



Per- és polifluorozott vegyületek (PFAS és PFOS), fluortartalmú csomagolószerek környezet- és élelmiszerbiztonsági összefüggései



ÓBUDAI EGYETEM

REJTŐ SÁNDOR KÖNNYŰIPARI
ÉS KÖRNYEZETMÉRNÖKI KAR

Dr. Szigeti Tamás János Stratégiai igazgató
Bálint Analitika Kft.

Rejtő Sándor (1853-1928) a Budapesti Műegyetemen végzett 1878-ban. Érdeklődési körébe volt **az első gépészmérnöki oklevél**, melyet a **Műegyetemen** állítottak ki.

Fő kutatási területe a szilárdságvizsgálat volt, úttörő elmélete szerint "a fémes anyagok szilárdságai az anyagszerkezetük függvénye." Nevéhez fűződik a **Mechanikai Technológiai Intézet** (Gillemot tanszék elődje) megalapításának megszervezése, ahol pl. Csomagoló gépek működtek együtt.

Főbb műve a **Praktikus mechanikai technológia alapelvei** (1901), ami előadás-jegyzetei alapján született. Ez a könyve évtizedig meghatározó útmutató volt a gépészeknek.

1901–1902 között a **Sándor Műegyetem** **Gépészmérnöki Tanszékének** dékánja, 1920–1921-ben a **Műegyetem rektora**.

Rejtő Sándor (1853–1928) a Budapesti Műegyetemen végzett 1878-ban. Érdekesség, az övé volt **az első gépészmérnöki oklevél**, melyet a **Műegyetemen** állítottak ki.

Fő kutatási területe az anyagvizsgálat volt, úttörő elmélete szerint "a fémes anyagok tulajdonságai az anyagszerkezetük függvénye." Nevéhez fűződik a **Mechanikai Technológiai Intézet** (Gillemot tanszék elődje) anyagvizsgáló laboratóriumának megszervezése, ahol pl. Csonka Jánossal dolgozott együtt.

Főbb művei közé tartozik az **Elméleti mechanikai technológia alapelvei** könyve (négy kötetben), ami előadás-jegyzetei alapján született. A textiltechnológiáról írt könyve évtizedig meghatározó útmutatója volt a textilipar mérnökeinek.

1901–1902-ben a **Királyi József Nádor Műegyetem Gépészmérnöki Karának dékánja**, 1920–1921-ben a Műegyetem **rektora**.



**Az ivóvíz az
élelmiszerlánc
szerves része**



A **PFAS** kifejezés a szintetikus vegyszerek mesterséges vegyületek családjára vonatkozik, beleértve a **PFOA**-t (perfluor-oktánsav) és a **PFOS**-t (perfluor-szulfonsav) is. A csoport több száz vegyi anyagot tartalmaz, amelyeknek váza egymáshoz hasonló, de szerkezetük és kémiai tulajdonságaik kissé eltérőek. Az összes per- és polifluor-alkil-anyagra közösen jellemző, hogy szén- és fluoratomokat tartalmaznak. E vegyületek számos termékben előfordulnak víz-, olaj-, zsír- és hőálló tulajdonságaik miatt.

A PFAS-ok csak ipari eredetűek: antropogén hatás

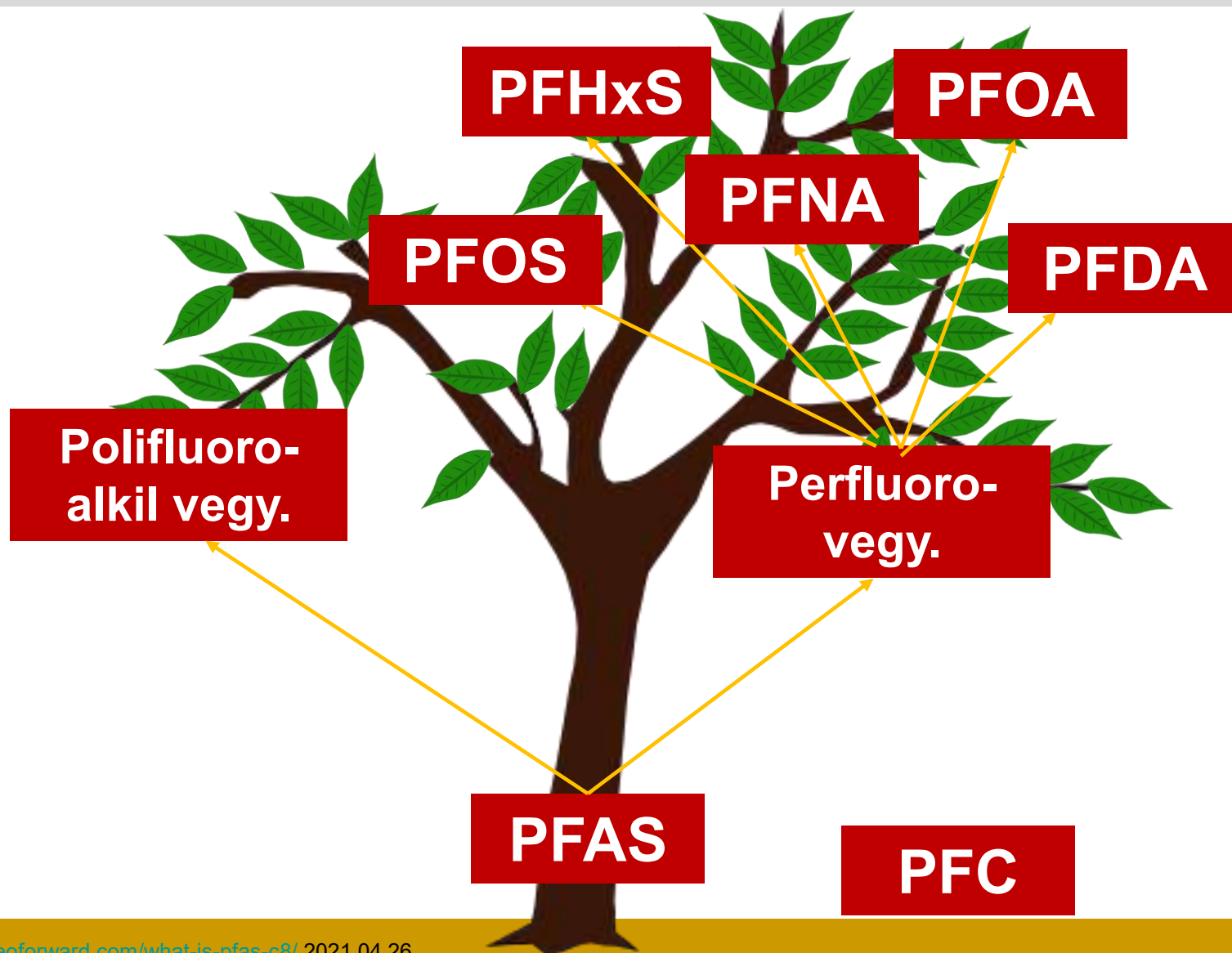




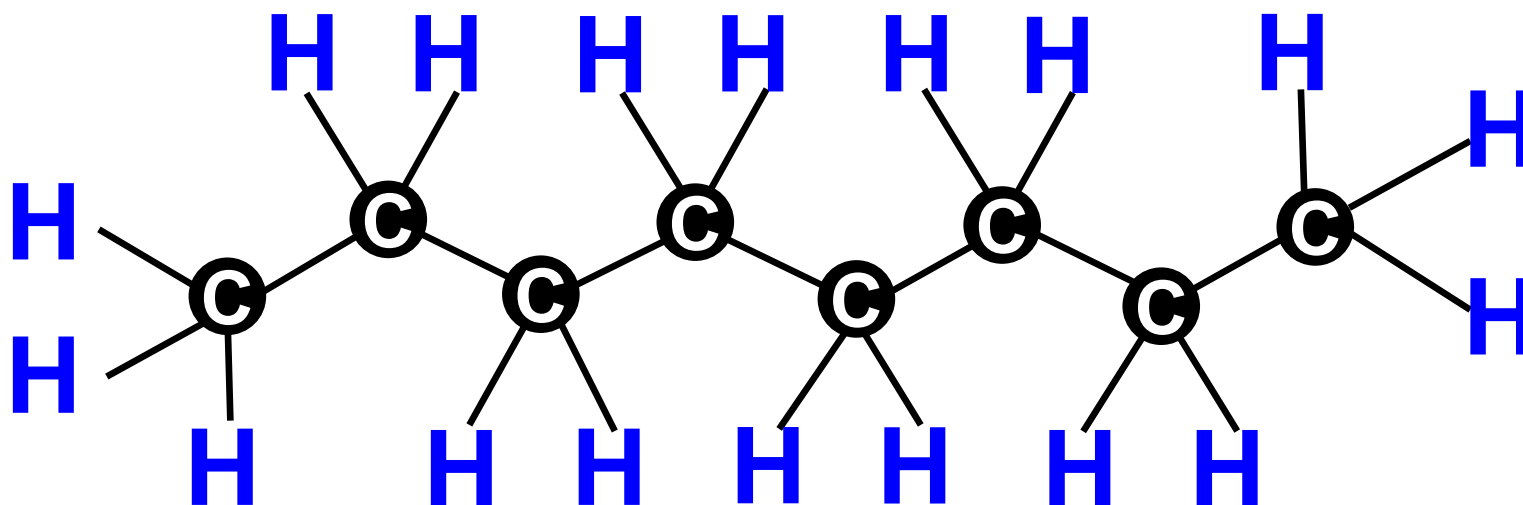
Prefixumok és terminológia

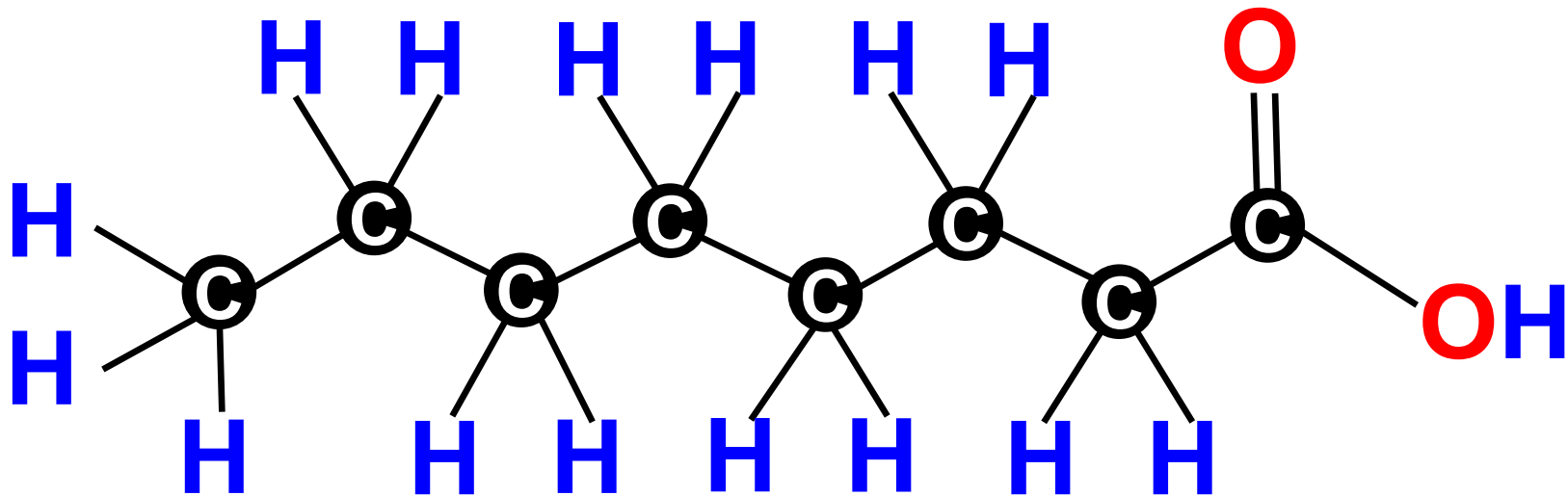
Prefixum	Jelentés
Per-	Át, keresztül
Peri-	Környezet, körüli
Poly-	Sok
Post-	Későbbi, mögöttes
Pre-	Előbbi, valami előtt
Pro-	Előtt, tovább

