

Substanz Blau ABC

Arbeitspapier zum erweiterten Sicherheitsdatenblatt

Berechnungen

DNEL_{oral}

Akute orale Toxizität: LD50 > 2000 mg/kg Ratte (SDS vom 11.09.2002)

Subakute Toxizität: 1000 mg/kg/d (NOAEL) Annahme
(Analogieschluss zu einer anderen Substanz)

Chronische Toxizität 100 mg/kg/d (NOAEL) Annahme
(anstatt Faktor 6, Faktor 10 niedriger angenommen als subakute Tox.)

Die Dosis ohne Effekt für den Verbraucher (Derived No Effect Level, DNEL) ergibt sich aus der niedrigsten bestimmte Toxizität im Tierversuch durch Division durch einen Sicherheitsfaktor, hier Faktor 100.

$$\frac{\text{Tox}_{\text{acute, max.}}}{100} = \frac{2000 \text{ mg/kg}}{100} = 20 \text{ mg/kg} = \text{DNEL}_{\text{acute, oral}}$$

$$\frac{\text{Tox}_{\text{chronisch, max.}}}{100} = \frac{100 \text{ mg/kg/d}}{100} = 1 \text{ mg/kg/d} = \text{DNEL}_{\text{langzeit, oral}}$$

Beispiel: Ein Erwachsener mit 60 kg bzw. ein Kleinkind 6 kg können ohne gesundheitliche Beeinträchtigung maximal

$$\begin{aligned} 20 \text{ mg/kg} \cdot 60 \text{ kg} &= 1200 \text{ mg} && \text{Erwachsener} \\ 20 \text{ mg/kg} \cdot 6 \text{ kg} &= 120 \text{ mg} && \text{Kleinkind} \end{aligned}$$

einmalig aufnehmen.

Expositionspfad Luft

DNEL_{inhalativ}

Akute Exposition (DNEL_{acute, inhalativ})

Exposition	4 h	
Aufgenommenes Luftvolumen (V _{Luft, 4h})	0,83 m ³ /h = 3,32 m ³ /4h	(bei 20 m ³ /24 h)
DNEL _{acute, oral}	20 mg/kg	

$$\frac{\text{DNEL}_{\text{acute, oral}}}{V_{\text{Luft, 4h}}} = \frac{20 \text{ mg/kg}}{3,32 \text{ m}^3} = 6,02 \text{ mg/m}^3/\text{kg} \quad \text{DNEL}_{\text{acute, inhalativ}}$$

Bei einer 4 stündigen Exposition darf die Konzentration in der Luft von Substanz Blau ABC maximal $6,02 \text{ mg/m}^3/\text{kg}$ betragen.

Langzeitexposition (DNEL_{langzeit, inhalativ})

Ein Mensch atmet im Mittel 20 m^3 Luft täglich ein, für das Kleinkind (worst case) wird der gleiche Wert angenommen.

$$\frac{\text{DNEL}_{\text{langzeit, oral}}}{V_{\text{Luft/d}}} = \frac{1 \text{ mg/kg/d}}{20 \text{ m}^3/\text{d}} = 0,05 \text{ mg/m}^3/\text{kg} \quad \text{DNEL}_{\text{langzeit, inhalativ}}$$

Bei einer längeren Exposition darf die Konzentration in der Luft von Substanz Blau ABC $0,05 \text{ mg/m}^3/\text{kg}$ nicht überschreiten.

Vergleich TA-Luft vom 24.07.2002

5.2.1 Gesamtstaub, einschließlich Feinstaub

Die im Abgas enthaltenen staubförmigen Emissionen dürfen

den Massenstrom $0,20 \text{ kg/h}$

oder

die Massenkonzentration 20 mg/m^3

nicht überschreiten. Auch bei Einhaltung oder Unterschreitung eines Massenstroms von $0,2 \text{ kg/h}$ darf im Abgas die Massenkonzentration $0,15 \text{ g/m}^3$ nicht überschritten werden.

