

Lead Component Identificatie methode

*Selecteren en communiceren van
gevaarsinformatie voor mengsels*

Leo van der Biessen

Bijeenkomst CGC-NVT 's-Hertogenbosch

09 maart 2017

Open

Programma

- Waarom is het bepalen van een lead component nodig
- Wettelijk kader
- Werking LCId methode
- Werking alternatieve methodes voor bepalen lead component inhalatie
- Wegnemen co-formuleerder dilemma

Waarom is het bepalen van lead component nodig

- Wetgever: Aantoonbaar veilig gebruik van gevaarlijke stoffen
 - Arbeidsomstandighedenwet
 - REACH

Veilig gebruik binnen arbeidsomstandighedenwet en REACH

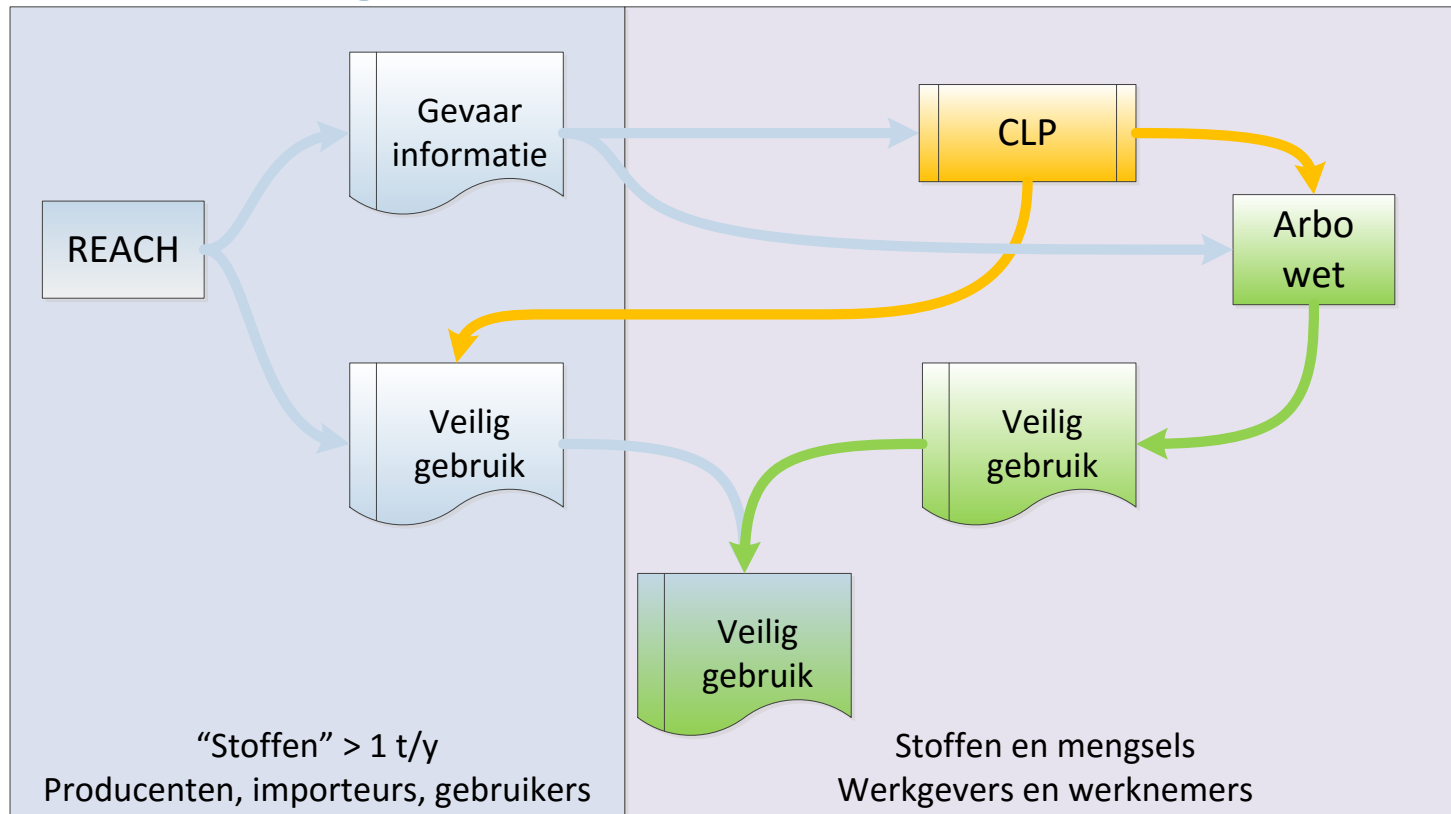
Arbeidsomstandighedenwet

- Bescherming werknemer
- Werkgever / werknemer
- Totale blootstelling
- Communicatie in bedrijf
- Doelvoorschrift
- Samenwerking