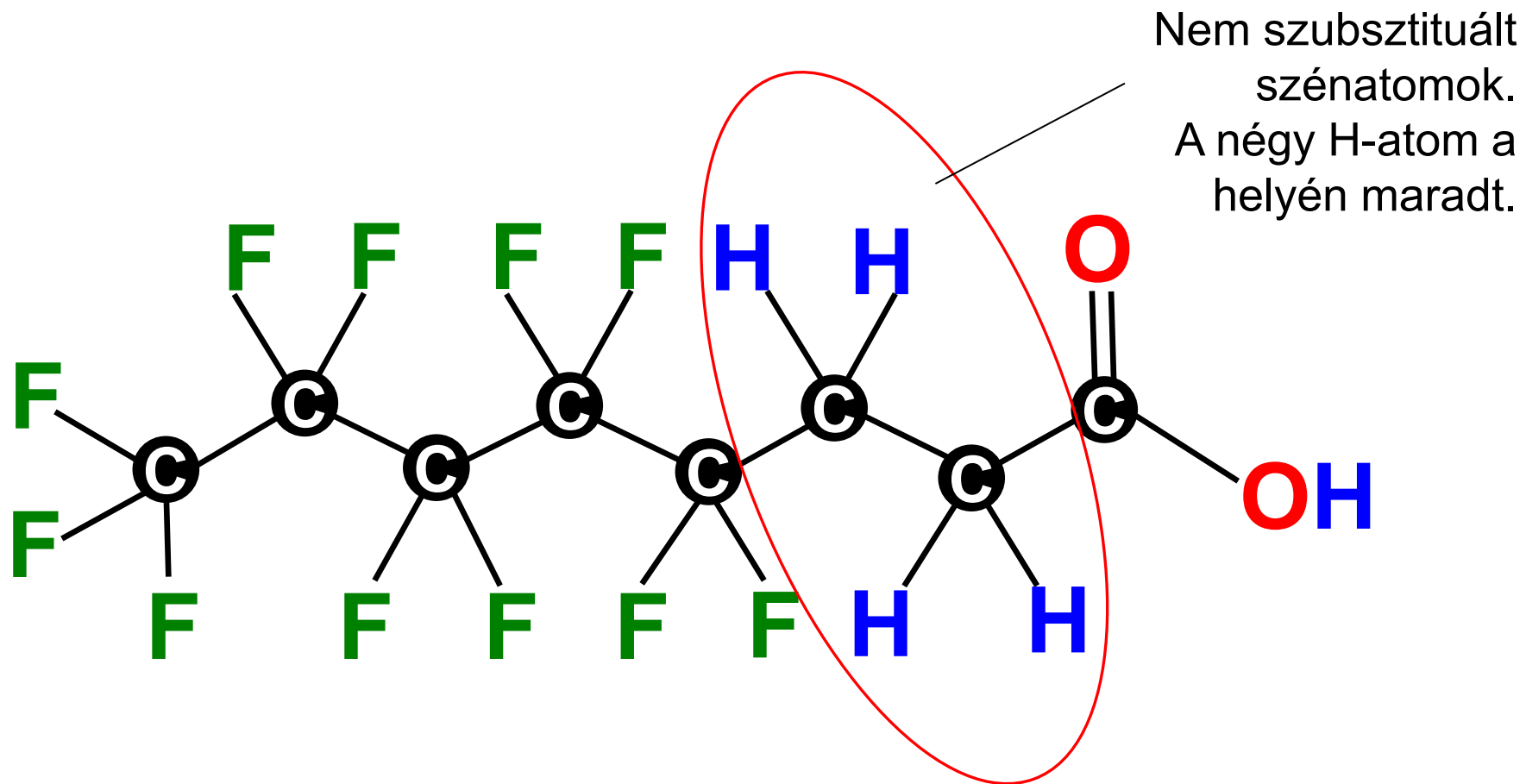
A per- és polifluoro-alkil vegyületek „családfája”

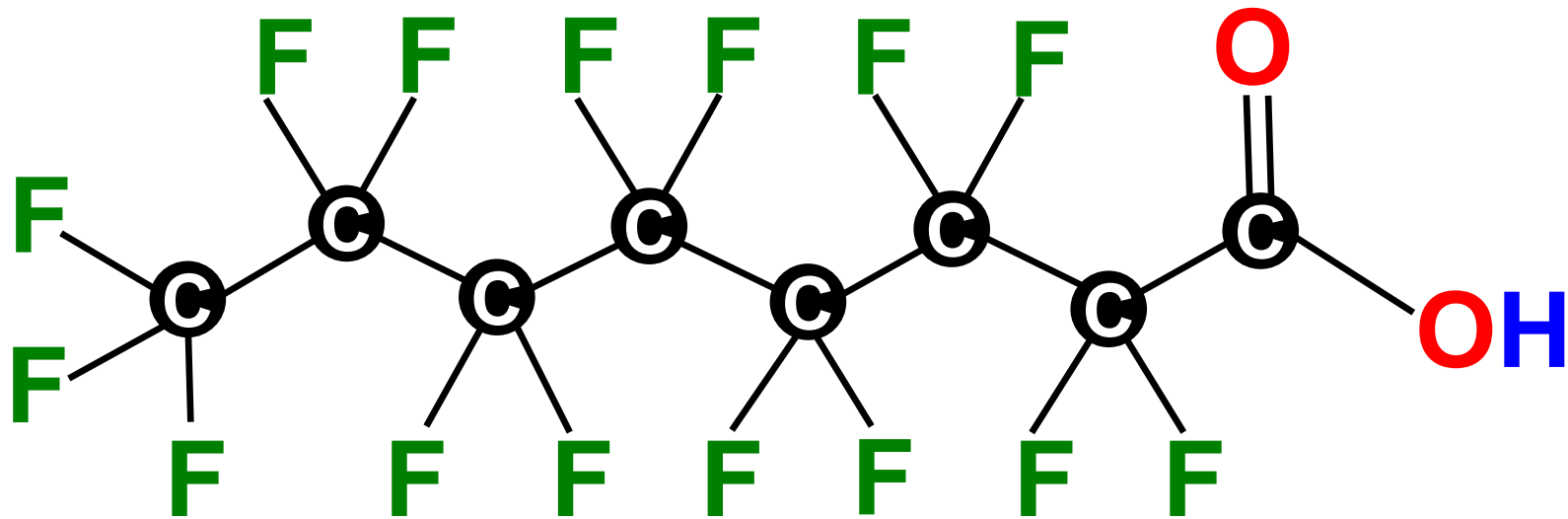


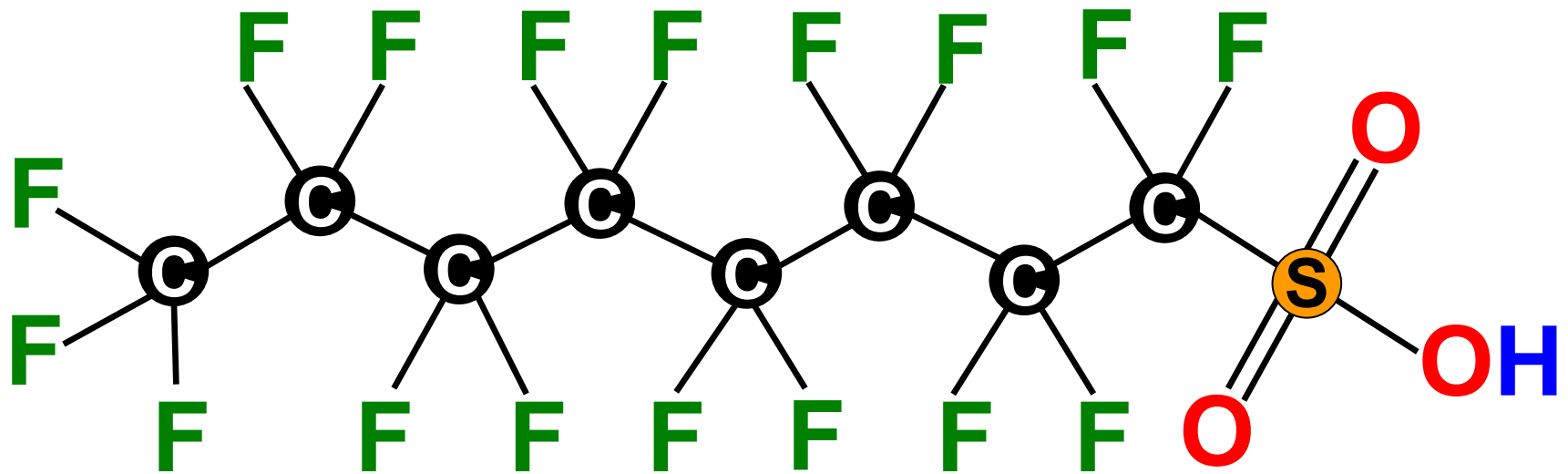
<https://www.geoforward.com/what-is-pfas-c8/> 2021.04.26





