

To: 5.1.2e [5.1.2e@rivm.nl]
From: 5.1.2e
Sent: Fri 1/17/2025 11:08:45 AM
Subject: RE: nicotine tox
Received: Fri 1/17/2025 11:08:45 AM

8694205

Ha mooi, een ijkpunt voor de inhalatoire absorptie. 80-90% voor rokers, 60-80% voor mee-rokers. Ik heb een mooie publicatie van 2020 over de inhalatoire module die aan htk (high throughput toxicokinetics) model van de EPA is toegevoegd ([Development and Evaluation of a High Throughput Inhalation Model for Organic Chemicals - PMC](#)), Een en ander is gebaseerd op de equations van Jongeneelen et al 2011 (dat is IndusChemFate) waar ik al naar aan het kijken was. Het model beschouwt inderdaad ook mucus als een apart compartiment, maar alleen als een concurreren compartiment (Additionally, in the isopropanol model paper published by Clewell *et al.* in 2001, it was noted that certain chemicals are likely to be absorbed into the mucus or otherwise trapped in the upper respiratory tract (URT), verder gaat de opname toch vooral van alveolaire lucht direct naar bloed (in het model). Ik zou me kunnen voorstellen dat het 'trappen' in mucus voor de minder dan 100% inhalatoire absorptie zorgt. In het artikel ook een vergelijking van gemeten vs. berekende partitiec coefficient obv van octanol-air / octanol-water en water air (Henry) partitiec coefficienten voor 41 'small organic molecules'

