



Advies 14695A01 – indicatief MTR voor lucht voor de stoffen HCFC-123 en PFAC

A. van Leeuwenhoeklaan 9
3721 MA Bilthoven
Postbus 1
3720 BA Bilthoven
www.rivm.nl

T 030 274 91 11
F 030 274 29 71
info@rivm.nl

Stoffen	2,2-dichloor-1,1,1-trifluorethaan (HCFC-123; CAS 306-83-2) 2-chloor-1,1,3,3,3-pentafluor-1-propeen (PFAC; CAS 2804-50-4).
Projectnummer RIVM	M/260101/18/CC
Datum rapportage	versie 1 A00: 06-12-2018 versie 2 A01: 26-09-2019 versie 3 A02: 16-01-2020
Auteur(s)	Femke Affourtit (RIVM-VSP)
Toetsers(s)	Paul Janssen (RIVM-VSP) Joke Herremans (RIVM-VSP)
Datum toetsing	17-12-2018
Status	DEFINITIEF 01: In deze versie zijn de opmerkingen verwerkt van de Wetenschappelijke Klankbordgroep normstelling water en lucht. De wijzigingen zijn de waarde van het i-MTR _{lucht} voor PFAC, tekstuele aanpassingen en verduidelijkingen en het rapportage format 02: aanpassing status van de stof

Inhoud

1	Inleiding.....	3
2	Werkwijze.....	3
3	Afleiding i-MTR 2,2-dichloor-1,1,1-trifluorethaan	4
3.1	Kenmerken van de stof	4
3.2	Toepassing van de stof	4
3.3	Toxicologische informatie	5
3.4	Evaluatie	6
3.5	Conclusies	7
4	Afleiding i-MTR PFAC.....	8
4.1	Kenmerken van de stof	8
4.2	Toepassing van de stof	8
4.3	Toxicologische informatie	9
4.4	Evaluatie	9
4.5	Conclusies	10
5	Status van dit advies/disclaimer	10
	Referenties.....	11
	Bijlage 1. Afkortingen	12
	Bijlage 2. Rapportageformulier 2,2-dichloor-1,1,1-trifluorethaan	13

Bijlage 3. Rapportageformulier 2-chloor-1,1,3,3,3-pentafluor-1-propene
16

1 Inleiding

Voor het beoordelen van luchtverontreiniging in het kader van een vergunning heeft het RIVM-VSP voor de volgende stoffen een humane indicatieve MTR-waarde voor inhalatoire blootstelling (humane $i\text{-MTR}_{\text{lucht}}$) en de daarbij behorende VR-waarde (humane $i\text{-VR}_{\text{lucht}}$) afgeleid:

- 2,2-dichloor-1,1,1-trifluorethaan (HCFC-123; CAS 306-83-2)
- 2-chloor-1,1,3,3,3-pentafluor-1-propeen (PFAC; CAS 2804-50-4).

2 Werkwijze

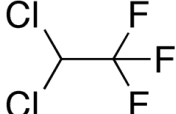
De afleiding van de humane indicatieve MTR voor lucht is uitgevoerd volgens de methodiek die is beschreven in RIVM Rapport 2015-0057 (De Poorter et al. 2015). Voor uitleg van de methode en verdere details wordt verwezen naar dit RIVM-rapport. De afleidingswijze van een Verwaarloosbaar Risiconiveau (VR) is het $\text{MTR}/100$.

3 Afleiding i-MTR 2,2-dichloor-1,1,1-trifluorethaan

3.1 Kenmerken van de stof

In de tabellen 1 en 2 staan de kenmerken van 2,2-dichloor-1,1,1-trifluorethaan (HCFC-123; CAS 306-83-2) samengevat. De stoffeigenschappen zijn overgenomen uit REACH registratie en Classificatie & Labelling inventaris. Voor details zie de bijlage 2.