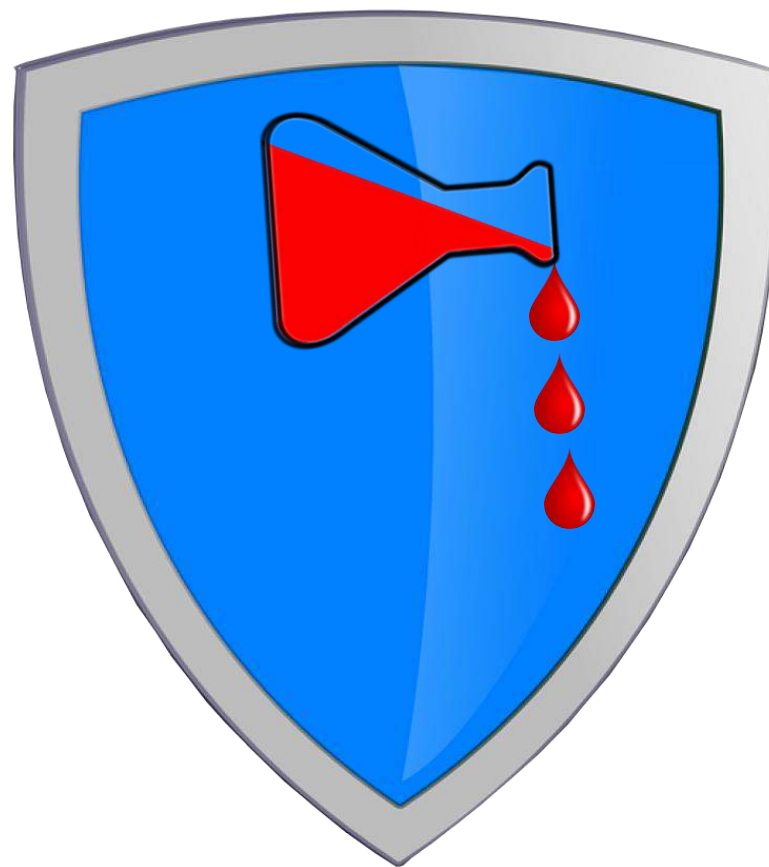




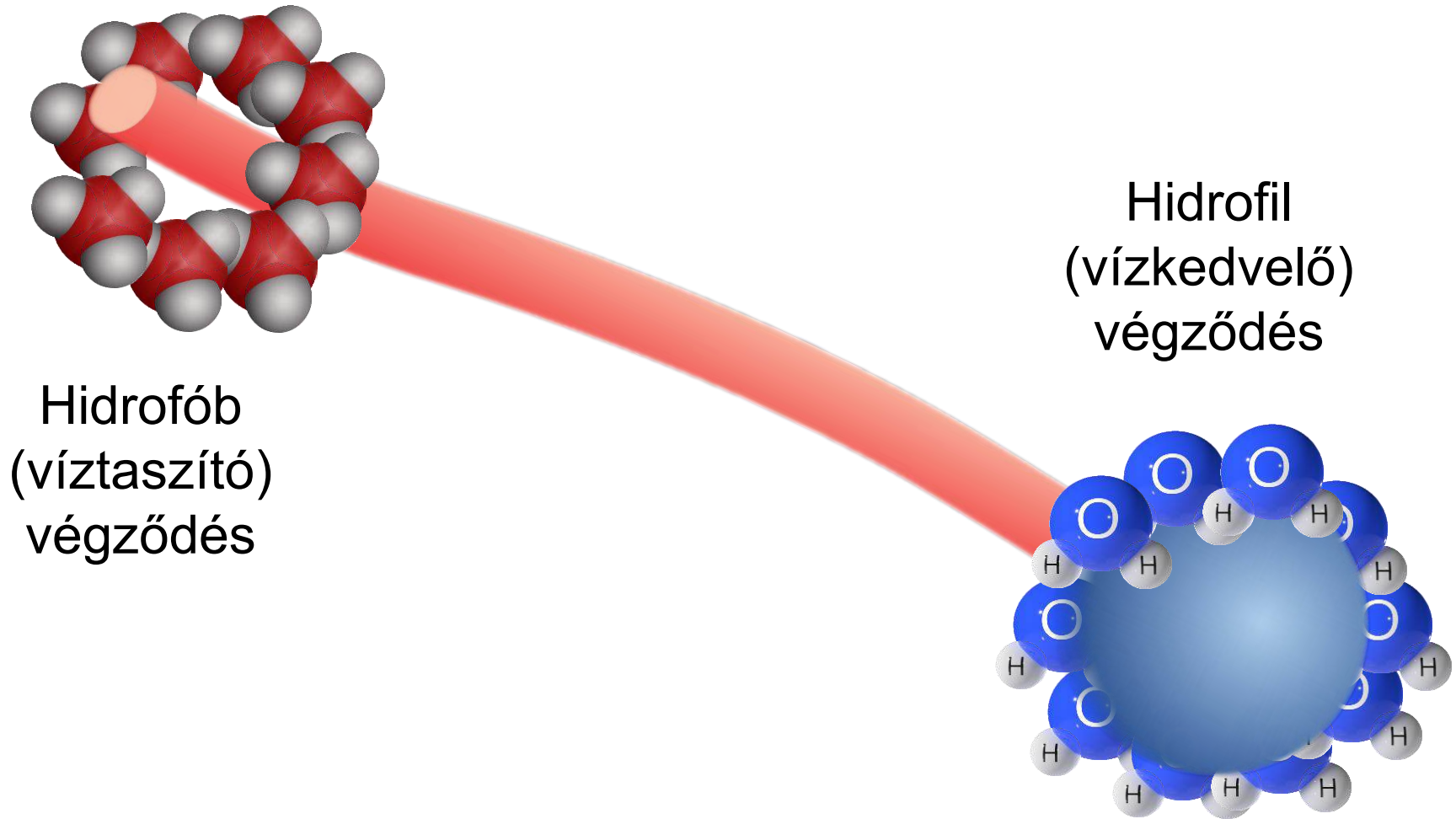




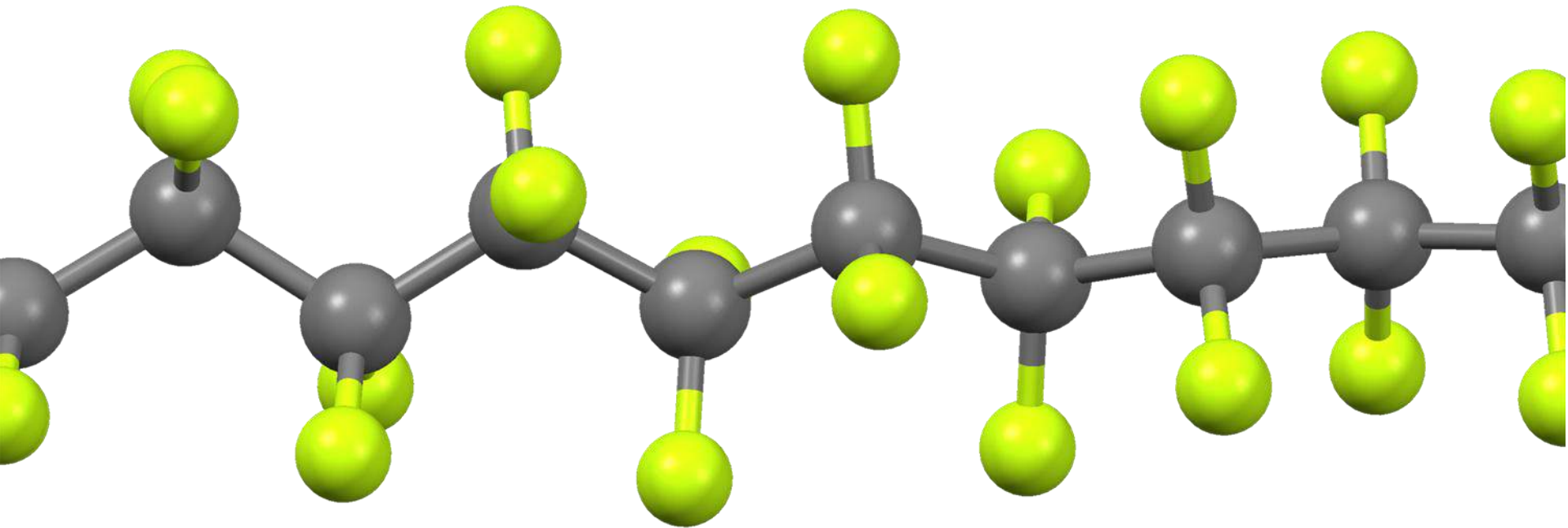
Hőállóság

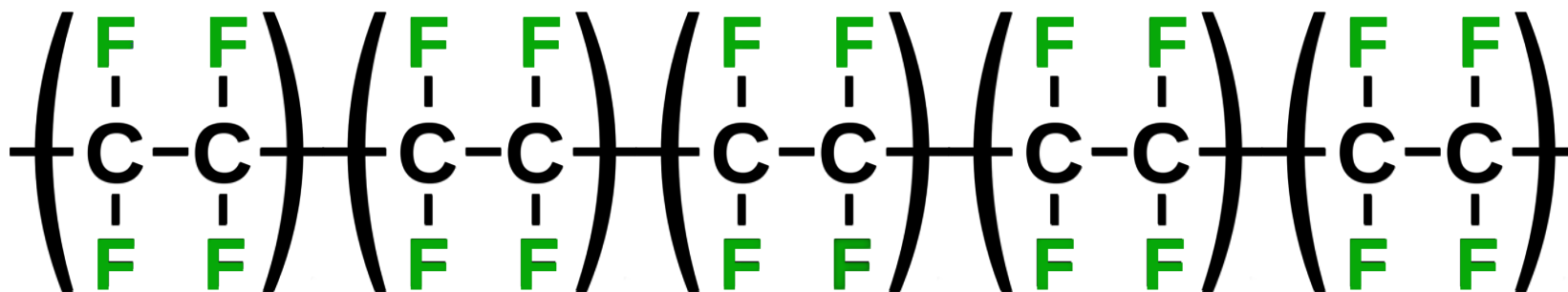


Kémiai ellenállóképesség



DU PONT







Jelenleg a PFOA, sói és rokon vegyületei bizonyos feltételek mellett használhatók a rendszerekben már meglévő tűzoltó habokban, amelyek folyékony tüzelőanyagok gőzeinek lefojtására és tüzeinek (B. osztályú tüzek) oltására szolgálnak

2025. május 5. rendelettervezet: módosítja az (EU) 2019/1021 európai parlamenti és tanácsi rendelet (POP-rendelet) I. mellékletét a perfluor-oktánsav (PFOA), a PFOA sói és a PFOA-rokon vegyületek tekintetében. A felhasználási engedély várhatóan 2025. 12. 3-án lejár.

Egyedi, három évre vonatkozó UTC-határértéket állapítanak meg a rendszerekben már jelen lévő tűzoltó habokra: 1 mg/kg a PFOA-ra vagy sóira, és 10 mg/kg az önálló vagy kombinált PFOA-rokon vegyületekre.

Ez az időszak várhatóan elegendő lesz a gazdasági szereplők számára a jelenlegi általános határértéket meghaladó habok helyettesítésére

A high-resolution image of the Earth as seen from space, showing the Western Hemisphere with North and South America, the Atlantic Ocean, and parts of Europe and Africa. The background is a deep black space filled with numerous white stars.

**A fluorozott
vegyületek
csaknem az
egész planéta
felületén
előfordulnak**

**...veszélyesebb,
mint a hamis
veszélyérzet.**



C8 Science Panel



Dr. Kyle Steenland
Rollins School;
környezet- és
munkaegészségügyi
szakértő;

Dr. Tony Fletcher
London School,
Egészségtan és
trópusi betegségek
szakértője;

Prof. Dr. David Savitz
Brown University;
Közegészségügyi,
szülészeti és
nőgyógyászati
szakember

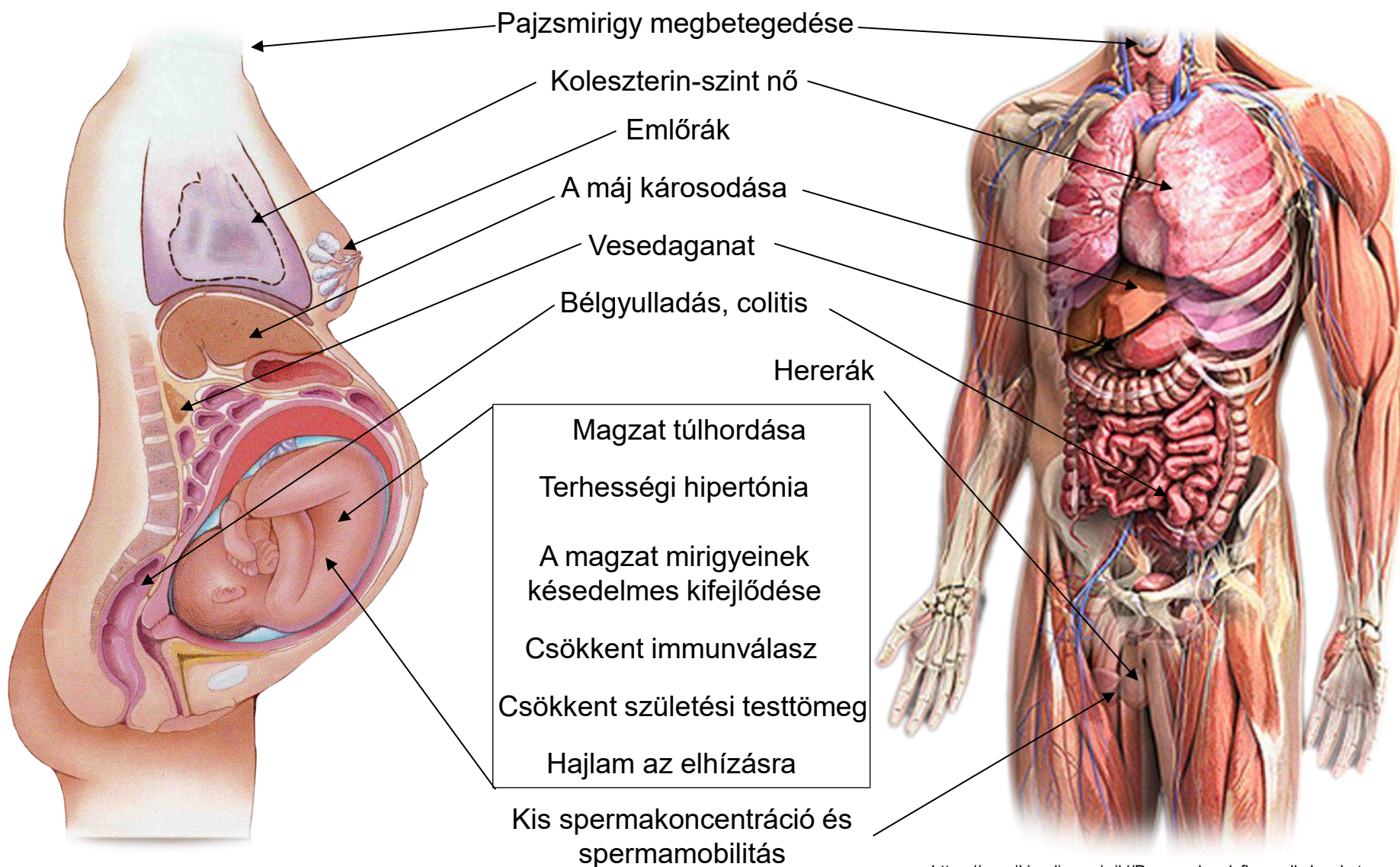


Nagy csalódás:

2005 körül vált gyanússá,
hogy a poli- és perfluorozott
alkil vegyületek toxikusak
lehetnek.

