

RIJKSINSTITUUT VOOR VOLKSGEZONDHEID EN MILIEU
BILTHOVEN

Rapport nr. 607504 003

**Receptuur voor de berekening van de Indicator Effecten
Toxische Stoffen (I_{tox})**

J. Bakker en D. van de Meent

juni 1997

Dit onderzoek is uitgevoerd in opdracht van het Directoraat-Generaal Milieubeheer, Directie Stoffen, Veiligheid, Straling, in het kader van het project 607504 "Kartering Ecotoxische Effecten Stoffen".

Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu (RIVM), Postbus 1, 3720 BA Bilthoven,
Telefoon: 030 - 274 91 11, Fax: 030 - 274 29 71

VERZENDLIJST

- 1 Directoraat-Generaal Milieubeheer, Directie Stoffen. Veiligheid, Straling
- 2 Directoraat-Generaal Milieubeheer, Directie Bodem
- 3 Directoraat-Generaal Milieubeheer, Directie Drinkwater, Water, Landbouw
- 4 Plv. d.g. Milieubeheer, dr ir B.C.J. Zoeteman
- 5 Dr D. Jung, DGM/SVS
- 6 Drs C.A.J. Denneman, DGM/Bo
- 7 Drs M.A. van der Gaag, DGM/DWL
- 8 Drs D. Jonkers, DGM/DWL
- 9 Drs R. Brinkman, DGM/SP

- 10 Drs A. Eijs, DGM/SVS
- 11 Drs C. van de Guchte, RIZA Lelystad
- 12 Ir P.J.M. Latour, RIZA Lelystad
- 13 Dr L.J.M. van der Eerden, AB-DLO Wageningen
- 14 Drs M.H.J. Klein, IKC-Natuurbeheer
- 15 Dr. J.H. Faber, IBN-DLO, Arnhem
- 16 Dr. J. de Bruijn, RIVM/CSR
- 17 Dr W. Slooff, RIVM/MNV
- 18 Drs R. Reiling, RIVM/MNV

- 19 Secretaris CIW Werkgroep V, Drs. J.G.J. Zwolsman, RIZA Dordrecht
- 20 Secretaris CIW Werkgroep VII, Ir M. Vossen, RIZA Lelystad
- 21 Ir T. Hamers, LUW
- 22 Dr J. Hermens, RITOX
- 23 Prof. dr N.M. van Straalen, VU
- 25 Dr P. Leeuwgangh, SC-DLO
- 24 Prof. dr J. Koeman, LUW
- 26 Prof. dr E. Udo de Haes, CML
- 27 Prof. dr. W. Admiraal, UvA
- 28 Prof. dr T. Schoot Uiterkamp, RUG/IVEM
- 29 Drs A. Ragas, KUN
- 30 Dr F. van Assche, International Zinc Association
- 31 Dr W.J.M. van Tilborg, VTBC
- 32 Dr M. Goedkoop, Pré
- 33 Ir R.A.E. Knoben, W+B
- 34 Ir F. Balk, BKH

- 35 Prof. ir N.D. van Egmond, RIVM
- 36 Dr ir G. de Mik, RIVM
- 37 Ir F. Langeweg, RIVM
- 38 Dr W.H. Könemann, RIVM/CSR
- 39 Prof. dr C.J. van Leeuwen, RIVM/CSR
- 40 Drs E. van der Plassche, RIVM/CSR
- 41 Drs. R.J.M. Maas, RIVM/MNV
- 42 Ir R. van den Berg, RIVM/LBG
- 43 Ir. A.H.M. Bresser, RIVM/LWD
- 44 Dr K. Beurskens, RIVM/LWD
- 45 Dr L. van Liere, RIVM/LWD
- 46 Dr ir H. van Grinsven, RIVM/LBG
- 47 Dr M. Pruppers, RIVM/LSO

- 48 Prof. dr H. Eijsackers, RIVM/ECO
49 Drs J.H. Canton, RIVM/ECO
50 Dr ir J. Notenboom, RIVM/ECO
51 Hoofd Voorlichting en Public Relations
52 Bureau Rapportenregistratie
53 Bibliotheek RIVM
- 54 Dr ir D. van de Meent
55 Dr O. Klepper, RIVM/ECO
56 Ir C. Roghair, RIVM/ECO
57 Dr A. Sterkenburg, RIVM/ECO
58 Drs R. Luttk, RIVM/CSR
59 Drs T.P. Traas, RIVM/ECO
60 Drs. J. Geenen, RIZA Lelystad
61 H.A. den Hollander, RIVM/ECO
62 Drs L. Brandes, RIVM/ECO
63 Ir T. van der Linden, RIVM/LBG
64 Ir A. Tiktak, LBG
65 Dr ir W.A.J.van Pul, RIVM/LLO
66 Dr J. van Jaarsveld, RIVM/LLO
67 Ing. D.F. Kalf, RIVM/CSR
68 Dr G.H. Crommentuijn, RIVM/CSR
69 Drs D. de Zwart, RIVM/ECO
70 Dr J. Struijs, RIVM/ECO
71 H. Maas,RIZA Lelystad
72 P. Jesse,RIZA Lelystad
73 A. Espeldoorn,RIZA Lelystad
74 L.C.M. Kerkum,RIZA Lelystad
75 Drs B. van Beusekom, UvA
76 Ing. A.C. de Groot, RIVM/ECO
77 R. van de Kamp, RIVM/ECO
78 Ing. M.T. Collombon, RIVM/ECO
79 C. Strien, RIVM/ECO
80 M.J. Wouterse, RIVM/ECO
81 A.J. Folkerts, RIVM/ECO
82 Dr. A. van Wezel, RIKZ Den Haag
83 Dr J. Hendriks,RIZA Lelystad
84 M. Beek,RIZA Lelystad
85 Drs J. Bakker, RIVM/ECO
86 Drs T. Aldenberg, RIVM/LWD
87 Dr B. Wesselink, RIVM/LAE
88 Dr E. Buringh, RIVM/LEO
89 Dr M. Janssen, RIVM/LSO
90 Drs B.J.W.G. Mensink, RIVM/CSR
- 91-150 Bureau Rapportenbeheer

VOORWOORD

KEES programma

Het onderzoek dat hier wordt gerapporteerd maakt deel uit van het RIVM onderzoeksprogramma "Kartering Ecotoxische Effecten Stoffen" (KEES). Dit programma omvat o.a. de volgende projecten:

1. Berekening van toxische stress voor generieke soorten
2. Berekening van toxische stress voor doelsoorten
3. Indicator toxische stress
4. Meting van toxiciteit van water in Nederland

Deze vier projecten hebben vier rapporten opgeleverd, waarin wordt beschreven hoe "toxische stress op ecosystemen" kan worden berekend of gemeten. De eerste twee projecten gaan uit van gemeten concentraties van stoffen in bodem en water, en berekenen de toxische stress van (een beperkt aantal) stoffen waarvoor gemeten concentraties beschikbaar zijn. Project 1 richt zich op de potentie voor toxische effecten voor alle mogelijke soorten (de generieke soortenverzameling); welke soorten er op de beschouwde plaatsen daadwerkelijk voorkomen, wordt hierbij niet in beschouwing genomen. Project 2 richt zich juist op de soorten die geacht worden van nature op de beschouwde plaatsen voor te komen (de doelsoorten). In tegenstelling tot de projecten 1 en 2, gaat project 3 uit van berekende concentraties. Op deze manier kan toxische stress worden berekend voor een grotere groep van stoffen waarvoor emissies en stoffeigenschappen bekend zijn, maar waarvoor gemeten concentraties niet voorhanden zijn. In project 4 wordt de toxiciteit van water experimenteel bepaald. Water wordt geconcentreerd en toxicologisch getest. Het aantal malen dat een watermonster moet worden geconcentreerd om toxische effecten te geven wordt genomen als maat voor de toxiciteit van het watermonster.

Potentieel Aangetaste Fractie

De vier projecten hebben gemeen dat er gebruik gemaakt wordt van de Potentieel Aangetaste Fractie soorten. De projecten 1-3 berekenen toxische stress op basis van bekende concentraties in het milieu en bekende, in het laboratorium bepaalde, toxiciteiten. Dit wordt gedaan voor een tevoren vastgestelde groep stoffen. Project 4 meet de toxiciteit van water. Dat wordt gedaan voor een onbekend mengsel van stoffen. In alle gevallen wordt het resultaat gerapporteerd in de vorm van de fractie van soorten waarvoor de concentratie in het milieu hoger is dan de No Observed Effect Concentratie (NOEC): de Potentieel Aangetaste Fractie soorten (PAF). PAF geeft uitdrukking aan de potentie voor toxische effecten; het zegt niets over de aard van het mogelijke effect, en ook niets over de mate waarin dat kan optreden.

Het PAF concept kan het beste worden omschreven als het omgekeerde van de bekende "Van Straalen methode" voor het afleiden van "veilige" concentraties in het milieu. De Van Straalen methode maakt gebruik van de cumulatieve NOEC verdeling om de concentratie te vinden waarbij een gegeven gedeelte (meestal 5%) van de soorten te lijden heeft van blootgesteld boven de NOEC. Gegeven een bepaalde concentratie in het milieu vindt de PAF methode --op basis van diezelfde NOEC verdeling-- het percentage van de soorten dat is blootgesteld aan concentraties boven de NOEC. Beide gebruiksmogelijkheden van de NOEC distributie zijn al beschreven door Van Straalen (1990), die heeft opgemerkt dat het aflezen van concentraties beschouwd zou moeten worden als voorwaarts gebruik, en het aflezen van potentieel aangetaste fracties als omgekeerd.

Toen dit programma van start ging waren ons geen meldingen bekend van PAF-achtige methoden voor het kwantificeren van de toxische stress op ecosystemen. De mogelijke waarde van het "voorwaatse gebruik" van de methode van Van Straalen om potentieel aangetaste fractie te bepalen werd ons voor het eerst onder de aandacht gebracht door onze collega's T. Aldenberg en W. Slooff, tijdens de voorbereiding van het document "Streven naar Waarden", in 1989. Kort geleden, tijdens het werk aan deze projecten, werd ons bekend dat bij het RIKZ (Kater en Lefèvre, 1996¹) en het RIZA (Knoben en Beek, 1997) met soortgelijk werk was begonnen.

Doel van het KEES programma

Het doel voor de lange termijn in het KEES programma is om het verband aan te geven tussen concentraties van toxische stoffen in het milieu en soortenrijkdom van ecosystemen. Het is de bedoeling om uiteindelijk toxische stress uit te drukken met de fractie soorten met een (te) geringe kans op voorkomen/voortbestaan, gegeven de blootstelling aan toxische stoffen. Verschillen van de toxische stress in ruimte en/of tijd kunnen worden gebruikt voor het beoordelen of ontwikkelen van milieubeleidsmaatregelen. Kwantificeren van toxische stress in termen van effecten op soortenrijkdom zou vergelijking met andere stressoren (verdroging, verzuring, vermesting, etc.) mogelijk maken.

Daarmee mikt het KEES programma erop om een rationele ondersteuning te bieden voor het maken van beleidsmatige keuzen. De resultaten zijn tevens bedoeld om te worden gebruikt in de Milieuplanbureauproducten van het RIVM.

Dit werk

Het lange-termijndoel (relateren van concentraties en soortenrijkdom) ligt niet dicht binnen bereik. Als realistisch korte-termijndoel is daarom voor de vier bovengenoemde projecten gekozen om operationele werkwijzen te ontwikkelen voor berekening en meting van de Potentieel Aangetaste Fractie soorten, bij wijze van indicatie van de toxische stress. Aangenomen wordt dat trends van PAF in ruimte en tijd een indicatie geven van trends in toxische effecten op ecosystemen. De waarde van PAF als indicator, het verband tussen PAF en soortenrijkdom, alsmede het mogelijke gebruik van PAF in het milieubeleid vallen buiten het kader van dit werk. Deze vier rapporten beperken zich daarom tot de technische aspecten van de bepaling van PAF.

Toekomstig werk

Er is al werk in de gang gezet dat voorziet in de zaken die nu nog buiten beeld zijn gebleven. Met als vertrekpunt de huidige technisch-wetenschappelijke status van het PAF concept wordt aandacht besteed aan de volgende onderwerpen:

- Vergelijking en analyse van de resultaten die uit de vier soorten van toxische stress bepalen komen. Welke verschillen en overeenkomsten zijn er, en kunnen die worden verklaard? Is aanpassing van de methoden nodig/mogelijk?
- Het mogelijke beleidsmatige gebruik van PAF als indicator voor toxische stress op ecosystemen. Zijn PAF-kaarten zinvolle middelen voor het aanwijzen van hot spots? Is het verloop van PAF in ruimte en tijd zinvol als maat voor de voortgang van het milieubeleid?
- Het verband tussen de Potentieel Aangetaste Fractie en de gezondheid van ecosystemen. Bestaat er een begrijpelijk en voorspelbaar verband tussen PAF en soortenrijkdom? Zijn

PAF-waarden bruikbaar als uitgangspunt voor het bepalen van de schade aan ecosystemen?

Dank

Dit rapport is de uitkomst van project 3: Indicator Toxische Stress. Verschillende RIVM-laboratoria, en andere onderzoeksinstituten, hebben aan dit project bijgedragen.

De schrijvers zijn de volgende personen erkentelijk voor hun bijdragen:

- Dick Jung, Arthur Eijs, Carl Denneman, Douwe Jonkers, Marten van der Gaag (DGM)
- Kees van de Guchte, Jan Hendriks, Hannie Maas, Margriet Beek, Paul Latour (RIZA)
- Jack Faber (IBN-DLO)
- Timo Hamers (LUW)
- Robert Luttik, Dennis Kalf, Trudie Crommentuijn, Jack de Bruijn (RIVM/CSR)
- Hilbert Booij (RIVM/LAE)
- Ton van der Linden, Hans van Grinsven (RIVM/LBG)
- Eltjo Buringh (RIVM/LEO)
- Addo van Pul (RIVM/LLO)
- Tom Aldenberg, Rick Wortelboer, Lowie van Liere (RIVM/LWD)
- Wilbert Slooff, Max Posch (RIMV/MNV)
- Laurens Brandes, Henri den Hollander, Olivier Klepper, Emiel Rorije, Willie Peijnenburg, Jaap Struijs en Ton Breure (RIVM/ECO)

INHOUD

VERZENDLIJST	2
VOORWOORD.....	4
SUMMARY	9
SAMENVATTING.....	11
1 INLEIDING	13
1.1 Vraagstelling	13
1.2 Doel	13
1.3 Methode	13
1.4 Stofkeuze.....	14
1.5 Opbouw van het rapport.....	16
2 METHODE.....	17
2.1 SimpleBox concentratie berekeningen.....	17
2.2 I_{tox} -berekeningen	19
2.2.1 Berekening van de Potentieel Aangetaste Fractie	20
2.2.2 Gecombineerde toxische werking, I_{tox}	22
2.3 Biologische beschikbaarheid, berekenen en afleiden van NOEC's	25
2.3.1 Organische verbindingen.....	25
2.3.2 zware metalen en arseen	26
2.4 Achtergrondconcentraties	27
3 INVOERGEGEVENS	29
3.1 Stofeigenschappen	29
3.1.1 Organische stoffen.....	29
3.1.2 pesticiden.....	44
3.2 Emissies	48
3.2.1 Emissieschattingen	48
3.2.2 Vergelijking emissieschattingen met emissieregistratie.....	59
3.3 Gemeten Concentraties	61
3.3.1 Bodem.....	62
3.3.2 Oppervlaktewateren.....	65
3.4 Toxiciteitsgegevens.....	67
3.4.1 Aquatische toxiciteitsgegevens	67

3.4.2 Terrestrische toxiciteitsgegevens	70
4 BEREKENINGEN EN RESULTATEN.....	73
4.1 Veldconcentraties en achtergrondconcentraties.....	73
4.1.1 Organische verbindingen.....	73
4.1.2 Pesticiden.....	74
4.1.3 Zware metalen en Arseen	75
4.2 Berekening PAF en I_{tox}	77
4.2.1 Berekening PAF	77
4.2.2 I_{tox} -berekening.....	80
4.3 Onzekerheden.....	85
5 DISCUSSIE.....	89
LITERATUUR	91
EINDNOTEN	99
BIJLAGE IA. EMISSIES VAN PCB'S IN EUROPA.....	101
BIJLAGE IB. EMISSIE VAN ORGANISCHE VERBINDINGEN (KOOLWATERSTOFFEN) IN EUROPA	103
BIJLAGE IC. EMISSIES VAN PESTICIDEN IN EUROPA.....	105
BIJLAGE IIA. AQUATISCHE EN TERRESTRISCHE NOEC'S ORGANISCHE VERBINDINGEN.	109
BIJLAGE IIB: AQUATISCHE L(E)C ₅₀ 'S VOOR PESTICIDEN	115
BIJLAGE IIC. TERRESTRISCHE NOEC'S VAN ZWARE METALEN EN ARSEEN.....	117

SUMMARY

This report describes the elaboration of the concept by Hamers et al. (1996) providing an algorithm to calculate the toxic stress on ecosystems. The toxic stress on ecosystems is denoted as a Potentially Affected Fraction (PAF).

The value of PAF indicates the fraction of naturally occurring organisms exposed to concentrations higher than or equal to the laboratory NOEC. The toxic stress in a multiple substances exposure situation is indicated by the Indicator toxic effect substances (I_{tox}).

The method thus provides an effect assessment for the combination of a substance and a compartment and multiple substances per compartment.

A substance specific dose-effect curve which is representative for the naturally occurring organisms has to be calculated. It was assumed that the dose-effect curve can be described by the log logistic distribution function. The log logistic distribution function is estimated from single species toxicity data. The distribution function is based on chronic NOECs. PAF is calculated from the combination of the estimated distribution function and the calculated field concentration.

The combined toxic stress in a multiple stress situation was calculated according to two methods from the single species combination toxicology, respectively concentration addition and effect addition. Concentration addition can only be applied to inert hydrophobic substances the mode of action of such substances is called narcosis. Effect addition is applied to all other substances.

The substance specific log logistic distribution functions were estimated by means of non linear regression. The average log logistic distribution function for the substances with narcosis as the mode of action has been estimated by means of multivariate non linear regression. The total toxic stress was calculated by multiplication of the complements of the PAFs:

$$PAF_{total} = 1 - (1 - PAF_{narcosis}) \cdot \prod_{i=1}^n (1 - PAF_i) = 1 - \frac{1}{\left(1 + \left(\sum_{i=1}^n \frac{C_i}{a_i}\right)^{b_{narcosis}}\right) \cdot \prod_{j=1}^n \left(1 + \left(\frac{C_j}{a_j}\right)^{b_j}\right)}$$

Secondary poisoning was not incorporated into the PAF calculations. The main exposure route was assumed to be porewater. The exposure route food was assumed not to be important. This may not be applicable for all organisms.

The anthropogenic PAF was only calculated for those species not affected by natural background concentrations of heavy metals according to:

$$PAF_{anthropogenic} = \frac{PAF_{total} - PAF_{background}}{1 - PAF_{background}}$$

The list of priority substances as proposed by Slooff (1994) and later adapted by Van den Berg (1995) was used to perform PAF calculations. The substances can be divide into pesticides, heavy metals and organic substances.

For both pesticides and organic substances the calculations of PAF of the selected substances were performed with calculated concentrations. Concentrations were calculated by means of SimpleBox model calculations based on production or emission data in the Netherlands for the year 1995. Transboundary emissions from Europe to the Netherlands were also taken into consideration.

An aggregated potentially affected fraction was finally calculated including all selected substances. The contribution of the groups of substances to the total toxic stress was indicated. For example, the toxic stress for fresh surface waters is mainly caused by pesticides, heavy metals and organic substances respectively. The toxic stress on natural soils is largely caused by heavy metals, pesticides and organic substances respectively. The toxic stress on agricultural soil is mainly caused by pesticides, heavy metals and organic substances respectively. Additionally the large contributors within a group could be identified. For example, the toxic stress caused by the organic substances is largely caused by PCBs, dioxins and pentachlorophenol.

SAMENVATTING

Dit rapport beschrijft de uitwerking van het door Hamers et al. (1996) beschreven concept voor de berekening van de toxische stress op ecosystemen uitgedrukt in de Potentieel Aangetaste Fractie (PAF).

De PAF-waarde geeft aan welke fractie van de in de natuur voorkomende organismen wordt blootgesteld aan concentraties groter of gelijk aan de laboratorium NOEC. De toxische stress veroorzaakt door het gelijktijdig aanwezig zijn van toxische stoffen in het milieu wordt weergegeven met de indicator toxische effecten van stoffen (I_{tox}).

De methode voorziet in een effectberekening per combinatie van stof en compartiment en voor meerdere stoffen tegelijk. Een stofspecifieke dosis-effect curve wordt berekend die representatief is voor de in de natuur voorkomende organismen. Verondersteld wordt dat de dosis-effect curve kan worden beschreven met de log-logistische verdelingsfunctie. De log-logistische verdelingsfunctie wordt geschat uit "single species" toxiciteitsgegevens. De verdelingsfunctie is gebaseerd op chronische NOEC's. De berekening van de PAF berust op de combinatie van een gemeten of een berekende veldconcentratie en de geschatte NOEC-verdelingsfunctie.

Het gecombineerd toxische effect van meerdere stoffen tegelijk is berekend volgens twee methoden uit de "single species" combinatie toxicologie, te weten effectadditie en concentratie-additie. Concentratie-additie wordt alleen toegepast op inerte hydrofobe stoffen met een narcotiserende toxische werking. Effectadditie wordt toegepast op alle overige stoffen.

De stofspecifieke log-logistische verdelingsfuncties zijn geschat met niet lineaire regressie. De gemiddelde log-logistische verdelingsfuncties voor de stoffen met een narcotiserende toxische werking zijn geschat met multivariate niet lineaire regressie. De totale toxische stress wordt berekend door vermenigvuldiging van de complementen van de PAF's. In formule ziet de berekening er als volgt uit:

$$PAF_{\text{totaal}} = 1 - (1 - PAF_{\text{narcotica}}) \cdot \prod_{i=1}^n (1 - PAF_i) = 1 - \frac{1}{\left(1 + \left(\sum_{i=1}^n \frac{C_i}{a_i}\right)^{b_{\text{narcotica}}}\right) \cdot \prod_{j=1}^n \left(1 + \left(\frac{C_j}{a_j}\right)^{b_j}\right)}$$

Bij de PAF-berekeningen is rekening gehouden met biologische beschikbaarheid door te veronderstellen dat bodemorganismen worden blootgesteld via het porievocht en waterorganismen via de vloeibare waterfase. Verondersteld wordt dat blootstelling via de vaste fase (voedsel) geen belangrijke rol speelt bij de blootstelling. Dit geldt voor de meeste maar niet alle organismen. Daarnaast is doorvergiftiging niet meegenomen in de berekening van de PAF.

Natuurlijke achtergrondconcentraties zijn voor de zware metalen verdisconteerd in de berekende potentieel aangetaste fractie volgens:

$$PAF_{\text{antropogeen}} = \frac{PAF_{\text{totaal}} - PAF_{\text{achtergrond}}}{1 - PAF_{\text{achtergrond}}}$$

De methode van de PAF-berekening is uitgewerkt aan de hand van voorbeeldstoffen. Het uitgangspunt voor de becijfering van I_{tox} is de lijst van prioritair stoffen zoals voorgesteld door Slooff (1994) en later aangepast door Ten Brink en Van den Berg (1995). De stoffen zijn onder te verdelen in pesticiden, zware metalen en organische verbindingen.

De berekende PAF's van de geselecteerde stoffen zijn behalve de zware metalen en arseen allen gebaseerd op veldconcentraties die berekend zijn met het SimpleBox 2.0 model op basis van emissie en/of productiegegevens voor Nederland in 1995. De compartimenten water, natuurbodem en landbouwbodem zijn onderscheiden. Per combinatie van compartiment en stof is een potentieel aangetaste fractie berekend. Eveneens zijn grensoverschrijdende emissies meegenomen in de berekeningen.

Een geaggregeerde potentiële aangetaste fractie van de in de natuur voorkomende soorten is per compartiment berekend voor alle geselecteerde stoffen volgens de methode van concentratie-additie en effectadditie. Er is aangegeven welke stofgroepen de grootste bijdrage leveren aan de totale toxische druk van de beschouwde stoffen. Voor oppervlaktewateren zijn dat in afnemende volgorde de pesticiden, zware metalen en de organische verbindingen. Voor natuurgebieden is de bijdrage van de zware metalen aan de totale toxische druk het grootst gevolgd door de pesticiden en de organische verbindingen. In landbouwgebieden is de bijdrage van pesticiden aan de totale toxische druk het grootst, gevolgd door de zware metalen en de organische verbindingen. Daarnaast wordt inzicht verkregen in de bijdrage van de individuele stoffen aan de toxische druk is. Zo wordt de toxische druk door de groep organische verbindingen grotendeels veroorzaakt door PCB's, dioxinen en pentachloorfenol.

1 INLEIDING

1.1 Vraagstelling

Milieubeïnvloeding door toxische stoffen wordt traditioneel stof voor stof behandeld. Om de totale beïnvloeding door alle stoffen samen te beschouwen en de relatie hiervan met de milieudruk (emissies aan te geven, is het wenselijk om hiervoor een methode te ontwikkelen. Op nationale schaal bestaat voor dit doel al de Milieubeleidsindicator voor het thema Verspreiding. Internationaal staat het thema “toxification” in de belangstelling (Agenda 21) maar een indicator hiervoor is er nog niet.

Daarnaast is het voor nationale en internationale doeleinden gewenst te beschikken over een indicator waarmee milieubeïnvloeding door toxische stoffen kan worden aangegeven en waarmee het relatieve belang ervan ten opzichte van andere vormen van milieubeïnvloeding kan worden beoordeeld.

1.2 Doel

Het project “Indicator effecten toxische stoffen” is opgezet met als doel een geaggregeerde indicator voor “vergiftiging” te ontwikkelen.

In de definitiestudie Hamers et al. (1996), die reeds is afgerond, is onderzocht wat de mogelijkheden zijn om te komen tot een geaggregeerde indicator voor toxische effecten.

De tweede fase, de indicatorontwikkeling, van het project stond in het kader van de ontwikkeling van een receptuur voor de indicator toxische. Het doel van dat onderzoek is een rekenvoorschrift voor de becijfering van een of meer I_{tox} -en voor een bepaald tijdstip, op basis van emissiecijfers voor dat tijdstip. Als gebruiksdoel voor de te ontwikkelen receptuur geldt rapportage van het geaggregeerde totaal van potentiële toxische effecten op ecosystemen en de bijdrage van stoffen of groepen van stoffen aan de totale toxische druk.

De becijfering van de potentiële toxische effecten op ecosystemen zal voor de schaal Nederland worden uitgevoerd. Afzonderlijke I_{tox} -en worden opgesteld voor de milieucompartmenten oppervlaktewateren, natuurgrond en landbouwgrond.

Dit rapport doet verslag van de genoemde ontwikkeling van een receptuur voor de becijfering van I_{tox} .

1.3 Methode

Op basis van de definitiestudie (Hamers et al., 1996) is een aantal keuzen gemaakt die als startpunt dienen voor de ontwikkelingsfase:

- Vooral nog wordt alleen een milieukwaliteitsindicator voor vergiftiging ontwikkeld. Beïnvloeding van de menselijke gezondheid door toxische stoffen valt buiten het huidige werk.
- De I_{tox} indicator wordt uitgedrukt in termen van “Potentieel Aangetaste Fractie” (PAF). De PAF-waarde wordt per stof gevonden uit combinatie van een blootstellingsconcentratie met de NOEC-verdelingsfunctie.

- In de I_{tox} worden PAF-waarden voor verschillende stoffen geaggregeerd tot een “combi-PAF”. De in de definitiestudie voorgestelde rekenwijze hiervoor, via concentratie-additie en effectadditie, wordt hierbij gehanteerd.
- In de I_{tox} wordt een zo groot mogelijke verzameling van stoffen geaggregeerd. Daartoe wordt uitgegaan van berekende blootstellingsconcentraties op schaal Nederland, te verkrijgen uit productie- en/of emissiecijfers. Van subsets van stoffen wordt aangegeven in welke mate deze stoffen bijdragen aan de totale toxische druk.
- Er worden afzonderlijke I_{tox} -en opgesteld voor de milieucompartimenten oppervlaktewateren, landbouwgrond en natuurgrond. Verdere aggregatie zal niet plaatsvinden.

1.4 Stofkeuze

Het uitgangspunt voor de becijfering van I_{tox} is een deel van de lijst van prioritaire stoffen zoals voorgesteld door Slooff (1994) en later aangepast door Ten Brink en Van den Berg (1995). De gekozen stoffen zijn de organische verbindingen:

Benzeen	Hexachloorbenzeen
Benzo[a]pyreen	Polychloorbifenylen
Dibutylftalaat	Pentachloorfenol
Diethylhexylftalaat	1,2,3-trichloorbenzeen
Dioxinen	1,2,4-trichloorbenzeen
Fluorantheen	1,3,5-trichloorbenzeen

Daarnaast de zware metalen:

Cadmium	Lood
Chroom	Nikkel
Koper	Zink
Kwik	Arseen

Daarnaast staan op de lijst van Slooff (1994) de pesticiden.

In Nederland worden zo'n 180 pesticiden geregistreerd gebruikt (ISBEST-bestand, zie Merkelbach en Lentjes, 1993). Deze 180 pesticiden maken ongeveer 99% uit van de totale hoeveelheid gebruikte pesticiden in Nederland (Van der Linden, 1996). Uit deze lijst van 180 pesticiden is een selectie gemaakt van negen pesticiden die het meest bijdragen aan de toxische stress in natuurgebieden². Het zou te ver gaan om alle 180 pesticiden in het onderzoek mee te nemen, bovendien zullen niet alle pesticiden even relevant zijn voor een schatting van de toxische druk in natuurgebieden. De 180 bestrijdingsmiddelen van het ISBEST-bestand worden daarom gescreend op hun toxiciteit en de mate waarin ze in natuurgebieden kunnen voorkomen. Een eerste screening is gebaseerd op de acute toxiciteit (LC_{50}) van deze bestrijdingsmiddelen voor drie organismen. De acute LC_{50} 's van algen, daphnia's en vissen zijn gebruikt (Luttik). De bestrijdingsmiddelen zijn gerangschikt naar de verhouding van de gebruiksvolumes en de acute LC_{50} 's. Deze verhouding geeft een eerste ruwe indicatie van de mogelijke toxische druk. Per organisme is het cumulatieve percentage van de (totale) berekende verhouding bepaald. De pesticiden zijn vervolgens zo geselecteerd dat ze tezamen 99,5% van de totale, volgens de volume- LC_{50} verhouding berekende 'toxische druk' uitmaken. Deze selectieprocedure resulteerde in lijst van 40 bestrijdingsmiddelen.

De volgende stap was het nagaan van de verspreiding (via atmosferisch transport) van deze 40 pesticiden van de landbouwgronden naar natuurgebieden. Hiertoe zijn berekeningen uitgevoerd met SimpleBox 2.0. Voor het uitvoeren van de berekeningen zijn een aantal basis aannames gedaan. De verkoopvolumes van het jaar 1993 zijn gebruikt als emissie. De emissie vindt alleen plaats op/in landbouwgrond. Het landbouw areaal waarop het bestrijdingsmiddel is toegepast is berekend aan de hand van een gemiddelde dosis die tijdens de toepassing wordt gehanteerd (Cijfers, Linders et al., 1994). Het landbouw areaal is dan gelijkgesteld aan de emissie [kg] gedeeld door de dosis [$\text{kg}\cdot\text{ha}^{-1}$]. Het overige landbouw areaal is als onbespoten beschouwd. De mengdiepte van het bespoten areaal is gelijk gesteld aan 5cm.

Er is voor 5cm gekozen omdat het bespoten areaal meestal niet wordt geploegd omdat er op dat moment gewassen groeien (een uitzondering hierop vormen bv. grondontsmettingsmiddelen). Het overige landbouw areaal heeft een mengdiepte van 20 cm. Verder is er rekening gehouden met emissies vanuit het buitenland (Europese Unie).

Van de geselecteerde 40 stoffen zijn de meeste invoergegevens zoals $\log K_{ow}$, dampdruk en oplosbaarheid wel bekend. De halfwaarde tijden van de pesticiden in water en sediment zijn veelal niet bekend. De halfwaarde tijden voor water en sediment zijn daarom geschat (lineaire regressie) aan de hand van de halfwaarde tijden in de bodem. De afbraaksnelheden in de atmosfeer zijn met een model geschat met behulp van structuurrelaties volgens Atkinson (Atkinson, 1987 en Rorije).

De 40 pesticiden zijn vervolgens weer gerangschikt. Nu echter zijn de bestrijdingsmiddelen gerangschikt door de concentraties in de natuurgebieden (inclusief buitenlandse emissies) te delen door de acute toxiciteit van dezelfde 3 organismen. Vervolgens zijn die stoffen geselecteerd die tezamen 99.5% van de toxische druk veroorzaken voor de drie organismen. Dit resulteerde in de volgende 9 stoffen:

Carbendazim	Methabenzthiazuron
Diquat-dibromide	Metribuzin
Lindaan	Monolinuron
Maneb	Thiram
Metamitron	

In overleg is besloten om ook de aandachtstoffen van de Watersysteemverkenningen van Rijkswaterstaat (Theunissen-Ordelman en Schrap, 1996) voor zowel de regionale als de rijkswateren en de stoffen beschouwd in de studie van naar emissies naar de Noordzee van TNO (TNO, 1995) mee te nemen in de studie naar de toxische druk van pesticiden in natuurgebieden. Dit resulteerde in een set van 23 pesticiden waarvan de grootste bijdrage aan de toxische druk wordt verwacht, bijlage Ic.