Tabel 1. Identiteit en Classificatie

Stofnaam	2,2-dichloor-1,1,1-trifluorethaan
IUPAC-naam	2,2-dichloro-1,1,1-trifluoroethane
Synoniemen	HCFC 123 HCFC-123 HFA-123 S123 Solkane 123 SOLKANE® 123
CAS-nummer	306-83-2
Geharmoniseerde classificatie	Geen
Zelfclassificatie in REACH registratie	H371 (centraal zenuw stelsel en lever), H373 (lever), H420
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	-
Molecuulformule	C ₂ HCl ₂ F ₃
Smiles	FC(F)(F)C(Cl)Cl
Structuurformule	

Tabel 2. Relevante fysisch-chemische eigenschappen en informatie over gedrag in het milieu.

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	153		
Oplosbaarheid in water [mg/L]	2 100	25 °C	REACH-registratie
Dampspanning [hPa]	934	25 °C	REACH-registratie
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	77520	geschat	EPI suite
octanol/water partiticoëfficiënt [log Kow]	2,17	20 °C	REACH-registratie

3.2 Toepassing van de stof

HCFC-123 is een chloorfluorkoolstofverbinding die wordt gebruikt als koelmiddel in airconditioningsinstallaties en als tussenproduct voor de productie van andere stoffen. De productie en het gebruik van HCFC-123 vallen onder het Montréal-protocol over ozonlaagafbrekende

stoffen. HCFC-123 is een zeer vluchtige, kleurloze, heldere vloeistof bij kamertemperatuur (ECETOC JACC 2005).

3.3 Toxicologische informatie

In de tabel 3 staan de beschikbare beoordelingen van 2,2-dichloor-1,1,1-trifluorethaan (HCFC-123; CAS nr. 306-83-2) samengevat. Voor HCFC-123 is geen toxicologische norm afgeleid door het RIVM of andere erkende instanties, wel zijn er experimentele toxiciteitsdata beschikbaar waaruit een indicatieve luchtnorm kan worden afgeleid.

Tabel 3 Beschikbare beoordelingen van de stof

Referentie beschikbare beoordeling	Waarde	Opmerking
REACH-registratiedossier (ECHA niet gedateerd)	Geen toxicologische norm afgeleid	
CICAD 23 2000	Geen toxicologische norm afgeleid	
ECETOC JACC 2005	Geen toxicologische norm afgeleid	

In de REACH-registratie zijn beschikbare toxicologische studies opgenomen waaruit een inhalatoire DNEL kan worden afgeleid. Een inhalatoire DNEL is niet afgeleid door de registrant omdat de stof is geregistreerd als tussenproduct welke uitsluitend onder strikt gecontroleerde omstandigheden gebruikt worden (REACH artikel 17 en 18). Voor een registratie als tussenproduct is afleiding van een DNEL niet verplicht. Echter, de fabrikant moet bevestigen dat de stof uitsluitend onder strikt gecontroleerde omstandigheden wordt geproduceerd en gebruikt om emissies en eventuele daaruit voortvloeiende blootstelling van mens en milieu tot een minimum te beperken. De toxicologische studies die zijn opgenomen in de REACH-registratie zijn meegenomen in de beoordeling van HCFC-123 door IPCS (International Programme on Chemical Safety) en ECETOC (European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals) (zie hieronder).

Het RIVM en andere erkende instanties zoals WHO, US-ATSDR, US-EPA of EFSA, hebben geen toxicologische normen voor de algemene bevolking voor HCFC-123 afgeleid. Wel heeft het RIVM een voorlopige luchtnorm ($=i\text{-MTR}_{\text{lucht}}$) van $4000 \mu\text{g}/\text{m}^3$ afgeleid voor de groep van niet volledig gehalogeneerde chloorfluorkoolwaterstoffen (HCFC) (RIVM 2000). Deze afleiding ging uit van HCFC-21 als meest toxische vertegenwoordiger uit deze groep en gebruikte een gecorrigeerde chronische NOAEL van HCFC-142b als een relatief goed onderzochte vertegenwoordiger uit de groep.