<http://www.c8sciencepanel.org/members.html>

A perfluorozott alkil vegyületek élettani hatásai



https://en.wikipedia.org/wiki/Per-_and_polyfluoroalkyl_substances



ELSEVIER

Available online at www.sciencedirect.com

ScienceDirect

journal homepage: www.elsevier.com/locate/watres



Distribution of perfluorooctane sulfonate isomers and predicted risk of thyroid hormonal perturbation in drinking water



Nanyang Yu ^a, Xiaoxiang Wang ^a, Beibei Zhang ^b, Jingping Yang ^c,
Meiying Li ^a, Jun Li ^a, Wei Shi ^a, Si Wei ^{a,*}, Hongxia Yu ^{a,*}

^a State Key Laboratory of Pollution Control and Resource Reuse, School of the Environment, Nanjing University, Nanjing, Jiangsu, PR China

^b State Environmental Protection Key Laboratory of Monitoring and Analysis for Organic Pollutants in Surface Water, Jiangsu Provincial Environmental Monitoring Center, Nanjing, PR China

^c Laboratory of Immunology and Reproductive Biology, School of Medicine, Nanjing University, Nanjing, Jiangsu, PR China

Enantiospecific Perfluorooctane Sulfonate (PFOS) Analysis Reveals Evidence for the Source Contribution of PFOS-Precursors to the Lake Ontario Foodweb

Brian J. Asher,[†] Yuan Wang,[‡] Amila O. De Silva,[§] Sean Backus,[§] Derek C. G. Muir,[§] Charles S. Wong,^{†,||} and Jonathan W. Martin^{‡,*}

[†]Department of Chemistry, University of Alberta, Edmonton, AB, Canada, T6G 2G2

[‡]Department of Laboratory Medicine and Pathology, University of Alberta, Edmonton, AB, Canada, T6G 2G3

[§]Water Science and Technology Directorate, Environment Canada, Burlington, ON, Canada, L7R 4A6

^{||}Department of Environmental Studies and Sciences and Department of Chemistry, Richardson College for the Environment, University of Winnipeg, Winnipeg MB, Canada, R3B 2E9

 *Supporting Information*

Environment International 75 (2015) 215–222



Contents lists available at ScienceDirect

Environment International

journal homepage: www.elsevier.com/locate/envint



Temporal trends of perfluorooctanesulfonate isomer and enantiomer patterns in archived Swedish and American serum samples

Yanna Liu ^a, Alberto S. Pereira ^a, Sanjay Beeson ^a, Robin Vestergren ^b, Urs Berger ^c, Geary W. Olsen ^d, Anders Glynn ^e, Jonathan W. Martin ^{a,*}

^a Division of Analytical & Environmental Toxicology, Department of Laboratory Medicine & Pathology, University of Alberta, Edmonton T6G 2G3, Alberta, Canada

^b Norwegian Institute for Air Research, Hjalmar Johansens gt. 14, Tromsø NO-9296, Norway

^c Department of Applied Environmental Science, Stockholm University, Stockholm SE-106 91, Sweden

^d 3M Company, Medical Department, St. Paul 55144, MN, USA

^e Department of Risk and Benefit Assessment, National Food Agency, Uppsala SE-751 26, Sweden

TECHNICAL-GRADE PERFLUOROOCTANE SULFONATE ALTERS THE EXPRESSION OF MORE TRANSCRIPTS IN CULTURED CHICKEN EMBRYONIC HEPATOCYTES THAN LINEAR PERFLUOROOCTANE SULFONATE

JASON M. O'BRIEN,*†‡ AISLYNN J. AUSTIN,† ANDREW WILLIAMS,§ CAROLE L. YAUK,§ DOUG CRUMP,‡
and SEAN W. KENNEDY†‡

†Centre for Advanced Research in Environmental Genomics, Department of Biology, University of Ottawa, Ottawa, Ontario, Canada

‡Environment Canada, National Wildlife Research Centre, Carleton University, Ottawa, Ontario, Canada

§Environmental Health Sciences and Research Bureau, Health Canada, Ottawa, Ontario, Canada

(Submitted 13 June 2011; Returned for Revision 5 July 2011; Accepted 10 September 2011)

Abstract—Recently it was discovered that the perfluorooctane sulfonate (PFOS) detected in wildlife, such as fish-eating birds, had a greater proportion of linear PFOS (L-PFOS) than the manufactured technical product (T-PFOS), which contains linear and branched isomers. This suggests toxicological studies based on T-PFOS data may inaccurately assess exposure risk to wildlife. To determine whether PFOS effects were influenced by isomer content, we compared the transcriptional profiles of cultured chicken embryonic hepatocytes (CEH) exposed to either L-PFOS or T-PFOS using Agilent microarrays. At equal concentrations (10 μ M), T-PFOS altered the expression of more transcripts (340, >1.5-fold change, $p < 0.05$) compared with L-PFOS (130 transcripts). Higher concentrations of L-PFOS (40 μ M) were also less transcriptionally disruptive (217 transcripts) than T-PFOS at 10 μ M. Functional analysis showed that L-PFOS and T-PFOS affected genes involved in lipid metabolism, hepatic system development, and cellular growth and proliferation. Pathway and interactome analysis suggested that genes may be affected through the RXR receptor, oxidative stress response, TP53 signaling, MYC signaling, Wnt/ β -catenin signaling, and PPAR γ and SREBP receptors. In all functional categories and pathways examined, the response elicited by T-PFOS was greater than that of L-PFOS. These data show that T-PFOS elicits a greater transcriptional response in CEH than L-PFOS alone and demonstrates the importance of considering the isomer-specific toxicological properties of PFOS when assessing exposure risk. Environ. Toxicol. Chem. 2011;30:2846–2859. © 2011 SETAC

Keywords—Chicken PFOS Isomer Microarray Gene expression

This is an open access article published under an ACS AuthorChoice [License](#), which permits copying and redistribution of the article or any adaptations for non-commercial purposes.



Letter

pubs.acs.org/journal/estlcu



Fluorinated Compounds in U.S. Fast Food Packaging

Laurel A. Schaider,^{*,†} Simona A. Balan,[‡] Arlene Blum,^{§,||} David Q. Andrews,[⊥] Mark J. Strynar,[#] Margaret E. Dickinson,[▽] David M. Lunderberg,[▽] Johnsie R. Lang,[○] and Graham F. Peaslee[@]

[†]Silent Spring Institute, Newton, Massachusetts 02460, United States

[‡]California Department of Toxic Substances Control, Sacramento, California 95814, United States

[§]Green Science Policy Institute, Berkeley, California 94709, United States

^{||}Department of Chemistry, University of California at Berkeley, Berkeley, California 94720, United States

[⊥]Environmental Working Group, Washington, D.C. 20009, United States

[#]National Exposure Research Laboratory, U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, North Carolina 27711, United States

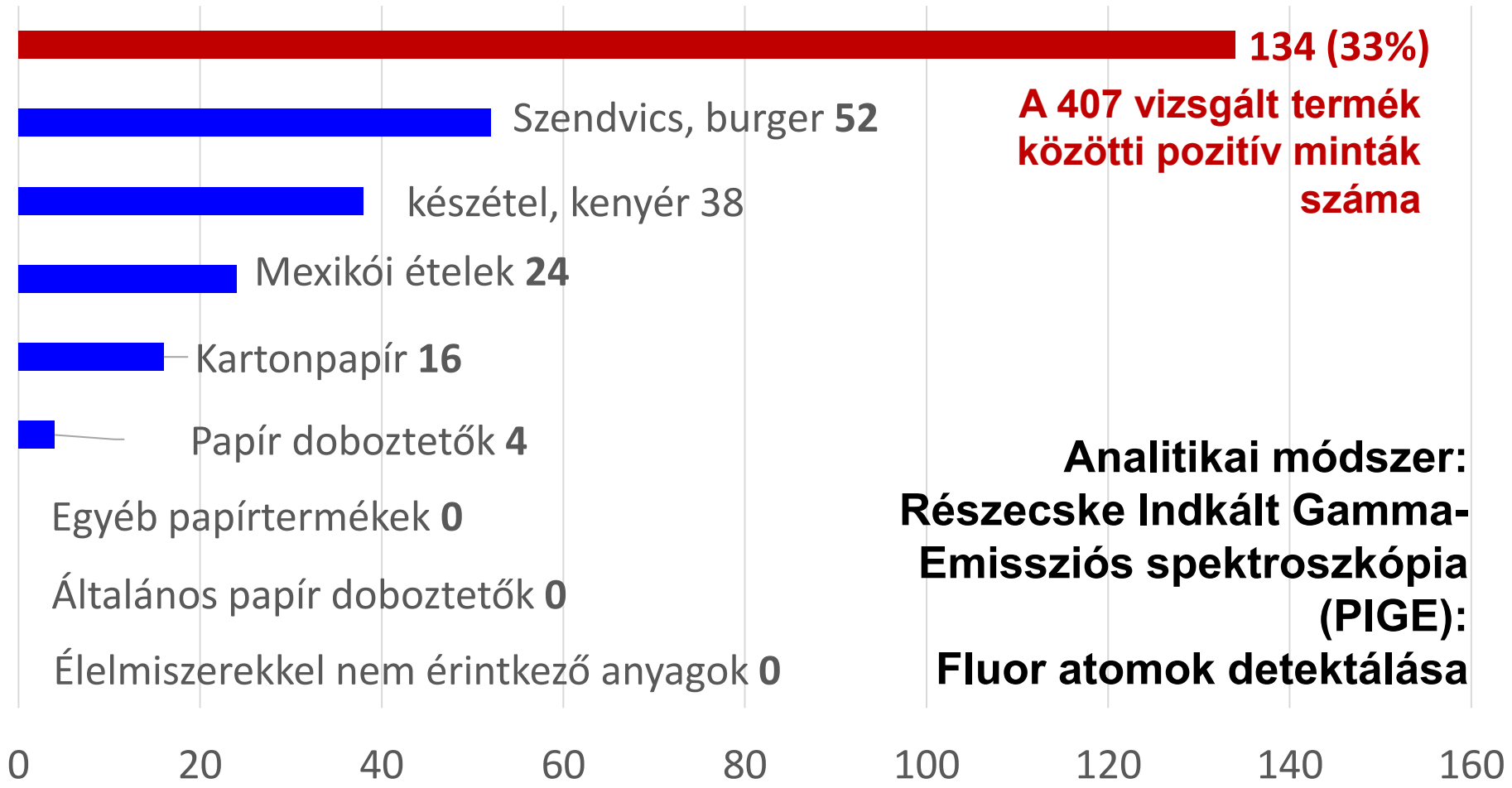
[▽]Chemistry Department, Hope College, Holland, Michigan 49423, United States

[○]Oak Ridge Institute for Science and Education, Oak Ridge, Tennessee 37831, United States

[@]Department of Physics, University of Notre Dame, Notre Dame, Indiana 46556, United States

Fluorozott vegyületek az élelmiszerláncban

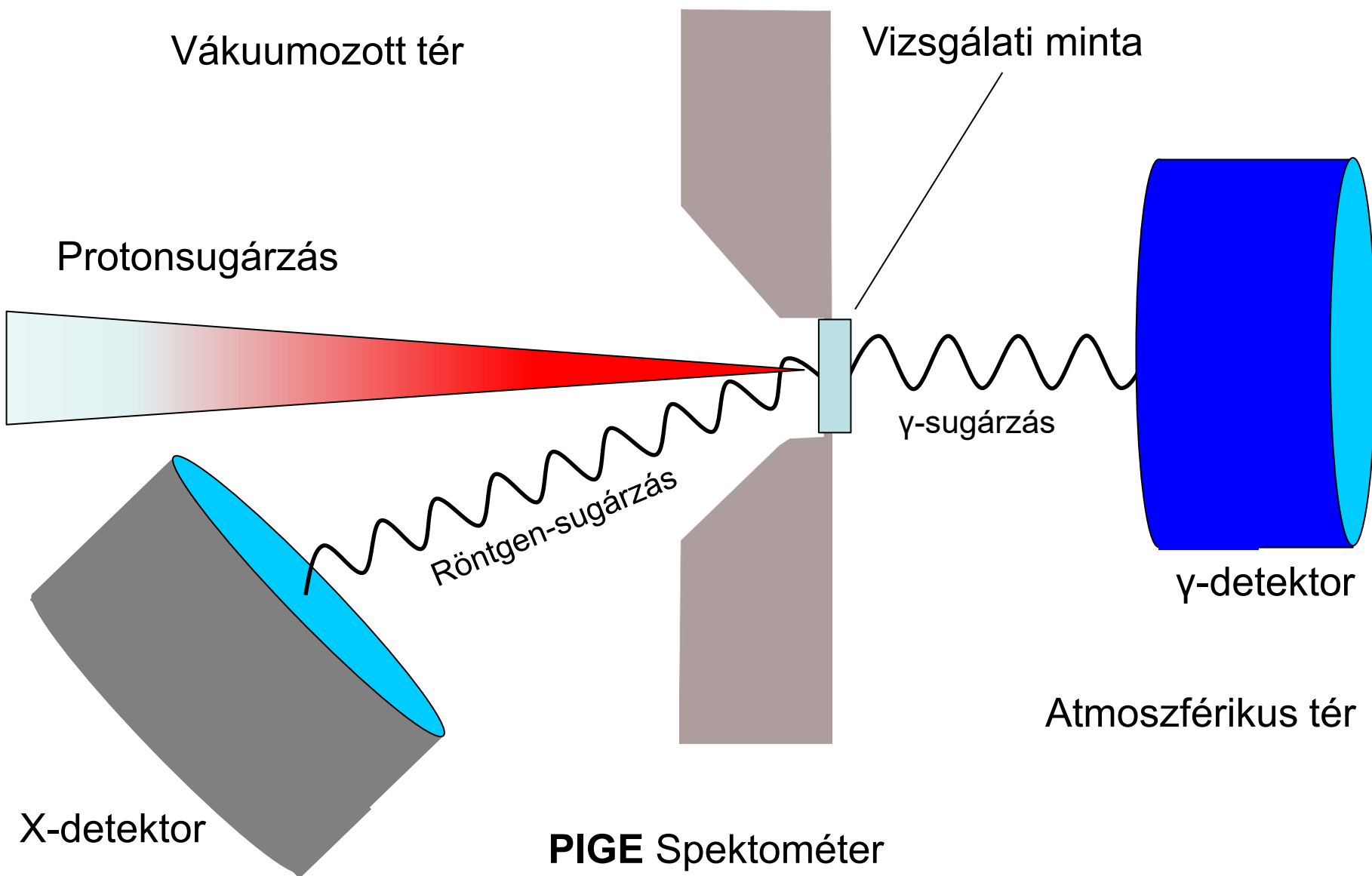
Tartomány: 16 – 800 nmol F/cm²



A 407 vizsgált termék közötti pozitív minták száma

**Analitikai módszer:
Részecske Indkált Gamma-
Emissziós spektroszkópia
(PIGE):
Fluor atomok detektálása**

Részecske-indukált gamma-emissziós spektroszkópia



Egy thriller-műfajú film a DuPont cégről (2019)