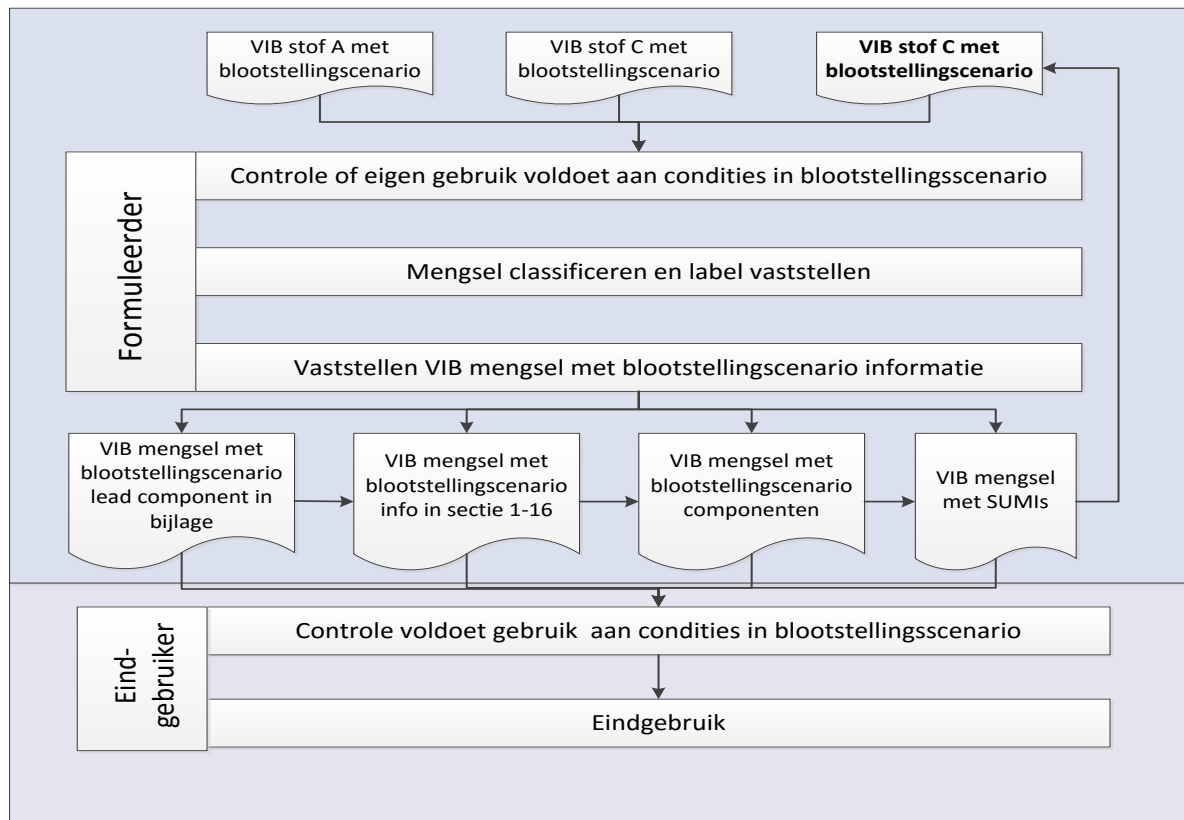
REACH

- Bescherming mens en milieu
- Producent/importeur centraal
- Stofgericht
- Ketencommunicatie
- Bindend gebruiksvoorschrift (eSDS)
- Verplichting hangt af van je rol