2,4-D	DNOC	Metribuzin
Atrazine	Fentin-acetaat	Mevinfos
Azinphos-methyl	Lindaan	Monolinuron
Bentazon	Malathion	Parathion
Carbendazim	Maneb	Simazine
Dichloorvos	Mecoprop	Thiram
Diquat-dibromide	Metamitron	Trifluralin
Diuron	Metabenzthiazuron	

1.5 Opbouw van het rapport

In hoofdstuk twee wordt ingegaan op de gebruikte methoden voor de schatting van de concentraties in de compartimenten water en bodem. Daarnaast wordt in hoofdstuk twee de gehanteerde methode voor de berekening van de potentieel aangetaste fractie (PAF) beschreven. Daarbij wordt eveneens ingegaan op het concept van biobeschikbaarheid en de problematiek van de achtergrondconcentraties. Hoofdstuk drie geeft een overzicht van de voor de berekeningen gehanteerde fysisch-chemische eigenschappen van de geselecteerde stoffen en de gebruikte toxiciteitsgegevens. De schatting van de emissiegegevens van de stoffen in het jaar 1995 voor zowel Nederland als Europa komt eveneens in hoofdstuk drie aan de orde. In hoofdstuk vier wordt de in hoofdstuk twee beschreven methode voor de berekening van de potentieel aangetaste fractie uitgewerkt voor de geselecteerde organische verbindingen, pesticiden, zware metalen en arseen. Tot slot volgt in hoofdstuk vijf de discussie.

2 METHODE

2.1 SimpleBox concentratie berekeningen

De berekeningen van de toxische stress van de geselecteerde stoffen is uitgevoerd met berekende concentraties. De concentraties zijn berekend met het SimpleBox model versie 2.0 (Brandes et al., 1996). In SimpleBox is het milieu gemodelleerd als een verzameling van goed gemengde, homogene compartimenten (lucht, twee watercompartimenten, sediment, drie bodemcompartimenten en twee vegetatiecompartimenten op natuurlijke bodem en landbouwbodem) in een regionale, een continentale en een globale ruimtelijke schaal. Om de berekeningen uit te voeren zijn emissiegegevens nodig die als input dienen. Zowel de emissies in Nederland als Europese emissie zijn in de berekeningen meegenomen. Europese emissies zijn gebruikt om de grensoverschrijdende emissies (import) via de atmosfeer en de grote rivieren te schatten.

Om de verspreiding van stoffen in het milieu via het rioolwater na zuivering in rioolwaterzuiveringsinstallaties (RWZI's) te berekenen is naast het SimpleBox model, het SimpleTreat model versie 3.0 (Struijs, 1996) gebruikt. Een deel van de emissies die worden veroorzaakt door huishoudens en de industrie zal namelijk via het riool in de rioolwaterzuiveringsinstallaties komen.

De concentraties van de toxische stoffen in drie compartimenten zijn voor het jaar 1995 berekend. De drie compartimenten zijn oppervlaktewateren, de bodem in landbouwgebieden en de bodem in natuurgebieden. In SimpleBox is de bodemdiepte variabel. De variabele bodemdiepte is afhankelijk van de fysisch-chemische eigenschappen van de bodem en de afbraaksnelheid in de bodem. De minimale te berekenen bodemdiepte in natuurgebieden is 3 cm en de maximale bodemdiepte in natuurgebieden is 100 cm. In landbouwgebieden is de minimale bodemdiepte 20 cm. De maximale bodemdiepte is eveneens 100 cm.

Voor sommige stoffen is het denkbaar dat de huidige concentratie mede wordt bepaald door emissies in het verleden. Dit zijn stoffen met een lange verblijftijd in het milieu (persistente verbindingen). Voorbeelden van persistente verbindingen zijn polychloorbifenylen, hexachloorbenzeen, DDT en zware metalen.

Voor veel stoffen is het niet nodig om rekening te houden met emissies uit het verleden en kunnen de concentraties met "steady state" berekeningen worden bepaald. In een "steady state" of stationaire toestand veranderen de concentraties in de compartimenten niet (meer). De aanvoer naar het milieu (emissies, import) is dan in balans met de afvoer (afbraak, export). Bij constante aanvoer hoort een constante (steady state) concentratie. Bij weinig persistente stoffen stelt de stationaire toestand zich snel in; bij persistente stoffen kan het vele jaren duren.

Een andere methode die kan worden gebruikt is de dynamische berekening. Hiermee kunnen veranderingen in de tijd van de invoer en de hieruit resulterende in de tijd verschillende concentraties worden berekend. Om na te gaan of de concentraties van de stoffen met het SimpleBox 2.0 model (Brandes et al., 1996) voorspeld kunnen worden door uit te gaan van de emissies in het jaar 1995 of dat er rekening gehouden dient te worden met emissies in het verleden zijn berekeningen uitgevoerd die een idee geven van de persistentie van de stoffen in de compartimenten.

Berekeningen zijn uitgevoerd met een hypothetisch blokvormig emissiescenario over een periode van 50 jaar. De “Steady state” berekening is gebruikt als blijkt dat 95 % van de steady-state concentratie in een periode van tien jaren bereikt wordt. Het meest nauwkeurig zal de berekening zijn als de “steady state” toestand (100 %) binnen een jaar wordt bereikt. Is deze periode veel langer dan enkele jaren dan kan niet met een steady-state berekening worden volstaan. In dat geval dient er rekening te worden gehouden met de historische emissies. In Tabel 2.1 staan de resultaten van de uitgevoerde berekeningen. Per compartiment is de periode aangegeven waarin de 95% van de steady-state wordt benaderd ($\geq 95\%$).

Tabel 2.1: Periode waarin de steady-state toestand wordt benaderd [jaar]

Stof	Lucht	Water	Sediment	Bodem
Benzeen	<1	<1	<1	<1
Benzo[a]pyreen	<1	<1	<1	<1
Dibutylftalaat	<1	<1	<1	<1
Diethylhexylftalaat	<1	<1	<1	<
Dioxinen	<1	7	8	7
Fluorantheen	<1	2	2	2
Hexachloorbenzeen	8	9	9	15
Polychloorbifenylen	<1	>50	>50	>50
1,2,3-trichloorbenzeen	<1	<1	<1	3
1,2,4-trichloorbenzeen	<1	<1	3	2
1,3,5-trichloorbenzeen	4	<1	3	3
Cadmium	<1	>>50	>>50	>>50
Chroom	<1	>>50	>>50	>>50
Koper	<1	>>50	>>50	>>50
Kwik	<1	>>50	>>50	>>50
Lood	<1	>>50	>>50	>>50
Tin	<1	>>50	>>50	>>50
Zink	<1	>>50	>>50	>>50

De concentraties kunnen voor het grootste deel van de stoffen met de “steady state” benadering berekend worden omdat de “steady state” toestand binnen een jaar wordt bereikt. De stationaire toestand wordt voor fluorantheen en de trichloorbenzenen na een iets langere periode bereikt. Toch zijn de concentraties van deze stoffen met de “steady state” benadering berekend. De afwijking ten opzichte van de dynamische berekening zal niet groot zijn. De periode waarin de steady-state toestand wordt benaderd ligt voor hexachloorbenzeen en dioxinen in de orde van 10 jaren. De concentraties van de zware metalen en PCB's kunnen niet met een steady-state benadering worden berekend. Om tot een schattingen te komen van de concentraties van deze groep verbindingen in het basisjaar 1995 zal de dynamische methode moeten worden toegepast.

Berekeningen met de dynamische methode vergen historische emissies als input. Als deze historische emissies onvoldoende bekend zijn kan de dynamische berekening niet worden toegepast. Omdat de eerste emissieschattingen voor de zware metalen vaak niet verder teruggaan dan 1985 is ervoor gekozen om bij de berekening van de toxische stress van zware metalen uit te gaan van gemeten concentraties in het veld voor de jaren '90 (Groot en Van Swinderen, 1993; Lagas en Groot, 1996). Concentraties van PCB's zijn wel met de dynamische methode berekend. Daartoe zijn emissieschattingen voor 1990 en 2000 gebruikt. Als begin situatie zijn gemeten concentraties in de bodem water lucht en sediment in het jaar 1990 gebruikt, zie Annema et al. (1995).

Een berekening voor de groep PCB's is in principe niet juist. Emissie van PCB's zijn echter alleen bekend voor totale hoeveelheden en niet van specifieke congenere. Bovendien worden de toxiciteiten van PCB's meestal gemeten met mengsels van PCB-congenere. Voor de gehanteerde methode (SimpleBox-berekeningen en PAF-berekeningen) is het daarom bijna onvermijdelijk om PCB's als een groep met gemiddelde stoffeigenschappen te behandelen.

De concentraties van de geselecteerde pesticiden zijn met de "steady state" benadering geschat. De pesticiden zijn naast de organische verbindingen en de zware metalen en arseen apart behandeld in verband met berekeningen met dezelfde pesticiden in de studie van Klepper en Van de Meent (1997).

2.2 I_{tox} -berekeningen

Hamers et al. (1996) hebben een methode ontwikkeld om gemeten of berekende concentraties van stoffen in het milieu om te rekenen naar een mogelijk ecotoxisch effect. De methode voorziet in een effectberekening per combinatie van stof en compartiment en voor meerdere stoffen per compartiment. Het per stof/compartiment berekende effect wordt uitgedrukt als een Potentieel Aangetaste Fractie, de PAF. Het gecombineerde effect van de beschouwde stoffen wordt I_{tox} genoemd. I_{tox} staat voor "Indicator toxisch effect stoffen" en geeft een indicatie van het mogelijke toxische stress door de simultane aanwezigheid van toxische stoffen in het milieu.

De berekeningsmethodiek van de PAF en daarna de I_{tox} zal in dit hoofdstuk worden besproken.

De berekening van de PAF berust op laboratoriumtoxiciteitsgegevens van organismen. Voor de afleiding van de PAF worden in het laboratorium gemeten NOEC's gebruikt. De NOEC "No Observed Effect Concentration", is de concentratie waarbij nog geen effect wordt waargenomen. De NOEC is afhankelijk van het effect dat men heeft onderzocht, voorbeelden van veel voorkomende eindpunten zijn reproductie, groei, en sterfte.

Om tot een PAF te komen wordt verondersteld dat de verschillende laboratorium organismen een representatieve steekproef vormen uit de populatie van in de natuur voorkomende organismen en dat de gevoeligheid van deze organismen gelijk is aan de gevoeligheid van de in de natuur voorkomende organismen. Met de laboratorium NOEC's wordt een NOEC-frequentie verdelingsfunctie in cumulatieve vorm opgesteld die wordt beschouwd als dosis-effect curve. De dosis-effect curve is een log-logistische verdelingsfunctie die wordt gefit door de laboratorium NOEC's. De stofspecifieke dosis-effect curve voor de generieke soortenverzameling is representatief voor de in de natuur voorkomende organismen.

De stof- en compartimentspecifieke PAF wordt verkregen door vervolgens de gemeten of berekende concentratie in te vullen. De PAF-waarde geeft aan welke fractie van de in de natuur voorkomende organismen wordt blootgesteld aan concentraties groter of gelijk aan de NOEC.

De stofspecifieke PAF's kunnen gecombineerd worden volgens twee methoden die gebaseerd zijn op de "single species" combinatie toxicologie, concentratie-additie en effectadditie.

Hamers et al. (1996) redeneren dat effectadditie kan worden toegepast voor alle stoffen behalve de stoffen met een narcotische werking. Om te beoordelen of stoffen behoren tot de groep stoffen met een narcotische werking zijn de klassifikatieschema's van Verhaar et al. (1992) geraadpleegd. Concentratie-additie wordt toegepast voor de berekening van de gecombineerde toxische werking van narcotiserende stoffen zoals benzeen en hexachloorbenzeen.

De berekening van de cumulatieve log-logistische verdelingsfunctie en de berekening van de I_{tox} zal in de onderstaande paragrafen eerst in het algemeen worden uitgewerkt. In hoofdstuk vier worden de berekeningen geïllustreerd aan de hand van de geselecteerde voorbeeldstoffen.

Op basis van de definitiestudie van Hamers et al. (1996) zijn een aantal keuzen gemaakt die als startpunt dienen voor dit onderzoek. Die punten zijn hierboven in paragraaf 1.3 weergegeven met de daaraan toegevoegd dat:

- Doorvergiftiging niet wordt meegenomen bij de PAF-berekeningen. Voor de berekeningen van de potentieel aangetaste fractie van organismen waarop doorvergiftiging van toepassing is, zie Luttik et al. (1997).
- Daarnaast is voor dit onderzoek besloten om PAF-berekeningen uit te voeren op basis van porievochtconcentraties en blootstelling via de vaste fase niet mee te nemen in de berekeningen van de PAF en I_{tox} .

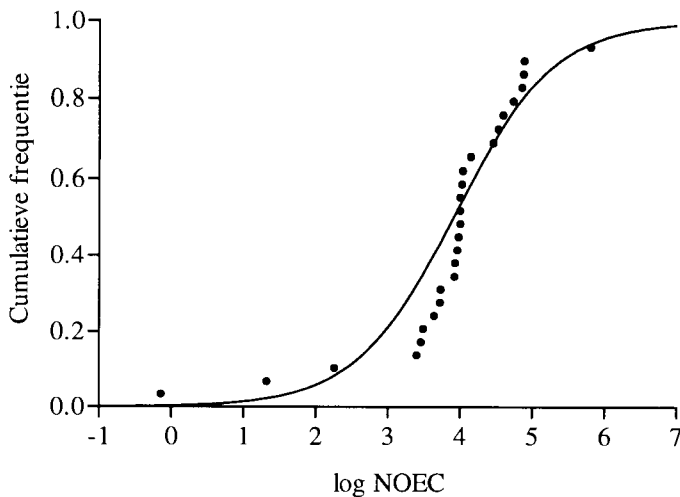
2.2.1 Berekening van de Potentieel Aangetaste Fractie

Log-logistische verdelingsfunctie

De cumulatieve log-logistische verdelingsfunctie (1) wordt gespecificeerd door twee coëfficiënten, alfa en bèta. Beide parameters worden geschat uit de verzamelde NOEC's.

$$F(C) = \frac{1}{1 + e^{\frac{-(\log(C)-\alpha)}{\beta}}} \quad \mathbf{1}$$

Door de verzamelde NOEC's naar grootte te ordenen en er vervolgens een cumulatieve frequentie aan toe te kennen van $1/n+1$ voor de eerste NOEC en $2/n+1$ voor de tweede enzovoort, wordt de empirische verdelingsfunctie verkregen (n = aantal NOEC's). Een empirische cumulatieve frequentieverdeling en de berekende functie, berekend aan de hand van schattingen voor alfa en bèta, zijn samen weergegeven in figuur 2.1.



Figuur 2.1: Empirische cumulatieve log-logistische verdelingsfunctie (●) en de hieruit geschatte verdelingsfunctie (—).

Berekening van de coëfficiënten van de log-logistische verdelingscurve

De parameters α en β worden bepaald aan de hand van de gevonden stofs specifieke NOEC's voor verschillende organismen. Om tot een representatieve schatting te komen van de cumulatieve log-logistische verdelingsfunctie is het gewenst om zoveel mogelijk taxonomische groepen mee te nemen in de berekeningen. Bij de normstelling gaat men er vanuit dat er minimaal 4 NOEC's nodig zijn van liefst verschillende soorten organismen (vier taxonomische groepen) om een cumulatieve log-logistische verdelingsfunctie te schatten³.

Hamers et al. (1996) geven twee methoden voor de schatting van de coëfficiënten van de log-logistische verdelingscurve:

De eerste methode wordt in het beleid toegepast bij het afleiden van normen. In de normstelling wordt het 5-de percentiel van de verdelingscurve geschat waarbij een methode is ontwikkeld om de betrouwbaarheidsintervallen van het 5-de percentiel te berekenen (Aldenberg, 1993; Aldenberg en Slob, 1993). De parameter alfa wordt berekend als de gemiddelde waarde van de log NOEC's van de verschillende organismen.

$$\alpha = \frac{\sum_{i=1}^n \log NOEC_i}{n} \quad 2$$

Bèta wordt berekend uit de standaarddeviatie van de log NOEC's volgens formule 2.

$$\beta = \frac{k_L \cdot s_n}{C_5} \quad 3$$

hierin is:

- k_L : extrapolatie constante voor de logistische verdelingsfunctie
- s_n : standaarddeviatie van de steekproef
- C_5 : vereffeningsconstante

C_5 is gelijk aan $\ln(19) = 2.9444$. k_L is een extrapolatie constante voor de logistische verdelingsfunctie. k_L is afhankelijk van de grootte van de steekproef en kan gevonden worden in statistische tabellen (Aldenberg, 1993; Aldenberg en Slob, 1993) voor verschillende betrouwbaarheidsintervallen.

Nadat alfa en bèta zijn berekend, kan met formule 1 de potentiële aangetaste fractie (PAF) voor de combinatie van één stof en compartiment berekend worden door eenvoudigweg de gemeten of berekende veldconcentratie in formule 1 in te vullen. De gemeten of berekende concentratie moet wel betrekking hebben op dezelfde fase als de NOEC-concentraties⁴.

De tweede methode, die volgens Hamers et al. (1996) enkele voordelen biedt boven de eerst genoemde methode, berust op schatting van de log-logistische verdelingsfunctie met behulp van niet lineaire regressie. Formule (1) wordt daartoe omgewerkt tot een functie met lineaire concentraties (formule 4). De afleiding van deze functie is weergegeven in Hamers et al. (1996).

$$F(C) = \frac{1}{1 + e^{\frac{-(\log c - \alpha)}{\beta}}} = \frac{\left(\frac{C}{a}\right)^b}{1 + \left(\frac{C}{a}\right)^b} \quad 4$$

waarin:

C : concentratie

a : 10^α

b : $\frac{1}{\beta \cdot \ln 10}$

Vervolgens wordt met het model, beschreven volgens formule 4, een univariate niet lineaire regressie toegepast op de gevonden empirische NOEC-verdeling.

Zoals hier onder zal blijken kan de functie met niet getransformeerde concentratie eenvoudig worden toegepast bij zowel concentratie-additie en effectadditie.

2.2.2 Gecombineerde toxische werking, I_{tox}

Het gecombineerde effect van het gelijktijdig aanwezig zijn van toxische stoffen in een compartiment geeft een PAF-totaal per compartiment. De totale PAF of combinatie-PAF kan beschouwd worden als een kwaliteitsindicator voor het milieu, I_{tox} . De aggregatie van de stofspecifieke PAF's is gebaseerd op twee principes: concentratie-additie en effectadditie.

Concentratie-additie

Concentratie-additie is een algoritme dat het gecombineerde effect berekent uit zgn. "single-species toxicity" experimenten voor stoffen die "Simple Similar Action" (SSA) vertonen. SSA wordt gekenmerkt door:

- gelijke werkingsmechanisme: Stoffen met gelijke werkingsmechanisme vertonen parallelle (log) dosis-effect curves,
- geen interactie tussen de verschillende stoffen: De werking van de ene stof wordt niet beïnvloed door een andere stof.

Concentratie-additie kan niet eenvoudigweg worden toegepast op de situatie waarin meerdere soorten voorkomen. Concentratie-additie kan alleen worden toegepast als aan de voorwaarde van gelijke werking kan worden voldaan voor alle organismen. Dit houdt in dat in een situatie waarin meerdere soorten voorkomen, het idee van gelijke werking niet alleen moet gelden tussen de verschillende stoffen (log NOEC-frequentieverdelingsfuncties) maar ook geldig moet zijn tussen de verschillende soorten organismen (binnen de log NOEC-verdelingsfunctie).

Deze voorwaarden voor concentratie-additie gaan alleen op voor stoffen met een narcotiserende werking. Dit zijn hydrofobe inerte stoffen zonder een specifieke werkingsmechanisme (Verhaar et al., 1992). Verhaar et al. (1992) geven vuistregels voor de classificatie van toxische stoffen.

Van stoffen waarvan men veronderstelt dat ze een gelijke werkingsmechanisme hebben zowel tussen als binnen de verdelingsfunctie is het verloop van die verdelingsfuncties parallel. Berekening van het gecombineerde toxisch effect van stoffen waarop concentratie-additie van toepassing is, is gebaseerd op de aanname dat de verdelingsfunctie van de stoffen met een gelijke werkingsmechanisme één en dezelfde hellingsparameter (β of b) hebben maar een stofspecifiek gemiddelde (α of a).

Wanneer concentratie-additie wordt toegepast op meerdere stoffen (n) leidt dat tot de volgende multivariate niet lineaire regressie die wordt uitgevoerd met het model volgens vergelijking 5.

$$F_{narcotica}(C_i) = \frac{\left(\sum_{i=1}^n \frac{C_i}{a_i}\right)^{b_{narcotica}}}{1 + \left(\sum_{i=1}^n \frac{C_i}{a_i}\right)^{b_{narcotica}}} \quad 5$$

Concentratie-additie wordt in hoofdstuk vier voor een negental stoffen uitgewerkt.

Effectadditie

Het gecombineerde effect van stoffen met verschillende onafhankelijke toxische werking kan berekend worden met effectadditie. Onafhankelijke toxische werking wordt als volgt gekarakteriseerd:

- verschillende werkingsmechanismen;
- geen interactie tussen de verschillende stoffen. De biologische werking van de ene stof wordt niet beïnvloed door andere stoffen.

In tegenstelling tot concentratie-additie hoeft geen gemiddelde NOEC verdelingsfunctie te worden berekend, omdat de PAF voor elke stof apart berekend wordt uit de stofspecifieke NOEC-verdelingsfunctie, voordat ze geaggregeerd worden in de combinatie-PAF. De logistische verdelingsfunctie voor de stoffen, anders dan de stoffen met een narcotiserende toxische werking, kan aan de hand van formule 4 worden berekend met univariate niet lineaire regressie. Elke stof heeft zijn eigen specifieke coëfficiënten a en b .

Berekening van de gecombineerde PAF

Het gecombineerde effect van stoffen met verschillende toxische werking wordt volgens Hamers et al. (1996) berekend als de vermenigvuldiging van de complementen van de PAF's. De keuze voor deze methode staat uitvoerig beschreven in Hamers et al. (1996). De combinatie-PAF wordt berekend volgens formule 6:

$$PAF_{\text{totaal}} = 1 - \prod_{i=1}^n (1 - PAF_i) = 1 - (1 - PAF_1) \cdot (1 - PAF_2) \cdot \dots \cdot (1 - PAF_n) \quad 6$$

Samenvattend ziet de rekenwijze voor het aggregeren van de PAF's er als volgt uit:

1. Selecteer de hydrofobe, inerte organische verbindingen uit de set van stoffen die in beschouwing zijn genomen.
2. Pas concentratie-additie toe op alle stoffen uit die selectie om PAF's te aggregeren door middel van multivariate niet lineaire regressie.
3. Pas effectadditie toe op de gezamenlijke PAF van de groep hydrofobe, inerte organische verbindingen en de resterende specifieke PAF's van alle andere verbindingen.

In formule:

$$PAF_{\text{totaal}} = 1 - (1 - PAF_{\text{narcotica}}) \cdot \prod_{i=1}^n (1 - PAF_i) \quad 7$$

hierin is (*i*) een specifieke verbinding met een specifieke toxische werking en is $PAF_{\text{narcotica}}$ de PAF van de groep verbindingen met een narcotische toxische werking na toepassing van concentratie-additie.

Vergelijking 7 kan volledig worden uitgewerkt door vergelijking 4 in te vullen:

$$1 - PAF_i = 1 - \frac{\left(\frac{C_i}{a_i}\right)^{b_i}}{1 + \left(\frac{C_i}{a_i}\right)^{b_i}} = \frac{1}{1 + \left(\frac{C_i}{a_i}\right)^{b_i}} \quad 8$$

$$PAF_{\text{totaal}} = 1 - \frac{1}{\left(1 + \left(\sum_{i=1}^n \frac{C_i}{a_i}\right)^{b_{\text{narcotica}}}\right) \cdot \prod_{j=1}^n \left(1 + \left(\frac{C_j}{a_j}\right)^{b_j}\right)} \quad 9$$

In formule 9 is (*i*) een individuele inerte, hydrofobe stof met een specifieke locatieparameter (*a*_{*i*}) een gezamenlijke hellingparameter (*b*_{narcotica}) en (*C*_{*i*}) een specifieke veldconcentratie of berekende concentratie. Bij de stof met een specifieke toxische werking (*j*) hoort een specifieke veldconcentratie (*C*_{*j*}) en een specifieke locatieparameter en hellingparameter, respectievelijk (*a*_{*j*}) en (*b*_{*j*}).

2.3 Biologische beschikbaarheid, berekenen en afleiden van NOEC's

2.3.1 Organische verbindingen

PAF-berekeningen voor de aquatische en terrestrische organismen zijn gebaseerd op in het laboratorium gemeten toxiciteitsgegevens. De toxiciteitsgegevens voor aquatische organismen worden uitgedrukt in concentraties in de waterfase. Het betreft altijd de in water opgeloste hoeveelheid stof. Voor aquatische organismen wordt aangenomen dat ze via het water worden blootgesteld en niet via voedsel. De laboratorium toxiciteitswaarden voor terrestrische organismen worden veelal uitgedrukt in concentraties op basis van droge stof en moeten worden omgerekend naar porievochtgehalten.

In het algemeen wordt verondersteld dat de in het laboratorium geteste bodemorganismen ofwel via het porievocht of via de vaste fase (voedsel) worden blootgesteld. In deze studie wordt verondersteld dat alleen blootstelling via het poriewater plaatsvindt. Blootstelling via voedsel is niet meegenomen in de berekening van de toxische stress.

De in het laboratorium uitgevoerde toxiciteitstesten voor bodemorganismen worden uitgevoerd in testbodems van verschillende samenstellingen. Het percentage organisch materiaal, de pH en het kleigehalte zijn enkele belangrijke parameters die van invloed zijn op de binding van een stof aan de vaste fase in de bodem. Er vanuit gaande dat de bodemorganismen via het porievocht worden blootgesteld betekent dat het gedeelte van de totale hoeveelheid stof in de bodem dat gebonden is aan vaste stofdeeltjes niet direct van belang is voor de toxiciteit van de stof.

Door toepassing van het evenwichtspartitieconcept (Van de Meent et al., 1990) worden de vaste stof gehalten omgerekend naar concentraties in het poriewater **10**.

$$NOEC_{poriewater} = \frac{NOEC_{bodem}}{K_{p,s/l}} \quad \mathbf{10}$$

$NOEC_{bodem}$:	NOEC uitgedrukt in droge stof gehalte [mg/kg droge stof]
$NOEC_{poriewater}$:	NOEC uitgedrukt in poriewatergehalte [mg/l poriewater]
$K_{p,s/l}$:	Evenwichtspartitiecoëfficiënt [l water/kg droge stof]

De evenwichtspartitiecoëfficiënt van organische verbindingen zoals benzeen en PAK's wordt doorgaans verondersteld alleen afhankelijk te zijn van het percentage organische materiaal in de bodem. Voor bepaalde organische verbindingen zoals sommige pesticiden is de pH van grote invloed op de partitiecoëfficiënt. Voor zware metalen zijn onder andere de pH, het kleigehalte en het organisch materiaal gehalte van belang.

De evenwichtspartitiecoëfficiënt voor de bodem geeft de verhouding weer tussen de concentratie in de vaste fase en de concentratie in de vloeistoffase in de bodem bij thermodynamisch evenwicht **11**.

$$K_{p,s/l} = \frac{C_{vast}}{C_{vloeistof}} \quad \mathbf{11}$$

$K_{p,s/l}$:	vast-vloeistof evenwichtspartitiecoëfficiënt [l water / kg vast]
C_{vast}	:	evenwichtsconcentratie in de vaste fase [mg/kg vast]
$C_{vloeistof}$:	evenwichtsconcentratie in de vloeistof fase [mg/l water]

Voor organische verbindingen kan de evenwichtspartiticoëfficiënt benaderd worden door alleen uit te gaan van de fractie organisch koolstof in de bodem **12**.

$$K_{p,s/l} = f_{oc} \cdot K_{oc} \quad 12$$

waarin:

$K_{p,s/l}$:	vast-vloeistof evenwichtspartiticoëfficiënt
f_{oc}	:	fractie organisch koolstof in de bodem [-]
K_{oc}	:	evenwichtspartiticoëfficiënt op basis van het organisch koolstofgehalte [l_{water} / kg_{oc}]

De K_{oc} kan voor organische verbindingen benaderd worden door de octanol-water partiticoëfficiënt (Van de Meent, 1993).

$$K_{p,s/l} = f_{oc} \cdot K_{ow} \quad 13$$

Voor een aantal stoffen, zoals pesticiden en zware metalen, is deze methode minder goed toepasbaar. De $K_{p,s/l}$ van deze stoffen wordt niet alleen bepaald door het gehalte organisch materiaal in de bodem maar ook voor een belangrijk deel door het gehalte klei (lutum) en de pH. De dissociatie van pesticiden speelt een belangrijke rol bij de partitie in de bodem.. De $\log K_{ow}$ van pentachloorfenol is bijvoorbeeld sterk afhankelijk van de pH, bij een lage pH (in een zure omgeving) is de dissociatie veel lager dan in een basisch milieu (hoge pH) waardoor pentachloorfenol de neiging heeft om bij lager pH's meer aan het organisch materiaal in de bodem te hechten. Andere stoffen hechten sterk aan de kleifractie in de bodem zoals de pesticide diquat-dibromide en zware metalen.

De octanol-water partiticoëfficiënt is voor stoffen met een lage K_a -waarde of een lage K_b -waarde sterk afhankelijk van de pH. De relatie tussen de octanol-water partiticoëfficiënt en de pH wordt beschreven met de vergelijkingen **14** en **15** (Struijs, 1996):

$$pK_a: \quad K_{ow}(pH) = \frac{K_{ow}(pH_0)}{1 + 10^{pH + \log K_a}} \quad 14$$

$$pK_b: \quad K_{ow}(pH) = \frac{K_{ow}(pH_0)}{1 + 10^{pK_w + \log K_b - pH}} \quad 15$$

hierin is:

K_a	:	dissociatieconstante van een zuur
K_b	:	dissociatieconstante van een base
K_w	:	dissociatieconstante van water
$K_{ow}(pH)$:	octanol-water partiticoëfficiënt bij een bepaalde pH
$K_{ow}(pH_0)$:	octanol-water partiticoëfficiënt voor de niet gedissocieerde vorm.

2.3.2 zware metalen en arseen

De evenwichtspartitieconstante voor zware metalen in de bodem wordt bepaald door een aantal bodemkarakteristieken. Janssen et al. (1996) onderzochten de relatie tussen een aantal bodemkarakteristieken en de in het veld gemeten $K_{p,s/l}$ -waarden. De significante bodemkarakteristieken verschillen van metaal tot metaal. De onderzochte bodemkarakteristieken zijn o.a. amorf Fe- en Al-gehalten, het lutumgehalte, organisch stof gehalte, de pH en de kation uitwisselingscapaciteit (CEC).

De in het veld gemeten partitieconstanten zijn bepaald door middel van het meten van de metaal concentraties in het poriewater en de concentraties op basis van vaste stof.

De bodemkarakteristieken die in de meeste gevallen bij de terrestrische toxiciteitsexperimenten worden opgegeven zijn: de pH het organisch stof gehalte, het klei gehalte en de CEC. Aan de hand van de door Janssen et al. (1996) opgestelde regressievergelijkingen (Tabel 2.2) voor het verband tussen de veldgemeten $K_{p,s/l}$'s en pH, organisch stof en klei kan de experimentele $K_{p,s/l}$ worden berekend. De gemeten terrestrische NOEC's op basis van drogestofgehalten worden met de berekende experimentele $K_{p,s/l}$'s omgerekend naar concentraties in het porievocht.

Tabel 2.2: regressievergelijkingen voor in het veld gemeten log K_p 's met pH-CaCl₂ en log-getransformeerde organische stof (OS) en Klei-gehalten. (overgenomen uit Janssen et al., 1996)

	R^2_{adj}	Significante bodemkarakteristieken	model
Cd	0.70	pH > OS	$0.48 * \text{pH} + 0.71 * (\log \text{OS}) - 0.43$
Cr	0.54	pH	$0.21 * \text{pH} + 2.64$
Cu	0.49	pH	$0.36 * \text{pH} + 0.38$
Ni	0.74	pH > Klei	$0.25 * \text{pH} + 0.57 * (\log \text{Klei}) + 1.00$
Pb	0.6	pH	$0.35 * \text{pH} + 2.05$
Zn	0.85	pH > Klei	$0.45 * \text{pH} + 0.60 * (\log \text{Klei}) - 0.26$

De vaste fase is gedestruerd met geconcentreerd HNO₃ om de metaalconcentraties te bepalen. In de op deze manier verkregen partitiecöëfficiënten is de invloed van de "niet beschikbare fractie" verwerkt.

Bij de beschikbaarheid van metalen speelt mee dat alleen die fractie metalen kan desorberen die ook daadwerkelijk in evenwicht is met de fractie in het poriewater. Metalen die bijvoorbeeld zijn ingebouwd in het kristalrooster van mineralen zijn dus niet uitwisselbaar en dus zowel op korte als lange termijn niet beschikbaar. Om de invloed van de "niet beschikbare fractie" op de K_p te kunnen schatten moet onderzocht worden in hoeverre het aandeel "niet beschikbare metalen" bijdraagt aan het totaal aan metalen in de bodem. Op dit moment is het nog niet geheel duidelijk welke rol de fractie "niet beschikbaar" speelt bij de partitie van de zware metalen (Janssen et al., 1996).