Beispiele:

Maximal erlaubte Emission am Produktionsstandort (Nachbarschaft, Innenraumbelastung)

In der Mitte eines Betriebsgrundstücks ($200 \text{ m} \times 200 \text{ m} = 40.000 \text{ m}^2$) steht ein 10 m hoher Schornstein (5.5.2 (1) Mindesthöhe nach TA-Luft). Unter dem Schornstein ist ein Volumen von

$$\begin{aligned} \text{Luftvolumen} & 40.000 \text{ m}^2 \times 10 \text{ m} = 400.000 \text{ m}^3 \\ \text{Luftaustausch pro Stunde} & 1 \end{aligned}$$

Kurzzeitexposition (z.B. Störfallsituation): Wieviel Substanz darf max. in die Luft abgegeben werden?

$$\begin{aligned} \text{DNEL}_{\text{acute, inhalativ}} & 6,02 \text{ mg/m}^3/\text{kg} \\ \text{DNEL}_{\text{acute, oral}} & 20 \text{ mg/kg} \quad (\text{entspricht } 120 \text{ mg einer einmaligen Dosis bei einem } 6 \text{ kg schweren Kind}) \\ V_{\text{Luft/d}} & 20 \text{ m}^3 \quad \text{aufgenommenes Luftvolumen pro Tag} \end{aligned}$$

$$(1) \quad \frac{120 \text{ mg}}{20 \text{ m}^3} = 6 \text{ mg/m}^3 \quad \text{max. Luftkonz. bei Störfall}$$

$$(2) \quad 6 \text{ mg/m}^3 \times 40.000 \text{ m}^3 = 240.000 \text{ mg} = 240 \text{ g}$$

Bei einer einmaligen Exposition dürfen mit oben stehenden Vorgaben max. 240 g der Substanz Blau ABC in die Luft emittiert werden. Dabei darf eine Konz. von 6 mg/m^3 nicht überschritten werden.

Berechnung Langzeitexposition: Maximale Emission pro Tag

$$\text{DNEL}_{\text{langzeit, inhalativ}} = 0,05 \text{ mg/m}^3/\text{kg}$$

$$\text{DNEL}_{\text{Kl.Kind, langzeit, inhalativ}} = 0,3 \text{ mg/m}^3$$

$$\frac{\text{DNEL}_{\text{Kl.Kind langzeit, oral}}}{V_{\text{Luft/d}}} = \frac{6 \text{ kg} \times 1 \text{ mg/kg/d}}{20 \text{ m}^3/\text{d}} = 0,3 \text{ mg/m}^3 \text{ DNEL}_{\text{Kl.Kind, langzeit, inhalativ}}$$

Nimmt man den Worst Case, dann geht bei einer dauerhaften Luftkonzentration von $0,3 \text{ mg/m}^3$ keine Gefahr von der Substanz aus.

$$\frac{V_{\text{Luft}} \times \text{DNEL}_{\text{langzeit, inhalativ}}}{V_{\text{Luft/d}}} = C_{\text{Luft max}}$$

$$\frac{400.000 \text{ m}^3 \times 0,3 \text{ mg/m}^3}{20 \text{ m}^3/\text{d}} = 30.000 \text{ mg} = 30 \text{ g}$$

Bei 1 Luftaustausch pro Stunde und einem $\text{DNEL}_{\text{Kleinkind}}$ von 6 mg/d dürfen maximal 30 g Substanz pro Stunde emittiert werden.

Umwelt/Boden

- Substanz ABC wirkt nicht toxisch auf Tiere (Fischtox LC50 > 500 mg/l (96 h), und Pflanzen (keine Daten vorhanden)
- Substanz ABC ist ein Pulver, sie bleibt nicht in der Luft und reichert sich dort nicht an
- Substanz ABC ist zu 25 – 50 % abbaubar, es findet keine Anreicherung im Boden statt.
- Es findet kein diffuser Eintrag der Substanz in die Umwelt statt.

→ Eintrag via Luft in den Boden ist nicht relevant und wird nicht betrachtet.

→ Diffuse Einträge sind nicht relevant und werden nicht betrachtet.

Kompartiment Wasser**PNEC_{Wasser}**Experimentell bestimmt:

Fischtoxizität LC50 > 500 mg/l (96 h, B. reio)

Default-Werte

Daphnientoxizität EC50 > 500 mg/l

Alge EC50 > 500 mg/l

Sicherheitsfaktor 1000
Sicherheitsfaktor 100

dauerhafte Exposition
einmal / Monat

$$\begin{array}{rcl}
 \text{PNEC}_{\text{Wasser}} & = & \frac{C_{\text{Fisch}}}{\text{Faktor}} \\
 & & \begin{array}{l} \text{dauerhaft} \\ 1/\text{Monat} \end{array} \\
 & & \begin{array}{l} \frac{500 \text{ mg/l}}{1000} \\ \frac{500 \text{ mg/l}}{100} \end{array} \\
 & & \begin{array}{l} = 0,5 \text{ mg/l} = 500 \mu \text{g/l} \\ = 5 \text{ mg/l} = 5000 \mu \text{g/l} \end{array}
 \end{array}$$

PNEC_{Wasser akut} = 5,0 mg/l

PNEC_{Wasser, langzeit} = 0,5 mg/l

PEC_{Wasser}**Bereich Hersteller**

Betrachtung entfällt, da das Abwasser verdunstet und anschließend verbrannt wird.

