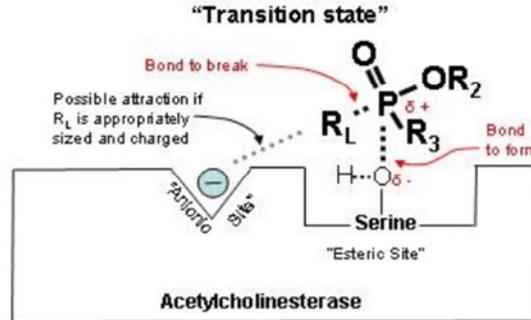
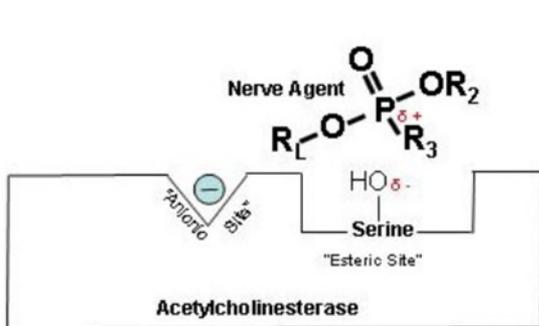
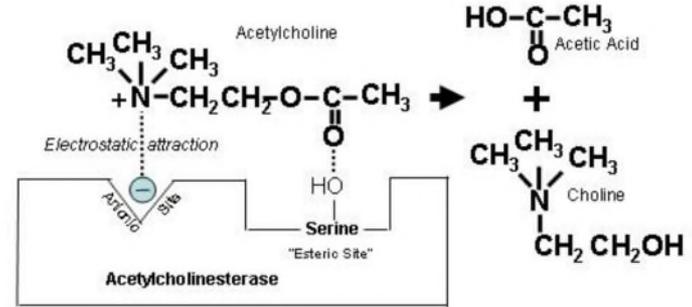
Système nerveux autonome
Parasympathique



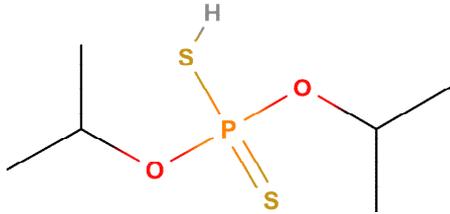
Toxicophore: inhibiteur des cholinestérasés



Dithiophosphate => oxon



Toxicophore: o,o-Diisopropyldithiophosphate



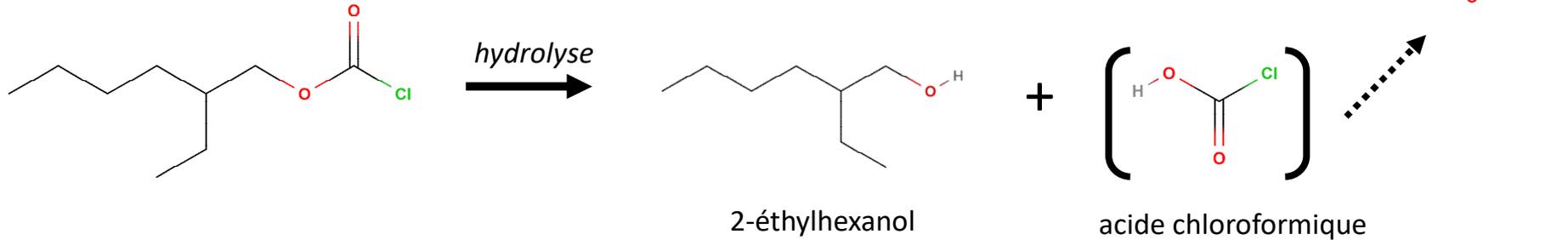
o,o-diisopropyldithiophosphate

Approche précautionneuse:

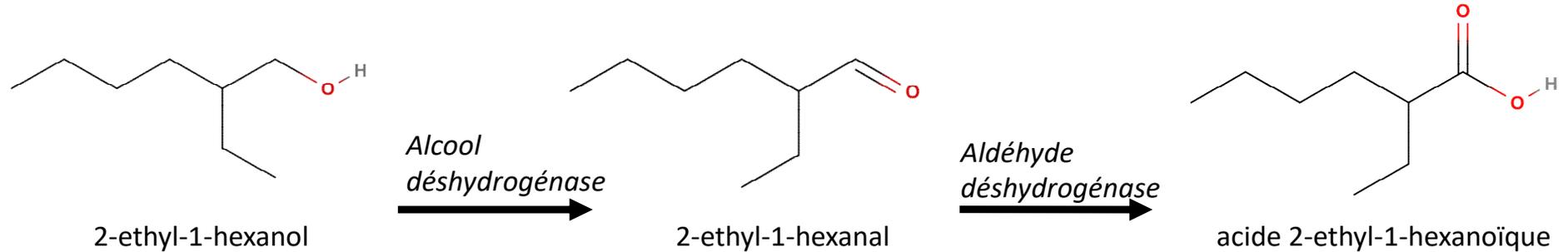
- **Considérer la substance comme un inhibiteur des cholinestérases (effet critique)**
- **Dériver une VTR à partir de la VTR du malathion**
- **Appliquer un facteur de correction (rapport des masses moléculaires)**