2.4 Achtergrondconcentraties

De berekende PAF's zijn gebaseerd op het totale gehalte van de stof in de bodem. Een aantal stoffen is van nature aanwezig in het milieu. PAK's (Polycyclische Aromatische Koolwaterstoffen) en zware metalen komen van nature voor in de bodem. Voor metalen speelt de natuurlijke achtergrondconcentratie een belangrijke rol. Voor PAK's speelt de natuurlijke achtergrondconcentratie geen rol vergeleken met de door antropogene emissies veroorzaakte concentraties (RIVM, 1996). Er is aangenomen dat dit eveneens geldt voor de achtergrond concentraties van zware metalen en PAK's in oppervlaktewateren. De in deze paragraaf beschreven methode voor het verdisconteren van de achtergrondconcentraties staat uitvoeriger beschreven in Klepper en Van de Meent (1997).

Bodemorganismen ondervinden wel degelijk effect van de van nature aanwezige metalen. De bodemflora en -fauna heeft zich echter in de loop van de tijd weten aan te passen aan de van nature aanwezige metalen. Het is daarom zinvol om een onderscheid te maken tussen de van nature aanwezige concentraties en de door antropogene invloeden veroorzaakte verhoogde concentratie.

Het berekende totale effect wordt daartoe gecorrigeerd voor het van nature aanwezige effect op bodemorganismen. Effecten corrigeren is niet hetzelfde als het corrigeren van concentraties omdat het verband tussen concentratie en effect niet lineair is (figuur 2.1). Het effect dat door antropogene invloeden wordt veroorzaakt is het verschil tussen het totale effect en het van nature aanwezige effect. Deze fractie wordt vervolgens gecorrigeerd voor de fractie van de soorten die geen effect ondervinden van de van nature aanwezige beschikbare concentraties. Het idee van de antropogene PAF of de toegevoegde PAF zoals beschreven kan in een vergelijking als volgt worden weergegeven:

$$PAF_{antropogeen} = \frac{PAF_{totaal} - PAF_{achtergrond}}{1 - PAF_{achtergrond}} \quad 16$$

De achtergrondconcentraties van zware metalen en arseen verschillen per bodemtype, afhankelijk van de bodemeigenschappen. Lexmond en Edelman (1992) hebben dit verband gemodelleerd voor zeven zware metalen en arseen (Tabel 2.3). Met de regressie-vergelijkingen kan het achtergrondgehalte van de metalen worden geschat aan de hand van het klei-gehalte in de bodem. Indien het organisch stof gehalte in de bodem $\geq 25\%$ dan wordt tevens het organisch materiaal gehalte in de regressievergelijkingen meegenomen (Lexmond en Edelman, 1992). De geschatte achtergrondgehalten, weergegeven als concentraties in de vaste fase, worden vervolgens omgerekend naar porievochtconcentraties met de vergelijkingen van Janssen et al. (1996). Hiermee wordt dan de PAF, behorende bij de achtergrondconcentraties, berekend.

Het concept van de toegevoegde PAF en de biobeschikbaarheid van zware metalen in de bodem zal in hoofdstuk 4 worden uitgewerkt aan de hand van de geselecteerde zware metalen en arseen.

Tabel 2.3: Regressie vergelijkingen voor de achtergrondconcentraties van zware metalen en arseen in de bodem volgens Lexmond en Edelman (1992). De aan klei gerelateerde fractie is de van nature aanwezige concentratie. Klei is de kleifractie [-], O.M.[-] is de fractie organisch materiaal, M is het metaalgehalte in de bodem [mg/kg_{d.s.}]

M = a + b * Klei voor O.M. < 25%				
M = a + b * Klei + c + d * O.M. voor O.M. $\geq 25\%$				
coëfficiënten				
	a	b	c	d
As	3.0	0.37	7.6	0.003
Cd	0.18	0.0047	-0.14	0.016
Cr	21	2.05	-10	0.09
Cu	1.4	0.58	9.3	0.003
Hg	0.05	0.0017	0.05	0.0007
Ni	-0.4	0.91	-5.5	0.11
Pb	17	0.75	0.05	0.9
Zn	17	2.66	-35	1.19

3 INVOERGEGEVENS

3.1 Stofeigenschappen

De verspreiding van in het milieu voorkomende microverontreinigingen wordt mede bepaald door de eigenschappen van de stoffen. Het SimpleBox 2.0 model gebruikt een aantal algemene stofeigenschappen zoals de dampdruk, de octanol-water partiticoëfficiënt en de oplosbaarheid in water. De voor de berekeningen gebruikte stofeigenschappen van de 11 geselecteerde stoffen uit de lijst van prioritaire stoffen (Slooff, 1994) zijn samengevat in Tabel 3.4. De stofeigenschappen zullen in het kort worden besproken.

3.1.1 Organische stoffen

Moleculair gewicht en smeltpunt

Het moleculair gewicht van veel organische verbindingen wordt gegeven door Weast (1985). Ook het smeltpunt van de stoffen kan in Weast (1985) gevonden worden. Er worden soms verschillende waarden voor deze parameter gevonden, maar de gevonden smeltpunten verschillen niet meer dan maximaal 5 °C.

Octanol-water partiticoëfficiënt

Afhankelijk van de meetmethode worden er verschillende waarden voor de log K_{ow} gevonden. Indien er grote verschillen zijn tussen de gerapporteerde octanol-water partiticoëfficiënten worden de log P^* (=log K_{ow}) waarden uit MedChem (1996) gebruikt.

Benzeen

GDC (1988) geeft een waarde voor benzeen van 2.10. IUCLID (1995) geeft een marge voor de log K_{ow} van 1.56-2.15. Medchem (1996) geeft een waarde van **2.14**.

Benzo[a]pyreen (B[a]p)

Schwarzenbach et al. (1993) rapporteren een log K_{ow} van 6.5 voor benzo[a]pyreen. In ATSDR (1990) wordt een log K_{ow} gemeld van **6.06**. Kalf et al. (1996) melden een beste schatting (log P^*) van 5.97.

Dibutylftalaat (DBP)

Mackay (1995b) en Howard (1989a) melden 4.72 als de log-waarde voor de octanol-water partiticoëfficiënt van dibutylftalaat. Schwarzenbach et al. (1993) rapporteren een licht afwijkende waarde van 4.57.

Diethylhexylftalaat (DEHP)

Grote verschillen in de octanol-water partiticoëfficiënt worden gevonden voor DEHP. Verbruggen et al. (1996) vermelden een waarde voor de $\log K_{ow}$ van 7.45, bepaald volgens de "slow stirring method". Howard (1989a) geeft een veel lagere waarde op, $\log K_{ow} = 5.11$.

Dioxinen (2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-*p*-dioxine)

Slooff et al. (1993) geven een $\log K_{ow}$ -waarde van 6.8 op. De octanol-water partiticoëfficiënt gegeven door Schwarzenbach et al. (1993) en de $\log P^*$ -waarde zijn respectievelijk 6.64 en 6.42.

Fluorantheen

Zowel HCD (1996) als Schwarzenbach et al. (1993) geven voor de logaritmische waarde van de octanol-water partiticoëfficiënt 5.22 op voor fluorantheen.

Hexachloorbenzeen (HCB)

Waarden voor de $\log K_{ow}$ van hexachloorbenzeen worden gevonden in de range van 5 tot 6.92 (Slooff (1991); IUCLID (1995) en Schwarzenbach et al. (1993)). De geselecteerde waarde is de $\log P^*$ (5.73) van MedChem (1996).

Polychloorbifenylen (PCB's)

PCB's staat voor een grote groep bifenyl verbindingen die in meer of mindere mate zijn gechloroerd. PCB's is hier als één stof behandeld met voor PCB's gemiddelde stoffeigenschappen. De stoffeigenschappen zijn berekend uit de eigenschappen van de verschillende PCB-congeneren. De berekende eigenschappen kunnen gezien worden als de gemiddelde stoffeigenschappen van PCB's. De $\log K_{ow}$ is berekend als het gemiddelde van 17 congeneren waarvan de waarden gegeven zijn door Miller et al. (1985).

Pentachloorfenol (PCP)

De octanol-water partiticoëfficiënt van pentachloorfenol is pH afhankelijk. Boven pH 5 neemt de octanol-water partiticoëfficiënt sterk af. De afname van de octanol-water partiticoëfficiënt wordt veroorzaakt door de sterk stijgende water oplosbaarheid ten gevolge van dissociatie vanaf pH 5, pK_a van pentachloorfenol is 4.74. De waarde voor de octanol-water partiticoëfficiënt gebaseerd op de niet gedissocieerde vorm, $\log K_{ow} = 5.12$ komt overeen met de waarde bij $pH \leq 4$ (Slooff et al., 1991). De $10 \log$ van de octanol-water partiticoëfficiënt bij een $pH = 7$ is gelijk aan 2.82. Om de $K_{p,s/l}$ voor de bodem te bereken is de $\log K_{ow}$ bij $pH = 5$ (4.67) gebruikt om de $K_{p,s/l}$ voor de bodem te bereken. De pH van de gemiddelde Nederlandse bodem ligt rond de pH 5 (Klepper, 1997). Voor berekeningen betreffende het compartiment oppervlaktewateren is de K_{ow} bij $pH = 7$ gebruikt.

Toluëen

Uit de beste schatting van de $\log K_{ow}$ volgens MedChem (1996) volgt een waarde van 2.73. Schwarzenbach et al. (1993) rapporteert een waarde van 2.79. Slooff et al. (1988) geven een lagere waarde 2.45

Trichloorbenzenen (TCB's)

De waarden van de log K_{ow} voor de trichloorbenzenen verschillen onderling weinig en liggen rond de waarde 4. Schwarzenbach et al. (1993) en GDC (1989) rapporteert een log K_{ow} voor 1,3,5 trichloorbenzeen van 4.02. Howard (1989a,b/1993) geeft een hogere waarde van 4.49. De log K_{ow} voor 1,2,3-TCB bedraagt 4.04 (GDC, 1987). Een beste schatting voor de log K_{ow} is 4.14 (MedChem, 1996). De log K_{ow} van 1,2,4-trichloorbenzeen heeft zoals gezegd een waarde van ongeveer dezelfde grootte. De laagste waarde wordt gegeven door GDC (1987). De hoogste waarde 4.02 wordt gegeven door Howard (1989a,b). Een tussen liggende waarde 4.00 vindt men in Schwarzenbach et al. (1993).

Tabel 3.1: log K_{ow} waarden voor de 12 geselecteerde stoffen bij 20-25 °C. De vetgedrukte waarden zijn gebruikt.

	ref 1	ref 2	ref 3	ref 4	ref 5	ref 6	ref 7	ref 8	ref 9
Benzeen	2.10	1.56-2.15	2.13						2.14
B[a]p			6.5						5.97
DBP			4.57	4.72	4.72				4.72
DEHP					5.22	7.45			7.45
Dioxinen			6.64				6.8		6.42
Fluorantheen			5.22						5.22
HCB		5-6.92	5.5				5.4		5.73
PCB's								6.14	
PCP				5.05			5.1		5.12
Tolueen			2.69				2.45		2.73
1,2,3-TCB	4.04						3.8		4.14
1,2,4-TCB	3.98		4.00		4.02		3.9		4.02
1,3,5-TCB	4.02		4.02		4.49		4.0		4.19
Ref:	1:	GDC (1987, 1988, 1989)							
	2:	IUCLID (1995)							
	3:	Schwarzenbach et al. (1993)							
	4:	Mackay (1995b)							
	5:	Howard (1991 a/b, 1990)							
	6:	Verbruggen et al. (1996)							
	7:	Basis Documenten Slooff (1991)							
	8:	Miller et al. (1985)							
	9:	log P* waarden uit de MedChem database (Medchem, 1996)							

*Oplosbaarheid in water***Benzeen**

Benzeen heeft vergeleken met andere apolaire organische verbindingen een hoge oplosbaarheid. De gebruikte oplosbaarheid in water van **1770 mg/l** staat gerapporteerd in GDC (1988). IUCLID (1995) vermeldt een oplosbaarheid van 1800 mg/l.

Benzo[a]pyreen

PAK's hebben over het algemeen een vrij lage oplosbaarheid met uitzondering van naphhtaleen en phenanthreen. De geselecteerde oplosbaarheid van benzo[a]pyreen bij 25 °C is $3.8 \cdot 10^{-3}$ mg/l (ATSDR, 1990). Schwarzenbach et al. (1993) vermeldt een oplosbaarheid van $1.5 \cdot 10^{-3}$ mg/l.

Diethylhexylftalaat

De ftalaten met een hoog molecuulair gewicht zoals DEHP zijn eveneens slecht in water oplosbare stoffen. Verbruggen et al. (1996) vermelden een gemeten oplosbaarheid van DEHP van $7.2 \cdot 10^{-4}$ mg/l. De onzekerheid in deze parameter is voor DEHP groot. Onder natuurlijke omstandigheden kan de oplosbaarheid van DEHP oplopen tot 0.5 mg/l. Howard (1989a) rapporteert een oplosbaarheid van 0.3 mg/l.

Dibutylftalaat

De oplosbaarheid van ftalaten met een lager molecuulair gewicht is enkele ordes van grootte hoger. Mackay (1995) en Howard (19891) geven een oplosbaarheid voor dibutylftalaat van 11.2 mg/l. Schwarzenbach et al. (1993) geeft een oplosbaarheid van 9.43 mg/l.

Dioxinen

De oplosbaarheid van dioxinen en dibenzofuranen is over het algemeen vrij laag. Slooff et al. (1993) rapporteren een laagste oplosbaarheid van 2,3,7,8-Dibenzo-*p*-dioxine van $7.91 \cdot 10^{-6}$ mg/l en een hoogste oplosbaarheid van $2.00 \cdot 10^{-5}$ mg/l. Schwarzenbach et al. (1993) en de Aster database (ASTER, 1994) geven waarden van respectievelijk $1.61 \cdot 10^{-5}$ en $7.05 \cdot 10^{-6}$ mg/l.

Fluorantheen

Fluorantheen heeft volgens Schwarzenbach et al. (1993). een oplosbaarheid van 0.243 mg/l. Mackay (1992b) vermeldt oplosbaarheden in de range van 0.166 tot 1.43 mg/l.

Hexachloorbenzeen

Hexachloorbenzeen heeft een oplosbaarheid van ongeveer 6 µg/l. Schwarzenbach et al. (1993), IUCLID (1995) en Slooff et al. (1991) geven respectievelijk waarden op van 5.8, 7.0 en 5.0 µmg/l.

PCB's

De oplosbaarheid van de gemiddelde PCB is geschat als het gemiddelde 59 congenere. De oplosbaarheid in water van deze 59 congenere worden gegeven door Opperhuizen et al. (1988).

Pentachloorfenol

Zoals gezegd is de oplosbaarheid van pentachloorfenol sterk afhankelijk van de pH (zie Slooff et al., 1991). De aan Mackay (1995a, 1995b) ontleende waarde is gebaseerd op de oplosbaarheid bij een pH 7. Bij de berekeningen voor het compartiment oppervlaktewateren wordt er vanuit gegaan dat pentachloorfenol in de gedissocieerde vorm voorkomt. De oplosbaarheid bij pH-waarden ≤ 4 is veel lager, 0.0842 mg/l. (Slooff et al., 1991 en ASTER, 1994)

Tolueen

De oplosbaarheid van tolueen in water heeft een waarde van 518 mg/l volgens de ASTER (1994) en Schwarzenbach et al. (1993). Slooff et al. (1988) geven een vergelijkbare waarde, 515 mg/l (20 °C).

Trichloorbenzenen

De oplosbaarheid van zowel 1,2,4-TCB als 1,3,5-TCB zijn overgenomen uit Schwarzenbach et al. (1993) respectievelijk 40.6 en 5.0 mg/l. De geselecteerde oplosbaarheid van 1,2,3-TCB is 12.2 mg/l (GDC, 1987).

Tabel 3.2: Oplosbaarheid van de geselecteerde stoffen [mg/l] bij 20-25 °C. De vetgedrukte waarden zijn gebruikt, zie eveneens de tekst.

	ref 1	ref 2	ref 3	ref 4	ref 5	ref 6	ref 7	ref 8
Benzeen	1789	1791	1800					1789
B[a]p	$1.5 \cdot 10^{-3}$							$3.8 \cdot 10^{-3}$
DBP	9.43	11.2		11.2				5.12
DEHP		0.3				$7.2 \cdot 10^{-4}$		$1.78 \cdot 10^{-4}$
Dioxinen	$1.61 \cdot 10^{-5}$				$7.9 \cdot 10^{-6}$			$7.05 \cdot 10^{-6}$
Fluorantheen	0.243			0.17				0.243
HCB	$5.8 \cdot 10^{-3}$	$6.2 \cdot 10^{-3}$	$7 \cdot 10^{-3}$		$5 \cdot 10^{-3}$			$4.6 \cdot 10^{-3}$
PCB's							$2.14 \cdot 10^{-3}$	
PCP	12	14		14	$8.4 \cdot 10^{-2}$			$8.4 \cdot 10^{-2}$
Tolueen	518				515*			518
1,2,3-TCB	12.2							12.3
1,2,4-TCB	40.6							45.4
1,3,5-TCB	5.0							4.2

* bij 20 °C

Ref	1:	Schwarzenbach et al. (1993)
	2:	Howard
	3:	IUCLID (1995)
	4:	Mackay (1995)
	5:	Slooff et al. (1991)
	6:	Verbruggen et al. (1996)
	7:	Opperhuizen et al. (1988)
	8:	Aster database (ASTER, 1994)

Dampdruk

De dampdrukken van de meeste geselecteerde stoffen zijn vrij laag. Met uitzondering van benzeen en toluen en in mindere mate de TCB's.

Benzeen

De laagste in de doorgenomen literatuur gevonden dampdruk voor benzeen, 9960 Pa wordt genoemd in GDC (1988). Hogere dampdrukken worden vermeld in Schwarzenbach et al. (1993) en IUCLID (1995), respectievelijk 12760 en 12690 Pa.

Benzo[a]pyreen

De geselecteerde dampspanning $7.47 \cdot 10^{-7}$ bij 25 °C van benzo[a]pyreen is overgenomen uit ATSDR(1990). Schwarzenbach et al. (1993) en Kalf et al., (1996) melden een dampdruk van $7.0 \cdot 10^{-7}$ Pascal.

Dibutylftalaat

De geselecteerde dampdruk van dibutylftalaat bij 25 °C is overgenomen uit Mackay (1995b) en Howard (1989a). Schwarzenbach et al. (1993) rapporteren een hogere dampspanning van $9.68 \cdot 10^{-3}$ Pascal bij 25 °C.

Diethylhexylftalaat

Howard (1989a) vermeldt een dampspanning van $8.6 \cdot 10^{-4}$ Pascal voor DEHP. Deze waarde komt overeen met de dampspanning overgenomen uit Verbruggen et al. (1996).

Dioxinen (2,3,7,8-tetrachloordibenzo-p-dioxine)

Slooff et al. (1993) geven voor de dampspanning van de vaste stof waarden in de range van $9.8 \cdot 10^{-8}$ - $4.5 \cdot 10^{-6}$ Pa. Schwarzenbach et al. (1993) geven een waarde voor de dampspanning van de vaste stof van $2.54 \cdot 10^{-7}$ Pa. De dampspanning uit de ASTER (1994) ligt een factor 10 hoger dan de laagste waarde uit Slooff et al. (1993), $9.22 \cdot 10^{-7}$ Pa.

Fluorantheen

De "Hazardous Chemicals Database" (HCD, 1996) geeft voor fluorantheen een dampspanning van $1.33 \cdot 10^{-3}$ Pascal bij 20 °C. Schwarzenbach et al. (1993) en Kalf et al. (1996) vermelden een dampspanning van $1.25 \cdot 10^{-3}$ Pascal bij 25 °C.

Hexachloorbenzeen

De dampspanning van hexachloorbenzeen loopt uiteen van $1.50 \cdot 10^{-3}$ Pascal (Slooff et al., 1991) tot $2.4 \cdot 10^{-3}$ Pascal (Ballschmitter et al., 1993). De gekozen dampspanning ligt binnen die range en is overgenomen uit Schwarzenbach et al. (1993).

PCB's

De gemiddelde dampspanning van PCB's is gebaseerd op de dampspanning van 14 PCB-congeneren (Schwarzenbach et al., 1993)

Pentachloorfenol

De dampspanning voor pentachloorfenol is gebaseerd op de dampspanning gerapporteerd in Mackay en Lee (1995a) en bedraagt $4.15 \cdot 10^{-3}$. Slooff et al. (1991) rapporteren een dampdruk van $1.3 \cdot 10^{-2}$ Pascal.

Tolueen

Gemeten dampdrukken voor tolueen lopen uiteen van 2933 Pa bij 20 C (Slooff et al., 1988) tot 3786 Pa bij 25 °C (Aster database) en 3852 Pa bij 25 °C (Schwarzenbach et al., 1993)

Trichloorbenzenen

De dampspanningen van de TCB's lopen wat uiteen. De laagst gevonden waarde voor de dampspanning van 1,2,4-TCB, 38.66 Pa, is overgenomen uit Howard (1990a?/b). Een bijna twee maal zo hoge waarde werd gevonden in Schwarzenbach et al. (1993), 62.5 Pa. De in de literatuur gevonden waarden voor de dampspanningen van 1,3,5-TCB lopen uiteen van 24 (GDC, 1989) tot 77.06 Pa (Howard, 1990a?/b). In GDC (1987) staat een dampspanning van 17.3 Pa voor 1,2,3-TCB gerapporteerd.

Tabel 3.3: Dampdruk [Pa] bij 20-25 °C. De gebruikte waarden zijn vetgedrukt, zie ook tekst.

	ref 1	ref 2	ref 3	ref 4	ref 5	ref 6
Benzeen	12760	12691	9960		10000	12692
Benzo[a]pyreen	$7.00 \cdot 10^{-7}$				$7.33 \cdot 10^{-7}$	$8.61 \cdot 10^{-11}$
Dibutylftalaat	$9.68 \cdot 10^{-7}$	$1.86 \cdot 10^{-3}$			1.33	$1.60 \cdot 10^{-1}$
Diethylhexylftalaat		$8.60 \cdot 10^{-4}$			176	$1.91 \cdot 10^{-2}$
Dioxinen	$2.54 \cdot 10^{-7}$			$9.80 \cdot 10^{-8}$		$9.22 \cdot 10^{-7}$
Fluorantheen	$1.20 \cdot 10^{-3}$				$1.33 \cdot 10^{-3}$	$1.26 \cdot 10^{-4}$
HCB	$2.00 \cdot 10^{-3}$	$2.53 \cdot 10^{-3}$		$1.50 \cdot 10^{-3}$	$1.47 \cdot 10^{-3}$	$5.80 \cdot 10^{-4}$
PCB's	$9.35 \cdot 10^{-3}$					
PCP		$1.47 \cdot 10^{-2}$		$2.00 \cdot 10^{-3}$	$1.47 \cdot 10^{-2}$	$2.43 \cdot 10^{-4}$
Tolueen	3852			2933		3786
1,2,3-TCB			17.30	28		19.73
1,2,4-TCB	62.50	38.66	45.30	61	133.32	38.80
1,3,5-TCB	32.8	77.06	24.00	28		32.26

Ref	1:	Schwarzenbach et al. (1993)
	2:	Howard
	3:	GDC
	4:	Slooff et al. (Basisdocumenten)
	5:	Hazardous Chemicals Database HCD (1996) (dampdruk bij 20 °C)
	6:	ASTER (1994)

Henry coëfficiënt

De evenwichtsverdeling van een stof tussen een vloeistoffase en een gasfase wordt beschreven met de Henry coëfficiënt. De Henry coëfficiënt geeft de verhouding weer tussen de concentratie in de gasfase en de concentratie in de vloeistoffase. De temperatuursafhankelijkheid van de Henry coëfficiënt wordt beschreven met de van 't Hoff vergelijking (1).

$$d \ln K_h / dT = \Delta H / RT^2 \quad 17$$

Voor de temperatuursafhankelijkheid van de vervluchtiging vanuit de oplossing naar de gasfase is de enthalpie voor vervluchtiging (ΔH_{henry}) nodig. ΔH_{henry} kan experimenteel worden bepaald of kan berekend worden uit de verdampingswarmte en de oplossingswarmte $\Delta H_{\text{henry}} = \Delta H_{\text{vap}} - \Delta H_{\text{sol}}$ (Ten Hulscher et al., 1992). De verdampingswarmte en de oplossingswarmte moeten wel betrekking hebben op dezelfde fase e.g. vloeistoffase (onderkoelde vloeistof) of vaste fase. Ten Hulscher et al. (1992) hebben de temperatuursafhankelijkheid van de Henry coëfficiënt onderzocht voor een aantal aromatische koolwaterstoffen. De gemeten vervluchtigingsenthalpie voor benzo[a]pyreen en fluorantheen en hexachloorbenzeen zijn respectievelijk 39 kJ/mol, 57 kJ/mol en 49 kJ/mol. Daarnaast hebben zij de vervluchtigingsenthalpie voor een aantal PCB's bepaald. ΔH_{henry} bedraagt ongeveer 60 kJ/mol voor de meeste PCB's (Ten Hulscher et al., 1992). De vervluchtigingsenthalpie voor benzeen, toluen en 1,2,4-TCB is berekend uit de experimentele waarden van de Henry coëfficiënt bij verschillende temperaturen (Ashworth et al., 1988) volgens een Van 't Hoff plot. De berekende waarde voor de ΔH_{henry} van benzeen is 26.6 kJ/mol, voor toluen 26.59 kJ/mol en voor 1,2,4-TCB 33.5 kJ/mol. Volgens Verbruggen et al. (1996) bedraagt de vervluchtigingsenthalpie voor DEHP 84 kJ/mol, berekend aan de hand van de verdampingsenthalpie 94 kJ/mol en de oplossingsenthalpie 10 kJ/mol.

Het SimpleBox model rekent niet rechtstreeks met de vervluchtigingsenthalpie, deze wordt berekend uit de verdampingsenthalpie en de oplossingsenthalpie. De parameters worden gebruikt om de dampdruk en de oplosbaarheid in water bij de omgevingstemperatuur (12 °C) te berekenen.

Verdampingsenthalpie

De verdampingsenthalpie van benzeen is 31 kJ/mol Schwarzenbach et al. (1993), dit is ongeveer gelijk aan de verdampingsenthalpie bij het kookpunt 33.85 kJ/mol (Weast, 1985). De verdampingsenthalpie van HCB is 68 kJ/mol voor de onderkoelde vloeistof terwijl deze voor de vaste stof 64 kJ/mol is (Ten Hulscher et al., 1992). De verdampingsenthalpie bij het kookpunt van hexachloorbenzeen is 63 kJ/mol. De verdampingsenthalpie van PCB's is gelijkgesteld aan 96 kJ/mol, de gemiddelde waarde van drie congenere (Verbruggen et al., 1996). Op basis van dampdrukken bij drie temperaturen (Verschuere, 1983) is via een van 't Hoff plot de verdampingsenthalpie voor toluen berekend op 38.7 kJ/mol. Indien de verdampingsenthalpie niet bekend of gevonden is, dan wordt verdampingsenthalpie bij het kookpunt als indicatiewaarde gebruikt. De verdampingsenthalpie bij kooktemperatuur van pentachloorfenol is 70 kJ/mol (Weast, 1985). Voor 1,2,3-TCB, 1,2,4-TCB en 1,3,5-TCB is deze respectievelijk 47.5, 47.8 en 46.9 kJ/mol (Weast, 1985). De verdampingsenthalpie bij het kookpunt (ΔH_{vap}) kan indien niet bekend, berekend worden uit de verdampingsentropie (ΔS_{vap}) volgens vergelijking (2). Bij het kookpunt zijn beide fasen in evenwicht, de verdampingsenthalpie kan nu als volgt worden berekend:

$$\Delta H_{\text{vap}} (T_b) = \Delta S_{\text{vap}} (T_b) \cdot T_b \text{ [J/mol]} \quad 18$$

De verdampingsentropie bij kooktemperatuur wordt geschat volgens de vergelijking van Kistiakowsky (Schwarzenbach et al., 1993) .

$$\Delta S_{\text{vap}} (T_b) = (36.6 + R \ln T_b) \text{ [J/mol/K]} \quad 19$$

Deze vergelijking levert goede resultaten op voor apolaire verbindingen. De grootste afwijkingen worden gevonden voor polaire verbindingen. Fishtine heeft een set van correctiefactoren K_F opgesteld als functie het moleculair dipoolmoment van de verbinding.

$$\Delta S_{\text{vap}} (T_b) = K_F(36.6 + R \ln T_b) \text{ [J/mol/K]} \quad 20$$

Uit het berekende moleculaire dipoolmoment van dibutylftalaat (0.621 debye) en het kookpunt (340 °C) en toepassing van K_F ($= 1 + \mu/100$) volgt een verdampingsenthalpie van 58.6 kJ/mol. Hierbij dient opgemerkt te worden dat het moleculaire dipoolmoment van dibutylftalaat eigenlijk elke waarde kan aannemen omdat het een zeer flexibel molecuul is. Schwarzenbach et al. (1993) geven voor de verdampingsenthalpie van dibutylftalaat 82 kJ/mol op. De verdampingsenthalpie van benzo[a]pyreen is ook met deze methode geschat. De K_F -waarde voor benzo[a]pyreen is gelijk aan 1 (apolair). Het kookpunt van benzo[a]pyreen is 396 °C. De berekende verdampingsenthalpie van benzo[a]pyreen bedraagt dan 70.5 kJ/mol. De volgens de methode van Fishtine en Kistiakowsky berekende verdampingsenthalpie voor 2,3,7,8 tetrachlorodibenzo-*p*-dioxine is gelijk aan 66 kJ/mol. De verdampingsenthalpie van fluorantheen is berekend uit de vervluchtigingsenthalpie en de oplossingsenthalpie.

Oplossingsenthalpie

De oplossingsenthalpie is voor benzeen, toluen, hexachloorbenzeen en benzo[a]pyreen berekend uit de verdampingsenthalpie en de vervluchtigingsenthalpie volgens $\Delta H_{\text{henry}} - \Delta H_{\text{vap}} = \Delta H_{\text{sol}}$. Voor dibutylftalaat is de oplossingswarmte gelijk gesteld aan die van diethylhexylftalaat. Voor PCB's is de gemiddelde waarde van vier congenen genomen 37 kJ/mol (Ten Hulscher et al., 1992). De oplossingsenthalpie van fluorantheen is berekend uit de gegevens van May en Wasik, (1978). De oplosbaarheid van pentachloorfenol bij verschillende temperaturen (Verschueren, 1983) is gebruikt om de oplossingsenthalpie voor pentachloorfenol te berekenen op 30.2 kJ/mol. Doucette en Andren (1988) hebben onder andere de oplosbaarheid van 4 dioxine congenen en 3 furan congenen bij verschillende temperaturen onderzocht. Het gemiddelde (48.7 kJ/mol) van de door Doucette en Andren berekende oplossingenthalpie van deze dioxinen en furanen is gebruikt als de oplossingsenthalpie voor dioxinen. De oplossingsenthalpie van 1,2,3-TCB en 1,3,5-TCB is gelijk gesteld aan de oplossingsenthalpie van 1,2,4-TCB ($= \Delta H_{\text{henry}} - \Delta H_{\text{vap}} = \Delta H_{\text{sol}} = 14$ kJ/mol).

Tabel 3.4: Gebruikte stoffeigenschappen van de geselecteerde stoffen.

Stofnaam	MW [g/mol]	T _m [°C]	log K _{ow} [-] bij 25 C°	S [mg/l] bij 25 C°	P _{vap} [Pa] bij 25 C°	H/R _T [-] bij 25 C°	ΔH _{Henry}	t _{1/2} _bodem [dagen]	t _{1/2} _water [dagen]	t [dagen]	t _{1/2} _OH [dagen]
Benzeen	78.1	5.5	2.14	1.77·10 ³	1.27·10 ⁴	2.22·10 ⁻¹	26.6	70	22	365	8
B[a]p	252.3	179.0	6.06	3.80·10 ⁻³	7.47·10 ⁻⁷	4.97·10 ⁻²	39.0	290	5	586	0.05
DBP	278.3	-35.0	4.72	1.12·10 ¹	1.87·10 ⁻³	5.27·10 ⁻⁵	77.2	32	15	14	0.77
DEHP	390.5	-50.0	7.45	7.20·10 ⁻⁴	8.60·10 ⁻⁴	2.96·10 ⁻²	84.0	44	11	215	0.69
Dioxinen	322	305	6.42	7.91·10 ⁻⁶	2.54·10 ⁻⁷	1.35·10 ⁻³	17.3	614	600	333	21
Fluorantheen	202.3	110.8	5.22	2.43·10 ⁻¹	1.25·10 ⁻³	4.28·10 ⁻⁴	57.0	113	7	280	0.46
HCB	284.8	230.0	5.73	5.80·10 ⁻³	2.00·10 ⁻³	6.18·10 ⁻²	49.8	1000	1529	6116	860
PCB's	303.3	100.7	6.14	2.14·10 ⁻³	9.35·10 ⁻³	1.02·10 ⁻²	60.0	1.8·10 ⁶	1095	465	69
PCP	266.3	190.0	5.12	1.40·10 ¹	4.15·10 ⁻³	5.10·10 ⁻⁶	56.8	50	136	240	21
Tolueen	92.1	-95	2.73	518	3786		26.6	29	31	105	4.3
1,2,3-TCB	181.5	53.5	4.14	1.22·10 ¹	1.73·10 ¹	1.24·10 ⁻¹	34.0	229	16	16	23
1,2,4-TCB	181.5	17.0	4.02	4.06·10 ¹	3.87·10 ¹	1.76·10 ⁻¹	33.5	104	28	410	18
1,3,5-TCB	181.5	63.5	4.19	0.50·10 ¹	2.40·10 ¹	4.48·10 ⁻¹	31.1	229	16	708	185

Biotische en abiotische degradatie in water en bodem

De karakteristieken van de bodem en die van de stof bepalen in sterke mate de halfwaarde tijden voor degradatie in de bodem. Dit verklaart niet alleen de verschillen tussen de stoffen maar ook de gevonden verschillen voor één en dezelfde stof. De ranges van de halfwaarde tijden van de verschillende stoffen zullen worden weergegeven. De gebruikte waarde is het geometrisch gemiddelde van de verschillende ranges voor zowel biotische als abiotische degradatie.