MARK
RUFFALO

ANNE
HATHAWAY

TIM
ROBBINS

BILL
CAMP

VICTOR
GARBER

AND
BILL
PULLMAN

DARK WATERS

ONE OF THE DEADLIEST COVER-UPS IN AMERICAN HISTORY

"A PERFECT FILM.
RIVETING, POWERFUL
AND IMPORTANT"

OBSERVER

"MARK RUFFALO'S
BEST PERFORMANCE YET"

HOLLYWOOD NEWS



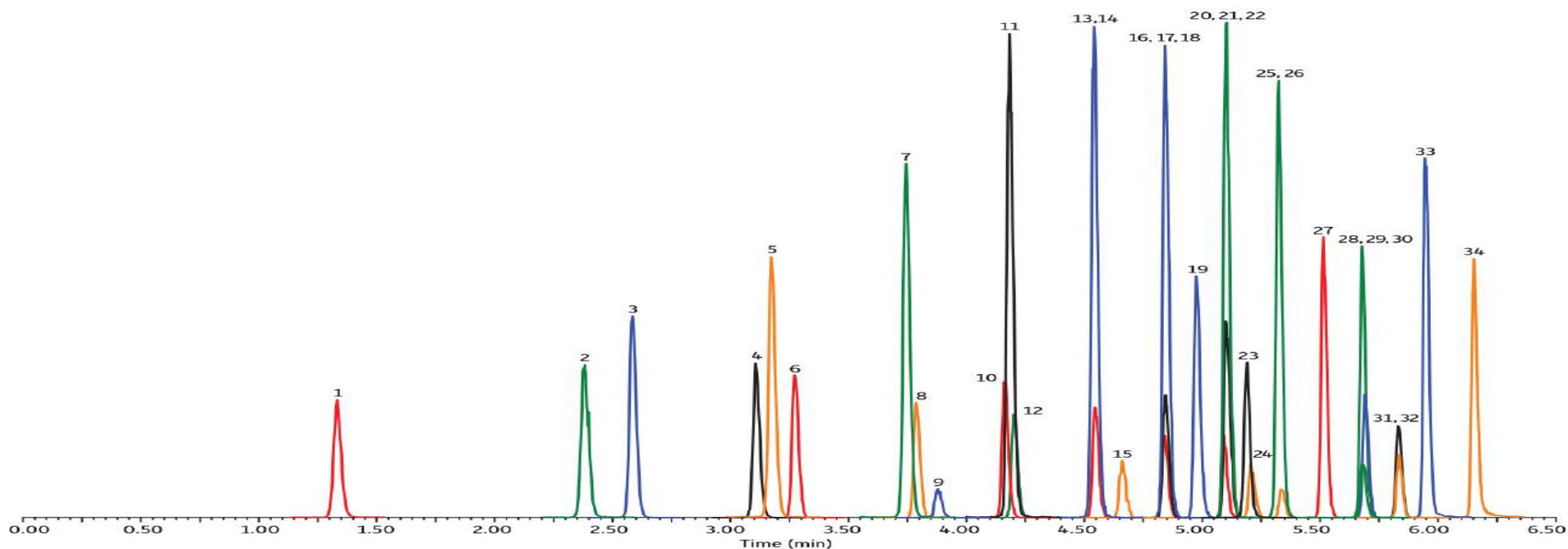
A történet: A DuPont vegyipari cég évek óta mérgezi egy kisváros ivóvizét, ezzel a környéken több száz állatot ölt meg, és a helyiek közül is sokan meghaltak a környezetszennyezés hatásai miatt. 2017 -ben a DuPont végül több mint 600 millió dollár kártérítést fizetett az áldozatoknak.

TODD HAYNES FILMJE



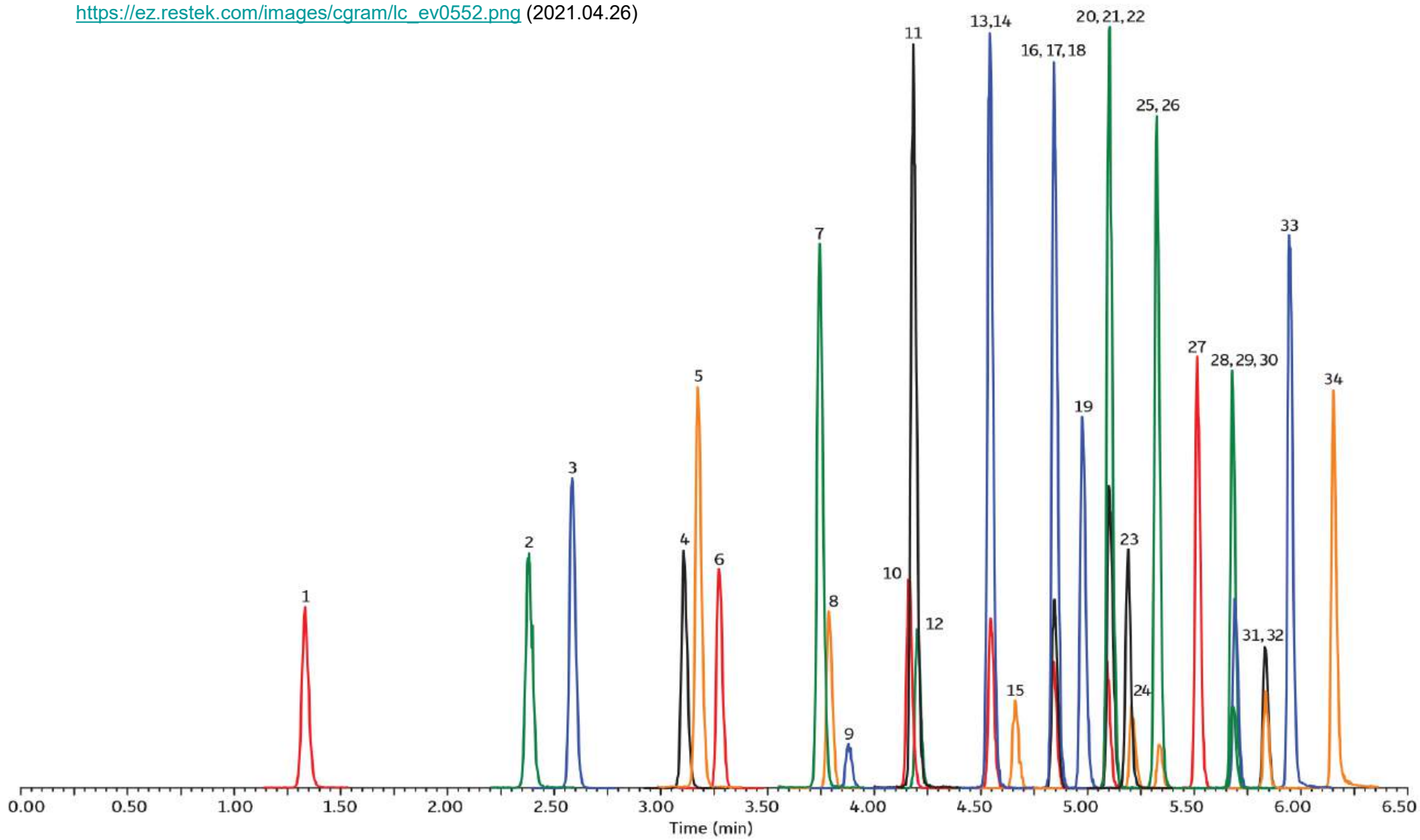
Perfluorbutánsav (PFBA)
Perfluorpentánsav (PFPA)
Perfluorhexánsav (PFHxA)
Perfluorheptánsav (PFHpA)
Perfluoroktánsav (PFOA)
Perfluornonánsav (PFNA)
Perfluordekánsav (PFDA)
Perfluorundekánsav (PFUnDA)
Perfluordodekánsav (PFDODA)
Perfluortridekánsav (PFTrDA)
Perfluorbután-szulfonsav (PFBS)
Perfluorpentán-szulfonsav (PFPS)
Perfluorhexán-szulfonsav (PFHxS)
Perfluorheptán-szulfonsav (PFHpS)
Perfluoroktán-szulfonsav (PFOS)
Perfluornonán-szulfonsav (PFNS)
Perfluordekán-szulfonsav (PFDS)
Perfluorundekán-szulfonsav (PFUnS)
Perfluordodekán-szulfonsav (PFDOS)
Perfluortridekán-szulfonsav (PFTrS)

C_4F_9COOH
$C_5F_{11}COOH$
$C_6F_{13}COOH$
$C_7F_{15}COOH$
$C_8F_{17}COOH$
$C_9F_{19}COOH$
$C_{10}F_{21}COOH$
$C_{11}F_{23}COOH$
$C_{12}F_{25}COOH$
$C_{13}F_{27}COOH$
$C_4F_9SO_2OH$
$C_5F_{11}SO_2OH$
$C_6F_{13}SO_2OH$
$C_7F_{15}SO_2OH$
$C_8F_{17}SO_2OH$
$C_9F_{19}SO_2OH$
$C_{10}F_{21}SO_2OH$
$C_{11}F_{23}SO_2OH$
$C_{12}F_{25}SO_2OH$
$C_{13}F_{27}SO_2OH$



Polifluorozott alkil vegyületek kromatogramja

https://ez.restek.com/images/cgram/lc_ev0552.png (2021.04.26)



Polifluorozott alkil vegyületek kromatogramja

Sor-szám	Csúcsok	t _R (perc)	Koncentráció ng/ml	Prekurzor ion	Leány-ion
1.	Perfluorbután-szulfonsav (PFBS)	2,06	10	298,8	79,9
2.	Perfluoro-n-[1,2- ¹³ C ₂]-hexánsav (¹³ C ₂ -PFHxA)	3,03	5	314,9	270,0
3.	Perfluorhexánsav (PFHxA)	3,04	5	312,9	268,7
4.	Tetrafluor-2-heptánfluor-propoxi- ¹³ C ₃ -propánsav (¹³ C ₃ -HFPO-PA)	3,36	5	286,8	168,7
5.	Hexafluor-propilénoxid dimer sav (HPPO-DA)	3,38	5	285,0	168,9
6.	Perfluorheptánsav (PFHpA)	4,09	5	362,8	318,8
7.	Perfluorhexán-szulfonsav (PFHxS)	4,22	10	398,8	79,9
8.	4,8-Dioxin-3H-perfluornonánsav (ADON)	4,24	5	376,9	250,7
9.	Perfluor-[1,2- ¹³ C ₂]-oktánsav (¹³ C ₂ -PFOA)	4,88	5	415,0	370,0
10.	Perfluoroktánsav (PFOA)	4,90	5	413,1	368,9
11.	Perfluornonánsav (PFNA)	5,54	5	462,9	418,9
12.	Perfluoro-1-[1,2,3,4- ¹³ C ₂]-oktánszulfonsav (¹³ C ₄ -PFOS)	5,57	10	503,0	80,0
13.	Perfluoroktán-szulfonsav (PFOS)	5,58	10	498,9	80,0
14.	9-klór-hexadekafluor-3-oxanon-1-szulfonsav (9Cl-PF3ONS)	5,88	5	530,80	350,7
15.	Perfluoro-n-[1,2- ¹³ C ₂]-dekánsav (¹³ C ₂ -PFDA)	6,08	5	514,9	469,9
16.	Perfluordekánsav (PFDA)	6,08	5	512,9	469,0
17.	N-deutériummetilperfluor-1-oktánszulfon-ecetsavamid (d3-NMeFOSAA)	6,28	10	572,9	418,8
18.	N-metil-perfluor-oktánszulfon-ecetsavamid (NMeFOSAA)	6,30	10	569,8	418,8
19.	N-deutérium-etilperfluor-1-oktánszulfon-ecetsavamid (d5-NEtFOSAA)	6,51	10	588,9	418,8
20.	N-etil-perfluoroktán-ecetsavamid (NEtFOSAA)	6,52	10	583,8	418,8
21.	Perfluorundekánsav (PFUnDA)	6,55	5	562,9	518,8
22.	11-klóreikozafuor-3-oxaundekán-1-szulfonsav (11Cl-PF3OUdS)	6,77	5	630,7	451,0
23.	Perfluordodekánsav (PFDoDA)	6,95	5	612,7	568,9
24.	Perfluortridekánsav (PFTrDA)	7,30	5	662,7	618,8
25.	Perfluortetradekánsav (PFTA)	7,60	5	712,7	668,7

Annex A (Elimination)

Parties must take measures to eliminate the production and use of the chemicals listed under Annex A. Specific exemptions are available in Annex A and apply only to Parties that have registered for them.