Toxicocinétique: Stabilité et biotransformation du éthylhexylchloroformate

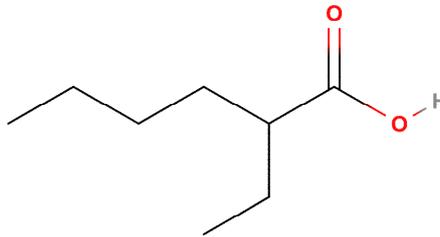
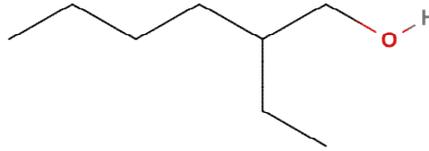
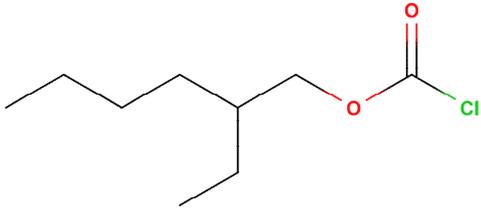
Stabilité de la molécule en milieu biologique



Toxicocinétique: biotransformation du éthylhexylchloroformate



Toxicocinétique: éthylhexylchloroformate



L'éthylhexylchloroformate est instable.

Considérer la toxicité de

- **2-ethyl-1-hexanol**
- **acide 2-ethyl-1-hexanoïque**



EPA/690/R-19/001F | April 23, 2019 | FINAL

Provisional Peer-Reviewed Toxicity Values for

2-Ethylhexanol
(CASRN 104-76-7)

Read across – références croisées

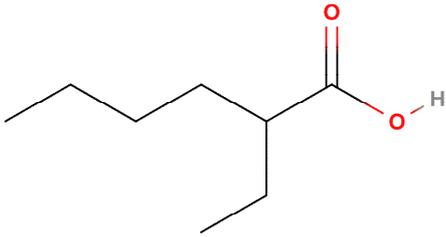
Ce qui se ressemble ... agit de la même façon

→ simple en apparence – complexe en réalité

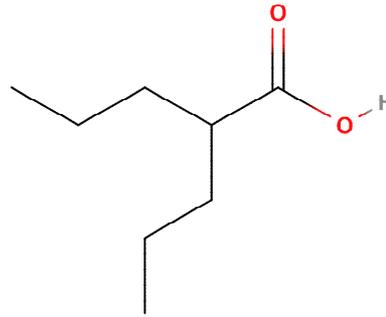
Comparer:

- Structure chimique et les groupes fonctionnels;
- Réactivité et les “alertes structurales” (cf. toxicophore);
- Propriétés physico-chimiques;
- Métabolites / produits de dégradation;
- Effets critiques

Read across: acide 2-ethyl-1-hexanoïque



acide 2-ethyl-1-hexanoïque



acide 2-propylpentanoïque

acide valproïque



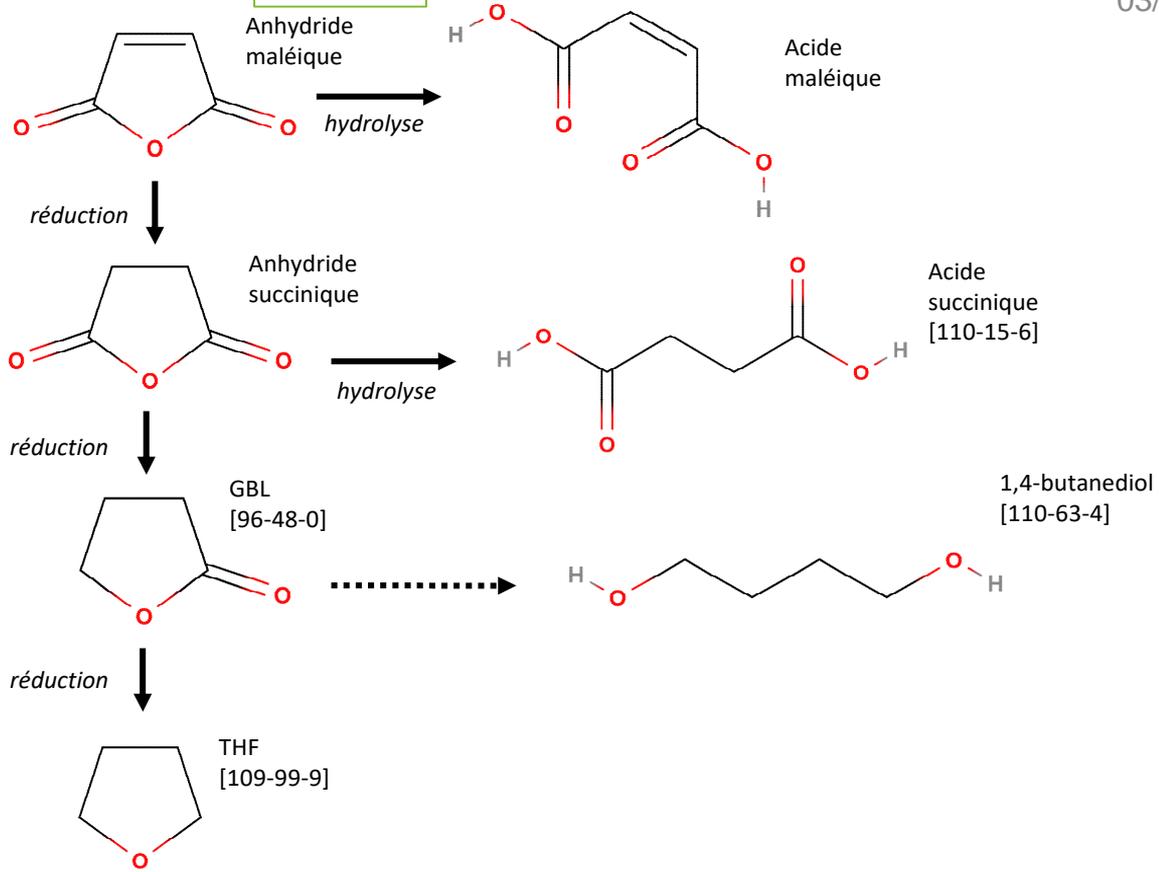
Dépakine: antiépileptique
(antidépresseur / anxiolytique)
→ Médicament tératogène