Benzeen

Bodem

De gevonden halfwaarde tijden voor de bodem liggen voor benzeen in de range van 5-365 dagen (Mackay, 1992a) volgens Howard (1991a) is de halfwaarde tijd van benzeen in de bodem 70 dagen.

water

Voor oppervlakte wateren liggen de halfwaarde tijden tussen de 5 en 16 dagen (Mackay, 1992a). Volgens Howard (1991a) liggen de halfwaardetijden voor zowel biotische als abiotische afbraak in oppervlaktewateren tussen de 6 en 28 dagen. EHC (1993) rapporteert halfwaarde tijden variërend van 16 tot 28 dagen.

Benzo[a]pyreen

bodem

De gevonden halfwaarde tijd van benzo[a]pyreen bedraagt minimaal 57 en maximaal 545 dagen (Mackay, 1992b). In ATSDR (1990) staat een halfwaarde tijd van 290 dagen vermeld.

water

De halfwaarde tijd van benzo[a]pyreen in oppervlaktewateren is vrij kort, 0.37-1.1 uur gebaseerd op de laboratorium fotolyse snelheidsconstante (Howard, 1991a). In natuurlijke wateren zijn de halfwaarde tijden vaak 20-60 % langer dan de in het laboratorium gemeten waarden omdat benzo[a]pyreen is aan zwevend stof in het water (CWQG, 1985). De halfwaarde tijden voor benzo[a]pyreen in natuurlijke wateren liggen tussen de 2 en 7 dagen (CWQG, 1985).

Fluorantheen

bodem

Halfwaarde tijden voor fluorantheen in de bodem variëren van 44 tot 182 dagen (Mackay, 1992b). Volgens Howard (1991a) liggen de halfwaarde tijden in de range van 140-440 dagen.

water

De gevonden laboratorium halfwaarde tijd in water voor fluorantheen ten gevolge van fotolyse bedraagt 21 tot 63 uren (Howard, 1991a). Dit betekent, rekeninghoudend met binding aan zwevend stof in water, mogelijke halfwaardetijden tussen de 1.5 en 13 dagen liggen. Mackay (1992b) geeft daarentegen hogere halfwaardetijden op tussen 160 en 5 dagen.

Dibutylftalaat

bodem

De gevonden $t_{1/2}$ in de bodem van dibutylftalaat loopt uiteen van 11 to 53 dagen (Mackay, 1995b) Howard rapporteert halfwaardetijden van 2 tot 23 dagen (Howard, 1991a).

water

Voor water is de $t_{1/2}$ 15.4 dagen (Mackay, 1995b) en volgens Howard (1991a) in de range van 1 tot 14 dagen.

Diethylhexylftalaat

bodem

De halfwaarde tijden van diethylhexylftalaat in de bodem ligt tussen de 5 en de 389 dagen afhankelijk van aerobe of anaerobe condities (Howard, 1991a).

water

De halfwaarde tijd in oppervlakte wateren varieert tussen de 5 en 23 dagen Howard (1991a).

Dioxinen

bodem

Slooff et al. (1993) melden halfwaarde tijden voor 2,3,7,8-tertrachloordibenzo-*p*-dioxine uit verschillende studies. De hoogste halfwaarde tijd is 3321 dagen. Verder worden waarden gegeven van 190-330 dagen, van 365 tot 1095 dagen en van 230 tot 320 dagen. Het geometrisch gemiddelde van deze ranges is berekend op 614 dagen.

water

Fotochemische afbraak van 2,3,7,8-TCDD in water in de zomer heeft een halfwaarde tijd van 6 dagen. Biologische afbraak van 2,3,7,8-TCDD in oppervlaktewateren bedraagt 600 dagen (Slooff et al., 1993). Het jaargemiddelde voor de fotochemische afbraak is verondersteld twee maal zo langzaam te zijn als de fotochemische afbraaksnelheid in de zomertijd. Howard (1991a) geeft aan dat fotochemische afbraak van 2,3,7,8-TCDD in de natuurlijke omgeving waarschijnlijk niet significant is. Deze uitspraak is gebaseerd op de waargenomen persistentie van 2,3,7,8-TCDD in het milieu en een hoge $K_{oc} = 2.4 \cdot 10^7$ voor bodemadsorptie.

Hexachloorbenzeen

Bodem

Hexachloorbenzeen is een zeer persistente verbinding. Halfwaarde tijden van 969 tot 2089 dagen in de bodem worden gevonden. (Mackay, 1992a en Howard, 1991a). Slooff et al. (1991) geeft halfwaarde tijden in de bodem van 1 tot 6 jaar.

water

In oppervlakte wateren ligt de gegeven $t_{1/2}$ voor hexachloorbenzeen tussen de 969 en 2089 dagen (Mackay, 1992a en Howard 1991a).

PCB's

bodem

De halfwaardetijden voor PCB's in de bodem en sediment is berekend volgens SimpleBox 2.0 uit de halfwaardetijd van PCB's in water⁵. De halfwaardetijd in oppervlaktewateren is 1095 dagen (Verbruggen et al., 1996). De hieruit berekende halfwaardetijd in de bodem is $1.8 \cdot 10^6$ dagen. Het grote verschil wordt veroorzaakt door de sterke binding van PCB's aan de bodemdeeltjes.

water

De halfwaardetijd in oppervlaktewateren is 1095 dagen (Verbruggen et al., 1996).

Pentachloorfenol

bodem

Gerapporteerde halfwaarde tijden voor pentachloorfenol in de bodem variëren van 7 dagen tot 70 dagen afhankelijk van de bodem condities, aerob of anaerob, (EHC, 1987). Mackay (1995b) geeft halfwaarden op van minimaal 7 dagen tot maximaal 178 dagen.

water

Voor de oppervlaktewateren worden halfwaarde tijden genoemd van 80 tot 192 dagen (EHC, 1987) en van 13 tot 80 dagen (GDC, 1985).

Tolueen

bodem

Slooff et al. (1988) rapporteren halfwaarde tijden in de bodem van 83-92 dagen. Howard (1991a) vermeldt kortere halfwaarde tijden in de bodem, 4 tot 22 dagen. Het geometrisch gemiddelde voor de halfwaarde tijd in de bodem is berekend op 29 dagen.

water

Gerapporteerde halfwaarde tijden variëren van 90 tot 120 dagen (Slooff et al., 1988) tot 4-20 dagen (Howard, 1991a). Het geometrisch gemiddelde is berekend op 31 dagen.

Trichloorbenzenen

bodem

De gevonden halfwaarde tijden van de TCB's in de bodem is voor 1,2,3-trichloorbenzeen en 1,3,5-trichloorbenzeen 229 dagen Mackay (1992a). Voor 1,2,4-trichloorbenzeen zijn halfwaarde tijden gevonden in de range van 28 tot 180 dagen Mackay (1992a).

water

In oppervlaktewateren varieert de halfwaarde tijd voor zowel biotische als abiotische afbraak voor 1,2,3-trichloorbenzeen van 2 tot 30 dagen (Mackay, 1992a). Afbraaksnelheden voor 1,2,4-trichloorbenzeen liggen in de range van 28 tot 180 dagen (Mackay 1992a) en 1.5 tot 28 dagen (Howard, 1989b) voor de $t_{1/2}$. 1,3,5-Trichloorbenzeen heeft een halfwaarde tijd van 18 dagen voor degradatie in het oppervlaktewater (Howard, 1989b). Mackay (1992a) geeft halfwaardetijden van 11 tot 22 dagen voor degradatie in zeewater.

Biotische en abiotische degradatie in sedimenten

De halfwaardetijden tijden voor de stoffen in de sedimenten zijn gebaseerd op aerobe (ondergrens) en anaeroob (bovengrens) condities. De halfwaarde tijden onder anaerobe condities zijn vaak langer dan de halfwaarde tijden onder aerobe condities. De gebruikte waarde is gebaseerd op de berekende gemiddelde halfwaardetijd. De halfwaarde tijden in sediment zijn in Tabel 3.5 weergegeven.

Tabel 3.5: Halfwaardetijden in sediment door biotische en abiotische degradatie.

Stofnaam	$t_{1/2}$ sediment [dagen] gerapporteerd	Referenties	$t_{1/2}$ sediment [dagen] gebruikt
Benzeen	10-720	Howard, 1991a	365
Benzo[a]pyreen	114-1059	Howard, 1991a	586
Dibutylftalaat	2-23	Howard, 1991a	14
Diethylhexylftalaat	42-389	Howard, 1991a	215
Dioxinen	333	Slooff et al., 1993	333
Fluorantheen	280-880	Howard, 1991a	280
Hexachloorbenzeen	3876-8356	Mackay, 1992a	6116
PCB's	465	berekend	465
Pentachloorfenol	240	Mackay, 1995b	240
Tolueen	90-120	Howard, 1991a	105
1,2,3-TCB	16	Mackay, 1992a	16
1,2,4-TCB	112-708	Mackay, 1992a en Howard, 1991a	410
1,3,5-TCB	708	Mackay, 1992a	708

Degradatie in de atmosfeer

De halfwaarde tijden van de stoffen in de atmosfeer is voor alle stoffen gebaseerd op de reactie met atmosferische hydroxylradicalen. Deze reactie is in de meeste gevallen de overheersende en snelheidsbepalende stap in de atmosferische afbraak van organische microverontreinigingen. Reactie met hydroxylradicalen kan onder laboratorium omstandigheden worden gemeten of zoals in de meeste gevallen worden bepaald aan de hand van QSARS, Atkinson (1988), zie Tabel 3.6. De snelheidskonstante voor de afbraak door hydroxylradicalen, k_{OH} -waarden, zijn omgerekende naar halfwaarde tijden ($t_{1/2,OH}$) met een 12 uren gemiddelde concentratie van $1.5 \cdot 10^6$ moleculen/cm³.

Tabel 3.6: Atmosferische halfwaardetijden [dagen] als gevolg van reactie met hydroxyl radicalen. De gebruikte waarden zijn vetgedrukt.

Stof	$t_{1/2_atm\ OH}$ [dagen]	k_{OH} [cm ³ /molecule/s]	$t_{1/2_OH}$ [dagen]	referenties
Benzeen	3-13	$0.8-1.6 \cdot 10^{-12}$	13-7	GDC, 1988
	0.1-1	$1.19-1.45 \cdot 10^{-12}$	9-7	Mackay, 1992a
Benzo[a]pyreen	0.05			ATSDR 1990
	0.02-0.2			Mackay, 1992b
Dibutylftalaat	0.8			Mackay, 1995b
		$8.7 \cdot 10^{-12}$	1.2	ECPI, 1996
Diethylhexylftalaat	0.693			Verbruggen et al., 1996
	0.121-1.21			Mackay, 1995b
		$1.4 \cdot 10^{-11}$	0.76	Verbruggen et al., 1996
Dioxinen	0.93-9.3			Howard et al., 1991a
		$3.3-5.0 \cdot 10^{-13}$	32- 21	Sloof et al., 1993
Fluorantheen	0.0840-0.84			Mackay, 1992b en Howard, 1991a
		$3.31 \cdot 10^{-11}$	0.32	Slooff, 1989
Hexachloorbenzeen	156-1564			Mackay, 1992a
		$2.0 \cdot 10^{-14}$	534	GDC, 1993 en Ballschmitter, 1993
		$1.5 \cdot 10^{-14}$	713	Slooff et al., 1991
PCB's	69			Verbruggen et al., 1996
		$2.9 \cdot 10^{-12}-0.4 \cdot 10^{-12}$	3.6-53	Atkinson, 1987
pentachloorfenol	7			EHC, 1987
	5.8-58			Mackay, 1995
		$1.2 \cdot 10^{-13}$	89	Slooff et al., 1991
Tolueen	4.3			Howard, 1991a
	2.5			Slooff et al., 1988
1,2,3-TCB	23			Mackay, 1992a
		$6.8 \cdot 10^{-14}$	157	Slooff, 1991
1,2,4-TCB	18.8			Howard, 1989b
	17.7	$5.65 \cdot 10^{-13}$	18.9	Dilling et al., 1988
		$8.7 \cdot 10^{-14}$	123	Slooff, 1991
1,3,5-TCB	185			Howard, 1989b
		$5.0 \cdot 10^{-14}$	214	Slooff, 1991

3.1.2 pesticiden

Fysisch chemische eigenschappen

Tabel 3.7: Fysisch-chemische eigenschappen van de geselecteerde pesticiden

	Moleculair gewicht [g/mol] ³	log K _{ow} [-]	Dampdruk [Pa] 20-25 °C	Oplosbaarheid [mg/l] 20-25 °C	Smeltpunt [°C] ⁴	H/RT [-]
2,4-D	221.0	2.81 ¹	1.10E-03 ²	760 ¹	140.5	4.80E-08 ⁵
atrazine	215.7	2.60 ^{1/2}	4.00E-05 ¹	30	175.8	1.20E-07 ¹
azinphos-methyl	317.3	2.75 ²	1.00E-06 ²	27.5 ^{1/2}	73.5	3.06E-08 ⁵
bentazon	240.3	0.62 ³	1.70E-04 ²	500 ^{1/2}	138	2.00E-13 ¹
carbendazim	191.2	1.52 ²	1.00E-06 ²	7.5 ²	304.5	1.03E-08 ⁶
dichlorvos	221.0	1.90 ³	1.60E+00 ¹	10000 ²	5.0	1.81E-05 ⁶
diquat-dibromide	344.1	3.77 ^{1*}	1.00E-05 ¹	718000 ¹	300.0	1.93E-12 ⁶
diuron	233.1	2.82 ³	2.30E-07 ³	38.5 ¹	157.0	9.20E-07 ¹
DNOC	198.1	2.39 ¹	8.70E-03 ¹	130 ¹	84.0	5.50E-06 ¹
fentin-acetate	409.0	3.43 ³	1.80E-04 ¹	15.65 ⁷	122.0	5.00E-06 ⁶
lindaan	290.8	3.85 ¹	2.20E-02 ¹	7.3 ¹	112.5	6.10E-05 ¹
malathion	330.3	2.75 ³	5.30E-03 ¹	145 ¹	2.8	4.87E-06 ⁶
maneb	265.3	2.61 ^{4*}	9.70E-08 ⁴	0.0001 ⁴	198.0	1.04E-04 ⁶
mecoprop	214.6	2.99 ²	3.10E-04 ⁴	620 ^{1/2}	94.5	1.40E-09 ¹
metamitron	202.2	0.83 ¹	2.00E-06 ³	1820 ¹	166.6	4.50E-07 ¹
methabenzthiazuron	221.3	1.98 ²	1.50E-05 ³	60 ¹	120.0	2.23E-08 ⁶
metribuzin	214.3	1.65 ⁴	5.80E-05 ³	1200 ⁴	126.0	4.30E-09
mevinfos	224.1	0.55 ¹	2.22E-01 ¹	600000 ²	14.0	6.00E-08 ¹
monolinuron	214.6	2.2 ¹	6.00E-03 ¹	570 ¹	81.5	9.30E-07 ¹
parathion	291.3	3.81 ^{1/2}	5.00E-03 ¹	24 ¹	6.1	2.50E-05 ¹
simazin	201.7	2.18 ²	8.00E-07 ¹	4.25 ¹	226.0	1.60E-08 ¹
thiram	240.4	1.82 ²	3.20E-03 ²	30 ¹	155.5	3.30E-07 ¹
trifluralin	335.3	4.83 ³	9.50E-03 ³	0.32 ³	49.0	2.19E-03 ⁶

* log K_{om} i.p.v. log K_{ow} (maneb); log K_{p,s/l} i.p.v. log K_{ow} (diquat-dibromide)

- Ref: 1 Linders et al. (1994)
 2 Theunissen-Ordelman en Schrap (1996)
 3 Tomlin (1994)
 4 ARS Pesticide Properties Database (ARS, 1996)
 5 Howard et al. (1991b)
 6 Henry coëfficiënt berekend uit oplosbaarheid en dampdruk bij 20-25 °C
 7 Verschueren (1983)

Biotische en abiotische degradatie

De snelheid van de afbraak, biotisch en abiotisch, kan worden uitgedrukt in halfwaardetijden. De halfwaardetijden voor de afbraak in de bodem voor de geselecteerde pesticiden komen voor het grootste gedeelte uit Linders et al. (1994). Halfwaardetijden voor oppervlaktewateren zijn overgenomen uit Linders et al. (1994) en Theunissen-Ordelman en Schrap (1996). Indien er geen halfwaardetijden voor oppervlaktewateren bekend zijn is de afbraaksnelheid als volgt geschat op basis van de halfwaardetijden voor hydrolyse, fotolyse en de bodem: Indien de halfwaardetijd voor hydrolyse veel sneller is dan de halfwaardetijd in de bodem, wordt deze waarde genomen of gecombineerd (gemiddelde) met de halfwaardetijd in de bodem⁶. De halfwaardetijd in sedimenten van oppervlaktewateren is gebaseerd op de halfwaardetijd in slib. De halfwaardetijden in slib zijn weergegeven door Theunissen-Ordelman en Schrap (1996). Indien de halfwaardetijd in slib niet bekend is, is de halfwaardetijd in sedimenten gelijkgesteld aan de halfwaardetijd in de bodem tenzij hieronder anders aangegeven. Dit kan het geval zijn bij een korte halfwaardetijd voor hydrolyse. De halfwaardetijd in de atmosfeer is gebaseerd op reactie met hydroxylradicalen. De afbraaksnelheden zijn berekend aan de hand van structuurrelaties volgens Atkinson (1988) en Rorije (1996). Deze methode kan niet worden toegepast op de verbindingen bentazon, diquatdibromide, maneb, fentinacetaat en trifluralin. In de tekst is aangegeven hoe hiermee is omgegaan.

2,4-D

De $t_{1/2}$ in water is 2 tot 4 dagen (Howard, 1991b). De halfwaarde tijd van 2,4-D in sediment is verondersteld gelijk te zijn aan de halfwaarde tijd in de bodem.

Atrazine

De halfwaardetijd van atrazine in water is geschat uit de halfwaardetijd voor hydrolyse en de halfwaardetijd in de bodem door het gemiddelde van beide waarden te berekenen.

Azinphos-methyl

De halfwaardetijd van azinphos-methyl in water is gelijkgesteld aan de halfwaardetijd voor hydrolyse (Tomlin, 1994).

Bentazon

De $t_{1/2}$ in water voor bentazon is afgeleid uit de kortste halfwaarde tijd in de bodem (12 dagen) (Howard, 1991b) en de halfwaardetijd voor hydrolyse (30 dagen). De halfwaardetijd voor bentazon in sediment is gelijk gesteld aan de halfwaarde tijd in de bodem.

Carbendazim

De halfwaardetijd voor carbendazim in sediment is gelijkgesteld aan de halfwaardetijd in de bodem.

Dichloorvos

De $t_{1/2}$ van dichloorvos in oppervlaktewateren is voor dichloorvos afgeleid uit de $t_{1/2}$ in waterbodems en de halfwaardetijd voor hydrolyse, 2,8; 2,6 en 8 dagen respectievelijk Theunissen-Ordelman en Schrap (1996), Linders et al. (1994) en Tomlin (1994).

Diquat-dibromide

De halfwaardetijd van diquat-dibromide in oppervlaktewateren is berekend aan de hand van de halfwaardetijd ten gevolge van hydrolyse, > 30 dagen (Linders et al., 1994) en de halfwaarde tijd voor fotolyse, 74 dagen (Linders et al., 1994). De halfwaardetijd in sediment is afgeleid uit de ondergrens voor water en de halfwaardetijd in de bodem, 1000 dagen (Linders et al., 1994). De atmosferische halfwaardetijd is gelijkgesteld aan de atmosferische halfwaardetijd van diquat (2 dagen, Verschueren, 1983)

Diuron

De halfwaardetijd voor diuron in sediment is gelijkgesteld aan de halfwaardetijd in de bodem.

DNOC

De $t_{1/2}$ in oppervlaktewateren is gelijkgesteld aan de $t_{1/2}$ in de bodem.

Fentinacetaat

$t_{1/2}$ in sediment is gebaseerd op de halfwaardetijd in water (7 dagen) en de halfwaardetijd in de bodem 46 dagen (redelijk hoge $\log k_{ow}$). De afbraaksnelheid in de lucht (QSAR-berekening was niet mogelijk) is voor fentin-acetaat gelijkgesteld aan de kortste hydrolyse halfwaardetijd vanwege de hoge vochtgevoeligheid blijkend uit een halfwaardetijd van 0.05 dagen (Linders et al., 1994).

Maneb

Maneb heeft een korte halfwaardetijd (1.5 dagen) voor hydrolyse (Linders et al., 1994). De halfwaardetijd voor maneb in oppervlaktewateren is gelijkgesteld aan de halfwaardetijd voor hydrolyse. Vanwege de snelle hydrolyse van maneb is de halfwaardetijd voor sediment niet gebaseerd op de halfwaardetijd in de bodem maar op de halfwaardetijd in water. De afbraak in de lucht is eveneens gebaseerd op de halfwaardetijd voor hydrolyse vanwege de gevoeligheid voor vocht.

Metamitron

De halfwaardetijd voor metamitron in sediment is gelijkgesteld aan de halfwaardetijd in de bodem, 30 dagen.

Methabenzthiazuron

De $t_{1/2}$ in bodems van oppervlaktewater is gelijkgesteld aan de halfwaardetijd in de bodem.

Monolinuron

De afbraaksnelheid van monolinuron in oppervlaktewateren is afgeleid uit de halfwaardetijd voor fotolyse (22 dagen, Theunissen-Ordelman en Schrap, 1996) en de halfwaardetijd in de bodem (50 dagen, Linders et al., 1994).

Tabel 3.8: Halfwaardetijden van de pesticiden in de verschillende compartimenten

	$t_{1/2}$ soil ¹ [dagen]	$t_{1/2}$ water [dagen]	$t_{1/2}$ sediment [dagen]	$t_{1/2}$ air ⁵ [dagen]
2,4-D	8	2.5 ⁴	8	1.725
atrazine	50	66	85 ²	0.073
azinphos-methyl	52	18 ^{3h}	1.7 ²	0.074
bentazon	48	19	48	0.343*
carbendazim	197.5	215 ³	197.5	0.05
dichloorvos	2	1.2	0.35 ²	1.159
diquat-dibromide	1000	47 ^{1h/f}	173	2*
diuron	94	27	94	0.314
DNOC	8.5	8.5	29.7 ²	51.658
fentin-acetate	46	7 ¹	18	0.05*
lindaan	1406	26.8 ¹	13.3 ⁴	7.893
malathion	5	15 ⁴	17 ⁴	0.75
maneb	56	1.5 ^{1h}	1.5	1.5*
mecoprop	11	8.4 ⁴	71 ⁴	0.617
metamitron	30	18.8 ¹	30	0.293
methabenzthiazuron	135	90 ¹	135	0.329
metribuzin	34	7 ³	15.4 ³	0.3
mevinfos	1.2	5 ¹	16.9 ²	0.126
monolinuron	50	33.5	50	0.286
parathion	49	2.9 ¹	3.2 ²	0.119
simazine	58	32.8 ¹	58	0.078
thiram	18	18	18	0.033
trifluralin	221	14.9	3.8 ²	0.385*

h: hydrolyse

f: fotolyse

Ref 1: Linders et al. (1994)
 2: Theunissen-Ordelman en Schrap (1996)
 3: Tomlin (1994)
 4: Howard et al. (1991b)
 5: Atkinson (1988) en Rorije (1996); QSAR methode voor reactie met hydroxylradicalen, behalve voor *, QSAR-methode kan niet worden toegepast.

Parathion

De afbraaksnelheid van parathion in sediment is 3.2 dagen (Theunissen-Ordelman en Schrap, 1996) en voor oppervlaktewateren 2.9 dagen (Linders et al., 1994).

Simazine

De halfwaardetijd voor simazine in sediment is gelijkgesteld aan de halfwaardetijd in de bodem.

Thiram

De halfwaardetijden voor thiram in oppervlaktewateren en sediment is gelijkgesteld aan de halfwaardetijd in de bodem. De halfwaardetijd voor de hydrolyse van thiram bedraagt 48 dagen (CWQG, 1985).

Trifluralin

De halfwaardetijd voor trifluralin in oppervlaktewateren (14.9 dagen) is gebaseerd op de halfwaardetijd in de bodem (221 dagen, Linders et al, 1994) en de snelste halfwaardetijd voor hydrolyse (0.1 dag, Tomlin, 1994). De halfwaardetijd in sediment is 3.8 dagen (Theunissen-Ordelman en Schrap, 1996). De atmosferische halfwaardetijd is gelijkgesteld aan de gemiddelde hydrolyse halfwaardetijd van 0.1-0.5 dagen (Tomlin, 1994).

3.2 Emissies

3.2.1 Emissieschattingen

Emissies naar het milieu als gevolg van economische activiteit c.q. menselijk handelen veroorzaakt (verhoogde) concentraties van (milieuvreemde) stoffen in het milieu. Deze (verhoogde) concentraties van toxische stoffen hebben invloed op de "gezondheid" van ecosystemen. De oorzaak-gevolgketen ziet er in het kort als volgt uit: van economische activiteit naar produktievolumes, emissies, concentraties in het milieu en toxische effecten van stoffen op ecosystemen.

Er zal worden ingegaan op de schattingen van emissies van de geselecteerde stoffen in Nederland en in Europa voor het basisjaar 1995. Van de gekozen stoffen worden de emissies onder andere gerapporteerd in de Milieubalans 96 (RIVM, 1996).

Het betreft de stoffen benzeen, benzo[a]pyreen, fluorantheen, dioxinen. Daarnaast zijn de emissies vanaf 1985 bekend voor de meeste zware metalen, zoals cadmium, chroom, koper, kwik, lood, nikkel en zink. Voor de schatting van de emissies van diethylhexylftalaat en dibutylftalaat is gebruik gemaakt van Peijnenburg et al. (1991). Voor pentachloorfenol is gebruik gemaakt van Slooff (1991). De emissies van 1,2,3-trichloorbenzeen, 1,2,4-trichloorbenzeen, 1,3,5-trichloorbenzeen en hexachloorbenzeen zijn geschat aan de hand van het basisdocument chloorbenzenen en het SPEED werkplan trichloorbenzenen, hexachloorbenzeen en hexachloorbutadieen (Schwartz et al., 1993). Emissies van PCB's zijn voor Nederland en Europa voor de periode van 1990 tot 2000 geschat door Annema et al. (1995). De emissies van dioxinen in Nederland, inclusief de grensoverschrijdende emissies staan gerapporteerd in Slooff et al. (1993). Voor de emissies van toluene in o.a. gebruik gemaakt van Berdowski et al. (1996a)

PCB-emissies

Annema et al. (1995) hebben een schatting gemaakt van de emissies van PCB's in Nederland in 1990 en in 2000. De emissies in 2000 zijn schat onder de aanname van autonome ontwikkelingen. Hierbij zullen de meeste PCB's bevattende apparaten uit het apparatenpark verdwijnen doordat ze niet worden vervangen door nieuwe PCB's bevattende apparaten.

Aangenomen is dat de afname van de emissies tussen 1990 en 2000 lineair is. De directe atmosferische emissies naar de atmosfeer zullen dan bijvoorbeeld per jaar met 14 kg afnemen. In Tabel 3.9 zijn voor Nederland de directe emissies per compartiment weergegeven. Annema et al. (1995) hebben eveneens een schatting gemaakt van de atmosferische emissies in Europa in 1990 en 2000. Voor Europa is hetzelfde aangenomen als voor Nederland, namelijk dat de ontwikkelingen in de emissies autonoom verlopen. Annema et al. (1995) hebben alleen de atmosferische emissies van PCB's voor Europa in beschouwing genomen. Dit zijn zowel de directe atmosferische emissies als de indirecte emissies naar de atmosfeer door heremissie vanuit oppervlaktewateren en de bodem. De directe atmosferische component is gebruikt om de Europese emissies per compartiment af te leiden. Hiertoe is verondersteld dat er een vaste verhouding bestaat tussen de emissies naar de atmosfeer en de emissies naar de andere compartimenten. Ten tweede is aangenomen dat de berekende verhouding voor Nederland ook geldig is voor de rest van Europa. De geldigheid van de eerste aanname zal bepaald worden door de verhouding tussen het gebruik van de verschillende toepassingen waarin PCB's zijn verwerkt en de verhouding van de PCB-congeneren in die toepassing. PCB's worden onder andere toegepast in open systemen zoals verven en lijmen of gesloten systemen zoals transformatoren. De tweede veronderstelling houdt in dat de verhouding tussen het gebruik van de verschillende systemen voor Europa gelijk is aan die in Nederland en dat per toepassing dezelfde verhouding aan congenere wordt gebruikt. De emissies naar de Europese compartimenten zijn zo zowel voor het beginjaar 1990 als het eindjaar 2000 geschat. De emissies in de tussenliggende jaren zijn berekend door middel van lineaire interpolatie.

Tabel 3.9: Emissie van PCB's [kg/jaar] in Nederland en Europa van 1990 tot 2000 naar lucht, water en bodem.

Nederland	1990		1995		2000	
	[kg/jaar]	aandeel [%]	[kg/jaar]	[kg/jaar]	aandeel [%]	
lucht	250	34	180	110	39	
water	212	29	146	80	29	
RWZI	100	14	70	40	14	
stedelijk gebied	180	23	115	50	18	
<hr/>						
Europa	1990		1995		2000	
	[kg/jaar]		[kg/jaar]	[kg/jaar]		
lucht	122405		85570	48734		
water	103881		69673	35465		
RWZI	49035		33384	17733		
stedelijk gebied	88262		55230	22197		

In Tabel 3.9 zijn de geschatte emissies voor Europa en Nederland samengevat. Daarbij is het aandeel per compartiment in de totale emissies in Nederland weergegeven. Met die verhoudingen zijn de emissies naar de bodem en water voor Europa geschat. **Bijlage Ia** bevat de emissies van PCB's per compartiment voor een aantal Europese landen.

Dioxine emissies

Slooff et al. (1993) hebben schattingen gemaakt van de directe emissies van dioxinen en furanen voor de situatie eind 1990. Daarnaast zijn schattingen gemaakt van de grensoverschrijdende emissies van dioxinen en furanen via de atmosfeer en de grote rivieren (Rijn en Maas) vanuit Europa naar Nederland. De resultaten van die schattingen zijn weergegeven in Tabel 3.10 en overgenomen uit Slooff et al. (1993). De emissie zijn weergegeven in internationale toxische equivalenten (g I-TEQ). De toxiciteit van afzonderlijke dioxinen en furanen worden daarbij gerelateerd aan de toxiciteit van 2,3,7,8-dibenzo-*p*-dioxine.

Tabel 3.10: Emissie naar lucht, water en bodem in Nederland (situatie eind 1990) van PCDD's en PCDF's, uitgedrukt in g I-TEQ per jaar

	Emissie	Import
oppervlaktewateren	4	55-80
lucht	616	500
bodem		
landbouwgrond	7.9	
stedelijk gebied	2.2	

De emissie naar landbouwgrond wordt veroorzaakt door de aanwezigheid van dioxinen en furanen in landbouwbestrijdingsmiddelen (0.6 g I-TEQ), het gebruik van RWZI-slib (7 g I-TEQ) en het opbrengen van baggerslib (0.3 g I-TEQ).

Emissies van Pentachloorfenol.

De meest recente emissieschattingen van pentachloorfenol staan beschreven in Slooff et al. (1991). De bronnen en emissies van pentachloorfenol zijn voor het jaar 1987 geïnventariseerd (Tabel 3.11). Om tot een schatting van de emissies van pentachloorfenol in 1995 te komen zijn de emissies in het jaar 1987 afgestemd op te verwachten (recent) toekomstige ontwikkelingen in het gebruik van pentachloorfenol zoals aangegeven in Slooff et al. (1991). De belangrijkste ontwikkelingen zullen hier kort worden herhaald.

Het gebruik van pentachloorfenol in de champignonkwekerijen is na 1990 verboden. Door een toename van het aantal inwoners in Nederland van ongeveer 14.7 miljoen inwoners naar ongeveer 15.4 miljoen inwoners in 1995 zal de emissie van pentachloorfenol door huishoudens toenemen bij een gelijk blijvende emissiefactor. De emissiefactor per inwoner is gebaseerd op de gegevens uit 1987 en is gelijk aan $375 \text{ kg}/14.7 \text{ miljoen inwoners} = 2.55 \cdot 10^{-5} \text{ kg/inwoner/jaar}$. De emissie van huishoudens in 1995 is vervolgens berekend op basis van $2.55 \cdot 10^{-5} \text{ kg/inwoner/jaar}$ vermenigvuldigd met het aantal van 15.4 miljoen inwoners in 1995 = 392 kg/jaar. Aangenomen dat 95% (percentage aansluitingen op het openbaar riool) van deze lozingen naar de RWZI's gaat, belandt 20 kg direct in het oppervlaktewater. Van de 372 kg gaat na rioolwaterzuivering een deel via het effluent naar de oppervlaktewateren, via het zuiveringsslib naar landbouwgrond en een deel naar de atmosfeer. De verspreiding na waterzuivering is berekend met het SimpleTreat 3.0 model (Struijs, 1996). De diffuse industriële emissie is ongeveer gelijk aan de diffuse lozing van huishoudens (Slooff et al., 1991). De toepassing van pentachloorfenol in de leerlooierij is inmiddels verboden in Nederland.