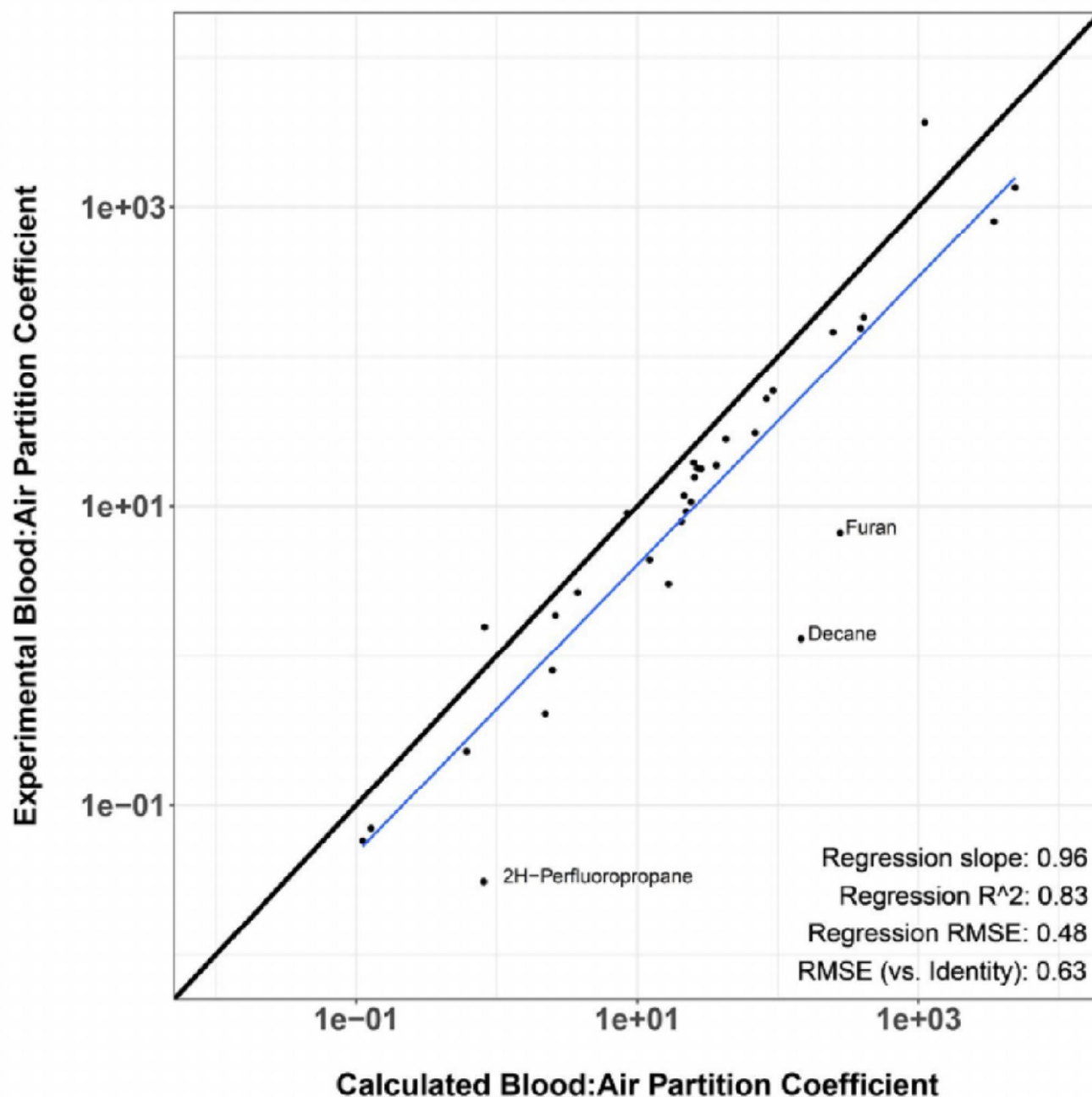


Figure S3: Comparison of experimentally-derived (from literature) and calculated blood:air partition coefficients. Labeled points were > 1 log-order different between experimental and calculated values. Blue line is regression line of best fit with the slope and r^2 value noted in the bottom. Black line is the line of identity ($x = y$). RMSE is compared to line of identity.

De phys-chem data (Koa, Kow en Henry) komen van de OPERA QSAR software schattingen, en zoals je ziet is dat een prima basis om de blood:air partitiec coefficient mee te schatten. Dus met een tabelletje met Koa, Kow en Henry, plus de berekende Kblood:air kunnen we wel een range van opname voor de analogen produceren. In ieder geval kan ik dat voor nicotine en 6-methylnicotine uitwerken.

Mvg,

5.1.2e

5.1.2e

.....
Department of Consumer Product Safety
Centre for Safety of Substances and Products
Dutch National Institute for Public Health and the Environment (RIVM)
 Antonie van Leeuwenhoeklaan 9 | 3721 MA Bilthoven | 5.1.2e
 POBox 1 (postbak 1) | 3720 BA Bilthoven | the Netherlands

T + 31 (0)88 689 5.1.2e

M + 31 (0)6 5.1.2e

5.1.2e @rivm.nl

www.rivm.nl

Committed to health and sustainability



From: 5.1.2e <5.1.2e@rivm.nl>

Sent: vrijdag 17 januari 2025 11:50

To: 5.1.2e <5.1.2e@rivm.nl>

Subject: FW: nicotine tox

Ha 5.1.2e,

FYI, 5.1.2e heeft ook wat kinetiek data op een rijtje gezet.

Cheers,

5.1.2e

From: 5.1.2e <5.1.2e@rivm.nl>

Sent: woensdag 15 januari 2025 15:16

To: 5.1.2e <5.1.2e@rivm.nl>

Subject: nicotine tox

Hoi 5.1.2e

Hier de link naar het overzichtsdocument t.a.v. de tox van nicotine:

[R:\Projecten\V050505_01_Risicob. Nicotine inhalatie nzt\2. Uitvoering\2.4 Resultaten\Overzicht tox nicotine.docx](R:\Projecten\V050505_01_Risicob._Nicotine_inhalatie_nzt\2._Uitvoering\2.4_Resultaten\Overzicht_tox_nicotine.docx)

Groeten, 5.1.2e