Chimie, toxicocinétique et mécanisme d'action: Perspectives

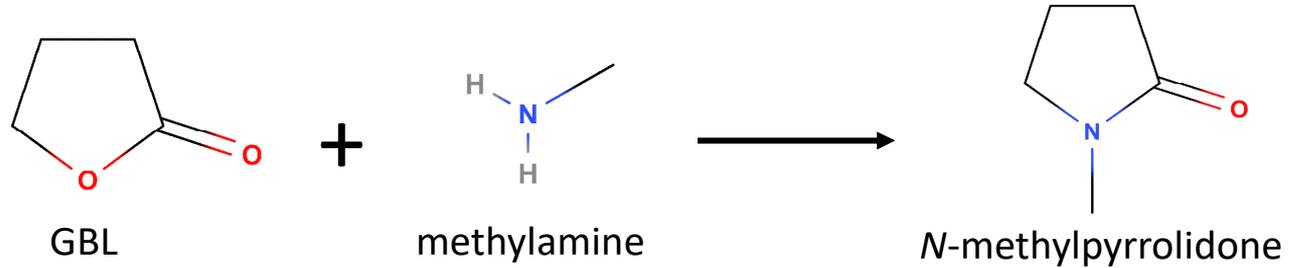
- Tetrahydrofurane
- *N*-methylpyrrolidone
- gamma-butyrolactone
- 1,4-butanediol
- acide maléique

3. VTR

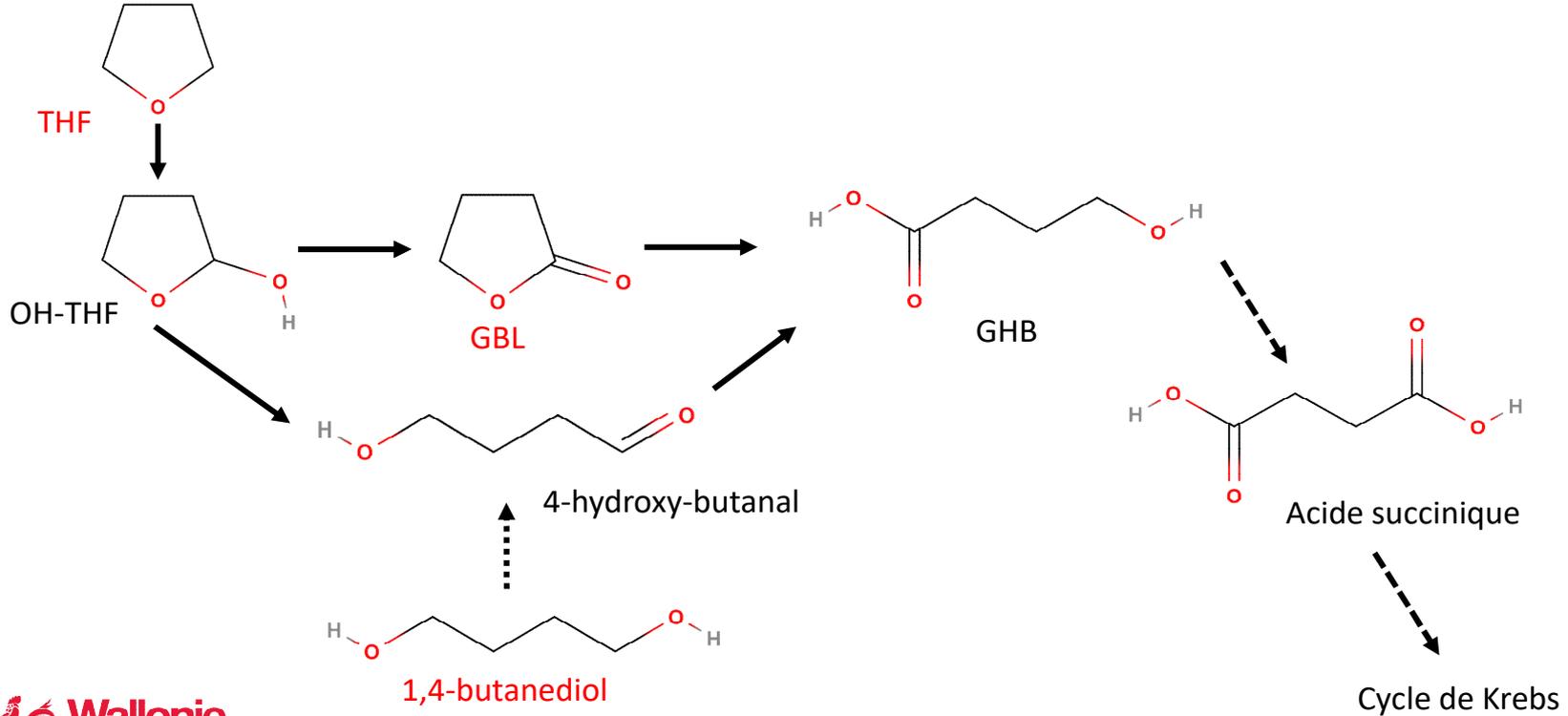
- Tetrahydrofurane
- N-methylpyrrolidone
- gamma-butyrolactone
- 1,4-butanediol
- acide maléique