In Europa is deze toepassing nog wel gedeeltelijk toegestaan. Door toepassing van pentachloorfenol in de papierindustrie belandt er minder dan 100 kg in het oppervlaktewater. Gezien de afname in het gebruik van pentachloorfenol in de synthetische vezels industrie, ruim een halvering van het gebruik in een jaar, (van 7.5 ton in 1988 naar 3 ton in 1989) is aangenomen dat de emissie van pentachloorfenol door de papierindustrie in 1995 eveneens sterk is gedaald en daarom op nul gesteld. Pentachloorfenol is in de textielindustrie niet meer toegestaan. Pentachloorfenyllauraat is nog wel toegestaan in de textiel industrie. In Tabel 3.11 is de hoeveelheid pentachloorfenyllauraat geëmitteerd door de textielindustrie uitgedrukt in hoeveelheden pentachloorfenol.

Tabel 3.11: Bronnen en emissies van pentachloorfenol in Nederland in 1987 en 1995 [kg/jaar].

Bron	<u>lucht</u>		<u>water</u>		<u>bodem</u>		<u>rwzi</u>
	1987	1995	1987	1995	1987	1995	1995
champignonkwekerijen					250	0	
huishoudens (rwzi's)			375	20			372
industrie (rwzi's)			375	20			372
leerloerij			150	0			
papier industrie			<100	0			
textiel*	2100	2100	2600	2600	5000	5000	
pesticiden					500-1000	0	
rwzi slib					<20		
hout, gebruik uit verleden	35000	25310					
hout, geïmporteerd	13000	15881					
vuilverbranding	40	3.3					
Totaal	50140	40413	±3550	2640	±6010	5000	744

* gebaseerd op de hoeveelheid pentachloorfenyllauraat uitgedrukt in hoeveelheden pentachloorfenol.

De emissies naar de bodem door het gebruik als pesticide vindt niet meer plaats omdat pentachloorfenol als pesticide niet meer wordt toegepast. In 1995 is er nog 767 ton met pentachloorfenol geïmpregneerd hout uit het verleden in Nederland aanwezig (Slooff et al., 1991). De emissiefactor voor pentachloorfenol vanuit hout naar de atmosfeer is 0.03 kg/kg_{hout}/jaar. Dit resulteert in een emissie van 25.31 ton pentachloorfenol. Een verbod op de import van geïmpregneerd hout valt niet te verwachten. Er zal dan een internationaal besluit tot een verbod van pentachloorfenol als houtverduurzamingsmiddel van kracht moeten worden. Dit valt alleen op de lange termijn te verwachten. De geïmporteerde hoeveelheid geïmpregneerd hout in 1995 is toegenomen met de groei in de economische activiteit. Het bruto binnenlands product van Nederland is toegenomen van 176 miljard ecu in 1987 en 215 miljard ecu in 1995. De emissie, zo wordt aangenomen, zal daarmee stijgen van 13000 kg in 1987 naar 15881 kg in 1995. De hoeveelheid door vuilverbrandingsinstallaties verwerkte afval is van 2,6 Mton in 1987 toegenomen naar 4,37 Mton in 1996 (RIVM, 1996). De emissiefactor voor verbrandingsinstallaties in 1987 is als volgt berekend, 40 kg PCP/ 2.6 Mton afval = $1.538 \cdot 10^{-5}$ kg/ton. De efficiency verbetering van de huidige vuilverbrandingsinstallaties t.o.v. de installaties in 1987 is een faktor 20 (Schwartz et al., 1993). De emissies ten gevolge van vuilverbranding zijn daardoor ondanks een stijging in de hoeveelheid afval gedaald naar 3.3 kg pentachloorfenol.

De totale emissies in Europa in 1995 zijn geschat aan de hand van de totale emissies in Nederland in 1995 (Tabel 3.12). Er zijn twee mogelijkheden berekend om tot een raming van de Europese emissies te komen. De ene mogelijkheid berust op een schaling naar economische activiteit (bruto binnenlandse producten), de andere methode is gebaseerd op schaling naar demografische ontwikkelingen (bevolkingsomvang).

Het bruto binnenlands product en de bevolkingsomvang zijn gebaseerd op de 17 staten van de Europese Economische Ruimte (EER) (Eurostat, 1995) met daaraan toegevoegd Zwitserland en exclusief Nederland. Het totale bruto binnenlands product van de EER bedroeg in 1995 4646 miljard ecu (tegen marktprijzen en wisselkoersen van 1985) voor Nederland was dat in 1995 215 miljard ecu. De bevolkingsomvang van de EER in 1995 was 366,931 miljoen inwoners, de bevolkingsomvang in Nederland was in 1995 15,393 miljoen inwoners. Gebaseerd op de bevolkingsomvang zijn de Europese emissies hoger dan de emissies die geschat zijn aan de hand van de economische ontwikkelingen. De schatting op basis van de economische ontwikkeling is gebruikt voor de berekening van de concentraties pentachloorfenol. De schatting van de Europese emissie is vrij ruw. Een betere benadering zou zijn om te kijken naar de economische of volume ontwikkelingen in relevante industriële of economische sectoren.

Tabel 3.12: Emissies in EER geschat naar bevolkingsomvang en bruto binnenlandsproduct in vergelijking met Nederlandse emissies. Emissies in het 1995 [ton].

land	lucht	water	bodem	rwzi's
Nederland	40.4	2.6	5.0	0.7
EER (BBP)	874.7	57.1	108.2	16.1
EER (Bevolking)	963.3	62.9	119.2	17.7

Emissies van diethylhexylftalaat en dibutylftalaat

Emissieschattingen voor ftalaten staan in Peijnenburg et al. (1991). Emissie van ftalaten vindt plaats tijdens de verschillende fasen in de levenscyclus van producten waarin ftalaten zijn verwerkt. De te onderscheiden fasen zijn productie, distributie, verwerking in andere producten, het gebruik van die producten en de afvalfase. De verschillende fasen met de bijbehorende emissieschattingen zullen kort worden besproken. De gegevens zijn gebaseerd op Peijnenburg et al. (1991).

Productie

In Nederland worden geen ftalaten geproduceerd.

Distributie

Tijdens de distributie van ftalaten vinden er emissies naar het oppervlaktewater plaats veroorzaakt door morsen en het omspoelen van de tanks. Per keer wordt de emissie geschat op 1 kg. Bij een binnenlands gebruik van 10.000 tot 12000 ton DEHP per jaar in Nederland in 1990 en een gemiddelde lading van 20 ton per vrachtwagentanker is de emissie naar oppervlakte water 0.5-0.6 ton per jaar. Het gebruik van DBP in Nederland is 500-1300 ton per jaar. Onder dezelfde aannames resulteert dat in een emissie naar het oppervlaktewater van 0.025-0.065 ton per jaar in 1990.

Verwerking

De emissies die ontstaan tijdens de verwerking in producten (Tabel 3.13) zijn geschat op basis van het gebruik van de totale hoeveelheid ftalaten voor de verschillende toepassingen en het aandeel van DEHP en DBP in de totale hoeveelheid ftalaten met de bijbehorende emissiefactoren.

Tabel 3.13: Emissies van DEHP en DBP bij de toepassing van ftalaten in 1990 [ton/jaar]

Toepassing	atmosfeer		water	
	DEHP	DBP	DEHP	DBP
kabel isolatie	0.5			
PVC-pasta	10.5	1.1		
buis profielen	0.2			
gladpersen folies	8			
gladpersen vloeren	2.8			
verschillende	1.6			
lak			0.8	0.8
Totaal	23.6	1.1	0.8	0.8

Het gebruik van producten

Ftalaten worden in verschillende producten toegepast. Tijdens het gebruik van deze producten treden er emissies op naar water en lucht, zie Tabel 3.14.

Tabel 3.14: Emissies van DEHP en DBP naar de atmosfeer en oppervlaktewateren, tijdens het gebruik van producten waarin ftalaten zijn verwerkt [ton/jaar].

Product	atmosfeer		water	
	DEHP	DBP	DEHP	DBP
vloeren	0.6			
behang	0.1			
verf	0.7	0.4		
folies	3.4		17.9	
zolen/schoenen etc.			11.9	
Totaal	4.8	0.4	29.8	

Afvalfase

Tijdens de laatste fase, de afvalfase kunnen emissies optreden bij de verbranding van de isolatielaag van kabels (DEHP 3 ton en DBP ongeveer 0.3 ton) naar de atmosfeer. Verder vinden er emissies van DEHP vanuit garages naar het oppervlaktewater plaats van ongeveer 1 ton per jaar.

De totale emissie van DEHP en DBP zijn samengevat in Tabel 3.15. De emissies van DEHP in 1990 zijn voor de atmosfeer en de oppervlakte wateren ongeveer even groot. De emissies van DBP liggen veel lager (factor 20 tot 30) waarbij de emissie van DBP naar oppervlakte water 2 keer zo hoog is als de emissie naar lucht. De emissies in het jaar 1990 zijn omgerekend naar emissies in 1995 door een correctie voor de economische ontwikkelingen toe te passen.

Deze correctie is gebaseerd op het bruto binnenlands produkt voor marktprijzen en wisselkoersen van 1985 (Eurostat 1995, 1995). Voor Nederland is het bruto binnenlands produkt van 197 miljard ecu in 1990 uitgegroeid tot 215 miljard ecu in 1995. De bruto binnenlandse producten voor 1995 zijn berekend aan de hand van lineaire extrapolatie van de groei van het BBP over de periode 1987-1993. Er dient een kanttekening te worden gemaakt bij deze extrapolatie. Er is namelijk geen rekening is gehouden met technische maatregelen of beleidsmaatregelen waardoor de emissies mogelijk in de loop van de tijd zijn afgenomen. Het is daardoor mogelijk dat de emissies te hoog zijn geschat.

Tabel 3.15: Emissie van DEHP en DBP in Nederland in 1990 en 1995 [ton/jaar].

fase	atmosfeer		water	
	DEHP	DBP	DEHP	DBP
Productie				
distributie			0.5-0.6	0.025-0.065
verwerking	23.7	1.1	0.8	0.8
gebruik	4.8	0.4	29.8	
garages			1	
verbranding kabels	3	0.3		
Totaal 1990	31.5	1.8	32.2	0.85
Totaal 1995	34.4	2	35.1	0.93

Buitenlandse emissies van diethylhexylftalaat en dibutylftalaat

Emissie schattingen van ftalaatesters in West-Europa in 1990 zijn gegeven door Poppe et al. (1993). Deze schattingen zijn gebaseerd op statistische gegevens en een praktische analyse van emissiemechanismen en -routes. Emissies van ftalaten kunnen zoals gezegd optreden tijdens de productie, distributie, tijdens de verwerking van ftalaten in eindproducten, het gebruik van deze producten en tijdens het storten of verbranden van afval. Tabel 3.16 geeft een overzicht van de door Poppe et al. (1993) geraamde emissies in West-Europa in 1990. In de eerste kolom staan de waarden voor de totale emissies van ftalaten zoals weergegeven door Poppe et al. (1993).

Daarnaast staan de emissies van DEHP. Volgens Poppe et al. (1993) bestaat 50% van de totale hoeveelheid gebruikte ftalaten uit DEHP. Het aandeel van DEHP in de totale emissies wordt verondersteld van dezelfde orde grootte zijn. Vervolgens zijn de emissies verdeeld over emissies naar de atmosfeer, oppervlakte wateren, de bodem en een deel via RWZI's (Poppe et al., 1993).

De emissies in het jaar 1990 zijn omgerekend naar emissies in 1995 door een correctie voor de economische ontwikkelingen toe te passen. Deze correctie is gebaseerd op het bruto binnenlands produkt voor marktprijzen en wisselkoersen van 1985 (Eurostat 1995, 1995). In 1990 bedroeg het bruto binnenland produkt voor de EER 4303 miljard ecu, in 1995 is dat uitgegroeid tot 4646 miljard ecu. De bruto binnenlandse producten voor 1995 zijn berekend aan de hand van lineaire extrapolatie van de groei van het BBP over de periode 1987-1993. Er dient een kanttekening te worden gemaakt bij deze extrapolatie. Er is namelijk geen rekening is gehouden met technische maatregelen of beleidsmaatregelen waardoor de emissies mogelijk in de loop van de tijd zijn afgenomen. Het is daardoor mogelijk dat de emissies te hoog zijn geschat.

Tabel 3.16: Emissies van ftalaten en DEHP in West-Europa in 1990 inclusief Nederland.

Proces/ eindgebruik	Emissies ftalaten [ton/jaar]	Emissies DEHP [ton/jaar]			
		atmosfeer	water	RWZI	bodem
Productie	220		100		10
Distributie	80		30		10
Verwerking in eindproducten					
persen folies	280	140			
persen vloeren	10	5			
coatings	520	260			
plasticisols	50	25			
extrusie	90	45			
Totaal verwerking	950	475			
Binnenshuis eindgebruik					
vloeren verdamping	20	10			
vloeren water extractie	500*			250	
behang	20	10			
overige	40	20			
kabels bedrading	60	30			
totaal binnenshuis	640	70		250	
Exterieur eindgebruik	5600*		2800		
Afval	250		125		
Totaal		545	3055	250	20
Totaal emissie 1995		588	3298	270	22

* onzekere schatting

De toegepaste hoeveelheid dibutylftalaat in 1990 in Nederland is ongeveer 3% van de totale hoeveelheid gebruikte ftalaten. De Europese emissies van dibutylftalaat zijn verkregen door te veronderstellen dat 3 % van de totale emissies veroorzaakt wordt door DBP, gebaseerd op het aandeel dibutylftalaat in de totale produktievolumes in 1990 in Nederland. De totale emissies van ftalaten zijn echter gebaseerd op stoffeigenschappen van DEHP. De emissie naar oppervlaktewater en de lucht kunnen daardoor te laag zijn geschat omdat DBP een hogere dampdruk en een hogere oplosbaarheid in water heeft.

De emissies van dibutylftalaat in het jaar 1990 zijn eveneens geëxtrapoleerd naar emissies in 1995 door een correctie voor de economische ontwikkelingen toe te passen. Deze correctie is gebaseerd op het bruto binnenlands produkt voor marktprijzen en wisselkoersen van 1985 (Eurostat, 1995).

Tabel 3.17: Emissies van DBP in West-Europa in 1990 [ton/jaar] inclusief Nederland.

Proces/eindgebruik	Emissie DBP [ton/jaar]			
	Atmosfeer	Oppervlaktewateren	RWZI	Bodem
Productie		6		0.6
Distributie		1.8		0.6
Verwerking	28.5			
Eindgebruik binnenshuis	2.1		17.1	
exterieur		168		
Afval		7.5		
Totaal 1990	30.6	183.3	17.1	1.2
1995	33	198	18	1

Tabel 3.18: Emissies van HCB en TCB's (=T) in Nederland in 1995 [kg/jaar]

Bron	lucht HCB	water		RWZI		bodem		
		HCB	1,3,5-T	1,2,3-T	HCB	1,2,3-T	1,2,3-T	1,2,4-T
chemie		5	50	2	5	30		
huishoudens				2	5	30		
pesticiden							1500	6000
AVI's	2							
Totaal	2	5	50	4	10	60	1500	6000

Emissies van chloorbenzenen

Hexachloorbenzeen, 1,2,3-trichloorbenzeen, 1,2,4-trichloorbenzeen en 1,3,5-trichloorbenzeen.

Schwartz et al. (1993) gaan in op de vraag in hoeverre de emissiereducties van deze chloorbenzenen zijn gerealiseerd zoals bepaald op de derde Noordzee ministers conferentie. Destijds is er afgesproken dat in 1995 de emissies naar lucht en het oppervlaktewater ten opzichte van 1985 met minstens 50% afgenomen moeten zijn. Schwartz et al. (1993) schatten de emissies van HCB door de industrie naar het oppervlaktewater in 1995 op 5 kg. Op basis van een emissiefactor voor huishoudens van 0.3 mg/inw./jaar (gebaseerd op gegevens van 1985) wordt de emissie in 1995 door de groei van de bevolking ongeveer 5 kg. De diffuse lozing door de industrie wordt verondersteld van dezelfde omvang te zijn. Verder is verondersteld dat 95% van deze emissies naar de RWZI's gaat. Door de afvalverbrandingsinstallaties vinden er emissies van HCB naar de atmosfeer plaats. De emissiefactor voor HCB is 0.35 mg/ton in het jaar 1995 (Schwartz et al., 1993). De hoeveelheid afval dat via afvalverbrandingsinstallaties in 1995 is verwerkt bedroeg 4.6 Mton (RIVM, 1996). De hoeveelheid HCB dat via afvalverbrandingsinstallaties in de atmosfeer terecht komt wordt hiermee geschat op ongeveer 2 kg.

Emissies van TCB's komen hoofdzakelijk voort uit de chemische industrie. Bij de productie van bestrijdingsmiddelen komen 1,2,4-TCB en 1,2,3-TCB vrij en bij de opwerking van residu van chloorkoolwaterstoffen en door de farmaceutische industrie komt hoofdzakelijk 1,3,5-TCB vrij. Deze emissies (in hoofdzaak 1,3,5-TCB) zijn voor 1995 geschat op 50 kg (Schwartz et al., 1993). Daarnaast vindt er emissie van 1,2,3-TCB en 1,2,4-TCB plaats door het gebruik van bestrijdingsmiddelen in de verhouding 1 staat tot 4 (gebaseerd op het voorkomen van 1,2,4-TCB en 1,2,3-TCB in afvalwater). Chloorfenvinyl en dichlobenil bestaan voor 14% uit TCB's (Schwartz et al., 1993). Uit de verkoopvolumes van 1993 (Merkelbach en Lentjes, 1993) wordt de emissie van 1,2,3-TCB naar landbouwgrond geschat op 1,5 ton. De emissie van 1,2,4-TCB naar landbouwgrond is dan ongeveer 6 ton. De emissie van 1,2,3-TCB door huishoudens is geschat aan de hand van een emissiefactor voor huishoudens van 2 mg/inw/jaar (Schwartz et al., 1993). Dit houdt in dat de emissie van 1,2,3-TCB door huishoudens in 1995 ongeveer 32 kg is geweest. (95% van deze emissies gaat via RWZI's). De diffuse belasting van het oppervlaktewater door de industrie wordt verondersteld even groot te zijn als die van de huishoudens (Slooff et al., 1991).

Emissies van chloorbenzenen in West-Europa

De emissies van hexachloorbenzeen, 1,2,3-trichloorbenzeen, 1,2,4-trichloorbenzeen en 1,3,5-trichloorbenzeen is op dezelfde manier berekend als de Nederlandse emissies. In plaats van de Nederlandse bevolkingsomvang, hoeveelheid verbrand afval etc. zijn cijfers voor West-Europa gebruikt, exclusief Nederland. Het aantal inwoners in West-Europa (is Europese economische ruimte, Eurostat, 1995) in 1995 is 366,931 miljoen inwoners. De emissies van hexachloorbenzeen door de industrie zijn geschaald naar bruto binnenlands product. De hoeveelheid afval is geschaald naar het aantal inwoners. De emissie van 1,2,3-trichloorbenzeen in West-Europa door huishoudens en de industrie is geschaald naar het aantal inwoners in West-Europa. De emissie van 1,3,5-trichloorbenzeen door de industrie in West-Europa is geschat door de emissie in Nederland te vermenigvuldigen met het quotiënt van de bruto binnenlandse producten.

Tabel 3.19: Emissies van HCB en TCB's (=T) in West-Europa in 1995 [kg/jaar]

Bron	lucht HCB	water			RWZI		bodem	
		HCB	1,3,5-T	1,2,3-T	HCB	1,2,3-T	1,2,3-T	1,2,4-T
chemie		108	1080	38	110	725		
huishoudens				38	110	725		
pesticiden							13168	52670
AVI's	49							
Totaal	49	108	1080	76	220	1450	13168	52670

Emissies van Benzo[a]pyreen, Fluorantheen, Benzeen en Toluëen.

Door RIVM (1996) zijn de emissies van Beens[a]pyreen, fluorantheen en benzeen voor verschillende jaren gegeven. Aangezien concentraties met de "steady state" benadering worden berekend zijn alleen de emissies in jaar 1995 van belang. Door RIVM (1996) zijn de emissies naar lucht, water en bodem per doelgroep weergegeven. De emissies naar de bodem kunnen in het SimpleBox versie 2.0 model verdeeld worden over drie bodemsoorten (natuurgebieden, landbouwgrond, en stedelijk gebied). De emissies van de doelgroep landbouw vinden op landbouwgrond plaats en de emissies van de overige doelgroepen gaan naar het stedelijk gebied (inclusief infrastructuur). De atmosferische emissie van benzeen wordt hoofdzakelijk door het verkeer veroorzaakt (Tabel 3.20).

Tabel 3.20: Emissies in Nederland in 1995 [ton/jaar]

compartiment	benzeen	tolueen	benzo[a]pyreen	fluorantheen
atmosfeer	7840,5	22400	6,2	109,3
oppervlaktewater	-	666	2,9	7,5
natuur	-	-	-	-
landbouwgrond	-	-	-	3,2
stedelijk gebied	-	-	-	6,1
Totaal	7840,5		9,1	126,1

Buitenlandse emissie van benzo[a]pyreen, fluorantheen en benzeen.

Bij de concentratieberekeningen voor benzeen zijn de buitenlandse emissies (Europa) in 1993 (Booij, 1997) gebruikt, zie **Bijlage Ib**. Benzeen en tolueen dragen bij aan de totale emissie van vluchtige organische verbindingen (VOS). De Europese atmosferische emissie van tolueen is geschat aan de hand van de verhouding van de totale atmosferische emissie van vluchtig organische verbindingen, exclusief methaan (VOS NM) in Nederland en Europa (**Bijlage Ib**). De emissie naar oppervlaktewateren in Europa is berekend uit de verhouding van de emissie naar lucht en de emissie naar water in Nederland.

De emissies van Benzo[a]pyreen in Europa in 1995 zijn geschat door te veronderstellen dat voor de West-Europese landen (EER inclusief Zwitserland) de verandering van de emissie ten opzichte van de emissies in 1990 gelijk is geweest aan de verandering van de emissie in 1995 ten opzichte van 1990 in Nederland. Deze veronderstelling is niet onaannemelijk omdat Nederland in vergeleken met andere EU-landen gelijk op loopt met het terugdringen van de emissies en de introductie van emissie-eisen aan nieuwe installaties en voertuigen (RIVM, 1996). Dit houdt in dat voor de West-Europese landen de totale emissies ten opzichte van 1990 in 1995 met 20% zijn gedaald. Voor de verdeling van de totale emissie over lucht en water is verondersteld dat deze verhouding gelijk is aan de verhouding in Nederland in 1995. Van de totale benzo[a]pyreen emissies in Nederland gaat 68% naar de lucht en 32% naar het oppervlaktewater. De verhouding tussen de atmosferische emissies van benzo[a]pyreen en fluorantheen blijkt door de jaren heen vrij konstant te zijn. Een verklaring hiervoor kan zijn dat fluorantheen en benzo[a]pyreen dezelfde emissiebronnen hebben. PAK's worden gevormd bij verbrandingsprocessen (industrie, ruimteverwarming en verkeer). De atmosferische emissies van fluorantheen blijken ongeveer 18 maal zo hoog te zijn als de atmosferische emissies van benzo[a]pyreen. De emissies naar de bodem en het oppervlaktewater voor West-Europa zijn vervolgens afgeleid uit de relatieve emissies van fluorantheen in Nederland naar de bodem en het oppervlaktewater voor 1995. Ook deze relatieve bijdragen wijken door de jaren heen niet sterk van elkaar af. De gebruikte emissies van benzo[a]pyreen en fluorantheen in West-Europa in 1995 zijn gegeven in **Bijlage Ib**.

Emissies pesticiden

Nederlandse emissies van de geselecteerde pesticiden zijn gelijkgesteld aan de verkoop volumes in 1993 (Merkelbach en Lentjes, 1993). De buitenlandse emissies zijn geschat (zie ook Klepper en Van de Meent, 1997) op basis van de landbouw arealen van de verbouwde gewassen waarop de pesticiden worden toegepast (FAO, 1994). Daarbij zijn eveneens de gebruikelijke dosering en de toepassingsfrequentie en een kansfactor in de berekening meegenomen (Merkelbach en Lentjes, 1993). Indien er alleen productiegegevens voorhanden waren voor de gewassen in de FAO-database, is oppervlak van het betreffende gewas geschat met de productie-areaal verhouding in Nederland.

Omdat niet elke gewas-categorie zoals gegeven in ISBEST-bestand (Merkelbach en Lentjes, 1993) voorkomt in de FAO-database, zijn de uitkomsten, het totaal pesticide gebruik per land, geschaald op het gebruik van het betreffende pesticide in Nederland.

Wanneer de gecorrigeerde FAO-ISBEST schatting voor het bestrijdingsmiddel in Nederland meer dan een factor 10 afwijkt van de ISBEST-gegevens, dan is het gebruik van betreffende insecticide, fungicide of herbicide geschat uit de verhouding van het totale gebruik in Nederland en het totale gebruik in Europa van insecticiden, fungiciden en herbiciden. Als er geen gegevens voor het totaal gebruik van een pesticide in een land waren dan is het pesticide gebruik berekend uit de verhouding tussen het totale landbouwareaal in Nederland en het totale landbouwareaal van het betreffende land. Het totale landbouw areaal is de som van het areaal grasland, bouwland en boomgaarden. Voor azinphos-methyl, malathion en trifluralin is het oppervlak waarop het middel wordt toegepast bepaald uit de verkoopvolumes van ISBEST de gebruikelijke dosis en toepassingsfrequentie. Vervolgens is het gebruik in een ander Europees land geschat uit de verhouding tussen het totale landbouwareaal in Nederland en het totale landbouwareaal van het betreffende land. De uitkomsten van de schattingen van het pesticide-gebruik voor Europa zijn weergegeven in **Bijlage Ic**.

3.2.2 Vergelijking emissieschattingen met emissieregistratie⁷

In Nederland wordt jaarlijks een inventarisatie gemaakt van de emissies naar lucht en water aangevuld met emissieramingen voor het volgend jaar. De emissieregistratie omvat emissies naar lucht, water en bodem. Voor grote industriële puntbronnen worden de gegevens verzameld op individuele basis, dat wil zeggen dat deze emissies worden berekend met behulp van de kennis van wat er in ieder individueel bedrijf gaande is. Met deze benadering wordt het grootste gedeelte van de industriële emissies geïnventariseerd. Dit gedeelte van de emissie-inventarisatie omvat de 700 a 800 grootste bedrijven. De emissie van de overige industriële bedrijven en de niet-industriële bronnen vindt plaats door toepassing van landelijke statistieken en emissiefactoren, resulterend in landelijke totaalemissies per bronsoort. De emissiegegevens van ongeveer 900 stoffen en stofgroepen worden in een centrale database verzameld, opgeslagen en jaarlijks geactualiseerd.

De gegevens van de Nationale emissieregistratie worden onder andere gebruikt voor het formuleren van nationale en internationale milieubeleidsdoelstellingen. In de Nationale Milieubalans (RIVM, 1996) worden de emissiegegevens van de nationale emissieregistratie voor een aantal stoffen weergegeven. Voor 1995 waren dat de voor dit onderzoek relevante stoffen dioxinen, benzeen, benzo[a]pyreen en fluorantheen.

Ter vergelijking van de in dit onderzoek geschatte emissiegegevens zijn voor de verschillende sectoren de geschatte emissies en de emissies van de emissiejaarrapportage naast elkaar gelegd. Alle emissiegegevens van de emissieregistratie komen uit Auweraert et al. (1996) en Berdowski et al. (1996).

Tabel 3.21: Emissie naar de atmosfeer [kg/jaar] in Nederland volgens de emissieregistratie en eigen schattingen.

	Emissieregistratie		Eigen schatting 1995	Sector
	1994	1995		
Dibutylftalaat	5.33	5.49	1.1	Industrie
Diethylhexylftalaat	23.9	24.8	23.7	Industrie

De emissie van dibutylftalaat naar de lucht ligt volgens de emissieregistratie een factor 5 hoger dan de eigen schattingen. Overigens stijgt de emissie van DBP naar de atmosfeer van 3.52 ton/jaar in 1993 naar 5.33 ton in 1994. Deze stijging is het resultaat van veranderingen in de emissiefactor, productievolume en of het productieproces (Berdowski et al., 1996).

Voor ftalaten zijn blijkbaar alleen de emissies van de sector industrie beschouwd en niet de emissies die tijdens het gebruik van produkten waarin ftalaten zijn verwerkt ontstaan. De totale emissie wordt namelijk alleen veroorzaakt door de sector industrie (Auweraert et al., 1996). De emissies die optreden tijdens het gebruik van produkten hebben een niet onaanzienlijk aandeel (25%) in de totale emissie van ftalaten, volgens eigen schattingen. Hetzelfde geldt voor de emissies naar het oppervlaktewater.

Tabel 3.22: Emissies in Nederland naar oppervlaktewateren [kg/jaar] volgens de emissieregistratie en eigen schattingen.

	Emissieregistratie		Eigen schatting	Sector
	1994	1995	1995	
Ftalaten	117	113	1350(DEHP) 845 DBP	Industrie totaal
	117	113	2195	
Hexachloorbenzeen	14		10	Industrie overige totaal
	4.6		5	
	18.6	19.5	15	
Pentachloorfenol	4		392	Industrie overige totaal
	384		392	
	388	386	784	
TCB's	4		82	industrie overige totaal
	31.1		32	
	35.1	35.3	114	

Sector overige omvat o.a. huishoudens en andere diffuse bronnen.

Het verschil tussen de emissieregistratie en de eigen schatting voor emissie van dibutylftalaat en diethylhexylftalaat naar oppervlaktewateren zit hoofdzakelijk in de schatting van de emissie door de lakindustrie (800 kg voor zowel DEHP als DBP). Volgens de emissieregistratie vinden er in 1994 geen emissies van ftalaten naar het oppervlaktewater door de lakindustrie plaats.

De emissieschatting voor hexachloorbenzeen naar het oppervlaktewater door de industrie is hoger dan de eigen schatting. De emissie door de sector overige is volgens beide schattingen ongeveer 5 kg/jaar.

De industriële emissie van pentachloorfenol (zonder pentachloorfenyllauraat) is volgens eigen schatting bijna 100 keer zo hoog en wordt verondersteld net zo hoog te zijn als de diffuse emissie door huishoudens. Daarin zit waarschijnlijk het verschil. De emissieschatting voor de categorie overige is bijna gelijk.

Hetzelfde geldt voor trichloorbenzenen. Het verschil in de emissie van TCB's naar het oppervlaktewater door de industrie zit in de extra emissie van 50 kg 1,3,5-TCB door de farmaceutische industrie en de veronderstelling dat de diffuse emissie van TCB's door de industrie even hoog is als de diffuse emissie van huishoudens komen de emissie schattingen goed overeen. De emissieschattingen voor de categorie overige wordt geschat op ongeveer 32 kg per jaar.

Conclusie

De eigen schattingen van de emissies komen op een aantal punten niet overeen met de gerapporteerde emissies volgens de emissieregistratie. Aan de andere kant zijn er ook duidelijke overeenkomsten.

De emissies van dibutylftalaat naar de lucht vallen hoger uit waarschijnlijk omdat de geschatte emissie, zoals eerder aangegeven, gebaseerd zijn op de stoffeigenschappen van diethylhexylftalaat. Daarnaast is de emissie van dibutylftalaat volledig afkomstig van een andere industrietak, nl. de bouwmaterialenindustrie terwijl volgens eigen schattingen er ook nog emissies door de kunststofindustrie veroorzaakt worden.

De emissie van diethylhexylftalaat naar de atmosfeer door de kunststofverwerkende industrie komt goed overeen met de eigen schatting. Het lijkt erop dat er bij de emissieregistratie geen rekening is gehouden met de emissies van ftalaten die ontstaan tijdens de gebruiksfase en de afvalfase. Bij de eigen schattingen is aangenomen dat er nog emissies door de lakindustrie worden veroorzaakt. Volgens de emissieregistratie zijn die emissies er niet. Het zou kunnen zijn dat de emissie door de lakindustrie zijn teruggedrongen door technische maatregelen of door de ftalaten te vervangen.

Bij de eigen emissieschattingen is aangenomen dat de diffuse emissie van de industrie gelijk is aan de diffuse belasting door huishoudens. Het grootste gedeelte van de emissies komen via het rioolringstelsel bij de RWZI's terecht. De (diffuse) emissie van pentachloorfenol en de trichloorbenzenen door de industrie naar water zijn volgens de emissie registratie lager. De diffuse emissie door huishoudens (categorie overige) naar water komen voor hexachloorbenzenen, pentachloorfenol en de trichloorbenzenen goed overeen. Als laatste verschil dient opgemerkt te worden de emissie van 1,3,5-trichloorbenzenen door de farmaceutische industrie. Volgens eigen schattingen bedraagt de emissie naar water 50 kg/jaar. Volgens de emissieregistratie wordt er geen emissie van chloorbenzenen veroorzaakt door de farmaceutische industrie.

Op een aantal punten zouden de eigen emissieschattingen aangepast kunnen worden.

- Geen emissie van ftalaten naar water door de lakindustrie
- Geen emissie van 1,3,5-trichloorbenzenen naar water door de farmaceutische industrie
- Emissie van dibutylftalaat naar lucht verhogen met de emissies door de bouwindustrie.

3.3 Gemeten Concentraties⁸

In deze paragraaf worden gemeten veldconcentraties in Nederland weergegeven. Gemeten concentraties voor de compartimenten landbouwgrond, natuurbodems en oppervlaktewateren zullen worden samengevat in een tabel met als doel ze in hoofdstuk 4 (paragraaf 4.1.2) te vergelijken met de volgens SimpleBox 2.0 berekende concentraties.