Samenhang REACH, CLP en Arbowet



REACH verplichtingen in de keten



Lead component mengsels

Aannames

- Stoffen die niet bijdragen aan classificatie, dragen niet bij aan gevaar
- Bijdrage gevaar hangt af van grenswaarde en potentie voor blootstelling
- Stoffen onder concentratiegrens met >>> dampspanning of <<< grenswaarde kunnen lead worden
- Zeer zorgwekkende stoffen (CM 1a, 1b en 2) en met lokale of speciale effecten dragen altijd wezenlijk bij
- Combinatiewerking kan leiden tot andere lead component



Kiezen methode

- Lead Component Identificatie tool
 - CEFIC / VCI → ENES programma, Doel: Formuleerders voldoen aan REACH tool
 - Excel bestand, alle routes, H-zin, fysisch chemische eigenschappen
- Relatief Inhalate Chemiekaartenboek
 - Cmax/grenswaarde
- RAS Score Dohsbase®
 - $Tix = f(Cmax/OEL) * TOX$ (control banding)



Lead component identificatie methode

- Informatie over stoffen in het mengsel verzamelen
 - Concentratie, classificatie, referentiewaarden (DNELs, PNECs, NO(A)EL, NO(A)Ecs)
- Mengsel classificeren
- Methode kiezen
 - Top down (doorgeven ES info) of bottom up (Check of lead stof binnen kaders SUMI valt)
- Lead Componenten identificeren
 - Zeer zorgwekkende stoffen (Carc/Mut 1A, 1B, 2; PBT/vPvB $\geq 0.1\%$)
 - Stoffen met lokale effecten (irritatie, corrosie, sensibilisering) of speciale milieu-effecten (ozon)
 - Lead component berekenen
 - Check of additie kan optreden
- Bepaal relevante set van operationele condities en RMM die leiden tot veilig gebruik
- Voeg informatie toe aan VIB sectie 1-16 of VIB bijlage

Informatie verzamelen

- VIB leverancier is de basis
- Volledige samenstelling uit receptuur

Kwaliteitscontrole binnenkomde informatie

- 75% van alle VIBs niet (volledig) juist
- Vergelijk VIBs van verschillende leveranciers
- Doe de VIB-check (www.vib-check.nl)
- Controleer op ECHA-website, Gestis-database

Welke informatie hebben we nu

- Identiteit gebruikte stoffen: Naam, Cas nummer
- Classificatie stoffen en mengsels
- Concentratie (banden) van stoffen in het mengsel
- Fysisch chemische informatie componenten
- Overzicht DNELs, PNECs (en aanwezige grenswaarden)

Beoordelen combinatieblootstelling nodig

- Hetzelfde gezondheidseffect op hetzelfde orgaan systeem
- Vergelijkbare structuurformule
- Vergelijkbare mode of action


Type stof	Combinatieblootstelling
Vluchtige organische stoffen	Ja
Irriterende / Corrosieve stoffen (H314, H315, H335)	Ja
Zware metalen	Ja
Allergenen (H317, H334)	? / Ja
Reprotoxische stoffen (H360, 361, 362)	?
C&M (H340, H350)	Ja
STOT SE / RE (H370, 371 en H372, H373)	Ja mits
Zelfde reactieve groepen (bv. Isocyanaten)	Ja
Vergelijkbare structuur	?

Selectie gevaarsbepalende component

- Routespecifiek
 - Mens: inademing, huid, oraal, lange / korte termijn, lokaal / systemisch
- Leidende stof kan verschillen per route en per mengsel
- Slim kiezen helpt om hoeveelheid data/ beoordelingen te beperken

Hoe bepaalt LCId tool lead component

- Prioritaire stoffen en stoffen met lokaal effect (als geen DNEL wordt gegeven)
!!Check kritisch effect DNELs!!
- Huid en oraal
 - $LCI = \text{Concentratie} / \text{DNEL}$ of
 - $LCI = \text{Concentratie} / \text{NO(A)EL}$
 - $LCI = \text{Concentratie} / \text{classificatie ondergrens}$
- Inhalatie
 - Dampspanning van wezenlijk belang
 - $LCI = \text{Partiele dampspanning } 25^\circ / \text{DNEL (NO(A)EL of classificatie ondergrens)}$
 - Dampspanning niet van belang
 - $LCI = \text{Concentratie} / \text{DNEL (NO(A)EL of classificatie ondergrens)}$