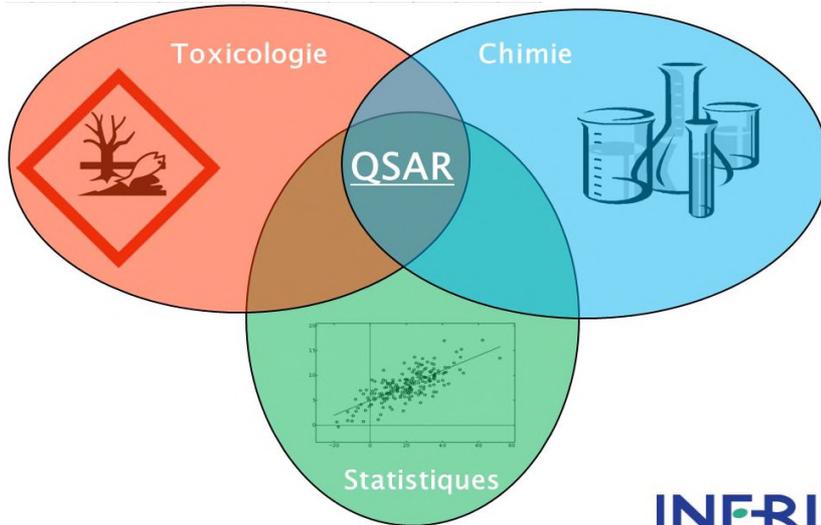
- Tetrahydrofurane
- *N*-methylpyrrolidone
- gamma-butyrolactone
- 1,4-butanediol
- acide maléique



Toxicocinétique: métabolisme



Toxicologie *in silico*: Relation structure activité: phénols substitués



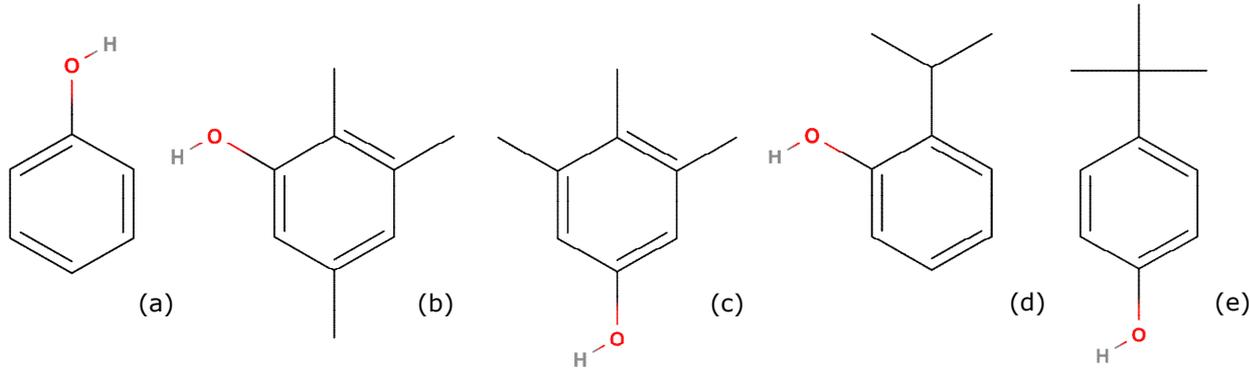
Paramètres stériques

Configuration électronique

Lipophilie

$$\text{Log} (1/C) = a*\pi + b*\sigma + C^{\text{te}}$$

Toxicologie *in silico*: Relation structure activité: phénols substitués



Toxicologie *in silico*: Relation structure activité: phénols substitués

TOXICOLOGICAL SCIENCES 69, 265–278 (2002)
Copyright © 2002 by the Society of Toxicology

The Relative Toxicity of Substituted Phenols Reported in Cigarette Mainstream Smoke

Carr J. Smith,^{*1} Thomas A. Perfetti,* Michael J. Morton,* Alan Rodgman,^{†2} Rajni Garg,[‡]
Cynthia D. Selassie,[‡] and Corwin Hansch[‡]

^{*}R&D, Bowman Gray Technical Center, RJRT Company, Winston-Salem, North Carolina 27102–1487; [†]Fundamental Research, R&D, RJRT Company,
Winston-Salem, North Carolina 27102–1487; and [‡]Department of Chemistry, Pomona College, Claremont, California