3.3.1 Bodem

Zware metalen en Arseen

Landbouwgebieden

Door het RIVM in samenwerking met het LBG is een kartering uitgevoerd om de bodemkwaliteit van landbouwgronden vast te stellen. Verschillende combinaties van grondsoort (zand, rivierklei, zeeklei, leem, en veen) en bodemgebruik (grasland, bouwland, mais, boomgaarden en bloembollenteelt) werden geselecteerd. De monsters zijn geanalyseerd op totaal en beschikbare zware metalen en arseen en de organische verbindingen PAK's, PCB's, lindaan en triazines. De organische verbindingen komen in de volgende paragrafen aan de orde, in deze paragraaf zullen de resultaten van de zware metalen worden weergegeven.

Op grasland en boomgaarden zijn de monsters genomen tot een diepte van 0-5 cm en op bouwland, mais en bloembollenteelt tot een diepte van 0-25 cm (Lagas en Groot, 1996). De gemeten concentraties geven een redelijk actueel beeld, de steekproeven zijn genomen in het jaar 1992.

De gemiddelde concentratie per metaal per combinatie bodemgebruik en grondsoort zijn overgenomen uit Lagas en Groot (1996), Tabel 3.23.

Tabel 3.23: Gemiddelde concentratie [mg/kg_{d.s.}] per combinatie grondgebruik/grondsoort voor een aantal zware metalen en arseen.

Combinaties grond- gebruik/grondsoort	Cd	Cr	Cu	Hg	Ni	Pb	Zn	As
Gras/rivierklei	0.43	35.80	23.28	0.15	19.90	42.50	142.60	15.30
Gras/veen	0.51	29.17	28.50	0.31	12.30	72.50	132.40	10.22
Gras/zand	0.19	9.92	11.91	0.07	3.68	21.92	43.50	3.88
Gras/zeeklei	0.35	40.20	19.14	0.13	18.60	37.80	117.40	10.64
Bouwland/zand	0.22	7.33	10.90	0.06	1.70	16.33	34.40	2.62
Bouwland/zeeklei	0.31	36.25	17.08	0.08	19.33	26.25	79.40	13.98
Gras/diversen	0.51	22.00	19.55	0.09	9.60	32.00	114.70	7.10
Bouwland/diversen	0.21	15.80	14.26	0.15	8.74	16.00	63.60	4.82

Tabel 3.24: Gemiddelde concentraties (gemiddeld over de combinatie grondgebruik en grondsoort en niet gewogen naar oppervlak) van een aantal zware metalen en arseen in landbouwgebieden en natuurgebieden

	landbouw [mg/kg]	natuur [mg/kg]	natuur ⁹ [mg/kg]
Cd	0.34	0.18	0.17
Cr	25		21
Cu	18	4	2
Ni	12	2	2
Pb	33	22	16
Zn	91	8	14
As	9		3
Hg	0.13		0.18

Natuurgebieden⁹

In de periode van oktober-november 1991 is door het RIVM een veldonderzoek uitgevoerd naar de bodem en grondwaterkwaliteit op vijf lokaties langs autosnelwegen (Groot en van Swinderen, 1996). De lokaties zijn gelegen in kwetsbare gebieden, bos op zandgrond. Op twee afstanden van de snelweg

zijn monsters genomen, dichtbij (2-14m) en veraf (74-190m). De monsters zijn genomen in de bovenste 10 cm van de bodem. Het onderzoek moest onder andere antwoord geven op de vraag of de emissie van het verkeer op deze wegen verhoogde concentraties te weeg brengt en of deze concentraties afnemen naarmate de afstand tot de snelweg groter wordt. Alleen voor lood werd een duidelijk afstandseffect waargenomen. De algemene conclusie van Groot en van Swinderen (1996) was dat er wel degelijk invloed van het verkeer op de bodem- en grondwaterkwaliteit te meten is; met name lood. De gemeten concentraties zijn in dit rapport geïnterpreteerd als natuurbodem, het is zeker niet zo dat de steekproef representatief is voor de gesteldheid van natuurgebieden in Nederland. Om een meer representatief beeld te krijgen van zandbodems in natuurgebieden zijn alleen de "veraf" metingen gebruikt om een gemiddelde concentratie te berekenen.

Organische verbindingen en pesticiden

Gemeten veldconcentraties in de bodem zijn hoofdzakelijk gebaseerd op Lijzen en Ekelenkamp (1995). De concentraties van de beschouwde stoffen in de bodem zijn weergegeven in Tabel 3.25; 3.26 en 3.27.

PCB's

Voor zover bekend bestaan er geen metingen van concentraties van PCB's in de bodem en water van voor 1990. Wel zijn er voor 1990 metingen verricht aan concentraties van PCB's in sedimenten. Annema et al. (1995) rapporteren voor verschillende combinaties van bodemtype en bodemgebruik in Nederland, gemeten PCB-gehalten van zeven congenen. De zeven congenen maken ongeveer een vijfde deel uit van de totale hoeveelheid PCB's in het milieu.

De verschillende bodemtypes en bodemgebruik zoals gerapporteerd door Annema et al. (1995) kunnen worden onderverdeeld in vier bodemgebruiksoorten: weiland, akkerland, boomgaarden en bosgrond (natuurbodems). Een gemiddelde concentratie voor landbouwgrond is verkregen door de concentraties van de zeven PCB-congeneren in de bovenste 10 cm van de grond per bodemgebruiksoort te middelen. Het gemiddelde gehalte van deze zeven PCB's is vervolgens gewogen naar het oppervlak van weiland, akkerland en boomgaarden. Het totale gehalte aan PCB's in landbouwgrond is hieruit bepaald door het berekende gehalte voor de 7 congeneren samen te vermenigvuldigen met 5. Het gehalte aan PCB's in de natuurlijke bodem is gelijkgesteld aan het gehalte in naaldbossen. Het gehalte aan PCB's in de overige bodemsoorten (stedelijk gebied) is gelijkgesteld aan de door Annema et al. (1995) berekende gehalte voor de gemiddelde Nederlandse bodem.

Tabel 3.25: Gemeten gemiddelde concentratie van totaal PCB's in de verschillende compartimenten in 1990.

Compartiment	Concentraties
Bodems	
landbouw	38.8 [$\mu\text{g}/\text{kg}$ (d.s.)]
natuur	8.8 [$\mu\text{g}/\text{kg}$ (d.s.)]
andere	12.2 [$\mu\text{g}/\text{kg}$ (d.s.)]

Tabel 3.26: Gemeten concentraties organische verbindingen en pesticiden [$\mu\text{g}/\text{kg}$] in bodems in landbouwgebieden.

	gemiddelde	minimum	maximum	jaar v meting	Ref
Benzeen					
B[a]p	22.42	3	261	1992	Lagas, 1996
DBP					
DEHP					
Dioxinen		$1 \cdot 10^{-3}$	$9 \cdot 10^{-3}$	1990	Slooff, 1993
Fluorantheen	71.38	22	830	1992	Lagas, 1996
HCB	3.7	0.1	17		Lijzen, 1995
PCB's	38.8			1990	Annema, 1995
PCP	0.59			1980	Slooff, 1991
1,2,3-TCB					
1,2,4-TCB					
1,3,5-TCB					
Tolueen					
Atrazine	5.64	5*	20/47	1992/88	Lagas, 1996
Lindaan	0.57	0.17	2	1992	Lagas, 1996
Parathion			100	1988	Lijzen, 1995
Simazine	5.14	5*	16	1992	Lagas, 1996

* helft van de detectielimiet

Tabel 3.27: Gemeten concentraties organische verbindingen [$\mu\text{g}/\text{kg}$] in bodems in natuurgebieden.

	gemiddelde	minimum	maximum	jaar v meting	Ref
Benzeen	5*	<10		1991	Groot, 1993
B[a]p	22.38	5	90	1991	Groot, 1993
Dioxinen	$3 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$9 \cdot 10^{-3}$	1990	Slooff, 1993
Fluorantheen	50.25	5	300	1991	Groot, 1993
HCB	0.25*	<0.5			Lijzen, 1995
PCB's	8.8			1990	Annema, 1995
Tolueen	25*	<50		1991	Groot, 1993

* helft van de detectielimiet

3.3.2 Oppervlaktewateren

Tabel 3.28: Gemeten concentraties [$\mu\text{g}/\text{l}$] in oppervlaktewateren in Nederland.

	gem.	min.	max.	jaar v meting	Referenties
Benzeen	$<1.0 \cdot 10^{-1}$			1987	Slooff (1987)
B[a]p #		$3.48 \cdot 10^{-4}$	$3.5 \cdot 10^{-2}$	1987	
DBP	$2.8 \cdot 10^{-1}$			1989	ECPI (1996)
DEHP	$1.2 \cdot 10^{-1}$			1989	ECPI (1996)
Dioxinen #	$1.4 \cdot 10^{-7}$			1990	
Fluorantheen #		$2.9 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-1}$	1987	
HCB	$\leq 1.0 \cdot 10^{-3}$	$< 1.0 \cdot 10^{-4}$	$3.0 \cdot 10^{-3}$	1988	Slooff (1991)
PCB's #	$1.8 \cdot 10^{-2}$			1990	
PCP	$3.4 \cdot 10^{-2}$	$2.0 \cdot 10^{-2}$	$2.5 \cdot 10^{-1}$	1988	Slooff (1991)
1,2,3-TCB	$1.7 \cdot 10^{-2}$	$2.0 \cdot 10^{-3}$	$9.0 \cdot 10^{-2}$	1988	Slooff (1991)
1,2,4-TCB					
1,3,5-TCB					
Tolueen	$1.0 \cdot 10^{-1}$		$8.0 \cdot 10^{-1}$	1984	Slooff (1988)
Atrazine	$1.1 \cdot 10^{-2}$				Klepper en Meent (1997)
Lindaan	$3.0 \cdot 10^{-3}$				Klepper en Meent (1997)
Parathion	$4.0 \cdot 10^{-3}$				Klepper en Meent (1997)
Simazine	$1.0 \cdot 10^{-2}$				Klepper en Meent (1997)
Cadmium	$7.0 \cdot 10^{-2}$				Klepper en Meent (1997)
Koper	$3.91 \cdot 10^0$				Klepper en Meent (1997)
Lood	$1.8 \cdot 10^0$				Klepper en Meent (1997)
Zink	$1.6 \cdot 10^1$				Klepper en Meent (1997)

Concentraties in het oppervlaktewater berekend uit gemeten concentraties in het sediment door toepassing van het evenwichtpartitieconcept.

Benzeen

De gemeten concentraties van benzeen in het IJsselmeer en de Maas in respectievelijk 1984 en 1983 waren doorgaans lager dan 0.1 µg/l (Slooff et al., 1987).

Benzo[a]pyreen en fluorantheen

Gemeten concentraties van benzo[a]pyreen en fluorantheen in de Rijn en Maas zijn voor benzo[a]pyreen in zowel Rijn en Maas 0.02 µg/l. Voor fluorantheen zijn de concentraties respectievelijk 0.18 en 0.15 µg/l. De concentraties zijn gemeten in 1985. Op basis van gemeten gehalten van benzo[a]pyreen en fluorantheen in waterbodems in 1987 en de evenwichtspartiticoëfficiënt zijn concentraties in het water berekend.

Gemeten concentraties in het sediment van Nederlandse meren liggen voor benzo[a]pyreen tussen 0.02 en 0.5 mg/kg en in sedimenten van rivieren tussen de 1 en 2 mg/kg. Concentraties van fluorantheen in sedimenten van meren in Nederland liggen tussen 0.1 en 1.0 mg/kg en voor rivieren in Nederland tussen 2 en 4 mg/kg (Slooff et al., 1989). De concentratie van benzo[a]pyreen in rivieren ligt tussen $1.7 \cdot 10^{-2}$ - $3.5 \cdot 10^{-2}$ µg/l en in meren tussen $3.48 \cdot 10^{-4}$ - $8.7 \cdot 10^{-4}$ µg/l. De berekende concentratie van fluorantheen is voor rivieren ligt tussen $2.4 \cdot 10^{-1}$ - $4 \cdot 10^{-1}$ µg/l en varieert in meren van $2.9 \cdot 10^{-2}$ - $5.8 \cdot 10^{-2}$ µg/l.

Dibutylftalaat en diethylhexylftalaat

De concentraties van dibutylftalaat en diethylhexylftalaat zijn concentraties gemeten in het IJsselmeer in 1989 (ECPI, 1996).

Dioxinen

Het gehalte dioxinen, uitgedrukt in ng I-TEQ/l, in oppervlakte wateren is berekend uit concentraties in de waterbodems met de evenwichtspartiticoëfficiënt voor sediment. In 1990 zijn in de Nieuwe Waterweg dioxine gehalten waargenomen van minimaal 43 to maximaal 48 ng I-TEQ/kg. In de Eems Dollard is in 1990 een gehalte in het sediment gemeten van 10 ng I-TEQ/kg (Slooff et al., 1993).

PCB's

Het gehalte PCB's in oppervlaktewateren is eveneens berekend op basis van sediment gehalten en de evenwichtspartiticoëfficiënt voor sediment. Het gemiddelde gehalte PCB's in de Nederlandse waterbodems is geschat op 400 µg/kg (Annema, et al., 1995).

Trichloorbenzenen

De concentratie trichloorbenzenen is gebaseerd op de gezamenlijke gehalte van de drie congenen in de Rijn, Maas, Westerschelde, het Noordzeekanaal en de Nieuwe Waterweg, gemeten in 1988 (Slooff, et al., 1990).

Hexachloorbenzeen

De concentraties van hexachloorbenzeen zijn gebaseerd op hetzelfde jaar en dezelfde lokaties als van de TCB's (Slooff et al., 1990)

Pentachloorfenol

De concentraties van pentachloorfenol in de Nederlandse oppervlaktewateren zijn gemeten in de Rijn bij Lobith, de Maas bij Eijsden, Schaar van Oude Doel, KM2 en NW 37 in 1988.

Tolueen

De over een jaar gemiddelde concentratie van tolueen in de Rijn, Maas en het IJsselmeer was in 1984 0.1 µg/l en maximaal 0.8 µg/l in de Maas (Slooff et al., 1988)

Zware metalen

De concentraties van de zware metalen lood, koper, cadmium en zink zijn overgenomen uit Klepper en Van de Meent (1997).

3.4 Toxiciteitsgegevens

In dit hoofdstuk worden de toxiciteitsgegevens van de verschillende stoffen besproken. De NOEC's die gebruikt zijn voor de berekening van de coëfficiënten van de logistische verdelingscurve zijn weergegeven in **Bijlage II**. In dit hoofdstuk zullen per stof de afleiding van de NOEC's worden besproken. Er wordt echter nagestreefd om berekeningen met toxiciteitsgegevens zoveel mogelijk te beperken en zoveel mogelijk gebruik te maken van gemeten NOEC's. Per stof zullen de aquatische en terrestrische toxiciteitsgegevens worden besproken en aangegeven wat het toxische werkingsmechanisme van de stof is. Verder wordt aangegeven wat de bronnen van de toxiciteitsgegevens zijn.

3.4.1 Aquatische toxiciteitsgegevens

Benzeen

Benzeen behoort tot de groep apolaire verbindingen met een narcotiserende toxische werking. De NOEC's zijn gemeten laboratorium NOEC's uit de AQUATOX-database en AQUIRE-database. Daarnaast zijn NOEC's uit Vaal et al. (1995) gebruikt om de lijst aan te vullen, resulterend in een set van 12 NOEC's voor benzeen.

Benzo[a]pyreen

De gebruikte NOEC's voor benzo[a]pyreen zijn overgenomen uit Kalf et al. (1996). Zij hebben eveneens gebruik gemaakt van de routine van Van Leeuwen et al. (1991) om aquatische NOEC's te berekenen. De lijst van NOEC's is afgezien van de aanvulling met laboratorium NOEC's beduidend korter dan de lijst voor benzeen. De reden is dat de berekende NOEC's die een factor 10 hoger zijn dan de oplosbaarheid van de stof in water worden door Kalf et al. (1996) buiten beschouwing zijn gelaten. Dit geldt eveneens voor de gemeten laboratorium NOEC's. Deze vuistregel is in het vervolg toegepast op de berekende NOEC's via de methode van Van Leeuwen (1991). Deze vuistregel is niet toegepast op de gemeten laboratorium NOEC's. Indien de gemeten toxiciteitsgegevens de oplosbaarheid meer dan een factor 10 overschrijden zal dit worden aangegeven.

De toxiciteitsgegevens zijn dan minder betrouwbaar. De lijst van NOEC's uit Kalf et al. (1996) is verder aangevuld met een NOEC uit de AQUATOX database. Benzo[a]pyreen heeft een narcotiserende toxische werking. Het is mogelijk dat benzo[a]pyreen een andere (hogere toxiciteit) toxische werking dan de basistoxiciteit op basis van de hydrofobiciteit heeft omdat de berekende toxiciteitswaarden via de methode van Van Leeuwen et al. (1991) een lager toxiciteit voorspellen vergeleken met de in het laboratorium gemeten toxiciteitsgegevens (Kalf et al., 1996).

Dibutylftalaat

NOEC's voor dibutylftalaat zijn alleen gevonden in de IUCLID database. Chronische toxiciteitsgegevens voor ftalaten zijn schaars. De organismen waarvoor laboratorium NOEC's zijn gevonden zijn onder te verdelen in de drie taxonomische groepen vissen, algen en geleedpotigen. In geen van de gevallen wordt de oplosbaarheid met een factor 10 overschreden. Ftalaten behoren tot de groep chemische verbindingen met een diester-toxiciteit (ASTER, 1994).

Diethylhexylftalaat

Het aantal gevonden aquatische NOEC's voor diethylhexylftalaat is te verdelen over de drie taxonomische groepen vissen, algen en geleedpotigen. De laboratorium NOEC's overschrijden in bijna alle gevallen de oplosbaarheid van diethylhexylftalaat met een factor 10 behalve de NOEC voor *Salmo gairdneri*. Daarom is enige voorzichtigheid met het gebruik van deze NOEC's geboden. Diethylhexylftalaat behoort net zo als dibutylftalaat tot de groep chemische verbindingen met een diester-toxiciteit (ASTER, 1994).

Dioxinen

De toxiciteitsgegevens van dioxinen zijn gebaseerd op 2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-p-dioxine. De emissies van dioxinen en de berekende concentraties zijn allen uitgedrukt in I-TEQ. Dat wil zeggen dat de concentraties en emissies van andere dioxine congenereën en gechlloreerde dibenzofuranen worden omgerekend naar toxiciteitsequivalenten 2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-p-dioxine. De blootstellingsduur is een cruciale factor bij het meten van de toxiciteit van 2,3,7,8-TCDD omdat het toxisch effect pas enige tijd na de blootstelling optreedt. De organismen waarvoor toxiciteitsgegevens zijn gevonden zijn onder te verdelen in de drie taxonomische groepen vissen, wormen en weekdieren (slakken). Dioxinen en furanen behoren tot de groep chemicaliën met een cyclodien structuur en een neurotoxische werking.

Fluorantheen.

Fluorantheen heeft een narcotiserende toxische werking. De toxiciteitsgegevens van fluorantheen zijn gebaseerd op Kalf et al. (1996). De overgenomen NOEC's zijn geschat met de methode van Van Leeuwen et al. (1991) aangevuld met in het laboratorium gemeten NOEC's. De organismen waarvoor toxiciteitswaarden zijn verkregen zijn onder te verdelen in de 9 taxonomische groepen amfibieën, kreeftachtigen, vissen, algen, bacteriën, protozoa, coelenteraten, slakken en waterplanten.

Hexachloorbenzeen

De NOEC's uit Plassche (1994) zijn gebruikt voor de berekening van de NOEC-verdelingsfunctie. De toxische werking van hexachloorbenzeen kan worden ondergebracht in de groep van narcotiserende chemicaliën.

Pentachloorfenol

De gebruikte toxiciteitsgegevens staan gerapporteerd in Slooff et al. (1991). Het aantal organismen kan verdeeld worden in negen taxonomische groepen: vissen, slakken, coelenteraten, amfibieën, algen, bacteriën en insecten, kreeftachtigen en waterplanten. De gebruikte NOEC voor de vissen *Salmo gairdneri* en *Pimephales promelas* en de kreeftachtige *Daphnia magna*, zijn geometrisch gemiddelden. Pentachloorfenol wordt ondergebracht in de groep stoffen met ontkoppeling van de oxidatieve fosforylering als toxisch werkingsmechanisme.

PCB's

De toxiciteitsgegevens van PCB's zijn gemeten toxiciteiten. Toxiciteitsexperimenten worden meestal uitgevoerd met mengsels van PCB-congeneren. Indien met verschillende mengsels toxiciteitsexperimenten zijn uitgevoerd, is de NOEC berekend als het geometrisch gemiddelde van de NOEC's van de mengsels. De organismen zijn te verdelen in de drie taxonomische groepen vissen, kreeftachtigen en slakken. Vanwege de specifieke toxische werking van PCB's (vitamine A en dioxinetoxiciteit) is ervoor gekozen PCB's te beschouwen als een aparte groep stoffen met specifieke toxische werking.

Tolueen

De toxische werking van tolueen is narcotiserend. Slooff et al. (1991) rapporteerden zes aquatische NOEC's voor tolueen. Organismen uit de volgende 3 taxonomische groepen zijn vertegenwoordigd: algen, kreeftachtigen en vissen.

Trichloorbenzenen

De toxiciteitsgegevens (NOEC's) van de drie trichloorbenzeen isomeren zijn allen geschat met de methode van Van Leeuwen et al. (1991). Trichloorbenzenen behoren tot de groep apolaire verbindingen met een narcotiserende toxische werking. De NOEC van 1,3,5-TCB voor de schimmel *Saccharomyces cerevisiae* overschrijdt de oplosbaarheid met meer dan een factor 10.

Zware metalen en arseen

De aquatische toxiciteitsgegevens voor de zware metalen zijn allen overgenomen uit Crommentuijn et al. (1997). Zware metalen en arseen zijn hier beschouwd als stoffen met een specifieke toxische werking (effectadditie) in verband met de berekening van I_{tox} , zie hoofdstuk 2. Concentratie-additie en antagonistische effecten worden echter waargenomen bij sommige organismen (Posthuma en Notenboom, 1996)

Pesticiden

De toxiciteitsgegevens voor de pesticiden komen uit verschillende bronnen, zie Klepper en Van de Meent (1997). Een inventarisatie van chronische aquatische NOEC's voor pesticiden is gemaakt door Kalf et al. (1997). Indien er niet voldoende chronische NOEC's bekend zijn, is gebruik gemaakt van acute $E(L)C_{50}$'s die zijn omgerekend naar chronische NOEC's door ze te delen door een factor 10. Voor alle stoffen zijn in ieder geval drie toxiciteitsgegevens bekend van vissen, algen en kreeftachtigen (**Bijlage IIb**). Er wordt vanuit gegaan dat alle pesticiden een specifieke toxische werking hebben.

3.4.2 Terrestrische toxiciteitsgegevens

Organische verbindingen behalve landbouwbestrijdingsmiddelen

In tegenstelling tot aquatische toxiciteitsgegevens zijn toxiciteitsgegevens van de meeste organische verbindingen voor bodemorganismen schaars. Voor een aantal verbindingen zijn er geen of te weinig gegevens bekend voor bodemorganismen. In dat geval is verondersteld dat de gevoeligheid van de terrestrische organismen gelijk is aan de gevoeligheid van aquatische organismen en dat de organismen via het porievocht worden blootgesteld. Deze aannames worden o.a. gemaakt door Denneman en Van Gestel (1990) en Kalf et al. (1996) en lijkt valide voor de meeste verbindingen.

Voor een aantal verbindingen waren er geen of te weinig terrestrische toxiciteitsgegevens voorhanden om te gebruiken voor de berekening van de parameters alfa en bèta van de log-logistische verdelingscurve. Dit is het geval voor benzeen, PCB's, fluorantheen, DEHP, DBP, Dioxinen, 1,2,4-TCB en 1,3,5-TCB. De log-logistische verdelingscurve is daarom gebaseerd op de toxiciteitsgegevens van de aquatische organismen.

Dibutylftalaat en diethylhexylftalaat

Voor dibutylftalaat en diethylhexylftalaat zijn alleen terrestrische toxiciteitsgegevens gevonden van planten en bacteriën. Voor dibutylftalaat betreft het maar één taxonomische groep, planten, en voor diethylhexylftalaat maar twee, planten en bacteriën. De "gemeten" concentraties diethylhexylftalaat zijn tot een factor 10^6 hoger dan de oplosbaarheid in water. Vanwege de grote onbetrouwbaarheid van deze toxiciteitsgegevens zijn aquatische NOEC's gebruikt.

Benzo[a]pyreen

De terrestrische toxiciteitsgegevens voor benzo[a]pyreen zijn overgenomen uit Kalf et al. (1996). Het betreft NOEC's voor vijf bodemorganismen te verdelen in de twee taxonomische groepen wormen en geleedpotigen.

Dioxinen

Er zijn twee chronische terrestrische NOEC's voor 2,3,7,8-TCDD gevonden (Denneman en Van Gestel, 1990). Het betreft bodemfauna en de regenworm *A. Caliginosa*.

Hexachloorbenzeen

Voor hexachloorbenzeen is maar één terrestrische NOEC gevonden (Denneman en van Gestel, 1990; en Hesse et al., 1991). Daarom is ervoor gekozen aquatische NOEC's te gebruiken voor het schatten van de toxiciteit voor bodemorganismen die zijn blootgesteld via het porievocht.

PCB's

Er zijn in de literatuur voor zover bekend geen bodemtoxiciteitsgegevens bekend voor PCB's. Daarom zijn de aquatische NOEC's gebruikt voor de berekening van de vergiftiging van bodemorganismen door PCB's.

Pentachloorfenol

Van pentachloorfenol zijn twee NOEC's voor planten, een NOEC voor regenwormen en vier NOEC's voor microbiële processen gebruikt voor de berekening. De NOEC voor *Eisenia foetida* is het geometrisch gemiddelde van drie NOEC's. De NOEC voor zowel *Avena sativa* en *Lactuca sativa* is berekend uit twee gemeten NOEC's. Daarnaast is voor de berekening van het porievochtgehalte een $K_{p,s/l}$ berekend op basis van het organisch koolstofgehalte in de bodem en de pH afhankelijke K_{ow} . In totaal kunnen drie taxonomische groepen onderscheiden worden: planten, regenwormen en microbiële processen.

Trichloorbenzenen

Voor 1,2,3-trichloorbenzenen zijn twee terrestrische NOEC's gevonden. Het betreft de regenworm *Eisenia andrei* en de plant *Lactuca sativa*. Met deze gegevens zijn de coëfficiënten van de log-logistische verdelingscurve geschat. Voor 1,2,4-trichloorbenzenen en 1,3,5-trichloorbenzenen is één enkele NOEC gevonden. Daarom is gebruik gemaakt van aquatische toxiciteitsgegevens.

Tolueen

Een vijftal terrestrische NOEC's voor tolueen uit Denneman en van Gestel (1990) is gebruikt om de verdelingscurve te schatten. De organismen kunnen verdeeld worden in drie taxonomische groepen: planten, regenwormen en microbiële processen.

Zware metalen en arseen

Alle toxiciteitsgegevens van de zware metalen komen uit Denneman en van Gestel (1990). Voor zink zijn de gegevens aangevuld met recentere toxiciteitsgegevens (Slooff et al., 1993). In alle gevallen zijn alleen de toxiciteitsgegevens waarvan het totale gehalte is gemeten meegenomen in de berekeningen. Van organismen die via voedsel worden blootgesteld zijn de toxiciteitsgegevens buiten beschouwing gelaten. NOEC's op basis van droge stof gehalten zijn omgerekend naar porievochtconcentratie met de regressievergelijkingen van Janssen et al. (1996). Chronische EC_{50} 's voor microbiële processen en enzymatische activiteit zijn omgerekend naar chronische NOEC's door ze te delen door een factor 10. Als er meerdere NOEC's per "organisme" bekend zijn dan zijn de op porievochtgehaltes gebaseerde NOEC's geometrisch gemiddeld. LC_{50} 's en EC 's anders dan de chronische EC_{50} zijn niet omgerekend naar NOEC's (**Bijlage IIc**).

Pesticiden

De terrestrische NOEC-verdelingscurve is voor alle pesticiden gebaseerd op de aquatische toxiciteitsgegevens van de pesticiden (Klepper en Van de Meent, 1997).

4 BEREKENINGEN EN RESULTATEN

4.1 Veldconcentraties en achtergrondconcentraties

4.1.1 Organische verbindingen

De verspreiding van de organische microverontreinigingen in het milieu is met SimpleBox 2.0 berekeningen geschat voor het jaar 1995. De concentraties van de verschillende stoffen in de compartimenten water en bodem zijn berekend met de in hoofdstuk 3 weergegeven stoffeigenschappen en afbraaksnelheden en de in hoofdstuk 3 geschatte emissies voor Nederland en Europa. De berekende concentraties zijn weergegeven in concentraties in de water fase. Voor de bodem betekent dit dat de concentraties zijn weergegeven als concentraties in het poriewater. De concentraties in de water (vloeistof) fase zijn van belang voor de schatting van de PAF. Organismen in de natuurlijke omgeving worden verondersteld alleen te zijn blootgesteld aan de in water opgeloste fractie van de stof. De meeste terrestrische toxiciteitsgegevens moeten daarom worden omgerekend van droge stof gehalten naar gehalten in het poriewater. Tabel 4.1 geeft een overzicht van de met SimpleBox berekende concentraties in oppervlaktewateren en natuurlijke bodems en landbouwgrond.

Tabel 4.1: Berekende concentraties in oppervlaktewateren, natuurlijke bodems en landbouwgrond.

Stof	oppervlaktewateren [$\mu\text{g}/\text{l}$]		natuurgrond [$\mu\text{g}/\text{l}_{\text{pw}}$]		landbouwgrond [$\mu\text{g}/\text{l}_{\text{pw}}$]	
	berekend	gemeten	berekend		berekend	
Benzeen	$3.98 \cdot 10^{-3}$	$< 1.0 \cdot 10^{-1}$	$2.70 \cdot 10^{-9}$		$2.70 \cdot 10^{-9}$	
B[a]p	$2.08 \cdot 10^{-3}$	$3.5 \cdot 10^{-3}$	$1.20 \cdot 10^{-5}$		$1.81 \cdot 10^{-6}$	
DBP	$3.07 \cdot 10^{-3}$	$2.8 \cdot 10^{-1}$	$1.66 \cdot 10^{-5}$		$1.02 \cdot 10^{-11}$	
DEHP	$1.00 \cdot 10^{-3}$	$1.2 \cdot 10^{-1}$	$1.47 \cdot 10^{-7}$		$7.34 \cdot 10^{-8}$	
Dioxinen	$2.84 \cdot 10^{-8}$	$1.4 \cdot 10^{-7}$	$8.36 \cdot 10^{-10}$		$1.26 \cdot 10^{-10}$	
Fluorantheen	$2.17 \cdot 10^{-2}$	$1.1 \cdot 10^{-1}$	$3.13 \cdot 10^{-5}$		$3.34 \cdot 10^{-5}$	
HCB	$2.55 \cdot 10^{-4}$	$\leq 1.0 \cdot 10^{-3}$	$5.94 \cdot 10^{-8}$		$3.12 \cdot 10^{-7}$	
PCP	$1.02 \cdot 10^{-1}$	$3.4 \cdot 10^{-2}$	$6.62 \cdot 10^{-5}$		$3.92 \cdot 10^{-5}$	
PCB's	$1.80 \cdot 10^{-2}$	$1.8 \cdot 10^{-2}$	$8.80 \cdot 10^{-6}$		$3.88 \cdot 10^{-5}$	
Tolueen	$3.31 \cdot 10^0$	$1.0 \cdot 10^{-1}$	$2.90 \cdot 10^{-3}$		$2.30 \cdot 10^{-3}$	
1,2,3-TCB	$7.61 \cdot 10^{-5}$		$3.29 \cdot 10^{-8}$		$4.03 \cdot 10^{-4}$	
1,2,4-TCB	$1.89 \cdot 10^{-5}$	$* 1.7 \cdot 10^{-2}$	$2.32 \cdot 10^{-8}$		$8.12 \cdot 10^{-4}$	
1,3,5-TCB	$2.62 \cdot 10^{-4}$		$8.83 \cdot 10^{-9}$		$4.70 \cdot 10^{-9}$	

* Concentratie voor totaal trichloorbenzenen.

In hoofdstuk 3 zijn gemeten veldconcentraties gegeven die dienen als vergelijkingsmateriaal voor de berekende concentraties. De meest recente gegevens over concentraties in de bodem komen uit Lagas (1996) en Groot en van Swinderen (1993). De gemeten veldconcentraties blijken voor benzo[a]pyreen en fluorantheen beduidend hoger te liggen dan de berekende concentraties. De concentratie van PCB's in de bodem en het oppervlaktewater veranderen nauwelijks ondanks de emissiereducties. De berekende concentratie van benzeen en toluen in de bodem liggen beneden de detectielimiet. Dit komt overeen met de veldwaarnemingen. De berekende concentratie van benzeen en toluen in de oppervlaktewateren komt voor toluen goed overeen met de gemeten concentratie en ligt voor benzeen beneden de detectielimiet wat overeenkomt met de veldwaarneming.

De berekende concentraties van pentachloorfenol in de bodem en het oppervlakte water komen goed overeen met de veldgegevens. Dit geldt eveneens voor de berekende concentraties dioxinen in oppervlaktewateren. De berekende concentratie dioxinen in de bodem liggen een factor 10 (natuurgrond) tot 100 (landbouwgrond) lager dan de gemeten waarde

Tabel 4.2: Met SimpleBox berekende porievochtconcentraties [g/l] en gehalten op basis van droge stof [g/kg] in de bodem in 1995 en concentraties in het oppervlaktewater [g/l] van pesticiden.