Lead component
is stof met
hoogste LCI

Werking LCID tool Inhalatie

- Invullen
 - Stofnamen, CAS, H-zinnen, concentratie (bovengrens), DNELs, PNECs
 - Classificatie mengsel
 - Is dampspanning relevant, moeten concentratieregels worden toegepast
- Werking
 - Directe doorrekening
 - Sheet past concentratielimiet toe als standaard
 - Automatische omrekening VP naar 25 °C
- Direct resultaat
 - Rij 3 , conclusie mengsel
 - Rij 7-12 route specifieke informatie
 - Kolom D, stof overweging
 - Verborgene kolom AK en verder stof specifieke waarden (als combinatie effect optreedt)

Invuloverzicht en resultaat

LCID input part														
Is mixture classified for Human Health Hazard(s)?		yes	=> Go to cell D16 and columns A-C and E-O				User instructions:							
Is mixture classified for Environmental Hazard(s) (incl. Ozone layer)?		no					mandatory inputs							
Use CLP concentration limits for HH Priority substances?		yes	(default is "yes")				optional inputs							
Exposure to vapours possible? (if yes, tool will factor in vapour pressure)		yes					conditional inputs							
CLP classification of the mixture for Human Health:		h341	h315	h318	h336	h302	h373	Specific part for Human Health						
Relevant Components in Mixture		Human health classification - per component If specific concentration limits are available, please use button below to navigate to input area (or go to input for specific concentration limits)						ENV Priority?	Mixture composition	DNELs				
Substance ID (optional)	Component NAME (only relevant components)	CAS No. (optional)	Remark on component's contribution to LCID	HH class. 1	HH class. 2	HH class. 3	HH class. 4	HH class. 5	HH class. 6	PBT and/or vPvB?	Percentage in preparation [% w/w]	Unit conversion inhalation DNEL	DNEL dermal - LT/systemic [mg/kg BW/day]	DNEL oral - LT/systemic [mg/kg BW/day]
												DNEL inhalation - LT/systemic [mg/m ³]		
	n-Butanol	71-36-3	LCI for acute HH effects relevant, LCI inhalation; Effects on eyes; Compound not classified for ENV	H302	H335	H315	H318	H336			33.33000	310		3125
	curmeen	98-82-8	Only local effects relevant - no LCI HH calculated; Compound not classified for ENV	H335							33.33000	100	15.4	5
	Phenol	108-95-2	CM compound with DNEL, LCI inhalation, LCI dermal; Effects on eyes; Compound not classified for ENV	H331	H341	H311	H301	H314	H373		33.33300	8	1.23	0.4

Resultaat LCId tool

Cefic/VCI Lead Component Identification (LCID) Tool (version 1.0)								Test mengsel 3 stoffe
Results part - Priority Substances								
Priority Substance(s) HH:	Phenol.			Some carcinogen or mutagen compounds have DNELs and are not Priority Substances and considered in LC identification.				
Priority Substance(s) ENV:								
Results part - Lead Components (LC)								
	LC 1	LC 2	LC 3	Group concentration [%]	Relevant local effects (beyond eyes)	Check for substances who complete set of DNELs - LCC (NO(A)EL/NO(A)EC/LC50/LD50/A TE based):		
LC Inhalation (w VP)	n-Butanol					CM compound with DNEL		
LC Dermal	Phenol				n-Butanol(H315)	CM compound with DNEL		
LC Oral	#N/A					CM compound with DNEL	#N/A	
Components driving hazard for Eye (via classification)	Phenol	n-Butanol						
LC Environment	Mixture not classified for ENV (excl. Ozone depletion)			MF environment:	n/a	<i>Remark:</i>		
LC Ozone layer hazard	No compound classified for Ozone layer			Cweighted (%)	n/a	=> use in STEP E12 to the right	Msafe component (kg/dag)	
Clear all input								

Verborgen resultaten in kolom AK en verder

Vapor pressure at 25 °C [hPa]	DNEL inhalation LT/sys (ppm)	LCI inhalation (mg/m3 basis) with VP	LCI_inh based on NO(A)EL/NO(A)EC/LD50/LC50/AATE with VP	LCI_dermal based on NO(A)EL/NO(A)EC/LD50/LC50/AATE	LCI_oral based on NO(A)EL/NO(A)EC/LD50/LC50/AATE	LCI - score inhalation w/o VP	LCI inhalation (mg/m3 basis) with TRA fugacity factor	LCI Dermal [mg/kgBW/dag] basis	LCI inhalation (mg/m3 basis) with correlation fugacity factor	LCI Ingestion
14.11123913	#DIW0!	1.5172	FALSE							10.6656
6.999174609	#DIW0!									
0.282224783	#DIW0!	1.1759	FALSE			4.1666	4.166625	27.1	16.15980595	83.3325