Received February 25, 2002; accepted May 31, 2002

TABLE 3
Phenols Ordered by Estimated Toxicity

| No. | Compound | Adjusted log P | Measured log P | σ^+ | Est. log 1/C |
|-----|---|----------------|----------------|------------|--------------|
| 124 | Phenol, 2,6-dimethoxy-4-ethyl-* | 2.14 | | -1.86 | 6.21 |
| 125 | Phenol, 2,6-dimethoxy-4-methyl-* | 1.61 | | -1.87 | 6.12 |
| 123 | Phenol, 2,6-dimethoxy-4-ethyl-* | 1.83 | | -1.72 | 5.96 |
| 133 | Phenol, 2-(dimethylamino)- | 1.64 | | -1.70 | 5.90 |
| 50 | 1,4-Benzenediol, 2-ethyl-6-methyl- | 2.24 | | -1.53 | 5.78 |
| 51 | 1,4-Benzenediol, 2-methoxy- | 0.71 | 0.47 | -1.70 | 5.73 |
| 166 | Phenol, 4-ethyl-2-methoxy-6-methyl- | 2.80 | | -1.39 | 5.69 |
| 120 | Phenol, 2,6-dimethoxy-* | 1.11 | 1.15 | -1.56 | 5.62 |
| 146 | Phenol, 4,6-dimethyl-2-methoxy- | 2.27 | | -1.40 | 5.61 |
| 231 | Phenol, 2,4,6-tri-(1,1-dimethylethyl)- | 6.75 | | -0.78 | 5.38 |
| 54 | 1,4-Benzenediol, 2,3,5-trimethyl- | 2.16 | 1.69 | -1.37 | 5.55 |
| 116 | Phenol, 2,6-di-(1,1-dimethylethyl)-4-ethyl- | 5.96 | | -0.82 | 5.49 |
| 238 | 2-Propanone, (3,5-dimethoxy-4-hydroxyphenyl)- | 0.40 | | -1.53 | 5.45 |
| 117 | Phenol, 2,6-di-(1,1-dimethylethyl)-4-methyl- | 5.43 | 5.10 | -0.83 | 5.41 |
| 48 | 1,4-Benzenediol, 2,5-dimethyl- | 1.71 | | -1.30 | 5.37 |
| 113 | Phenol, 4-butyl-2-methoxy- | 3.41 | | -1.07 | 5.37 |
| 165 | Phenol, 4-ethyl-2-methoxy-5-methyl- | 2.80 | | -1.15 | 5.37 |
| 47 | 1,4-Benzenediol, 2,3-dimethyl- | 1.66 | 1.24 | -1.30 | 5.36 |
| 71 | 1,2,4-Benzeneatriol † | 0.21 | | -1.84 | 5.35 |
| 63 | BenzenePROPANOIC acid, 3,4-dihydroxy-2,5,6-trimethyl- † | -2.01 | | -1.68 | 5.29 |
| 145 | Phenol, 4,5-dimethyl-2-methoxy- | 2.27 | | -1.16 | 5.28 |
| 49 | 1,4-Benzenediol, 2-ethyl- | 1.79 | | -1.22 | 5.28 |
| 53 | 1,4-Benzenediol, 2-propyl- | 1.79 | | -1.22 | 5.28 |
| 196 | Phenol, 2-methoxy-4-propyl- | 2.88 | | -1.07 | 5.27 |
| 229 | Phenol, 2,3,4,6-tetramethyl- | 3.32 | | -1.00 | 5.26 |
| 186 | Phenol, 2-methoxy-4-(1-methylethyl)- | 2.75 | | -1.06 | 5.24 |
| 188 | Phenol, 2-methoxy-4-(1-propenyl)-, <i>cis</i> - | 2.75 | | -1.06 | 5.24 |
| 161 | Phenol, 2-ethyl-4-methoxy- | 2.55 | | -1.08 | 5.23 |
| 52 | 1,4-Benzenediol, 2-methyl- | 1.26 | 0.98 | -1.23 | 5.20 |
| 12 | Benzeneacetic acid, 2,3-dihydroxy-, † | -3.90 | | -1.45 | 5.19 |
| 163 | Phenol, 4-ethyl-2-methoxy- | 2.35 | | -1.08 | 5.19 |

$$\text{Activité biologique} = \text{Log} (1/C) = a * \pi + b * \sigma + C^{\text{te}}$$

Toxicologie *in silico*: Relation structure activité: phénols substitués

phénol

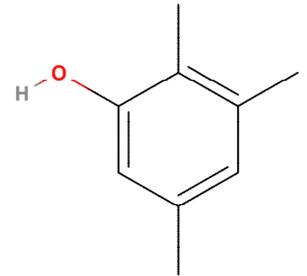
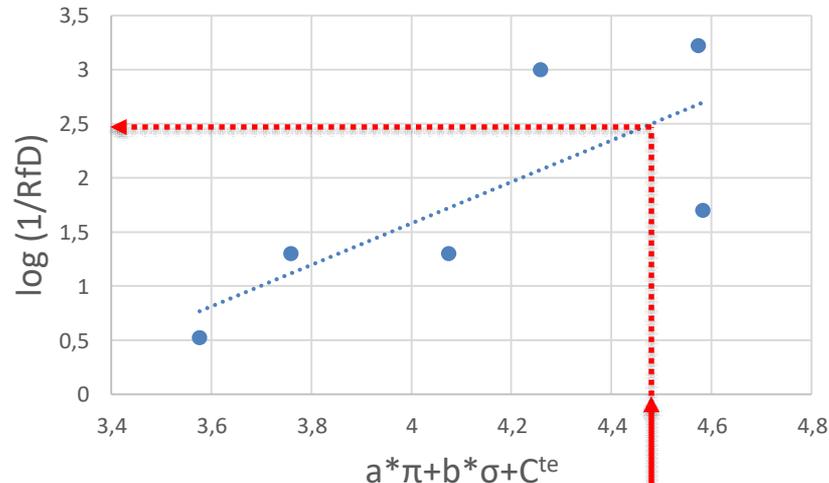
o-crésol (2-méthyl-phénol)

m-crésol (3-méthyl-phénol)

2,4-diméthyl-phénol

2,6-diméthyl-phénol

3,4-diméthyl-phénol



$$\text{Log} (1/RfD_{\text{US EPA}}) = f(a*\pi + b*\sigma + C^{\text{te}})$$

Conclusions

- VL pour PNN construites sur base de VTR & paramètres physicochimiques;
- En l'absence de VTR dans les bases de données, des VTR sont établies selon différentes approches (relation structure et activité);
- Ces VTR sont raisonnablement précautionneuses;
- L'usage des VTR doit être limité au calcul des VL_H , VL_{nappe}

4. PNN repris dans S-Risk[®] WAL

- 22 PNN
- Paramètres physico-chimiques conservés
- VTR MàJ
 - VTR_{inh} AWAC
 - VTR_{or} utilisées dans Pollusol 2 (avis experts toxicologues et INERIS)



Sélectionner le polluant dans S-Risk[®] WAL, aucune modification à apporter!