<u>Aldrin</u> ●	<u>Chlordane</u> ●	<u>Chlordecone</u> ●
<u>Decabromodiphenyl ether (commercial mixture, c-decaBDE)</u> ▲	<u>Dechlorane Plus</u> ▲	<u>Dicofol</u> ●
<u>Dieldrin</u> ●	<u>Endrin</u> ●	<u>Heptachlor</u> ●
<u>Hexabromobiphenyl</u> ▲	<u>Hexabromocyclododecane (HBCDD)</u> ▲	<u>Hexabromodiphenyl ether and heptabromodiphenyl ether</u> ▲
<u>Hexachlorobenzene (HCB)</u> ● ▲	<u>Hexachlorobutadiene</u> ▲	<u>Alpha hexachlorocyclohexane</u> ●
<u>Beta hexachlorocyclohexane</u> ●	<u>Lindane</u> ●	<u>Methoxychlor</u> ●
<u>Mirex</u> ●	<u>Pentachlorobenzene</u> ● ▲	<u>Pentachlorophenol and its salts and esters</u> ●
<u>Polychlorinated biphenyls (PCB)</u> ▲	<u>Polychlorinated naphthalenes</u> ▲	<u>Perfluorooctanoic acid (PFOA), its salts and PFOA-related compounds</u> ▲
<u>Perfluorohexane sulfonic acid (PFHxS), its salts and PFHxS-related compounds</u> ▲	<u>Short-chain chlorinated paraffins (SCCPs)</u> ▲	<u>Technical endosulfan and its related isomers</u> ●
<u>Tetrabromodiphenyl ether and pentabromodiphenyl ether</u> ▲	<u>Toxaphene</u> ●	<u>UV-328</u> ▲

<https://www.pops.int/TheConvention/ThePOPs/AllPOPs/tabid/2509/Default.aspx>



Annex B (Restriction)

Parties must take measures to **restrict** the production and use of the chemicals listed under Annex B in light of any applicable acceptable purposes and/or specific exemptions listed in the Annex.

DDT ●

Perfluorooctane sulfonic acid (PFOS), its salts and perfluorooctane sulfonyl fluoride (PFOSE) ● ▲

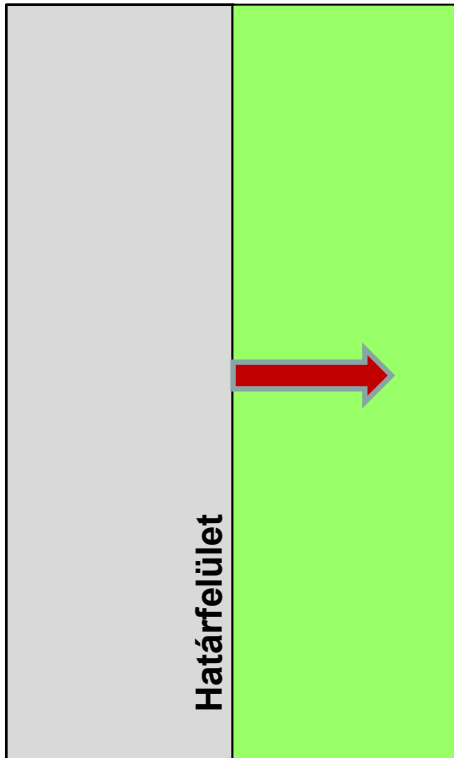
<https://www.pops.int/TheConvention/ThePOPs/AllPOPs/tabid/2509/Default.aspx>

Megnevezés	Koncentráció
Összesített határérték a 20 kiemelt PFAS vegyületekre - (2020/2084 EU) Ivóvíz irányelv (32. dia)	0,1 µg/L
Összes PFAS (indikátor paraméter) - (2020/2084 EU) Ivóvíz irányelv	0,5 µg/L
4 PFAS együttesen (PFOA, PFOS, PFNA, PFHxS) TWI (testtömeg-kg/hét)	4,4 ng
Az EU REACH szabályozása és a Stockholm Egyezmény alatt a PFOA-t 2020-tól betiltották	x
Felszíni vízre vonatkozó holland javaslat	0,65 ng
Ivóvízre vonatkozó USA javaslat (USA EPA – Environmental Protection Agency) 2023-ból	4,00 ng

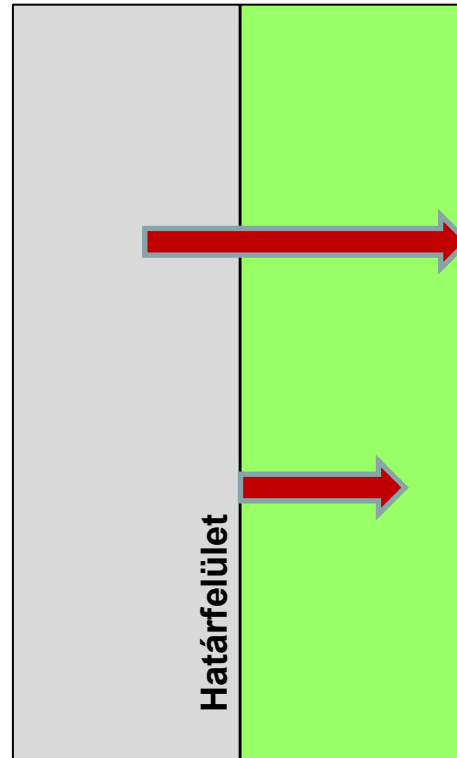
PFOA: perfluor oktánsav
PFOS: Perfluor oktán-szulfonsav
PFNA: Perfluor nonánsav
PFHxS: perfluor hexán-szulfonsav
TWI: Tolerable weekly intake – tolerálható heti bevitel

Külső és belső szennyezők migrációja

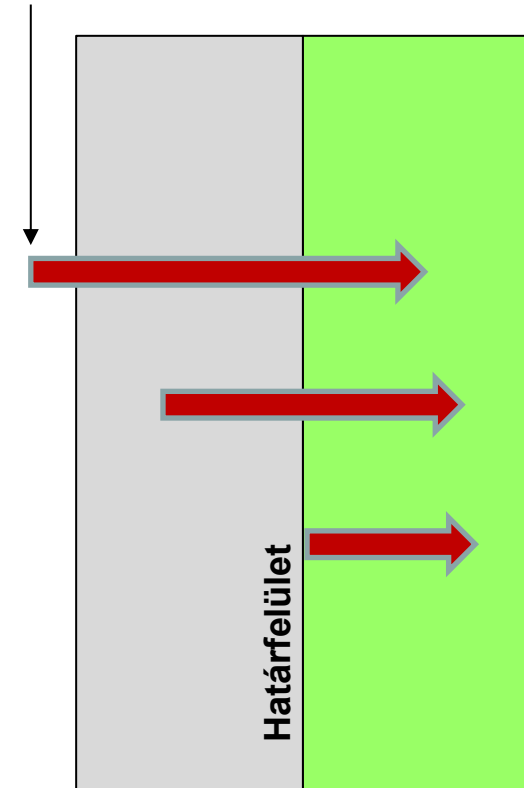
Szennyezők a környezetből



Áthatolhatatlan anyagok
(üveg, fém, műanyag)



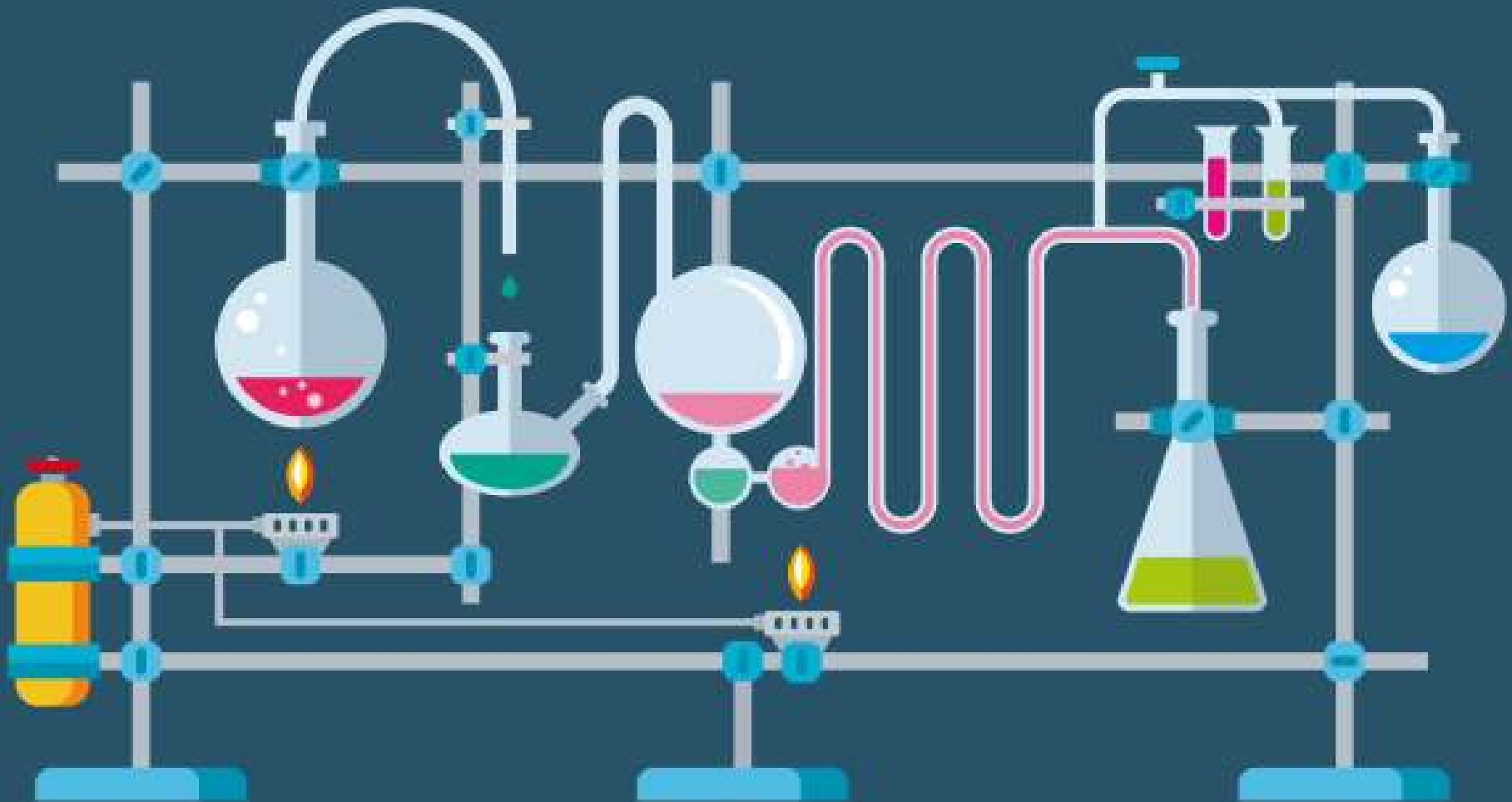
Áteresztő anyagok
(műanyagok, gumi)