Bereich Verwendung**Expositionsabschätzung nach dem Frachtensatz**

W1:	Warenmenge pro Tag	3000 kg	
W2:	Spez. Farbstoffmenge	20 g/kg	
Z:	Zusammensetzung	45 %	Reinfarbstoff
F:	Fixierungsgrad	70 %	

Emission in das Abwasser pro Tag

$$\begin{aligned}
 E_{\text{local}} &= W1 \times W2 \times Z (1-F) && 8.100 \text{ g/d} \\
 \text{Klaranlagenvolumen pro Tag} &&& 2.000 \text{ m}^3/\text{d} = 2.000.000 \text{ l/d} \\
 \text{Vorflutervolumen pro Tag} &&& 18.000 \text{ m}^3/\text{d} = 18.000.000 \text{ l/d} \quad (0,21 \text{ m}^3/\text{s})
 \end{aligned}$$

Emission aus Klaranlage 100%

Konzentration bei Eintritt ins Gewasser **405 µg/l = PEC Verwendung**

$$C_{\text{local, water}} = \frac{E_{\text{local}}}{(V_{\text{Klaranlage}} + V_{\text{Vorfluter}})}$$

$$\frac{\text{PEC}}{\text{PNEC}_{\text{langzeit}}} = \frac{405 \text{ µg/l}}{500 \text{ µg/l}} = \mathbf{0,81}$$

Bereich Verwendung, Blickpunkt Vorflutervolumen

Vorfluter	(V1)	18.000 m ³ /d = 18.000.000 l/d (0,21 m ³ /s)
	(V2) kl. Bach	8.640 m ³ /d = 8.640.000 l/d (0,1 m ³ /s)
	(V3) z.B. Nidda	86.400 m ³ /d = 86.400.000 l/d (1,0 m ³ /s)
E _{local}		Emission ins Abwasser pro Tag
C _{local, acute}	bei Eintritt ins Gewasser	hier 4500 µg/l festgelegt (PEC / PNEC = 0,9)
C _{local, langzeit}	bei Eintritt ins Gewasser	hier 450 µg/l festgelegt (PEC / PNEC = 0,9)

Beispielrechnungen:**Einmalig**

Als Vorfluter hat das Unternehmen einen kleineren Flu mit einem Durchflu von 1 m³/s (V3). Das Verhaltnis von PEC / PNEC soll 0,9 nicht berschreiten. Wieviel darf einmalig an einem Tag pro Monat ins Abwasser gelangen?

$$C_{\text{local, acute}} \times V3 = E_{\text{local}}$$

$$4500 \text{ µg/l} \times 86.400.000 \text{ l/d} = 38.8800.000.000 \text{ µg/d} = 388,80 \text{ kg/d}$$

Bei einem Vorfluter von 1m³/s konnen 388,80 kg der Substanz Blau ABC einmalig an einem Tag/Monat ins Abwasser gelangen, ohne dass das Verhaltnis PEC / PNEC > 1 wird.

Langzeit

Als Vorfluter hat das Unternehmen einen kleineren Flu mit einem Durchflu von 1 m³/s (V3). Das Verhaltnis von PEC / PNEC soll 0,9 nicht berschreiten. Wieviel darf max. taglich ins Abwasser gelangen?

$$C_{\text{local, langzeit}} \times V3 = E_{\text{local}}$$

$$450 \text{ µg/l} \times 86.400.000 \text{ l/d} = 38.880.000.000 \text{ µg/d} = 38,88 \text{ kg/d}$$

Bei einem Vorfluter von $1\text{m}^3/\text{s}$ können 38.88 kg der Substanz Blau ABC ins Abwasser gelangen, ohne dass das Verhältnis $\text{PEC} / \text{PNEC} > 1$ wird.