Encodage de PNN dans S-Risk® WAL

- <https://sol.environnement.wallonie.be> : Consulter Annexe 5 (page PNN)
- **Recommandation**: Nommer la simulation avec le nom du PNN afin de pouvoir la retrouver et éviter le ré-encodage du PNN
- Attention aux PNN non MàJ (RH), quelques adaptations à apporter
- Exemple sur base PNN non mis à jour (données RH): 1,2-dichloropropane

Version Mars 2018

SPAQdE

Cellule Environnement Santé

Note relative aux Polluants Non Normés (PNN) déjà présents dans S-RISK® WAL et à l'encodage d'un nouveau PNN dans ce logiciel

1. PNN déjà présents dans S-RISK®WAL

Le logiciel S-Risk® reprend dans sa base de données 22 polluants qui ne sont pas repris dans le Décret Sol. Ces 22 polluants non normés sont listés dans le Tableau ci-dessous.

| Polluants non normés repris dans S-Risk | N°CAS polluants repris dans S-Risk |
|---|------------------------------------|
| 1,1-Dichloroéthane | 75-34-3 |
| 1,2,3-Triméthylbenzène | 526-73-8 |
| 1,2,4-Triméthylbenzène | 95-63-6 |
| 1,2-Dichlorobenzène | 95-50-1 |
| 1,3,5-Triméthylbenzène | 108-67-8 |
| 1,3-Dichlorobenzène | 541-73-1 |
| 1,4-Dichlorobenzène | 106-46-7 |
| 2,3,4,6-Tétrachlorophénol | 58-90-2 |
| 2,4,5-Trichlorophénol | 95-95-4 |
| 2,4,6-Trichlorophénol | 88-06-2 |
| 2,4-Dichlorophénol | 103-89-2 |
| 2-Chlorophénol | 95-57-8 |
| Heptane | 142-82-5 |
| Hexachlorobenzène | 118-74-1 |
| Hexane | 110-54-9 |
| Mercury (Elemental) | 7439-97-6 |
| Monochlorobenzène | 108-90-7 |
| Octane | 111-65-9 |
| Pentachlorobenzène | 608-93-5 |
| Pentachlorophénol | 87-86-5 |
| 1,2,3,4-Tétrachlorobenzène | 634-66-2 |
| 1,2,4-Trichlorobenzène | 120-82-1 |

Il a été décidé pour ces 22 PNN¹ de :

- Conserver les paramètres physico-chimiques proposés dans le logiciel S-Risk®.
- Utiliser les valeurs toxicologiques de référence pour la voie d'exposition par INHALATION (VTR_{inh}) proposées par l'AWAC. Si l'AWAC n'a pas proposé de VTR, la VTR_{inh} proposée dans la BO PNN v.2 est utilisée (cas du 1,4-dichlorobenzène pour les effets à court terme). Pour l'hexachlorobenzène et le pentachlorophénol, aucune VTR_{inh} n'a été proposée pour les effets

¹ Cf comité technique de la subvention du 17/10/2016 et du 08/12/2016 et du « GT VS₁ » du 05/12/2016.

S-Risk® - onglet « chemical »

2 **3**

Available Simulations

| PN# | label | Che | Appl | Lank use | Last mod |
|--------------|-------|-------------------|------|--------------------|----------|
| PN# 12 dich | PJ | 1,2-dich | 1 | Res with vegi garc | 201 12:0 |
| Tes | SC | Ben | 2 | Res with vegi garc | 201 14:3 |
| PN# vol tebu | PJ | tebu | 3 | Res with vegi garc | 201 10:0 |
| PN# tebu | PJ | tebu | 1 | Hea indu | 201 10:0 |
| TAL | SC | TP-alipl (EC >21) | 2 | Hea indu | 201 13:3 |
| PN# vol ... | PJ | AMf | 3 | Res with veq | 201 12:3 |

Simulation

Name : PNN 12 dichloropropane
Label : PJ
Description :
Chemicals : 1,2-dichloropropane
Application@I: Generic soil remediation val type :
Soil profile :

General

Name: 1,2-dichloropropane
CAS n°: 78-87-5
 Organic
 Dissociating
Type: Base
pKa:

Properties

| | |
|----------------|---------|
| M (g/mol): | 1.13E2 |
| Ts (°C): | 10 |
| S (mg/l): | 2.68E3 |
| Tp (°C): | 10 |
| P (Pa): | 3.18E3 |
| Th (°C): | 10 |
| H (Pa.m²/mot): | 1.24E2 |
| Koc (dm²/kg): | 3.938E1 |
| Kd (dm²/kg): | |

OR: calculate Koc with QSAR formula of type:
OR: calculate K_d with formula: log(Kd) = A + B * log(CL) + C * log(Conc) + D * log(CEC) + E * log(OM) + F * pH-CaCl2
A 0.0E0 B 0.0E0 C 0.0E0 D 0.0E0 E 0.0E0 F 0.0E0
Kow: 1.0E2
Koa:
Dpe (m²/d): 0.0E0
Dpvc (m²/d): 0.0E0

Créer nouvelle simulation - nommer

1

2 **3**
Switch to Tier 2
(Blank chemical)

B **A**
Add

C
Indiquer le nom de la substance
Customize Delete

D
Encoder les paramètres physico-chimiques repris dans BD PNN

S-Risk® - onglet « plants »

S-Risk (Wallonia)

Model Equations Model Equations Annex III

Available Simulations Show all

Scenario Chemical Soil Water Outdoor air Indoor air **Plants** Animals Concentrations Exposure Risk Concentration limits Results G