Locatie beschrijving LCID methode

- Korte beschrijving

- <https://www.vci.de/ergaenzende-downloads/2016-03-16-brief-description-reach-practical-guide-safe-use-information-for-mixtures-lcid.pdf>

- Details

- <https://www.vci.de/vci/downloads-vci/publikation/2016-03-14-vci-cefic-practical-guide-safe-use-information-for-mixtures-under-reach-lcid-methodology.pdf>

Andere methoden lead component selectie inhalatie

Maximale concentratie – methode chemiekaartenboek

- Berekenen maximale concentratie o.b.v. relatieve dampspanning en mol gewicht
- Cmax / DNEL
- Hoogste > 10 % hoger dan # 2 → hoogste is lead component
- Long-term / Short-term / systemic / local

Component	CAS nummer	Partiele dampspanning	Cmax	DNEL	Cmax/VP
Phenol	108-95-2	0.067	347	8	43.3
Cumeen	98-82-8	1.653	8567	100	85.7
n-Butanol	71-36-3	3.333	8567	310	27.6

Andere methoden lead component selectie inhalatie

TIX-TOX methode (DOHSBASE, Scheffers/Wieling)

- Ratio Cmax / DNEL omgezet naar 1 -4 waarde
- Ernst effect in 4 klasse
- Product TIX en TOX → rangorde

DOHSBase Compare 17-01 EU

File Mode Language Help

Select Compare

TOX: IFA Spaltenmodell OELV: TWA 8 hr in mg/m3

List of substances sorted on Risk Assessment Score (RAS)

Name	CAS-number	Physical state	H/EUH-code(s)	TOX	C_sat	OELV	TIX	RAS
Phenol	108-95-2	Solid	H341 H331 H311 H301 H373	3	1,04 E+03	8,00000000	1,2	3,6
Butan-1-ol	71-36-3	Liquid	H226 H302 H335 H336 H315	3	2,57 E+04	310,00000000	1,1	3,3
Cumene	98-82-8	Liquid	H226 H304 H335 H411	1	2,95 E+04	100,00000000	1,4	1,4

Resultaat RAS-score

DOHSBase Compare 17-01 EU

File Mode Language Help

Select Compare

TOX: IFA Spaltenmodell OELV: TWA 8 hr in mg/m3

List of substances sorted on Risk Assessment Score (RAS)

Name	CAS-number	Physical state	H/EUH-code(s)	TOX	C_sat	OELV	TIX	RAS
Phenol	108-95-2	Solid	H341 H331 H311 H301 H373	3	1,04 E+03	8,0000000	1,2	3,6
Butan-1-ol	71-36-3	Liquid	H226 H302 H335 H336 H315	3	2,57 E+04	310,0000000	1,1	3,3
Cumene	98-82-8	Liquid	H226 H304 H335 H411	1	2,95 E+04	100,0000000	1,4	1,4