De IPCS (International Programme on Chemical Safety) en ECETOC (European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals) hebben HCFC-123 beoordeeld (CICAD 23 2000, ECETOC JACC 2005).

De IPCS en ECETOC concluderen dat HCFC-123 *in vivo* niet genotoxisch is. Hoewel HCFC-123 positief was in een chromosoomafwijking studie in humane lymfocyten *in vitro*, was HCFC-123 negatief in alle andere *in vitro* en *in vivo* testen voor genetische toxiciteit.

Lange termijn blootstelling aan HCFC-123 via de ademhaling bij ratten leidde tot tumoren in de lever, testes (Leydig-cellen) en alvleesklier (CICAD 23 2000, ECETOC JACC 2005). Naast tumoren werden ook effecten waargenomen in klinisch chemische parameters, lichaamsgewicht, gewichtstoename en peroxisoom proliferatie in de lever. Deze effecten werden gezien bij de laagst geteste concentratie van 300 ppm (1880 mg/m³), waardoor er geen NOAEL kon worden afgeleid.

De tumoren in de lever en Leydig-cellen zijn waarschijnlijk niet relevant voor mensen, echter de relevantie van alvleeskliertumoren voor mensen blijft onduidelijk (CICAD 23 2000, ECETOC JACC 2005). De levertumoren zijn niet relevant voor mensen aangezien deze waarschijnlijk een gevolg zijn van verhoogde peroxisoom proliferatie en peroxisoom proliferatie specifiek is voor ratten. De Leydig-celtumoren zijn niet relevant voor mensen aangezien deze waarschijnlijk een gevolg zijn van verhoogde hormonale verstoring bij oudere ratten en ook gerelateerd kunnen worden aan peroxisoom proliferatie. De significantie van alvleeskliertumoren voor mensen blijft onduidelijk omdat het mechanisme waardoor alvleeskliertumoren ontstaan niet wordt begrepen.

Kritische effecten bij herhaalde blootstelling aan de stof zijn leverschade in mensen en proefdieren, en vertraagde neonatale groei tijdens lactatie in ratten en apen (CICAD 23 2000, ECETOC JACC 2005). Deze kritische effecten kunnen veroorzaakt worden door de metaboliëten trifluoroacetylchloride en trifluoroazijnzuur welke ontstaan na omzetting van HCFC-123 door CYP2E1 in de lever. Trifluoroacetylchloride veroorzaakt mogelijk de levereffecten door covalente binding aan eiwitten en trifluoroazijnzuur in de moedermelk veroorzaakt mogelijk de groeivertraging bij neonaten. Voor beide kritische effecten is een LOAEL van 30 ppm (188 mg/m³) afgeleid uit een 2-generatie reproductieonderzoek met HCFC-123 in ratten (whole-body inhalation, 6 uur/dag, 7 dagen/week). Het was niet mogelijk om een NOAEL te identificeren, aangezien levereffecten werden waargenomen bij het laagste blootstellingsniveau in de 2-generatie reproductiestudie (30 ppm, 188 mg/m³). Levereffecten zijn ook gezien bij werknemers die gedurende 1-4 maanden herhaaldelijk werden blootgesteld aan HCFC-123. De blootstellingsconcentraties zijn echter onzeker; schattingen lopen uiteen van 5 tot 480 ppm (31,3 – 3005 mg/m³).

3.4 Evaluatie

Een stofspecifieke waarde voor het afleiden van de $i\text{-MTR}_{\text{lucht}}$ heeft de voorkeur boven de eerder door het RIVM voorgestelde voorlopige luchtnorm voor de hele groep van HCFC's. Aangezien voor HCFC-123 geen NOAEL beschikbaar is, wordt uitgegaan van de laagste LOAEL van

188 mg/m³ afkomstig uit de 2-generatiestudie in ratten. De LOAEL omgerekend naar continu blootstelling is gelijk aan 47 mg/m³ (factor 6/24). Op basis van stroomschema 2 uit De Poorter et al. (2015) wordt een i-MTR_{lucht} van 200 µg/m³ (afgeronde waarde) voorgesteld ($47 \text{ mg/m}^3 \div 2,5$ (interspecies (AF₁)) $\div 10$ (intraspecies (AF₂)) $\div 10$ (extrapolatie LOAEL naar NOAEL (AF₇))).