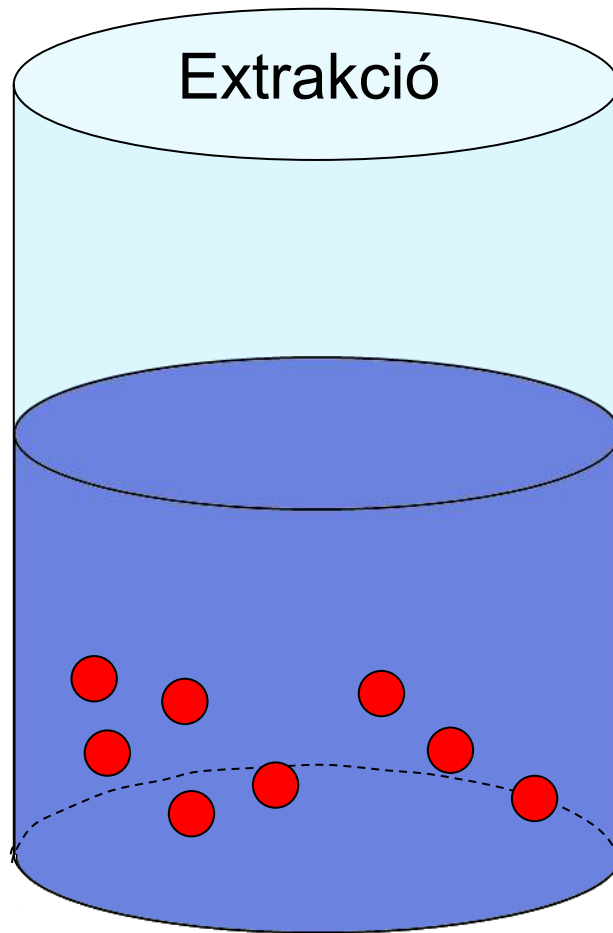


Porózus szerkezetű
anyagok (papír)

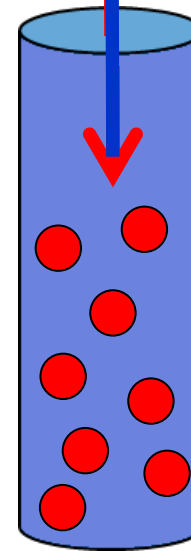
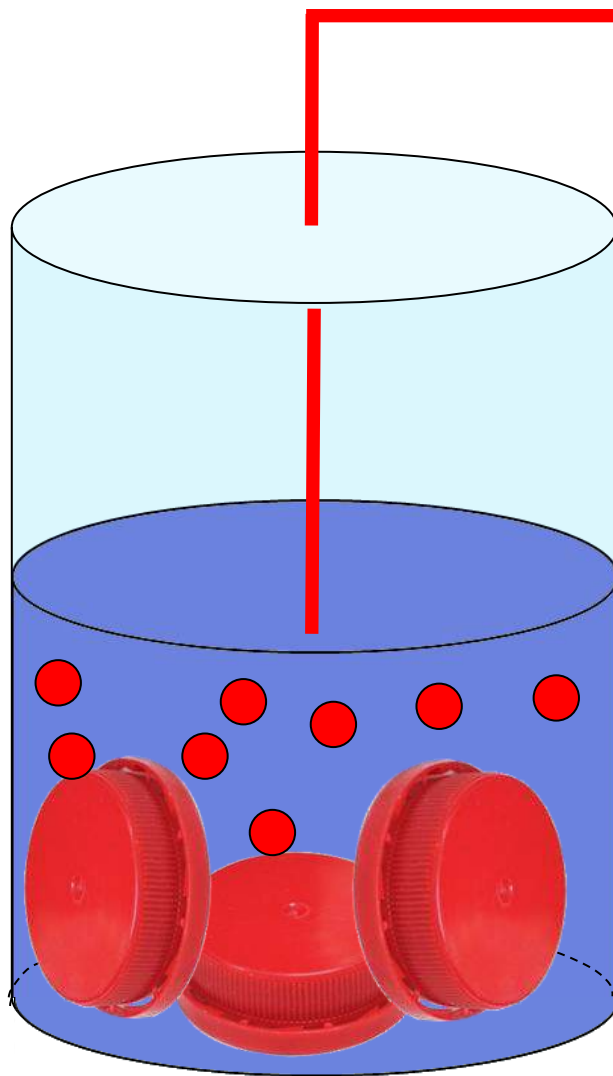
Nem-célzott analízis – A nyomozati munkához hasonló







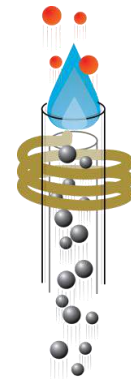
Extrakció élelmiszer-utánzó anyaggal 2/2



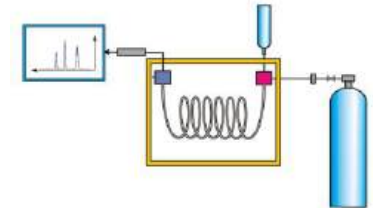
Clean-up



Globális kioldódás
gravimetria **mg/dm²**



Specifikus migráció
ICP-OS, ICP-MS **mg/kg** (fémek)



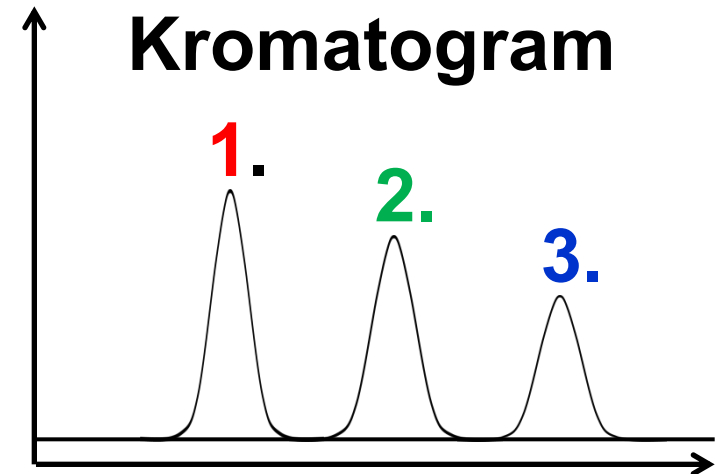
Specifikus migráció
elválasztástechnikával **mg/kg**
(szerves vegyületek)

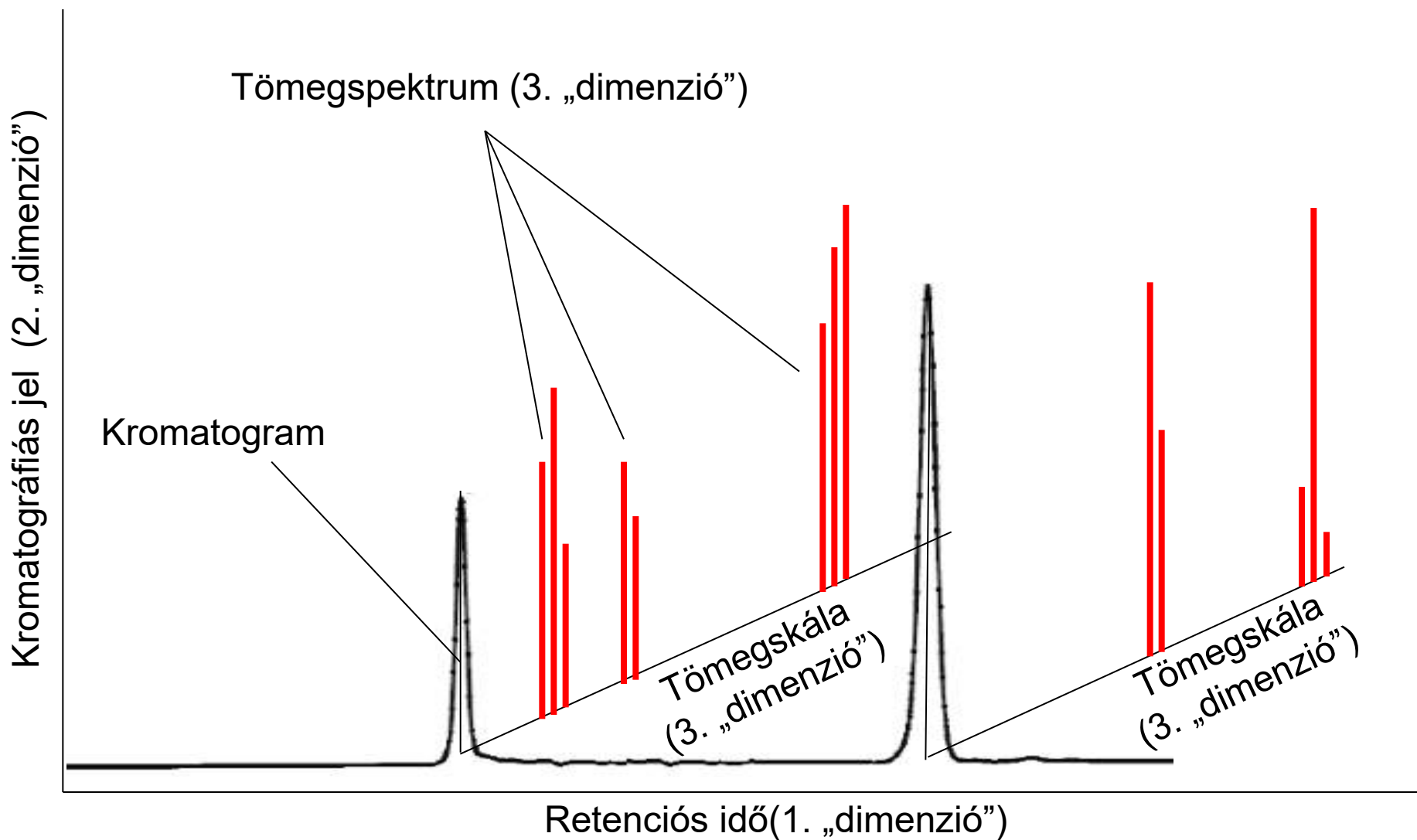
Az elemzés eredménye:

1. szennyező ($\mu\text{g/l}$)

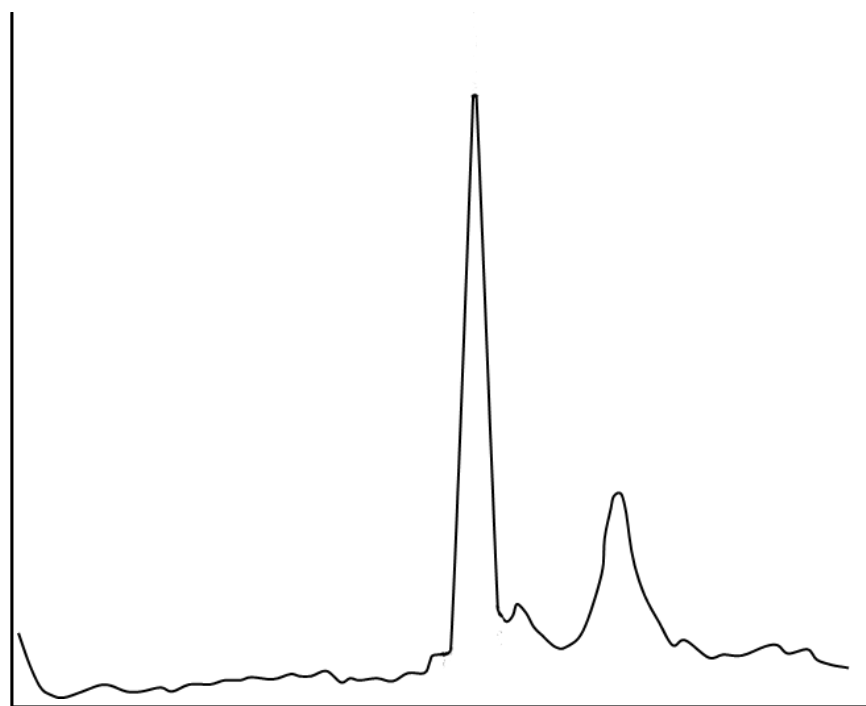
2. szennyező ($\mu\text{g/l}$)

3. szennyező ($\mu\text{g/l}$)