4 Type de sol – prof ESO

5

Choose chemical
1,2-dichloropropane

Volumetric washout factor for particles (-): 500,000
a(metabolism) (1/d): 0.0E0
a(photodegradation) (1/d): 0.0E0

A

Method for plant concentration calculation

Available model for plant / plant type
 No BCF at this level (inorganics) / use built-in equations (organics)
 BCF =
 BCF unit for organic chemicals is equal to [(mg/kg dm) / (mg/m³)]

OK Cancel

B

Calculation using chemical and plant properties

| | | No calculation possible | Calculation using plant BCF | Calculation using plant type | Calculation using chemical and plant properties |
|-------------------|-------------------------------------|-------------------------|-----------------------------|------------------------------|---|
| Potatoes | Potato | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input checked="" type="radio"/> |
| Root and tuberous | Carrot | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input checked="" type="radio"/> |
| Root and tuberous | Scorzonera and parsnip | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input checked="" type="radio"/> |
| Root and tuberous | Other root vegetables (as radish) | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input checked="" type="radio"/> |
| Bulbous plants | Bulbous vegetables (as onion) | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input checked="" type="radio"/> |
| Bulbous plants | Leek | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input checked="" type="radio"/> |
| Fruit vegetables | Tomato | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input checked="" type="radio"/> |
| Fruit vegetables | Cucumber | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input checked="" type="radio"/> |
| Fruit vegetables | Other fruit vegetables (as paprika) | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input checked="" type="radio"/> |
| Cabbages | Cabbage | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input checked="" type="radio"/> |
| Cabbages | Cauliflower and | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input type="radio"/> | <input checked="" type="radio"/> |

Simulation summary
 Name: PNN 12 dichloropropane
 Label: PJ
 Description:
 Chemicals: 1,2-dichloropropane
 Application type: I: Generic soil remediation value
 II: Site specific risk assessment
 III: Site specific remediation objective
 Soil profile:

Cocher la case pour chaque légume

S-Risk® - onglet « animals »

S-Risk (Wallonia) Model Equations Model Equations Annex III

Archives Preferences Crèvecoeur

Available Show all **Model inputs & outputs**

Scenario Chemical Soil Water Outdoor air Indoor air **Animals** Concentrations Exposure Risk Concentration limits Results Graph

Switch to Tier 1 6

Animal Intake Data

Chicken

Free-range chickens

Fraction of groundwater (-): 1

Fraction of supply water (-): 0

Fraction of other water (-): 0

Cattle

| | Beef cattle | | Milk cattle | | Sheep | |
|--------------------------------------|-------------|--|-------------|--|-------|--|
| Time fraction for winter diet (-): | 0.54 | | 0.54 | | 0.33 | |
| Local fraction of pasture grass (-): | 1 | | 1 | | 1 | |
| Local fraction of silage grass (-): | 1 | | 1 | | 1 | |
| Local fraction of maize (-): | 1 | | 1 | | 1 | |

| | summer | winter | summer | winter | summer | winter |
|--|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Fraction of groundwater consumed (-): | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| Fraction of supply water consumed (-): | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

BTF Factors

1,2-dichloropropane

| | | |
|--|----------|---|
| Cow meat BTF ((mg/kg fw)/(mg/d)): | 2.291E-6 | <input checked="" type="checkbox"/> Use model |
| Cow liver BTF ((mg/kg fw)/(mg/d)): | 2.291E-6 | <input checked="" type="checkbox"/> Use model |
| Cow kidney BTF ((mg/kg fw)/(mg/d)): | 2.291E-6 | <input checked="" type="checkbox"/> Use model |
| Cow milk BTF ((mg/kg fw)/(mg/d)): | 8.472E-7 | <input checked="" type="checkbox"/> Use model |
| Sheep meat BTF ((mg/kg fw)/(mg/d)): | 2.291E-6 | <input checked="" type="checkbox"/> Use model |
| Chicken - soil to egg BTF ((mg/kg fw)/(mg/d)): | 0.0E0 | |
| Chicken - feed to egg BTF ((mg/kg fw)/(mg/d)): | 0.0E0 | |

S-Risk® - onglet « exposure »

S-Risk (Wallonia) Encoder conc. sol (et ESO)

Model Equations Model Equations Annex II Archives Preferences Crevecoeur

Available Show all Model inputs & outputs

Scenario Chemical Soil Water Outdoor air Indoor air Plants Concentrations Exposure Risk Concentration limits Results Graph

Switch to Tier 1

1,2-dichloropropane

Exposure via food

Background exposure via food

| | |
|----------------------|-------|
| 1 - <3 y (mg/kg.d) | 0.0EO |
| 3 - <6 y (mg/kg.d) | 0.0EO |
| 6 - <10 y (mg/kg.d) | 0.0EO |
| 10 - <15 y (mg/kg.d) | 0.0EO |
| 15 - <21 y (mg/kg.d) | 0.0EO |
| 21 - <31 y (mg/kg.d) | 0.0EO |
| 31 - <41 y (mg/kg.d) | 0.0EO |
| 41 - <51 y (mg/kg.d) | 0.0EO |
| 51 - <61 y (mg/kg.d) | 0.0EO |
| >61 y (mg/kg.d) | 0.0EO |

Animal product consumption
Vegetable consumption
Fraction local animal products
Fraction local vegetables

Oral exposure - relative bioavailability

RBAsoil (-): 1 RBA_{dust} (-): 1 RBA_{water} (-): 1.0EO

Inhalation exposure

Adjust age-specific weight factors

Dermal exposure parameters

Kp (cm/h): 7.714E-3 Use model

ABS_{dermal.soil/dust} (-): 0.25

FA (-): 1

B (-): 0.050849809509738636

L_{event} (t/event): 2.7085945482531177

1-10 of 391

Simu Name: PNN 12 dichloro... Label: PJ Description: Chemicals: 1,2-dichloroprop... Application type: Site specific Soil profile:

7

8

A
B
C

Valeur par défaut
Valeur par défaut



S-Risk® - onglet « Risk »

A

Extrait BD PNN v.3 – 1,2-dichloropropane

Valeurs toxicologiques de référence - unités Risc Human (effacées si réévaluation et calcul avec S-Risk)

| effets non cancérogènes à seuil | | effets cancérogènes sans seuil | |
|---------------------------------|----------------|---|-------------------|
| VTRor | VTRinh à seuil | VTRor | VTRinh sans seuil |
| mg/kg.j | mg/m³ | mg/kg.jr | mg/m³ |
| 1,40E-02 | 4,00E-03 | 2,78E-04 | 1,00E-03 |
| OMS,2011 | US-EPA (1991) | OEHHHA C'ancer potenoxy de 3,6.10-2 (mg/kg.j).1 | OEHHHA, 2009 |

Unités identiques
→ encodage direct dans SR

Unités différentes

Conversion: $\frac{1.10^{-5}}{VTR \text{ en } mg/m^3} = VTR \text{ en } (mg/m^3)^{-1}$

Onglet « Risk »

VTR à seuil:

Si VTR_{inh} manquante → dérivée à partir de la voie orale

$$TCA = (TDI \times 70) / 20$$

- TCA : Tolerable Concentration in Air (soit VTR_{inh}) en mg/m^3
- TDI : Tolerable Daily Intake (soit VTR_{or}) en $mg/kg.j$
- En considérant un adulte de 70kg qui respire $20m^3$ d'air par jour.

VTR sans seuil:

Si VTR manquante: VTR aberrante de $1.10^{E-8} (mg/kg_{p.c}/jour)^{-1}$
ou $(mg/m^3)^{-1}$

S-Risk® - onglet « Results »

S-Risk (Wallonia)

Model Equations Model Equations Annex III

Archives Preferences Crevecoeur

Available Show all Model inputs & outputs

Scenario Chemical Soil Water Outdoor air Indoor air Plants Animals Concentrations Exposure Risk Concentration limits **Results** Graph

Last Calculation Time: 2019-11-12 12:12

Calculate and report results PDF Excel CSV HTML **Rapport complet** 10

If the summary report doesn't show automatically you can follow [this link](#)

S-Risk report - PNN 12 dichloropropane **Résumé**

Print

Main results

| Chemical | Lowest RI-based remediation value mg/kg dm | Lowest ExCR-based remediation value mg/kg dm | Lowest pRI-based remediation value mg/kg dm | Lowest CI-based remediation value mg/kg dm |
|---------------------|---|---|--|---|
| 1,2-dichloropropane | 2.242e-1 | 7.478e-2 | | (Critical concentration for indoor air CI) |

Conceptual site model

Scenario

Land use: Residential with vegetable garden

Based on: Residential with vegetable garden

Exposure routes

| | Oral | Inhalation | Dermal |
|---------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|
| soil & settled dust | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> |
| vegetables | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> |

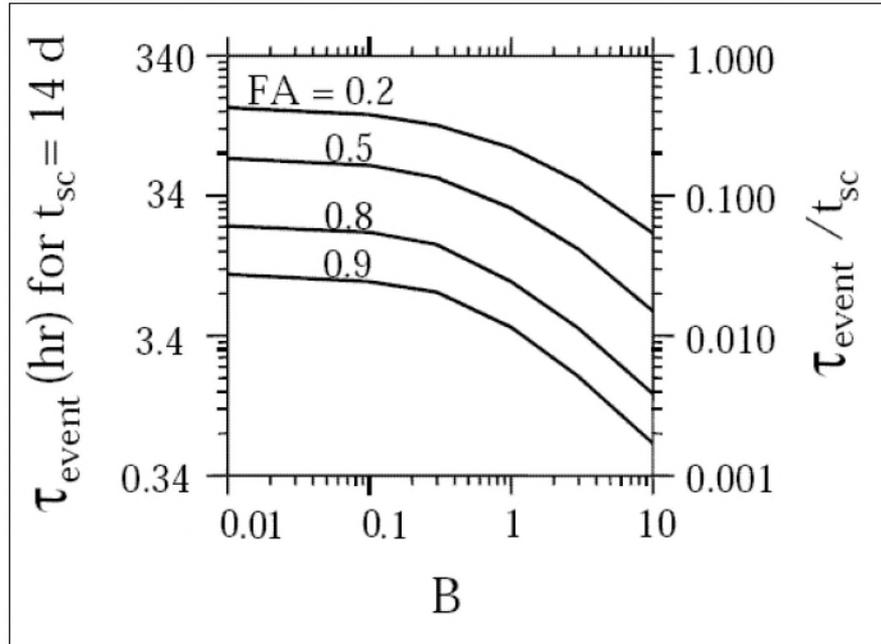
Main results
Conceptual site model
Scenario
Soil profile & concentrations
Results per chemical
 1,2-dichloropropane
List of user-modified parameters

Simulation
Name: PNN 12 dichloro...
Label: PJ
Description:
Chemicals: 1,2-dichloropropane
Application type: Generic soil r...
Application type:
 I: Site specific
 III: Site specific
Soil profile:

Merci pour votre attention!



Slide supplémentaire : FA – vérification du domaine d'application



User manuel S-Risk p.59

Figure 42: FA as a function of B and τ_{event} (t_{sc} equals the average turnover time of the stratum corneum and has a default value of 14 days)