3.5 Conclusies

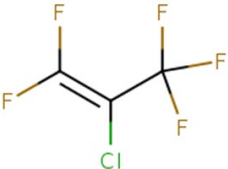
i-MTR_{lucht}: 200 µg/m³
i-VR_{lucht}: 2 µg/m³

4 Afleiding i-MTR PFAC

4.1 Kenmerken van de stof

In de tabellen 1 en 2 staan de kenmerken van 2-chloor-1,1,3,3,3-pentafluor-1-propene (PFAC; CAS 2804-50-4) samengevat. De stofeigenschappen zijn overgenomen uit REACH registratie en Classificatie & Labelling inventaris. Voor details zie de bijlage 3.

Tabel 3. Identiteit en Classificatie

Stofnaam	2-chloor-1,1,3,3,3-pentafluor-1-propene (PFAC)
IUPAC-naam	2-Chloropentafluoropropene
Synoniemen	1-Propene, 2-chloro-1,1,3,3,3-pentafluoro-Propene, 2-chloropentafluoro-
CAS-nummer	2804-50-4
Geharmoniseerde classificatie	Geen
Zelfclassificatie in REACH registratie	Geen REACH registratie Geen notificaties in Classificatie & Labelling inventaris
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	-
Molecuulformule	C ₃ ClF ₅
Smiles	Cl\C(=C(F)F)C(F)(F)F
Structuurformule	

Tabel 4. Relevante fysisch-chemische eigenschappen en informatie over gedrag in het milieu.

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	166		
Oplosbaarheid in water [mg/L]	416	geschat	EPI suite
Dampspanning [hPa]	1900	geschat	EPI suite
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	40580	geschat	EPI suite
octanol/water partiticoëfficiënt [log Kow]	2,56	geschat	EPI suite

4.2 Toepassing van de stof

PFAC is chloorfluorkoolwaterstof die gebruikt worden als koelmiddel en als drijfgas in spuitbussen. De productie en het verbruik van chloorfluorkoolwaterstoffen valt onder het Montréalprotocol over

ozonlaagafbrekende stoffen. De beschikbare informatie over de fysisch-chemische gegevens voor deze stof is beperkt.

4.3 Toxicologische informatie

Voor PFAC zijn geen toxicologische normen voor de algemene bevolking afgeleid door het RIVM of door andere erkende instanties zoals WHO, US-ATSDR, US-EPA of EFSA. Een literatuurrecherche naar toxicologische informatie leverde geen resultaten.

4.4 Evaluatie

Voor PFAC kan geen toxicologische norm afgeleid worden vanwege het ontbreken van toxicologische gegevens. Voordat een indicatieve norm wordt afgeleid op basis van stroomschema 3 uit De Poorter et al. (2015), wordt verkend of normstelling van een verwante verbinding (read across) beschikbaar is.

Hexafluorpropeen is een stof die qua chemische structuur lijkt op PFAC (beide een propeen helemaal "bezet met" met halogenen). Voor hexafluorpropeen heeft het RIVM een luchtnorm (=MTR_{lucht}) afgeleid.

PFAC:



hexafluorpropeen:



Het kritische effect voor hexafluorpropeen is niertoxiciteit (RIVM 2012). Deze is toe te schrijven aan de vorming van specifieke metabolieten van de stof in de nieren. Gutathionconjugaten worden in lever en nieren omgezet naar cysteineconjugaten die op hun beurt door een nierenzym naar een reactieve thiolverbinding kunnen worden omgezet. Dit mechanisme van nierbeschadiging is bekend voor diverse haloalkenen, inclusief trichlooretheen, tetrachlooretheen, hexachloorbutadien, tetrafluoretheen en chloortrifluoretheen (RIVM 2012, Dekant en Henschler 1999, Luu et al. 2000). Carcinogeniteitsgegevens ontbreken voor hexafluorpropeen.