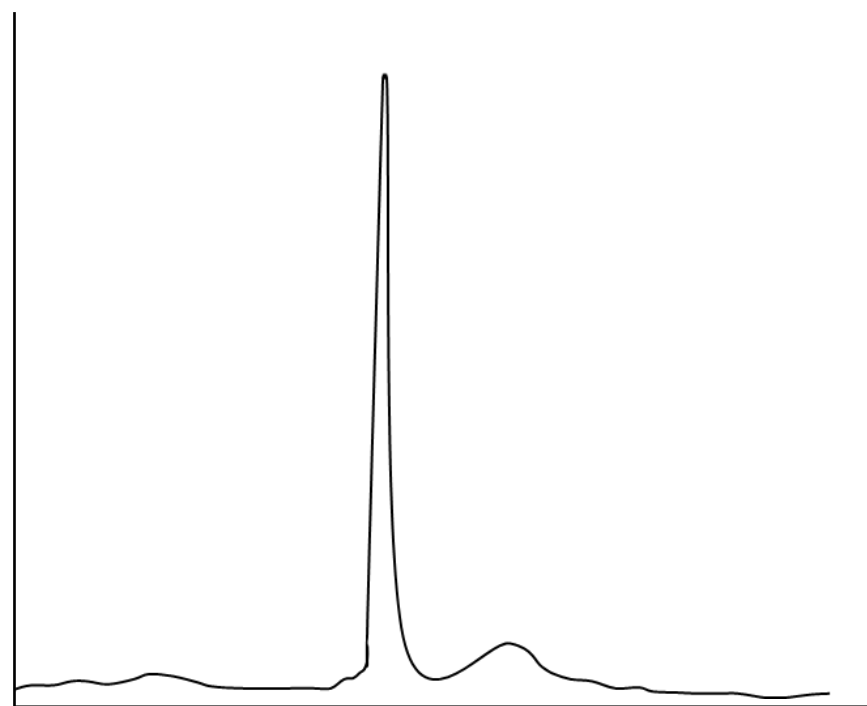




$\text{C}_8\text{F}_{17}\text{COOH}$ Perfluoro-octilsav (PFOA)

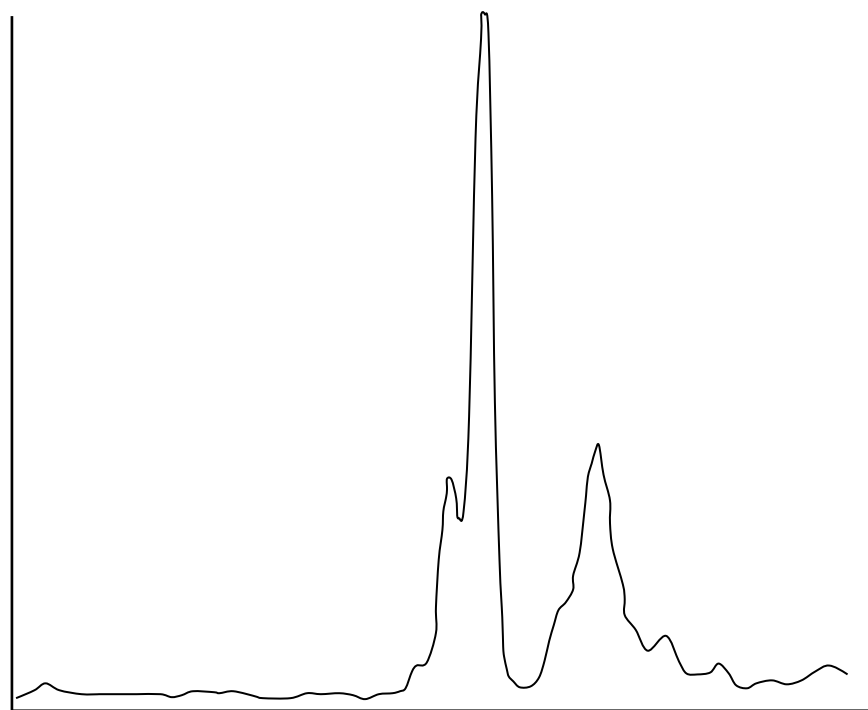


0,01 ng/ml kalibrációs pont S/N=20,3

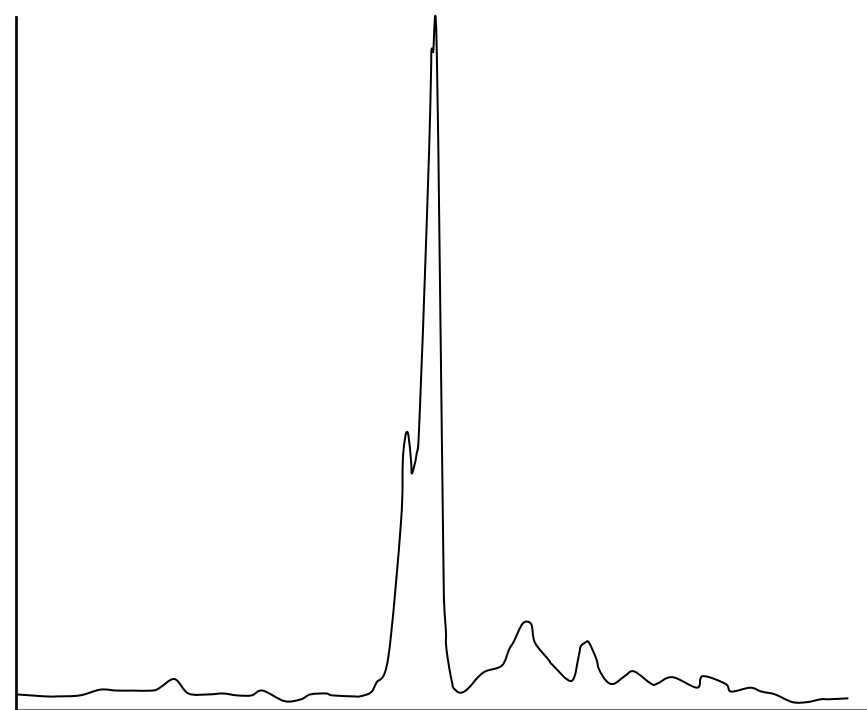


LOQ szinten spike-olt minta S/N=36,4

$\text{C}_8\text{F}_{17}\text{SO}_2\text{OH}$ perfluoro-octil-szulfonsav (PFOS)



0,01 ng/ml kalibrációs pont S/N=85,1



LOQ szinten spike-olt minta S/N=32,7



A veszélyesség elemzése: ToxTree

Estimation of Toxic Hazard - a Decision Tree Approach

File Edit Chemical Compounds Toxic Hazard Method Help

Chemical identifier Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C Go!

Available structure attributes

Error when applying the deci...	NO
For a better assessment a QS...	NO
Negative for genotoxic carino...	NO
Negative for nongenotoxic car...	NO
Potential S. typhimurium TA10...	NO
Potential carcinogen based on ...	NO
QSAR6,8 applicable?	NO
SA10_gen	NO
SA11_gen	NO
SA12_gen	NO
SA13_gen	NO

Structure diagram

Toxic Hazard

by Carcinogenicity (genotox and nongenotox) and mutagenicity rulebase by ISS

Estimate

Structural Alert for genotoxic carcinogenicity

Structural Alert for nongenotoxic carcinogenicity

Potential S. typhimurium TA100 mutagen based on QSAR

Unlikely to be a S. typhimurium TA100 mutagen based on QSAR

☒ Verbose explanation

QSA30_gen.Coumarins and Furocoumarins **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA37_gen.Pyrrolizidine Alkaloids **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA38_gen.Alkenylbenzenes **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA39_gen_and_nogen.Steroidal estrogens **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
QGenotoxic alert? At least one alert for genotoxic carcinogenicity fired? Yes Class Structural
Alert for genotoxic carcinogenicity Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA10_gen.α,β unsaturated carbonyls **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QaN=Na.Aromatic diazo **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 Qar-N=CH2.Derived aromatic amines **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
QQSAR6,8 applicable?.Aromatic amine without sulfonic group on the same ring No Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA17_nogen.Thiocarbonyl (Nongenotoxic carcinogens) **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA20_nogen.(Poly) Halogenated Cycloalkanes (Nongenotoxic carcinogens) **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA31a_nogen.Halogenated benzene (Nongenotoxic carcinogens) **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA31b_nogen.Halogenated PAH (naphthalenes, biphenyls, diphenyls) (Nongenotoxic carcinogens) **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA31c_nogen.Halogenated dibenzodioxins (Nongenotoxic carcinogens) **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA39_gen_and_nogen.Steroidal estrogens **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA40_nogen.substituted phenoxyacid **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA41_nogen.substituted n-alkylcarboxylic acids **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA42_nogen.phthalate diesters and monoesters **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA43_nogen.Perfluorooctanoic acid (PFOA) **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C
 QSA44_nogen.Trichloro (or fluoro) ethylene and Tetrachloro (or fluoro) ethylene **No** Cc2c(NS(=O)(=O)c1ccc(N)cc1)onc2C

First Prev 1 / 1 Next Last

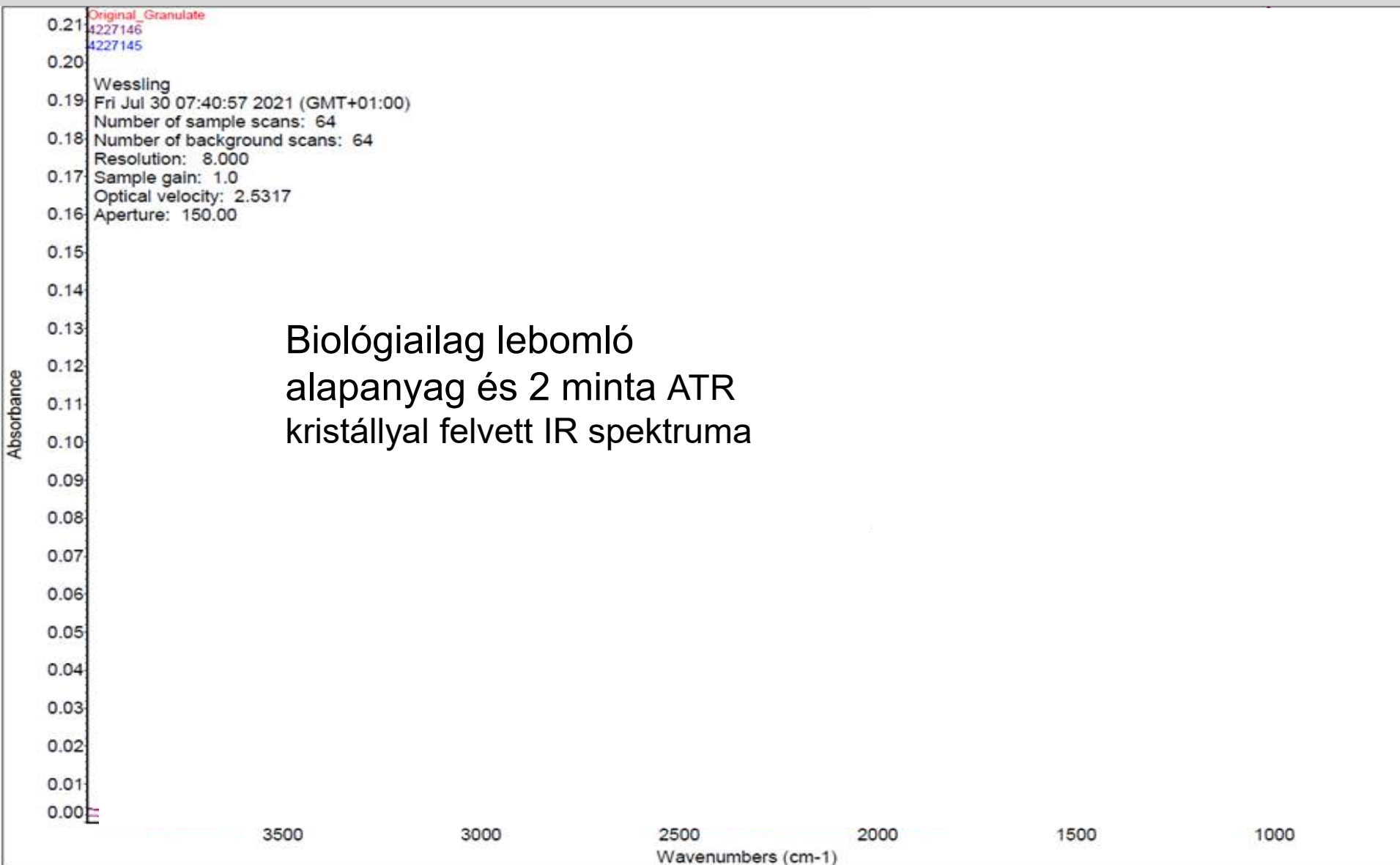
Completed.

ToxTree Course QSAR2014



NEMZETI AKKREDITÁLO HATÓSÁG

National Accreditation Authority



Köszönöm a megtisztelő figyelmet!



**Napóleon és Batsányi János után szabad megfogalmazásban:
Vigyázó szemetek a csomagolásra vessétek...**

<https://foodpackagingforum.org/news/fluorochemicals-in-popcorn-bags-worldwide>

<https://chemtrust.org/pfas-food-packaging-faq/>

<https://ipen.org/sites/default/files/documents/ipen-packaging-report-fin-opr-25012024.pdf>