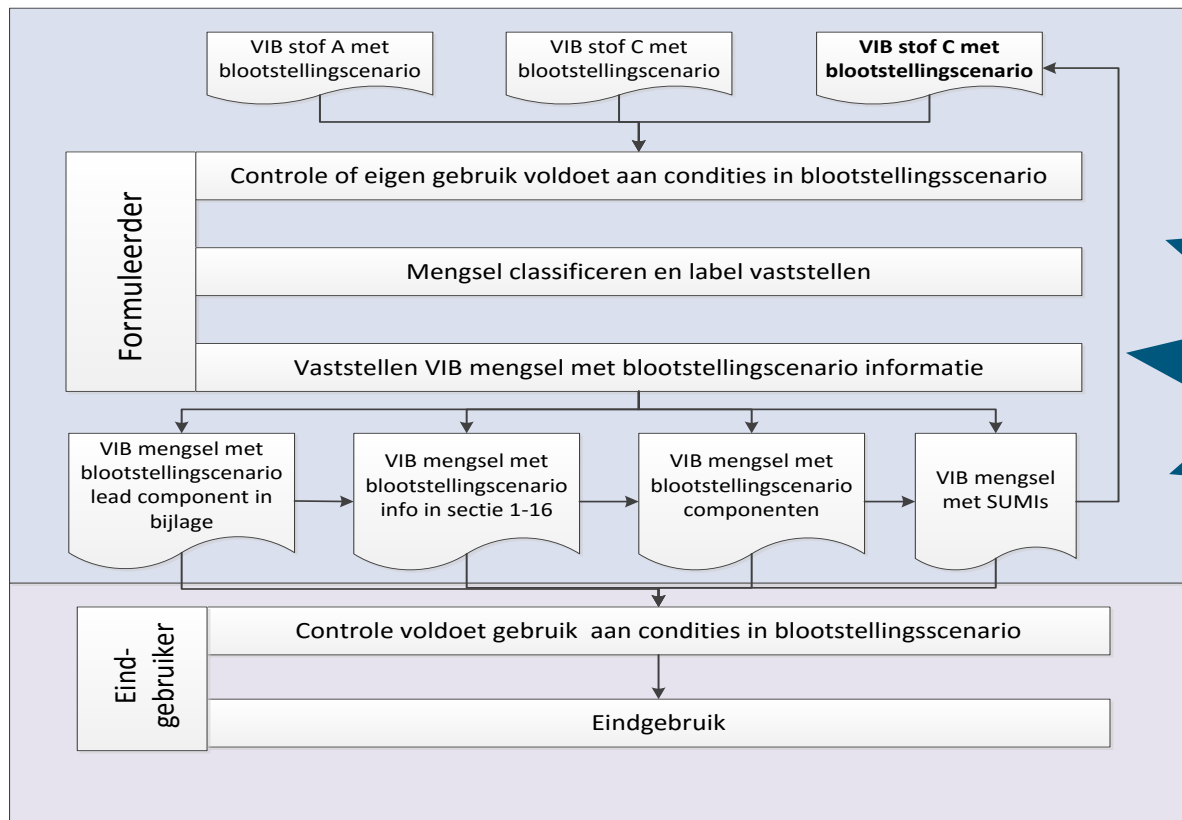
Resultaat vergelijking 3 methodes

- Verschillende formuleerders
 - >200 gevaarlijke stoffen
 - > 1500 mengsels
- Geen grote verschillen tussen 3 methodes voor inhalatie
 - > 90% zelfde lead component
 - 1 – 2 omwisseling
 - Wel verschil in hoogteverschil rangorde
- LCID methode gebruiken

Verminderen informatiedruk

- < 15% gevaarlijke stoffen lead component, betrekken # 2 → 7%
→ beter hanteerbaar

Verplichtingen in de keten gerealiseerd



Probleem vervolgmuleerder

Concentratiebanden in VIBs

- Rekenplicht met hoogste waarde
 - Som concentratie > 100%
 - Geen zicht of verhoudingen componenten nog kloppen

Mengsels zonder stoffen met additief effect

- Benoemen lead component

Mogelijke oplossing voor componenten met additief effect

- Reciproke berekeningsmethode voorgesteld door ACGIH voor vluchtige componenten
- Berekenen mengsel specifieke grenswaarde of concentratie
 - Houdt rekening met partiele dampspanning en grenswaarde componenten

Berekenen mengsel specifieke grenswaarde

- Per stof partiele dampspanning uitrekenen ($\% \text{ stof} * \text{dampspanning}$)
- Per stof berekenen van C max op basis van partiële dampspanning (zie chemiekaartenboek)
- Uitrekenen relatief inhalatie risico ($C_{\text{max}} / \text{bedrijfs grenswaarde}$)
- Voor mengsel optellen relevante RIR getallen
- Per stof berekenen mengsel grenswaarde door:
C max van de stof te delen door Som-RIR

Leo.van.der.biessen@rhdhv.com

Volg ons op LinkedIn

[Linkedin.com/company/royal-haskoningdhv](https://www.linkedin.com/company/royal-haskoningdhv)
www.linkedin.com/in/leovanderbiessen

Volg ons op Twitter

@RHDHV

Volg ons op Facebook

[Facebook.com/Royalhaskoningdhv](https://www.facebook.com/Royalhaskoningdhv)

Vragen ?

Dank U!



**Royal
HaskoningDHV**
Enhancing Society Together