	Oppervlaktewater		Natuurbodem		Landbouwbodem	
	berekend	gemeten	poriewater berekend	droge stof berekend	gemeten	poriewater berekend
2,4-D	8.52E-09	1.00E-8	4.47E-10	1.44E-08		4.38E-05
atrazine	8.74E-07	1.10E-8	6.84E-09	1.36E-07	5.64E-6	2.69E-04
azinphosmethyl	8.10E-09	6.00E-9	3.51E-11	9.88E-10		3.11E-05
bentazon	1.67E-06	4.30E-8	5.63E-14	1.17E-14		1.27E-04
carbendazin	1.25E-05	1.32E-7	2.40E-09	3.98E-09		1.64E-04
dichloorvos	2.91E-09	4.00E-9	2.35E-10	9.34E-10		4.43E-05
diquatdibromide	2.11E-07		1.69E-13	9.95E-10		6.35E-05
diuron	2.06E-07	3.30E-8	6.24E-09	2.06E-07		1.97E-04
DNOC	7.55E-08	4.00E-9	4.00E-09	4.91E-08		2.60E-04
fentinacetaat	6.36E-08		2.56E-10	3.44E-08		5.27E-05
lindaan	4.55E-08	3.00E-9	6.61E-10	2.34E-07	5.70E-7	6.62E-06
malathion	6.40E-09		4.02E-11	1.13E-09		5.36E-05
maneb	1.30E-07		1.07E-07	2.18E-06		1.10E-03
mecoprop	1.97E-07	4.00E-8	1.74E-10	1.58E-09		7.21E-05
metamitron	3.37E-07		2.14E-08	7.24E-09		2.88E-04
methabenzthiazuron	1.94E-06	1.10E-9	1.79E-09	8.53E-09		2.07E-04
metribuzin	2.21E-08		1.60E-10	3.56E-10		4.61E-05
mevinfos	1.27E-09	2.00E-9	1.01E-10	1.79E-11		1.74E-05
monolinuron	7.51E-08	3.00E-9	2.17E-09	1.72E-08		7.81E-05
parathion	4.12E-09	3.00E-9	9.50E-12	3.07E-09		3.40E-05
simazine	1.30E-07	1.00E-8	8.64E-10	6.54E-09	5.14E-6	1.07E-04
thiram	1.02E-07		2.14E-09	7.06E-09		6.66E-04
trifluralin	4.18E-11		9.35E-14	3.16E-10		1.67E-07

4.1.2 Pesticiden

De berekende concentraties van de 23 geselecteerde pesticiden in de Nederlandse oppervlaktewateren, natuurbodem en landbouwbodem staan in Tabel 4.2. De berekende concentraties in de oppervlaktewateren kunnen vergeleken worden met de gemeten concentraties (Klepper en Van de Meent, 1997). De concentratie van atrazine, lindaan en simazine zijn in niet direct belaste bodems in landbouwgebieden gemeten (Lagas, 1996).

4.1.3 Zware metalen en Arseen

Bij afwezigheid van ver in de tijd teruggaande historische emissiescenario's voor de zware metalen, is gekozen voor gebruik van in het veld gemeten concentraties (zie hoofdstuk 2). In hoofdstuk 3 zijn de gemiddelde gemeten concentraties in de compartimenten water, landbouwgrond en natuurbodem weergegeven. De in het veld gemeten concentraties (droge stof) worden eerst omgerekend naar concentraties in het porievocht om rekening te houden met de biobeschikbaarheid. Daarnaast moet er rekening worden gehouden met de achtergrondconcentraties, waarna de antropogene PAF is berekend (paragraaf 4.2).

Landbouwgebieden

De gehalten van de zware metalen zijn gemeten voor verschillende combinaties van grondsoort (zand, rivierklei, zeeklei, leem, en veen) en bodemgebruik (grasland, bouwland, mais, boomgaarden en bloembollenteelt). De gemiddelde uitkomsten per metaal per combinatie bodemgebruik en grondsoort zijn overgenomen uit Lagas en Groot (1996), zie Tabel 3.23. Naast de bepaling van de gehalten van de onderzochte stoffen zijn de bodem karakteristieken (pH, percentage organisch materiaal en het percentage klei) van de verschillende combinaties van bodemgebruik en grondsoort bepaald.

Gehaltes van de zware metalen en arseen in het porievocht zijn berekend door toepassing van het evenwichtspartitieconcept. Aan de hand van de bodemkarakteristieken (Tabel 4.3) zijn met de regressievergelijkingen van Janssen et al. (1996) de evenwichtspartitieconstanten ($K_{p,s/l}$)

Tabel 4.3: Gemiddelde bodemkarakteristieken bij de verschillende combinaties grondgebruik/grondsoort.

Combinaties grond- gebruik/grondsoort	pH-H ₂ O	pH-KCl	pH-CaCl ₂	% O.M.	% Klei
Gras/rivierklei	6.2	5.8	5.6	9.9	22.5
Gras/veen	5.8	5.0	5.2	30.8	14.5
Gras/zand	6.1	5.5	5.5	6.2	4.5
Gras/zeeklei	6.6	6.2	6.0	12.5	25.1
Bouwland/zand	6.0	5.1	5.4	4.8	3.0
Bouwland/zeeklei	7.8	7.2	7.2	3.4	21.08
Gras/diversen	6.3	6.0	5.7	13.1	9.6
Bouwland/diversen	6.5	5.9	5.9	3.0	7.5

berekend¹⁰.

Voor kwik en arseen zijn door Janssen et al. (1996) geen regressievergelijkingen afgeleid. De porievochtconcentraties voor kwik en arseen zijn berekend uit de evenwichtspartitiecoëfficiënt voor de bodem die gebruikt wordt voor de afleiding van de Maximaal Toelaatbare Concentraties (Crommentuijn et al., 1997).

Natuurgebieden

In de periode van oktober-november 1991 is door het RIVM een veldonderzoek uitgevoerd naar de bodem en grondwaterkwaliteit op vijf lokaties langs autosnelwegen (Groot en van Swinderen, 1996). De lokaties zijn gelegen in kwetsbare gebieden, bos op zandgrond.

Per locatie zijn de bodemkarakteristieken (pH, % organisch materiaal en % klei) bepaald. Met behulp van berekende partiticoëfficiënten (regressievergelijkingen van Janssen et al. (1996)) zijn per locatie gemiddelde concentraties in het porievocht berekend. Daaruit zijn vervolgens per metaal de concentratie in het porievocht van de bodem in “natuurgebieden” berekend. De resultaten van de gemiddelde berekende porievochtconcentraties voor zowel de landbouwgebieden als de natuurgebieden staan in Tabel 4.4.

Tabel 4.4: Gemiddelde concentraties van een aantal zware metalen en arseen in landbouwgebieden en natuurgebieden

	landbouw		natuur	
	mg/kg	µg/l _{pw}	mg/kg	µg/l _{pw}
Cd	0.34	0.18	0.18	3.76
Cr	24.56	2.49		
Cu	18.08	41.59	4.21	76.01
Ni	11.73	6.33	1.55	16.91
Pb	33.16	1.98	22.12	10.19
Zn	91.00	58.26	7.88	254.03
As	8.57	44.98		
Hg	0.13	0.76		

Achtergrondconcentraties

Daarnaast komen zware metalen van nature voor in de bodem. De achtergrondconcentraties van zware metalen en arseen verschillen per bodemtype, afhankelijk van de bodemeigenschappen. Lexmond en Edelman (1992) hebben dit verband gemodelleerd voor zeven zware metalen en arseen. Met de berekende regressievergelijkingen kan het achtergrondgehalte van de metalen worden geschat aan de hand van het klei-gehalte in de bodem. Als het organisch stof gehalte in de bodem $\geq 25\%$ dan wordt tevens het organisch materiaal gehalte in de regressievergelijkingen meegenomen (Lexmond en Edelman, 1992).

De geschatte achtergrondgehalten, uitgedrukt in vastestofconcentraties, worden vervolgens omgerekend naar porievochtconcentraties met de vergelijkingen van Janssen et al. (1996). Hiermee wordt dan de PAF, behorende bij de achtergrondconcentraties, berekend.

In Tabel 4.5 zijn de geschatte achtergrondconcentraties voor zeven zware metalen en arseen gegeven. De achtergrondgehalten zijn berekend behorende bij de bodemkarakteristieken van de acht landgebruik/grondsoort combinaties in Tabel 4.3. In tabel 4.6 zijn de gehalten van de metalen in de ondergrond van Nederlandse bodems (Lagas en Groot, 1996) gegeven als vergelijkingsmateriaal. De gehalten van de ondergrond kan gezien worden als de natuurlijke achtergrondconcentratie omdat verwacht mag worden dat de antropogene invloed minimaal is.

Tabel 4.5: Geschatte achtergrondconcentraties op basis van kleifractie [mg/kg] per combinatie grondgebruik/grondsoort, volgens Lexmond en Edelman (1992).

Combinatie grondgebruik/grondsoort	Cd	Cr	Cu	Ni	Pb	Zn	As	Hg
Gras/rivierklei	0.11	46.13	13.05	20.48	16.88	59.85	8.33	0.04
Gras/veen	0.07	29.73	8.41	13.20	10.88	38.57	5.37	0.02
Gras/zand	0.02	9.23	2.61	4.10	3.38	11.97	1.67	0.01
Gras/zeeklei	0.12	51.46	14.56	22.84	18.83	66.77	9.29	0.04
Bouwland/zand	0.01	6.15	1.74	2.73	2.25	7.98	1.11	0.01
Bouwland/zeeklei	0.10	43.21	12.23	19.18	15.81	56.07	7.80	0.04
Gras/diversen	0.05	19.68	5.57	8.74	7.20	25.54	3.55	0.02
Bouwland/diversen	0.04	15.38	4.35	6.83	5.63	19.95	2.78	0.01

Vergelijken we de achtergrondconcentraties van Tabel 4.5 en tabel 4.6 dan komen de gemeten ondergrondgehalten voor alle metalen overeen met de geschatte achtergrondgehalten. De gemeten metaalgehalten in de ondergrond zijn voor zeeklei en rivierklei voor alle metalen wat hoger.

Tabel 4.6: Zware metaalgehalten [mg/kg] in de ondergrond bij minimale antropogene beïnvloeding voor Nederlandse grondsoorten.

	Cd	Cr	Cu	Ni	Zn	Pb
zand	0.08	8.9	2	5.5	7.4	2.9
zeeklei	0.24	70	12	28	69	23
rivierklei	0.29	87	24	35	87	29

4.2 Berekening PAF en I_{tox}

4.2.1 Berekening PAF

Berekening van de coëfficiënten van de logistische distributiefunctie van de log NOEC's

De cumulatieve log logistische verdelingsfunctie, hoofdstuk 2 formule 1, wordt gespecificeerd door twee coëfficiënten, alfa en bèta. In de vorm waarin geen getransformeerde concentraties voorkomen wordt de log-logistische verdelingscurve gespecificeerd door de coëfficiënten a en b (formule 4, hoofdstuk 2). Beide parameters worden bepaald met behulp van niet lineaire regressie op de empirische verdelingsfunctie.

$$PAF = \frac{1}{1 + e^{\frac{-(\log c - \alpha)}{\beta}}} \quad 1$$

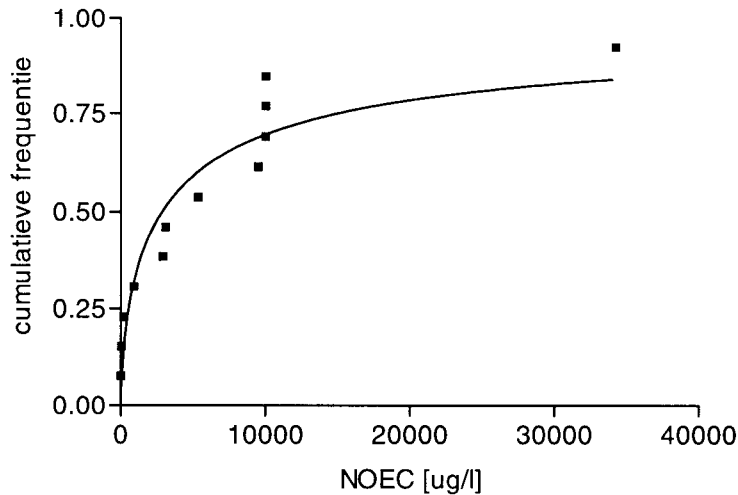
$$PAF = \frac{1}{1 + e^{\frac{-(\log c - \alpha)}{\beta}}} = \frac{\left(\frac{C}{a}\right)^b}{1 + \left(\frac{C}{a}\right)^b} \quad 4$$

Als voorbeeld wordt de logistische verdelingsfunctie van aquatische organismen voor benzeen berekend. In Tabel 4.7 staan NOEC's van benzeen voor 12 aquatische organismen. De met univariate niet lineaire regressie geschatte coëfficiënten a en b hebben respectievelijk de waarde 2855 en 0.6617. De univariate niet lineaire regressies zijn uitgevoerd met het software pakket GraphPad Prism™ versie 2.00.

Tabel 4.7: Aquatische NOEC's voor benzeen en de bijbehorende cumulatieve frequentie.

Organisme	NOEC [µg/l]	Cumulatieve frequentie	Referentie
<i>Salmo gairdneri</i> (vissen)	21	0.077	Aquatox
<i>Clupea harengus</i> (vissen)	50	0.154	Aquatox
<i>Cancer magister</i> (kreeftachtigen)	180	0.231	Aquatox
<i>Oncorhynchus kisuth</i> (vissen)	900	0.308	Aquatox
<i>Pimephales promelas</i> (vissen)	2900	0.385	Vaal, 1995
<i>Morone saxatilis</i> (vissen)	3100	0.461	Vaal, 1995
<i>Oncorhynchus mykiss</i> (vissen)	5340	0.538	Vaal, 1995
<i>Selenastrum capricornutum</i> (algen)	9500	0.615	Vaal, 1995
<i>Skeletonema costatum</i> (algen)	10000	0.692	Aquatox
<i>Daphnia magna</i> (kreeftachtigen)	10000	0.769	Aquatox
<i>Dunaliella tertiolecta</i> (algen)	10000	0.846	Aquatox
<i>Champia parvalu</i> (algen)	34260	0.923	Vaal, 1995

De fractie van de soorten die wordt blootgesteld aan concentraties hoger dan de laboratorium NOEC's kan berekend worden door de gemeten of berekende concentratie C in formule 4 in te vullen. Als de berekende concentratie van benzeen in het water bijvoorbeeld 10 µg/l bedraagt dan is de PAF = 0.0232. Dus voor 2.32 % van de aquatische organismen wordt de NOEC overschreden. Een maat voor de prestatie van de niet lineaire regressie is de regressiecoëfficiënt (R^2). Is regressiecoëfficiënt 1 (hoogste waarde) dan wordt 100 % van de empirische verdelingsfunctie verklaard door de geschatte verdelingsfunctie. De regressiecoëfficiënt van de functie in figuur 4.1 is 0.9062. Op deze wijze worden de coëfficiënten a en b voor alle stoffen voor zowel de terrestrische organismen als aquatische organismen berekend. De resultaten voor de geselecteerde toxische organische microverontreinigingen staan in Tabel 4.8. Daarbij is het aantal NOEC's (n) ook weergegeven. De toxiciteitsgegevens die gebruikt zijn voor de schatting van a en b staan in **Bijlage II**.



Figuur 4.1: log-logistische cumulatieve verdelingsfunctie van benzeen. Empirische verdelingscurve (■) en de met niet lineaire regressie geschatte cumulatieve verdelingsfunctie (—)

$$F(NOEC) = (NOEC/2885)^{0.66} / [1 + (NOEC/2885)^{0.66}]$$

Tabel 4.8: De geschatte coëfficiënten van de log-logistische cumulatieve distributiefunctie voor het aquatisch en het terrestrische organismen.

	Aquatisch				Terrestrisch			
	a	b	n	R ²	a	b	n	R ²
Benzeen#	2855	0.6617	12	0.906	2855	0.6617	12	0.906
B[a]p	8.05	1.8479	12	0.917	6.08·10 ⁻²	4.69	5	0.845
DBP#	520.5	1.3470	12	0.966	520.5	1.347	12	0.966
DEHP#	188.4	0.7302	8	0.946	188.4	0.7302	8	0.946
Dioxinen#	2.29·10 ⁻³	0.4089	7	0.764	2.29·10 ⁻³	0.4089	7	0.764
Fluorantheen#	103.1	0.9162	19	0.947	103.1	0.9160	19	0.947
HCB#	23.19	0.8053	19	0.983	23.19	0.8053	19	0.983
PCP	98.18	0.7104	13	0.942	17.52	0.4849	10	0.992
PCB's#	0.8	1.235	6	0.924	0.8	1.235	6	0.924
Tolueen	2026	1.6700	6	0.911	16598	0.9266	5	0.769
1,2,3-TCB#	1042	0.7073	20	0.956	1042	0.7073	20	0.956
1,2,4-TCB#	1241	0.7174	20	0.956	1241	0.7174	20	0.956
1,3,5-TCB#	793.6	0.7582	19	0.948	793.6	0.7582	19	0.948

coëfficiënten a en b van de terrestrische frequentieverdelingsfunctie is gebaseerd op aquatische toxiciteitsgegevens.

In hoofdstuk drie is aangegeven wat de toxische werking is van de verschillende stoffen. Dit resulteert in een set inert hydrofobe stoffen waarvan de gezamenlijke toxische druk is berekend via concentratie-additie. De in hoofdstuk twee beschreven methode wordt toegepast om een gemeenschappelijke cumulatieve verdelingsfunctie te berekenen met specifieke a-waarden en een gemeenschappelijke b-coëfficiënt(Tabel 4.9). Het software pakket SPSS[®] versie 7.5 is gebruikt voor het uitvoeren van multivariate niet lineaire regressie.

De geschatte individuele coëfficiënten a en b van de NOEC-verdelingsfuncties van de zware metalen en arseen met bijbehorende regressiecoëfficiënten (R^2) en het aantal NOEC's zijn in Tabel 4.10 weergegeven voor zowel aquatische organismen als terrestrische organismen.

Tabel 4.9: De parameters voor de gemiddelde verdelingsfunctie van de narcotiserende stoffen.

	<u>Aquatisch</u>			<u>Terrestrisch</u>		
	a	b	R^2	a	b	R^2
Benzeen	3155			3035		
B[a]p	8.03			0.070		
Fluorantheen	108			110		
HCB	23.2			23.3		
Tolueen	1907			15897		
1,2,3-TCB	1010			1028		
1,2,4-TCB	1207			1227		
1,3,5-TCB	783			795		
Concentratie-additie		0.7793	0.924		0.7301	0.937

Tabel 4.10: De parameters voor de coëfficiënten a en b van de aquatische en terrestrische log-logistische NOEC-verdelingsfuncties van de zware metalen en arseen.

	<u>Aquatisch</u>				<u>Terrestrisch</u>			
	a	b	n	R^2	a	b	n	R^2
Cadmium	11.93	0.7280	101	0.9830	32.05	1.046	12	0.9634
Koper	13.26	0.8847	105	0.9930	200.4	1.708	10	0.9644
Lood	148.6	0.9048	43	0.9888	22.28	1.504	10	0.9775
Zink	86.94	0.9558	50	0.9894	106.6	1.061	13	0.9535
Arseen					444.6	1.337	6	0.8989
Chroom					17.14	0.7870	6	0.8670
Kwik					86.06	0.6968	9	0.9419
Nikkel					40.44	1.648	6	0.8987

4.2.2 I_{tox} -berekening

Het gecombineerde effect van toxische stoffen die gelijktijdig in een compartiment aanwezig zijn wordt uitgedrukt in de PAF-totaal per compartiment. De totale PAF of combi-PAF kan beschouwd worden als een kwaliteitsindicator voor het milieu, I_{tox} .

De aggregatie van de stofspecifieke PAF's is gebaseerd op twee principes zoals beschreven in hoofdstuk 2. De eerste methode is gebaseerd op een algoritme die het gecombineerde effect berekend in zgn. "single-species toxicity" experimenten met meerdere stoffen die "Simple Similar Action" (SSA) vertonen. Het gecombineerde effect van stoffen met een gelijke werking wordt berekend door middel van concentratie-additie.

Aan de voorwaarden voor concentratie-additie voldoen alleen de stoffen met een narcotiserende toxische werking. Dit zijn hydrofobe inerte stoffen zonder een specifieke werkingsmechanisme (Verhaar et al., 1992). Verhaar et al. (1992) leveren vuistregels voor de classificatie van toxische stoffen.

Het gecombineerde effect van stoffen met een narcotiserende toxische werking kan vervolgens berekend worden door de gemeten of berekende concentraties in formule 5 in te vullen.

$$PAF_{narcotica}(C_{benzeen} \dots C_{1,3,5-TCB}) = \frac{\left(\sum_{1,3,5-TCB}^{benzeen} \frac{C_i}{a_i} \right)^{b_{narcotica}}}{1 + \left(\sum_{1,3,5-TCB}^{benzeen} \frac{C_i}{a_i} \right)^{b_{narcotica}}} \quad 21$$

$$PAF_{narcotica}(C_{benzeen} \dots C_{1,3,5-TCB}) = \frac{\left(\frac{C_{benzeen}}{a_{benzeen}} + \frac{C_{B[a]p}}{a_{B[a]p}} + \dots + \frac{C_{1,3,5-TCB}}{a_{1,3,5-TCB}} \right)^{b_{narcotica}}}{1 + \left(\frac{C_{benzeen}}{a_{benzeen}} + \frac{C_{B[a]p}}{a_{B[a]p}} + \dots + \frac{C_{1,3,5-TCB}}{a_{1,3,5-TCB}} \right)^{b_{narcotica}}} \quad 22$$

Nadat de coëfficiënten a en b van de NOEC log-logistische verdelingsfunctie zijn geschat kunnen de berekende concentraties of de gemeten veldconcentraties van de organische verbindingen, de inerte hydrofobe stoffen, de metalen en de pesticiden worden gecombineerd met de NOEC-verdelingsfunctie hetgeen resulteert in een stofspecifieke PAF per compartiment en een PAF voor de narcotiserende verbindingen. Tabel 4.11 geeft een overzicht van de stofspecifieke PAF van de organische verbindingen anders dan de landbouwbestrijdingsmiddelen in oppervlakte wateren, landbouwgrond en bodems in natuurgebieden voor zowel gemeten als berekende concentraties.

Het gecombineerde effect van stoffen met verschillende onafhankelijke toxische werking is berekend volgens de methode van effectadditie. Het gecombineerde effect van stoffen met verschillende toxische werking wordt volgens Hamers et al. (1996) berekend als het vermenigvuldigen van de complementen van de PAF's. De combi-PAF kan nu berekend worden als:

$$PAF_{totaal} = I_{tox} = 1 - \prod_{i=1}^n (1 - PAF_i) \quad 6$$

In tegenstelling tot concentratie-additie hoeft geen gemiddelde NOEC verdelingsfunctie te worden berekend voor de stoffen met een specifieke toxische werking, omdat de PAF voor elke stof apart berekend wordt uit de stofspecifieke NOEC-verdelingsfunctie, voordat ze geaggregeerd worden in de combi-PAF. De geaggregeerde toxische werking van alle stoffen uit Tabel 4.11 is berekend volgens formule 9 in hoofdstuk 2:

$$PAF_{totaal} = 1 - \frac{1}{1 + \left(\frac{C_{benzeen}}{a_{benzeen}} + \dots + \frac{C_{1,3,5-TCB}}{a_{1,3,5-TCB}} \right)^{b_{narcotica}} \cdot \left(1 + \frac{C_{DBP}}{a_{DBP}} \right)^{b_{DBP}} \cdot \dots \cdot \left(1 + \frac{C_{PCB}}{a_{PCB}} \right)^{b_{PCB}}} \quad 23$$

Tabel 4.11: Potentieel Aangestaste Fractie [%] voor de organische verbindingen (exclusief pesticiden) van de prioritaire stoffen.

	PAF-water		PAF-natuurlijke bodem		PAF-landbouwbodem	
	berekende conc.	gemeten conc.	berekende conc.	gemeten conc.	berekende conc.	gemeten conc.
Benzeen	0.01	0.07	0	0.67	0	0.4
B[a]p	0	0	0	0	0	0
Fluorantheen	0.04	0.19	0	0.03	0	0.02
HCB	0.01	0.03	0	0	0	0
Tolueen	0	0	0	0.02	0	0.01
1,2,3-TCB	0	0.02	0	-	0	-
1,2,4-TCB	0	0.01	0	-	0	-
1,3,5-TCB	0	0	0	-	0	-
PAF _{narcotica}	0.8	0	0.2	3.9	0.05	2.1
DBP	0	0	0	-	0	-
DEHP	0.01	0.5	0	-	0	-
Dioxinen	1.0	1.9	0.2	1.2	0.1	0.9
PCP	0.8	0.4	0.2	0.4	0.2	0.3
PCB's	0.9	0.9	0	0	0.01	0.01
PAF _{specifiek}	2.6	3.5	0.5	1.6	0.3	1.1
PAF _{prioritaire stoffen}	3.5	4.2	0.6	5.4	0.4	3.2

In Tabel 4.12 zijn van de pesticiden de coëfficiënten a en b van de NOEC-verdelingsfunctie en de bijbehorende berekende PAF's per compartiment weergegeven voor de berekende en gemeten concentraties van de pesticiden uit Tabel 4.2. De PAF van pesticiden voor de gemiddelde landbouwbodem is afgeleid uit de berekende concentratie in de bodem van het gebied waarop het middel is toegepast. Om een beeld te krijgen van de gemiddelde landbouwbodem is de PAF gewogen¹¹ naar de fractie van het bespoten landbouw areaal in Nederland. Inherent wordt verondersteld dat gelijktijdige toepassing van twee of meer pesticiden op hetzelfde areaal niet plaats vindt.

Tabel 4.12: Potentieel Aangetaste Fractie voor lanbouwbestrijdingsmiddelen in oppervlakte wateren, natuurgebieden en landbouwbodems.

	a	b	PAF-water berekend [%]	PAF-water gemeten [%]	PAF-natuur berekend [%]	PAF-natuur gemeten [%]	PAF-landbouw berekend [%]
2,4-D	2.57E-03	0.6117	0.04	0.05	0.01		0.1
atrazine	9.33E-05	1.0100	0.9	0.01	0.01	0.3	5.4
azinphos-methyl	1.51E-06	0.6387	3.4	2.8	0.11		0.2
bentazon	2.51E-02	1.1738	0	0	0		0.02
carbendazim	8.51E-05	0.5640	25.3	2.5	0.3		0.7
dichlorvos	1.26E-05	0.1974	16.1	16.9	10.4		0.8
diquat-dibromide	2.69E-04	0.3447	7.8		0.1		0.8
diuron	8.71E-06	1.1136	1.5	0.2	0.03		1.1
DNOC	1.00E-03	0.7488	0.1	0.01	0.01		3.3
fentin-acetate	6.76E-07	0.8042	13		0.2		10.7
lindaan	1.70E-05	0.4620	6.1	1.8	0.9	1.4	0.5
malathion	6.92E-06	0.4524	4.1		0.4		0.06
maneb	4.27E-04	1.1429	0.01		0.01		39.0
mecoprop	4.79E-02	2.7143	0	0	0.00		0
metamitron	3.80E-03	0.3619	3.3		1.2		2.2
methabenz-thiazuron	4.47E-04	0.4097	9.7	1.3	0.6		1.4
metribuzin	1.70E-04	0.2697	8.2		2.3		0.8
mevinfos	5.75E-06	0.2632	9.8	11	5.3		0.02
monolinuron	2.45E-04	0.2335	13.1	6.7	6.2		0.7
parathion	8.91E-07	0.4432	8.5	8.4	0.6		3.7
simazine	4.07E-05	1.0100	0.3	0.02	0	1.6	0.5
thiram	1.55E-06	0.3315	28.9		10.1		4.3
trifluralin	3.80E-06	1.9741	0	0.0	0		0
PAF _{pesticiden}			80.3		31.3		58.4

Het effect van de gemeten concentraties zware metalen in de bodem en het oppervlaktewater op respectievelijk de bodem- en waterorganismen, uitgedrukt als potentieel aangetaste fractie is vervolgens geschat. Uit Tabel 4.13 blijkt dat de PAF van de verschillende metalen voor natuurgebieden hoger is dan voor landbouwgebieden. Dit wordt veroorzaakt door de hogere biobeschikbaarheid van zware metalen in zandgronden. Zware metalen worden namelijk minder sterk gebonden in zandbodems dan in landbouwbodems waarin het percentage klei en organisch materiaal gemiddeld hoger is. Daarbij komt nog dat natuurbodem hier alleen betrekking heeft op zandbodems in natuurgebieden.

De antropogene PAF voor de zware metalen en arseen is berekend volgens formule van de toegevoegde c.q. antropogene PAF. De volgens de methode van Lexmond en Edelman geschatte achtergrond concentraties zijn gebruikt om de achtergrond PAF te berekenen. Met de regressievergelijkingen van Janssen et al. (1996) zijn de geschatte achtergrond concentraties omgerekend naar achtergrondconcentraties in het porievocht.

$$PAF_{antropogeen} = \frac{PAF_{totaal} - PAF_{achtergrond}}{1 - PAF_{achtergrond}}$$

Tabel 4.13: Antropogene PAF voor bodemorganismen van enkele zware metalen en arseen, en voor de metalen en arseen samen (I_{tox}).

	PAF-landbouw	PAF-natuur	PAF-water
Cd	0.4	6.4	2.3
Cr	3.3	-	-
Cu	3.8	45.4	25.3
Ni	0.05	3.1	-
Pb	1.4	20.5	1.8
Zn	24	34.6	16.6
As	1.1	-	-
Hg	1.9	-	-
$PAF_{metalen}$	32.6	74.2	40.3

Per compartiment zijn stofspecifieke PAF's berekend. De totale toxische stress is berekend volgens concentratie-additie en effectadditie. Daartoe is er onderscheid gemaakt tussen de groep hydrofobe narcotiserende verbindingen en de rest van de stoffen. De geaggregeerde toxische stress van de narcotiserende verbindingen is weergegeven door $PAF_{narcotica}$. Naast deze groep stoffen zijn de pesticiden, de zware metalen, arseen en de prioritare organische verbindingen anders dan de landbouwbestrijdingsmiddelen te onderscheiden. De laatst genoemde groep bevat de hydrofobe inerte verbindingen. De gezamenlijke toxische stress van de drie genoemde groepen van stoffen is berekend voor de compartimenten water, natuurbodems en landbouwgrond. De resultaten zijn samengevat in Tabel 4.14.

Tabel 4.14: Toxische stress (I_{tox}) [%] voor de onderscheiden stofgroepen per compartiment inclusief bijdragen aan de toxische stress

	water	natuurbodem	landbouwbodem
prioritaire stoffen	3.5	0.6	0.4
zware metalen	40.3	74.2	32.6
pesticiden	79.1	30.7	58.2
I_{tox}	88	82.2	71.3

4.3 Onzekerheden

De berekende PAF-waarden bevatten aanzienlijke onzekerheden. Deze zijn naar hun oorsprong in te delen in twee soorten: fundamentele onzekerheden en operationele onzekerheden.

Fundamentele onzekerheden

Fundamentele onzekerheid is de weerslag van twijfel aan de juistheid van de bewerkingen die worden toegepast: de consequenties van de gemaakte keuzen. Gekozen is om I_{tox} te berekenen op basis van het recept van Hamers. De aannamen die daarmee worden gedaan liggen vast. Alternatieve methoden om een I_{tox} -achtig resultaat te verkrijgen worden niet meer beschouwd. De twijfel die rest resulteert in onzekerheid omtrent het resultaat. Voorbeelden van vragen die de basis vormen van fundamentele onzekerheid over het I_{tox} -resultaat zijn:

- Zijn de beschikbare waarnemingen van concentraties representatief voor "Nederland"?, en is het gemiddelde of de mediaan een goede maat?
- Levert het gekozen rekenmodel een goede afspiegeling van de "concentratie in Nederland"?
- Hebben we een goed en volledig beeld van de emissies?
- Komen alle beschouwde stoffen in "Nederland" naast elkaar voor?
- Is de gekozen manier om laboratorium toxiciteitsmetingen via beschikbaarheidsverschillen door te vertalen naar veldomstandigheden correct?
- Zijn de beschikbare laboratoriumgegevens representatief voor "de soorten"?
- Is de NOEC verdeling log logistisch?
- Is het doorvermenigvuldigingsrecept voor combinatie van stoffen geldig?

De onzekerheid die uit dit soort vragen voortkomt is moeilijk te kwantificeren.