Voor hexafluorpropeen heeft het RIVM een luchtnorm (=MTR_{lucht}) van 30 µg/m³ afgeleid op basis van een NOAEL voor niereffecten van 10 ppm (61 mg/m³) uit een 90-dagen inhalatie-experiment in de muis (afgeronde waarde na omrekening naar continue blootstelling en delen door een assessmentfactor van 1 voor interspecies vanwege de bekende grotere gevoeligheid van ratten voor de kritische niereffecten, 10 voor intraspecies, 4 voor subchronische naar chronische blootstelling en een extra factor van 10 voor het ontbreken van gegevens over reproductietoxiciteit en carcinogeniteit) (RIVM 2012). Het kritisch effect voor hexafluorpropeen op de nieren is ook aangetoond voor een aantal andere haloalkenen, inclusief tetrafluoretheen en chloortrifluoretheen. Op

basis hiervan wordt voor PFAC gekozen voor read across naar hexafluorpropeen. Aangezien gegevens over metabolisme of dierstudies met PFAC ontbreken, kan niet worden aangetoond dat read across met hexafluorpropeen worst case is. Daarom wordt een extra factor 10 toegepast.

4.5 Conclusies

i-MTR_{lucht}: 3 µg/m³
i-VR_{lucht}: 0,03 µg/m³

5 Status van dit advies/disclaimer

Dit advies is opgesteld naar aanleiding van een vraag in de context van een vergunningverlening/ontheffingsaanvraag. Het advies is getoetst volgens de interne RIVM-kwaliteitsprocedures en door de Wetenschappelijke Klankbordgroep normstelling water en lucht (WK normstelling water en lucht). De voorgestelde indicatieve normen gelden als wetenschappelijke advieswaarden totdat ze zijn vastgesteld door het Ministerie van Infrastructuur en Waterstaat.

Referenties

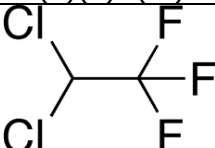
- Bijlage NeR (2014) <https://www.infomil.nl/onderwerpen/lucht-water/lucht/ner-archief/> (geraadpleegd op 17-12-2018).
- De Poorter, LRM, Van Herwijnen R, Janssen PJCM, Smit CE. 2015. Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen. Bilthoven, Nederland: RIVM. Rapport 2015-0057.
- CICAD 23 (2000) Concise International Chemical Assessment Document 23— 2,2-DICHLORO-1,1,1-TRIFLUOROETHANE (HCFC-123); International Programme on Chemical Safety, World Health Organisation.
- Dekant, W, Henschler, D (1999) Organ-specific carcinogenicity of haloalkenes mediated by glutathione conjugation. *Journal of Cancer Research and Clinical Oncology* (1999) **125**:174-181.
- ECETOC JACC (2005) 1,1-Dichloro-2,2,2-trifluoroethane (HCFC-123) CAS No. 306-83-2. ECETOC JACC REPORT No. 47. ISSN-0773-6339-47.
- ECHA (niet gedateerd) Registratiedossier intermediaire <https://echa.europa.eu/nl/registration-dossier/-/registered-dossier/12060/4/1> (Geraadpleegd op 26-11-2018)
- Luu, NC, Iyer, RA, Anders, MW, Ridge, DP (2000) Bioactivation Mechanisms of Haloalkene Cysteine S-Conjugates Modeled by Gas-Phase, Ion-Molecule Reactions. *Chemical Research in Toxicology* **13** (7), 610-615.
- RIVM (2000) Emissie en verspreiding van geur en toxische stoffen in de omgeving van de Tweede en Derde Merwedehaven te Dordrecht en de hiermee samenhangende gezondheidsaspecten. RIVM Rapport nr. 609021018.
- RIVM (2012) Afleiding van een Toelaatbare Concentratie in Lucht (TCL) voor hexafluorpropeen. RIVM intern advies d.d. 20-09-2012. PORS case nr. 13585, document nr 13585A00.

Bijlage 1. Afkortingen

AF	Assessment Factor
ATSDR	Agency for Toxic Substances and Disease Registry
DNEL	Derived No Effect Level
ECETOC	European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals
ECHA	European Chemicals Agency
EFSA	European Food Safety Authority
HCFC-123	2,2-dichloor-1,1,1-trifluorethaan
LOAEL	Low Observed Adverse Effect Level
IPCS	International Programme on Chemical Safety
MTR	Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau
NeR	Nederlandse Emissierichtlijn lucht
NOAEL	No Observed Adverse Effect Level
PFAC	2-chloor-1,1,3,3,3-pentafluor-1-propeen
REACH	Registration, Evaluation and Authorisation of Chemical (Verordening EU 1907/2006)
TDI	Toelaatbare dagelijkse inname
US EPA	United States Environmental Protection Agency
VR	Verwaarloosbaar Risiconiveau
WHO	World Health Organization
WK-nwl	Wetenschappelijke Klankbordgroep normstelling water en lucht

Bijlage 2. Rapportageformulier 2,2-dichloor-1,1,1-trifluorethaan

1. IDENTITEIT EN CLASSIFICATIE

Stofnaam	2,2-dichloor-1,1,1-trifluorethaan
IUPAC-naam	2,2-dichloro-1,1,1-trifluoroethane
Synoniemen	HCFC 123 HCFC-123 HFA-123 S123 Solkane 123 SOLKANE® 123
CAS-nummer	306-83-2
Geharmoniseerde classificatie	Geen
Zelfclassificatie in REACH registratie	H371 (centraal zenuw stelsel en lever), H373 (lever), H420
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	-
Molecuulformule	C ₂ HCl ₂ F ₃
Smiles	FC(F)(F)C(Cl)Cl
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	153		
Oplosbaarheid in water [mg/L]	2 100	25 °C	REACH-registratie
Dampspanning [hPa]	934	25 °C	REACH-registratie
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	77520	geschat	EPI suite
octanol/water partiticoëfficiënt [log Kow]	2,17	20 °C	REACH-registratie

3. TOXICITEIT

3.1 Humane toxiciteit: afleiding van i-HL_{halatoire}

Schema 1: Afleiding van i-HL (overkoepelend schema)

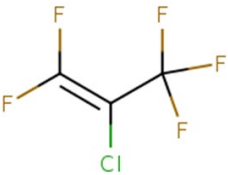
Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	Henry-coëfficiënt (bij 25°C) < 0,06 Pa m ³ /mol of is stof een zout?	Nee → i-MTR _{lucht}
	Evaluatie carcinogeniteit	
2	Is de stof genotoxisch obv uitgevoerde genotoxiciteitsstudies?	Nee → 5
3	Beoordeel beschikbare carcinogeniteitsgegevens: Is carcinogeniteit gebleken?	
4	Is het orale en/of inhalatoire 10 ⁻⁴ resp. 10 ⁻⁶ levenslang risico te bepalen?	
	Humane toxiciteit	
5	Is eerder en bestaande RIVM TDI of TCA of daarmee vergelijkbare norm?	Nee → 6
6	Is bestaande TDI of TCA afgeleid door andere erkende instanties (WHO, US-EPA, TSDR, CEPA)?	Nee → 7
7	Zijn er experimentele toxiciteitsdata voor de stof waaruit een i-HL mogelijk afleidbaar is?	Ja → 8
8	Levert afleiding volgens schema 2 een potentiële i-MTR _{lucht} op?	Ja → Afleiding volgens schema 2
9	Welke potentiële i-HL is het laagste de bestaande TDI/TCA, zelf afgeleide potentiële i-HL of de 10 ⁻⁴ resp. 10 ⁻⁶ levenslang risico? Kies de laagste als i-HL	

Schema 2 Afleiding i-HL uit toxiciteitsdata

Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	Zijn er slechts acute toxiciteits-, irritatie, corrosiviteits- en/of sensibilisatiegegevens?	Nee → AF ₁ = 2,5 (inhalatie); AF ₂ = 10
2	Is een 'life-time'-toxiciteitsstudie aanwezig?	Ja → AF ₃ = 1
3	Zijn biochemische en histopathologische parameters onderzocht?	Ja → AF ₄ = 1
4	Zijn zowel fertiliteits- als pre-/postnatale ontwikkelingseffecten onderzocht?	Ja → AF ₅ = 1
5	Is de stof mogelijk genotoxisch obv uitgevoerde genotoxiciteitsstudies?	Nee → AF ₆ = 1
6a	Is afleiding van overall NOAEL of BMDL uit dierstudies mogelijk?	Nee → 6b
6b	Is afleiding van acceptabele overall LOAEL uit dierstudies mogelijk?	Ja → AF ₇ = 10
7	Bepaal overall AF	AF _{totaal} = 250
8	Is AF totaal ≤ 10000	Ja → $i\text{-HL}_{\text{inhalatie}} = \frac{\text{LOAEL}}{\text{AF}_{\text{totaal}}}$ LOAEL 188 mg/m ³ Omgerekend naar continu blootstelling (6/24)

Bijlage 3. Rapportageformulier 2-chloor-1,1,3,3,3-pentafluor-1-propeen

1. IDENTITEIT EN CLASSIFICATIE

Stofnaam	2-chloor-1,1,3,3,3-pentafluor-1-propeen (PFAC)
IUPAC-naam	
Synoniemen	
CAS-nummer	2804-50-4
Geharmoniseerde classificatie	Geen
Zelfclassificatie in REACH registratie	Geen REACH registratie Geen notificaties in Classificatie & Labelling inventaris
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	-
Molecuulformule	C ₃ ClF ₅
Smiles	Cl\C(=C(/F)F)C(F)(F)F
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	166		
Oplosbaarheid in water [mg/L]	416	geschat	EPI suite
Dampspanning [hPa]	1900	geschat	EPI suite
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	40580	geschat	EPI suite
octanol/water partiticoëfficiënt [log K _{ow}]	2,56	geschat	EPI suite

3. TOXICITEIT

3.1 Humane toxiciteit: afleiding van i-HL_{halatoire}

Schema 1: Afleiding van i-HL (overkoepelend schema)

Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	Henry-coëfficiënt (bij 25°C) < 0,06 Pa m ³ /mol of is stof een zout?	Nee → i-MTR _{lucht}
	Evaluatie carcinogeniteit	
2	Is de stof genotoxisch obv uitgevoerde genotoxiciteitsstudies?	
3	Beoordeel beschikbare carcinogeniteitsgegevens: Is carcinogeniteit gebleken?	
4	Is het orale en/of inhalatoire 10 ⁻⁴ resp. 10 ⁻⁶ levenslag risico te bepalen?	
	Humane toxiciteit	
5	Is eerder en bestaande RIVM TDI of TCA of daarmee vergelijkbare norm?	Nee → 6
6	Is bestaande TDI of TCA afgeleid door andere erkende instanties (WHO, US-EPA, TSDR, CEPA)?	Nee → 7
7	Zijn er experimentele toxiciteitsdata voor de stof waaruit een i-HL mogelijk afleidbaar is?	Nee → Bepaal toepasbaarheid TCC (schema 3) indien read across niet mogelijk is. In dit geval is read across mogelijk.
8	Leverd afleiding volgens schema 2 een potentiële i-MTR _{lucht} op?	
9	Welke potentiële i-HL is het laagste de bestaande TDI/TCA, zelf afgeleide potentiële i-HL of de 10 ⁻⁴ resp. 10 ⁻⁶ levenslang risico? Kies de laagste als i-HL	