Operationele onzekerheid

Operationele onzekerheid is de weerslag van de variantie in het resultaat van de toegepaste bewerking. Deze komt geheel voort uit de variantie in de invoergegevens, en kan worden gekwantificeerd. De bronnen van operationele onzekerheid in I_{tox} zijn:

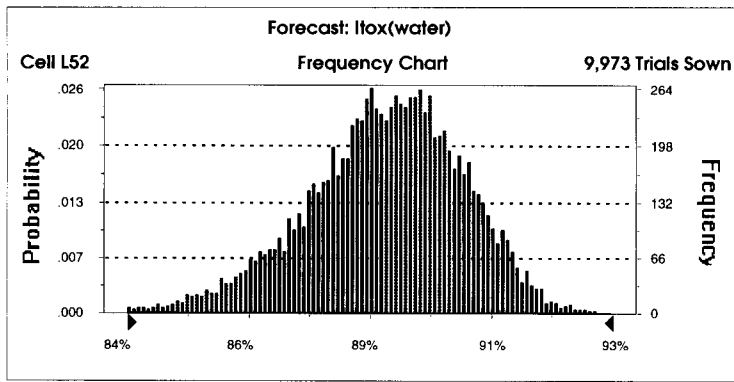
- Onzekerheid in gemeten concentraties. Aangenomen de beschikbare meetresultaten representatief zijn, is "de concentratie in Nederland" te schatten uit de metingen. De nauwkeurigheid van gemiddelde of mediane concentraties is vaak gering, maar goed te kwantificeren.
- Onzekerheid in berekende concentraties. Aangenomen dat het gebruikte SimpleBox model een goede voorspellende waarde heeft, kan "de concentratie in Nederland" geschat worden uit berekening. De onnauwkeurigheid van die schatting komt voort uit de onzekerheid (onnauwkeurigheid) van de invoergegevens van het rekenmodel. De onzekerheid van de rekenresultaten met SimpleBox is onderzocht door Etienne (1996).
- Onzekerheid in de NOEC-verdeling. Aangenomen dat de laboratorium experimenten representatief zijn, en dat de NOEC's log-logistisch verdeeld zijn, ligt de verdeling "vast" met het gemiddelde en de spreiding. De nauwkeurigheid waarmee deze parameters kunnen worden vastgesteld is vaak gering, maar kan worden gekwantificeerd.

Schatting van de operationele onzekerheid in I_{tox} (water)

Door middel van een Monte Carlo simulatie is een eerste aanzet gemaakt voor bepaling van de onzekerheid in het I_{tox} resultaat voor water. Voor de stoffen met de hoogste PAF-waarden is aan de onzekerheidsbronnen ervan --te weten de concentratie C_{water} , en de parameters, a en b, van de NOEC verdeling-- een driehoekige kansverdeling toegekend. Onder- en bovengrenzen voor de concentraties zijn, voor zover mogelijk, geschat door vergelijking van de berekende concentraties met de bekende spreiding in gemeten concentraties. Bij de parameters van de NOEC verdelingen zijn de onder- en bovengrenswaarden gebaseerd op de uitkomsten van de niet-lineaire regressieanalyses. De PAF-waarden die behoren bij de uiterste combinaties van boven- en ondergrenzen zijn berekend. De mogelijke waarden van PAF liggen binnen dit gebied. Mogelijke waarden van I_{tox} liggen tussen 26% en 96% (tabel 4.15). Uit Monte Carlo simulatie blijkt dat de meest waarschijnlijke waarden van I_{tox} tussen 85% en 92% moeten worden gezocht (figuur 4.2).

Tabel 4.15: Onder- en bovengrenzen in parameters voor bepaling van operationele onzekerheid in I_{tox} (water)

	C_{water} g/L			a g/L			b			PAF		
Benzeen	4E-9			1E-3	3E-3	4E-3	0.40	0.66	0.92	0.0%		
Benzo[a]pyreen	2E-9			7E-6	8E-6	9E-6	1.25	1.85	2.08	0.0%		
Fluorantheen	22E-9			89E-6	103E-6	117E-6	0.79	0.92	1.04	0.0%		
Hexachloorbenzeen	255E-12			20E-6	23E-6	26E-6	0.71	0.81	0.90	0.0%		
Lindaan	1E-9	46E-9	100E-9	19E-6	45E-6	70E-6	0.36	0.51	0.65	0.1%	3.0%	12.8%
Tolueen	3E-6			1E-3	2E-3	3E-3	0.66	1.67	2.68	0.0%		
1,2,3-TCB	76E-12			880E-6	1E-3	1E-3	0.63	0.71	0.78	0.0%		
1,2,4-TCB	19E-12			1E-3	1E-3	1E-3	0.64	0.72	0.80	0.0%		
1,3,5-TCB	262E-12			666E-6	794E-6	922E-6	0.67	0.76	0.85	0.0%		
Dibutylftalaat	3E-9			451E-6	521E-6	590E-6	1.06	1.35	1.63	0.0%		
Diethylhexylftalaat	1E-9			111E-6	188E-6	266E-6	0.44	0.73	1.02	0.0%		
Dioxinen	28E-15			-2E-9	2E-9	6E-9	0.02	0.41	0.80	1.0%		
Pentachloorfenol	102E-9			67E-6	98E-6	130E-6	0.53	0.71	0.89	0.8%		
PCB's	1E-9	18E-9	50E-9	1E-6	800E-9	11E-6	0.17	1.24	0.43	1.8%	0.9%	37.5%
Organische Stoffen										2%	6%	46%
Cadmium	70E-9			11E-6	12E-6	13E-6	0.70	0.73	0.76	2.3%		
Koper	1E-6	4E-6	5E-6	13E-6	13E-6	14E-6	0.86	0.88	0.91	8.5%	25.3%	30.7%
Lood	2E-6			140E-6	149E-6	157E-6	0.86	0.90	0.95	1.8%		
Zink	5E-6	16E-6	20E-6	83E-6	87E-6	91E-6	0.91	0.96	1.00	5.1%	16.6%	21.6%
Metalen										13%	40%	46%
2,4-D	9E-9			3E-3			0.61			0.0%		
atrazine	874E-9			93E-6			1.01			0.9%		
azinphos-methyl	8E-9			2E-6			0.64			3.4%		
bentazon	2E-6			25E-3			1.17			0.0%		
carbendazim	100E-9	12E-6	15E-6	43E-6	85E-6	128E-6	0.39	0.56	0.73	0.5%	25.3%	39.9%
dichlorvos	1E-9	3E-9	5E-9	6E-6	13E-6	19E-6	0.14	0.20	0.26	7.4%	16.1%	27.2%
diquat-dibromide	211E-9			269E-6			0.34			7.8%		
diuron	206E-9			9E-6			1.11			1.5%		
DNOC	76E-9			1E-3			0.75			0.1%		
fentin-acetate	1E-9	64E-9	100E-9	338E-9	676E-9	1E-6	0.56	0.80	1.05	0.1%	13.0%	33.5%
lindaan	45E-9			17E-6			0.46			6.1%		
malathion	6E-9			7E-6			0.45			4.1%		
maneb	130E-9			427E-6			1.14			0.0%		
mecoprop	197E-9			48E-3			2.71			0.0%		
metamitron	337E-9			4E-3			0.36			3.3%		
methabenzthiazuron	2E-6			447E-6			0.41			9.7%		
metribuzin	22E-9			170E-6			0.27			8.2%		
mevinfos	1E-9			6E-6			0.26			9.8%		
monolinuron	1E-9	75E-9	100E-9	123E-6	245E-6	368E-6	0.16	0.23	0.30	2.0%	13.1%	23.8%
parathion	4E-9			891E-9			0.44			8.4%		
simazine	130E-9			41E-6			1.01			0.3%		
thiram	1E-9	102E-9	200E-9	774E-9	2E-6	2E-6	0.23	0.33	0.43	3.4%	28.9%	42.2%
trifluralin	42E-12			4E-6			1.97			0.0%		
Pesticiden										13%	83%	87%
I_{tox}(water)										26%	90%	96%



Figuur 4.2: Output Monte Carlo simulatie van de berekening voor $I_{tox}(\text{water})$

5 DISCUSSIE

Het uitgevoerde onderzoek draagt stof aan voor discussie met betrekking tot de betekenis van de uitkomsten en de mogelijke bruikbaarheid ervan voor het milieubeleid. Deze discussie wordt hier niet gevoerd; dit is onderwerp van een vervolgstudie, en valt buiten het kader van het huidige werk.

I_{tox} blijkt becijferbaar

Door Hamers et al. (1996) was voor enkele voorbeeldstoffen een verkenning uitgevoerd. In dit onderzoek is onderzocht of het berekenen van I_{tox} voor de gehele lijst van "MB/MV-stoffen ("lijst van Slooff") uitvoerbaar is. Dat blijkt het geval te zijn. Niet voor alle stoffen waren de benodigde invoergegevens te vinden. Met name historische emissiegegevens zijn in dit opzicht een struikelblok. Voor metalen is het nog niet gelukt om goede concentratieschattingen te maken via berekeningen met SimpleBox; daarvoor is het nodig om nader te onderzoeken hoe belastingen in het verleden hebben geleid tot de nu gemeten concentraties in de bodem.

Het beoogde gebruiksdoel van I_{tox} is het aangeven van het verloop van de toxische stress in de tijd. Op basis van het hier beschreven onderzoek is dit in beginsel eenvoudig uitvoerbaar: de berekeningen moeten worden herhaald met emissiegegevens voor andere tijdstippen. Reconstructie van I_{tox} -waarden uit het verleden lijkt echter niet gemakkelijk omdat voor veel stoffen emissiegegevens uit het verleden niet zijn te achterhalen. Wél is het eenvoudig om vanaf nu, op basis van de gegevens die jaarlijks door de EmissieRegistratie worden aangeleverd, elk jaar de I_{tox} te berekenen.

Het aldus verkregen verloop van toxische stress in de tijd zou kunnen worden gebruikt als Milieu Effect Indicator voor het onderwerp "vergiftiging".

Hoge PAF-waarden

Opvallend is dat de hier berekende waarden van I_{tox} hoog zijn. Dat wil zeggen: hoog in vergelijking met de 5%-waarde die voor enkelvoudige stoffen als startpunt wordt genomen bij het vaststellen van MTR-waarden en milieukwaliteitsnormen. Gezien het aantal stoffen dat in beschouwing is genomen, zou het resultaat op zichzelf niet als onverwacht moeten worden aangemerkt.

De I_{tox} berekeningen zijn niets meer en niets minder dan een systematische toxicologische "schaling" van de waargenomen of geschatte concentraties van stoffen in het milieu. Gegeven de concentraties en de laboratorium NOEC's wordt per stof vastgesteld in welke mate in het veld sprake is van NOEC-overschrijding voor soorten. Dit is nu voor het eerst gedaan. De nu verkregen resultaten kunnen niet worden vergeleken met eerder gerapporteerde resultaten. Of de resultaten "hoog" zijn zal op een andere wijze moeten worden beoordeeld.

Relatief belang van stoffen in de totale toxische stress

Door Klepper en Van de Meent (1997) is een kaartbeeld gemaakt van de gecombineerde toxische stress van vier zware metalen. Dit roept de vraag op naar bijdragen van andere stoffen die niet zijn meebeschoofd. Die vraag kan niet worden beantwoord, omdat voor andere stoffen het gedetailleerde beeld van de concentraties in het milieu ontbreekt. De I_{tox} berekeningen bevatten een aanzet voor beantwoording. Aangenomen dat de onderlinge verhoudingen van de berekende concentraties een goede afspiegeling vormen van de "echte" concentratieverhoudingen, kunnen de berekende PAF-waarden per stof of per stofgroep (zoals in tabel 4.14) goed worden vergeleken. Die vergelijking leert dat voor water, natuurbodem en landbouwbodem geldt dat de grootste toxische druk afkomstig is van de zware metalen en bestrijdingsmiddelen, en dat de overige prioritaire stoffen relatief weinig bijdragen. Op grond hiervan mag worden vermoed dat combi-PAF kaarten op grond van zware metalen en bestrijdingsmiddelen een tamelijk volledig beeld geven van de toxische stress.

LITERATUUR

- Aldenberg, T., 1993. ETX 1.3a: Een computerprogramma voor het berekenen van betrouwbaarheids grenzen voor schadelijke concentraties, op basis van kleine steekproeven van toxiciteitsgegevens. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 719102015.
- Aldenberg, T., Slob, W., 1993. "Confidence limits for hazardous concentrations based on logistically distributed NOEC toxicity data", *Ecotoxicology and Environmental Safety*, **25**, 48-63.
- Annema, J.A., Beurskens, J.E.M., en Bodar, C.W.M., 1995. Evaluatie van PCB-stofstromen in het milieu. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 601014011.
- AQUATOX, gegevensbestand voor aquatische toxiciteitsgegevens. BKH, 1997. BKH advies bureau, raadgevende ingenieurs milieu bouw infrastructuur, Delft, 1997.
- AQUIRE, Integraal onderdeel van het ECOTOX databestand. Environmental Protection Agency (EPA), Duluth, MN, USA, 1996.
- ARS Pesticides Properties Database (PPD), 1996. United States Department of Agriculture, Agricultural Research Service (ARS).
- Ashworth, R.A., Howe, G.B., Mullins, M.E., Rogers, T.N., 1988. "Air-water partitioning coefficients of organics in dilute aqueous solutions", *Journal of Hazardous Materials*, **18**, 25-36.
- Aster-supportsystem (Assessment Tool for the Evaluation of Risk), 1994. ERL-Duluth
- Atkinson, R., 1988. "Estimation of gas-phase hydroxyl radical rate constants for organic chemicals", *Environmental Toxicology en Chemistry*, **7**, 435-442.
- ATSDR, 1990. Toxicological profile for benzo[a]pyrene. Us department of Health and Human services, Agency for Toxic Substances and Diseases Registry. ATSDR TP-88/05, 1990.
- Auwaert, R.J.K. van der, Berdowski, J.J.M., Jonker, W.J., en Verhoeve, P., 1996. Emissies in Nederland bedrijfspgroepen en regio's 1994 en ramingen 1995. Ministerie van Volkshuisvesting Ruimtelijke Ordening en Milieubeheer (VROM), 's-Gravenhage. Emissieregistratie Nr. 33.
- Baart, A.C., Berdowski J.J.M., Jaarsveld, J.A. van, (1995), Calculation of atmospheric deposition of contaminants on the North Sea, TNO-MEP-R 95/138.
- Bakker, J., 1996. Environmental fate and ecological risk of micropollutants. Interfacultaire Vakgroep Energie en Milieukunde (IVEM). Rijksuniversiteit Groningen, IVEM-doctoraalverslag nr 38.
- Ballschmitter, K., Wittlinger, R., 1991. "Interhemisphere Exchange of hexachlorocyclohexanes, hexachlorobenzene, polychlorobiphenyls, and 1,1,1-trichloro-2,2-bis(p-chlorophenyl)ethane in the lower troposphere", *Environmental Science and Technology*, **25**, 1103-1111.
- Berdowski J.J.M., Draaijers, G.P.J., en Evers, C.W.A., Emissies in Nederland 1994 en ramingen 1995. Ministerie van Volkshuisvesting Ruimtelijke Ordening en Milieubeheer (VROM), 's-Gravenhage. Emissieregistratie Nr. 34.
- Berdowski J.J.M., et al., 1996. Emissies in Nederland trends, thema's en doelgroepen 1994 en ramingen 1995. Ministerie van Volkshuisvesting Ruimtelijke Ordening en Milieubeheer (VROM), 's-Gravenhage. Emissieregistratie Nr. 32.

Booij pers communicatie (1997).

Brandes, L.J., Hollander, H. Den, Meent, D. Van de, 1996. SimpleBox 2.0: een "geneste" multimedia lotgevallen model voor milieu en chemicaliën. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 719101029.

Crommentuijn, T., Polder, M.D., en Plassche, E.J., (1997). Maximum permissible concentrations and negligible concentrations for metals-taking background concentrations into account. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 679101019. (in voorbereiding)

CWQG (Canadian Water Quality Guidelines), 1985. Canadian Council of Resource and Environment Ministers. Toronto, Ontario, 1985.

Denneman, C.A.J., en Gestel, C.A.M. van, 1990. Bodemverontreiniging en bodemecosystemen: voorstel voor C-(toetsings)waarden op basis van ecotoxicologische risico's. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 725201001.

Dilling, W.L., Gonsior, S.J., Boggs, G.U., Mendoza, C.G., 1988. "Organic photochemistry. 20. A method for estimating gas-phase rate constants for reactions of hydroxyl radicals with organic compounds from their relative rates of reaction with hydrogen peroxide under photolysis in 1,1,2-trichlorotrifluoroethane solution", *Environmental Science and Technology*, **22**, 1447-1453.

Doucette, W.J. en Andren, A.W., 1988. "Aqueous solubility of selected biphenyl, furan and dioxin congeners", *Chemosphere*, **17**, 2, 243-252.

ECPI, Pugh et al., 1996. Phtalate esters used in plasticised PVC; Assessment of the release, occurrence and possible effects of plasticisers in the environment. European Council for Plasticisers & Intermediates.

EHC (Environmental Health Criteria) 150, 1993. Benzene. World Health Organization (WHO), International Programme on Chemical Safety (IPCS), Geneva.

EHC (Environmental Health Criteria) 71, 1987. Pentachlorophenol. World Health Organization (WHO), International Programme on Chemical Safety (IPCS), Geneva.

Etienne, R.S., 1996. Operational Uncertainties in SimpleBox; Operational uncertainty analysis of the air-water concentration ratio computed by SimpleBox for 11 volatile compounds. Reports Environmental studies no. 136, Katholieke Universiteit Nijmegen.

Eurostat Statistical Office of the European Communities, 1995. Eurostat jaarboek '95; Een statistische blik op Europa 1983-1993. Eurostat, Luxemburg.

FAOSTAT-database, 1994, gewas-oppervlak

GDC (Gesellschaft Deutscher Chemiker), 1987. 1,2,4-trichlorobenzene; BAU report 17 1987. Beratergremium für Umweltrelevante Altstoffe (BUA). VCH, Cambridge.

GDC (Gesellschaft Deutscher Chemiker), 1988. Benzene; BUA report 24 1988. Beratergremium für Umweltrelevante Altstoffe (BUA). VCH, Cambridge.

GDC (Gesellschaft Deutscher Chemiker), 1989. 1,3,5-trichlorobenzene; BUA report 16 1989. Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh), Beratergremium für Umweltrelevante Altstoffe (BUA). VCH, Cambridge.

- GDC (Gesellschaft Deutscher Chemiker), 1993. Hexachlorobenzene; BUA report 119 1993. Beratergremium für Umweltrelevante Altstoffe (BAU). S. Hirzel- Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft, Stuttgart.
- GDC (Gesellschaft Deutscher Chemiker), 1993. Pentachlorophenol; BUA report 3 1985. Beratergremium für Umweltrelevante Altstoffe (BAU). S. Hirzel- Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft, Stuttgart.
- Groot, M.S.M., Bronswijk, J.J.B., Willems, W.J., Haan, T. De, en Castilho, P. Del, 1996. Landelijk Meetnet Bodemkwaliteit. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 714801007.
- Groot, M.S.M., en Swinderen, E.C. van, 1993. Verkennend onderzoek naar de kwaliteit van bodem en grondwater langs snelwegen in bosgebieden. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 714822001.
- Hamers, T., Aldenberg, T., en Van de Meent, D., 1996. Definition Report- Indicator Effects Toxic Substances (I_{tox}). Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 607128001. (vertrouwelijk rapport)
- HCD (Hazardous Chemicals Database), 1996. J.K Hardy, The University of Akron.
- Howard, P.H., Boethling, R.S., Jarvis, W.F. et al., 1991a. Handbook of environmental degradation rates. Chelsea, Lewis Publishers.
- Howard, P.J., 1989a. Handbook of environmental fate and exposure data for organic chemicals. Vol 1: large production and priority pollutants. Chelsea, Lewis Publishers.
- Howard, P.J., 1989b. Handbook of environmental fate and exposure data for organic chemicals. Vol 2: solvents. Chelsea, Lewis Publishers.
- Howard, P.J., 1991b. Handbook of environmental fate and exposure data for organic chemicals. Vol 3: pesticides. Boca Raton, Lewis Publishers.
- Howard, P.J., 1993. Handbook of environmental fate and exposure data for organic chemicals. Vol 4: solvents 2. Boca Raton, Lewis Publishers.
- IUCLID (International Uniform Chemical Information Database) database, 1995
- Janssen, R.P.T., Swartjes, F.A., Van den Hoop, M.A.G.T., en Peijnenburg, W.J.G.M., 1996. Evaluatie van het evenwichtspartitieconcept voor zware metalen in bodems en sedimenten. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 719101027.
- Kalf et al., 1995. Integrated environmental quality objectives for polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 679101018.
- Kalf, Crommentuijn, Polder et al., 1997. Maximum permissible concentrations and negligible concentrations for pesticides. In voorbereiding. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 679101020. (in voorbereiding)
- Kater, B.J., en Lefèvre, F.O.B., (1996). Ecologische risico analyse in de Westerschelde. De ontwikkeling en toepassing van het model ERASES. Rapport RIKZ-96.007.

Klepper, O., 1997. Persoonlijke mededeling

Klepper, O., en Van de Meent, D., 1997. Mapping the potentially affected fraction of species (PAF) as an indicator of generic toxic stress. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 607504001.

Knoben, R.A.E., en Beek, M.A., (1997). Beoordeling van risico's van stoffen. Gebruik van gevoeligheidsverdelingen voor de toetsing van de milieukwaliteit in het waterbeheer. Vertrouwelijk concept-rapport RIZA/W+B, 1 mei 1997.

Lagas, P., en Groot, M.S.S., (eds), 1996. Bodemkwaliteitskartering van de Nederlandse landbouwgronden. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 714801003.

Lexmond, Th. M., en Edelman, Th., 1992. "Huidige achtergrondwaarden van het gehalte aan een aantal zware metalen en arseen in de grond". Handboek voor milieubeheer en bodembescherming, D4110: 1-34. Alphen aan de Rijn, Samsom en Tjeenk-Willink.

Lijzen, J.P.A., en Ekelenkamp, A., 1995. Bronnen van diffuse bodembelasting. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 950011007.

Linden, A. van der, (1996), persoonlijke informatie

Linders, J.B.H.J., Jansma, J.W., Mensink, B.J.W.G., en Oterman, K., 1994. Pesticides: benefaction or pandora's box? A synopsis of the environmental aspects of 243 pesticides. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 679101014.

Luttik, R., Traas, T.P., Mensink, H., Mapping PAF of avian and mammalian target species in the national ecological network. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 607504004

Luttik, R., 1997. Persoonlijke communicatie.

Mackay, D., en Lee, S.C., 1995a. "Displaying multimedia environmental partitioning by triangular diagrams", *Environmental Toxicology and Chemistry*, **14**, 11, 1839-1846.

Mackay, D., Shiu, W.Y. en Ma, K.C., 1992a. Illustrated handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. Vol 1: monoaromatic hydrocarbons, chlorobenzenes and PCBs. Boca Raton, Lewis.

Mackay, D., Shiu, W.Y. en Ma, K.C., 1992b. Illustrated handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. Vol 2: polynuclear aromatic hydrocarbons, polychlorinated dioxines and dibenzofurans. Boca Raton, Lewis.

Mackay, D., Shiu, W.Y. en Ma, K.C., 1992c. Illustrated handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. Vol 3: volatile organic chemicals. Boca Raton, Lewis.

Mackay, D., Shiu, W.Y. en Ma, K.C., 1995b. Illustrated handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. Vol 4: oxygen, nitrogen, and sulfur containing compounds. Boca Raton, Lewis.

May, W.E., and Wasik, S.P., 1978. "Determination of the solubility behavior of some polycyclic aromatic hydrocarbons in water", *Analytical Chemistry*, **11**, 7, 997-1000.

MedChem Master database, 1996. Medicinal Chemistry Project at BioByte Corporation, Claremont, CA

Merkelbach, R.C.M., en Lentjes, P.G., 1993. ISBEST: een informatiesysteem dat het bestrijdingsmiddelengebruik in Nederland beschrijft. DLO-Staring Centrum, Wageningen.

Miller, M.M., en Wasik, S.P., 1985. "Relationship between octanol-water partitioning coefficient and aqueous solubility", *Environmental Science and Technology*, **19**, 522-529.

Opperhuizen, A., Gobas, F.A.P.C., Steen, J.M.D. van der, en Hutzinger, O., 1988. "Aqueous solubility of polychlorinated biphenyls related to molecular structure", *Environmental Science and Technology*, **22**, 638-646.

Peijnenburg, W.J.G.M., et al., 1991. Update van het scopingsdocument ftalaten. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 710401008.

Plassche, E.J., 1994. Towards integrated environmental quality objectives for several compounds with a potential for secondary poisoning. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 679101012.

Poppe, A.C., Cadogan, D.F., Papez, M., Pugh, D.M., 1993. "An assessment of the release, occurrence and possible effects of plasticisers in the environment". Gepresenteerd tijdens de conferentie: "PVC-93 - The Future", The Institute of Materials, Brighton, april 1993.

Posthuma, L., en Notenboom, J., 1996. Toxic effects of heavy metals in three worm species exposed in artificially contaminated soil substrates and contaminated field soils. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 719102048.

RIVM, 1996. Achtergronden bij: Milieubalans 96. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Bilthoven, Samsom H.D. Tjeenk Willink bv, Alphen aan den Rijn, 1996.

RIVM, 1996. Milieubalans 96: Het Nederlandse milieu verklaard. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Bilthoven, Samsom H.D. Tjeenk Willink bv, Alphen aan den Rijn, 1996.

Roghair, C.J., Struijs, J., en De Zwart, D., 1997. Measurement of toxic potency in fresh water in the Netherlands. Part A. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 607504004.

Rorije, E., 1996. persoonlijke communicatie

Schwartz, M., Booi, H., Coppoolse J., 1993. Trichloorbenzenen, hexachloorbenzeen en hexachloorbutadien. Rijksinstituut voor Zuivering Afvalwater; Ministerie van Verkeer en Waterstaat. RIZA-nota 93.013.

Schwarzenbach, M.R.P., Gschwend, P.M., en Imboden D.M., 1993. Environmental organic chemistry. New York, John Wiley & Sons, Inc.

Sloof, W., et al., 1987. Basisdocument benzeen. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 758476001.

Sloof, W., et al., 1989. Basisdocument PAK. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 758474007.

Slooff et al., 1988. Basisdocument hexachloorcyclohexanen. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 758473011.

- Slooff et al., 1991. Basisdocument chloorbenzenen. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 710401005.
- Slooff et al., 1991. Basisdocument chloorfenolen. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 7104010013.
- Slooff W., Liem, A.K.D., et al., 1993. Basisdocument Dioxinen. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 710401024.
- Slooff, W., 1994. Definitierapport-stofkeuze voor het thema verpreiding in de milieubalans/Milieuverkenning. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 482516002.
- Slooff, W., et al., 1988. Basisdocument cadmium. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 758474004.
- Slooff, W., et al., 1988. Ontwerp basisdocument toluen. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 758473010.
- Slooff, W., et al., 1989. Basisdocument koper. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 758474009.
- Slooff, W., et al., 1993. Basisdocument zink. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 710401028.
- Slooff, W., et al., 1997. Scopingsdocument lood. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. In voorbereiding.
- Struijs, J., 1996. SimpleTreat 3.0: een model ter voorspelling van de distributie en eliminatie van chemicalien door rioolwaterzuiveringsinstallaties (rwzi). Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 719101025.
- Ten Brink, B.J.E., en Van den Berg, R., 1995. Ontwerp Milieubalans en milieuverkenning; van globale visie naar concreet ontwerp. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 482516001.
- Ten Hulscher, Th.E.M., Van der Velde, L.E., en Bruggeman, W.A., 1992. "Temperature dependence of henry's law constant for selected chlorobenzenes, pchlorinated biphenyls and polycyclic aromatic hydrocarbons", *Environmental Toxicology and Chemistry*, **11**, 1595-1603.
- Theunissen-Ordeman, H.G.K., en Schrap, S.M., 1996. Watersysteemverkenningen 1996. Een analyse van de problematiek in aquatisch milieu: Bestrijdingsmiddelen. Rijksinstituut voor Integraal Zoetwaterbeheer en Afvalwaterbehandeling, Lelystad. RIZA nota 96.040.
- Tomlin, C., 1994. The pesticide manual; incorporating the agrochemicals handbook, 10 th edition. Crop Protection Publications.
- Vaal, M.A., Van der Wal, J.T., Hoekstra, J.A., en Hermens, J.L.M., 1995. Ordering chemical compounds by their chronic toxicity to aquatic species. A principal component analysis. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 719102041.
- Van de Meent, D., 1993. SimpleBox: een generiek multimedia lotgevallen evaluatie model. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 672720001.

Van de Meent, D., Aldenberg, T., Canton, J.H., Van Gestel, C.A.M. en Slooff, W., 1990. Streven naar waarden. Achtergrondstudie ten behoeve van de nota "Milieukwaliteitsnormering water en bodem". Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 670101002.

Van de Velde, R.J., Faber, W.S., Van Katwijk, V.F., et al., 1994. The preparation of a European land use database. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 712401001.

Van Drecht, G., Boumans, L.J.M., Fraters, D., 1996. Landelijke beelden van de diffuse metaalbelasting van de bodem en de metaalgehalten in de bovengrond, alsmede de relatie tussen gehalten en belasting. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 714801006.

Van Leeuwen, C.J., Van der Zandt, P.T.J., 1992. "Application of QSARs, extrapolation and equilibrium partitioning in aquatic effects assessment; I. Narcotic Industrial pollutants", *Environmental Toxicology and Chemistry*, **11**, 267-282.

Van Straalen N.M. (1990). New methodologies for estimating the ecological risk of chemicals in the environment. Proc. 6th Congres Int. Ass. of Engineering Geology, 6-10 August, Amsterdam. Balkema, Rotterdam.

Verbruggen E., Van de Meent, D., Beusen, A.H.W., Den Hollander, H., 1997. Globetox, het modelleren van de verspreiding van micro-verontreinigingen op mondiale schaal. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven. RIVM-rapport nr. 461502014.

Verhaar, H.J.M., Leeuwen, C.J. van, Hermens, J.L.M., 1992. "Classifying environmental pollutants; 1: structure-activity relationships for prediction of aquatic toxicity", *Chemosphere*, **25**, 4, 471-491.

Verschuieren, K., 1983. Handbook of environmental data on organic chemicals, second edition. Van Nostrand Reinhold, New York.

Weast, R.C., 1985. Handbook of chemistry and physics 1985-86; a ready-reference book of chemical and physical data, 66 th edition. Boca Raton, CRC Press.

EINDNOTEN

- ¹ Misschien wat verwarrend in deze context, noemen deze auteurs hun risico-uitlezing van de NOEC verdeling "inverse Van Staaen methode.
- ² De pesticiden die zijn voortgekomen uit de selectie zijn eveneens in het onderzoek van Klepper en Van de Meent (1997) gebruikt. Daardoor zijn ze apart behandeld naast de andere geselecteerde voorbeeld
- ³ Het PAF-concept verschilt hierin met de normstelling dat ten allen tijden een cumulatieve log-logistische verdelingsfunctie geschat zal worden.
- ⁴ Bodemtoxiciteitsgegevens kunnen zowel worden weergegeven als concentraties in vaste stof of als concentraties in het porievocht. De NOEC's en de concentratie in het veld moeten voor de berekening van de PAF betrekking hebben op dezelfde fase.
- ⁵ De gebruikte SimpleBox methode om uit degradatiesnelheid voor water degradatieconstanten voor bodem en sediment te schatten is gebaseerd op degradatie door microorganismen in uitsluitend de opgeloste fractie (porievocht).
- ⁶ Indien er geen halfwaardetijden voor biodegradatie in het oppervlaktewater bekend zijn worden de halfwaardetijden verondersteld gelijk te zijn aan die in de bodem volgens Howard (1991a).
- ⁷ Vergelijking van de eigen emissieschattingen met de emissieschattingen van de emissieregistratie heeft achteraf plaatsgevonden. Beoogd werd om aan te geven welke geschatte emissies, die gebaseerd zijn op de basisdocumenten, verschillen met de emissiegegevens van de emissieregistratie of waarschijnlijk niet correct zijn. In het geval van DBP zijn de emissies uit de emissieregistratie gebruikt als aanvulling op de eigen emissieschattingen (Tabel 3.21). De berekeningen van de concentraties met SimpleBox 2.0 zijn voor alle stoffen gebaseerd op de eigen emissieschattingen.
- ⁸ De berekende concentraties worden vergeleken met gemeten veldconcentraties, zie paragraaf 4.1.1, om een indruk te krijgen van de betrouwbaarheid van de berekende gegevens en de betrouwbaarheid van de I_{tox} -resultaten.
- ⁹ Uitgebreide datasets van gemeten veldconcentraties van zware metalen en arseen in de bodem in natuurgebieden zijn zeker voor handen (Van Drecht et al., 1996). De dataset van Groot en Van Swinderen (1996) is gebruikt zodat de gemeten concentraties direct gekombineerd konden worden met de bijbehorende gemeten bodemkarakteristieken. De gemeten concentraties in het laatst genoemde onderzoek wijken weinig af van de gemiddelde gemeten concentraties van bos op zandgronden uit (Van Drecht et al. (1996), zie Tabel 3.24.
- ¹⁰ De pH in de regressievergelijkingen van Janssen et al. (1996) is gebaseerd op 0.01 M $CaCl_2$ -extract. De pH van de bodemmonsters is gemeten in H_2O - en KCl-extracten. De pH- H_2O en de pH-KCl kunnen met de volgende regressievergelijkingen worden omgerekend naar pH- $CaCl_2$:
 $pH_{CaCl_2} = -0.658 + 1.003 * pH_{H_2O}$; $pH_{CaCl_2} = 0.56 + 0.943 * pH_{KCl}$ (Klepper en Van de Meent, 1997).

Berekende log $K_{p,s/l}$ -waarden voor de verschillende zware metalen. log $K_{p,s/l}$ -waarden voor arseen en kwik uit Crommentuijn et al. (1997).

Cd	Cr	Cu	Ni	Pb	Zn	As	Hg
2.95	3.81	2.38	3.16	4.00	3.05	2.28	2.23
3.10	3.72	2.24	2.95	3.86	2.76	2.28	2.23
2.75	3.79	2.35	2.74	3.96	2.59	2.28	2.23
3.21	3.89	2.53	3.29	4.14	3.26	2.28	2.23
2.63	3.77	2.31	2.61	3.93	2.44	2.28	2.23
3.39	4.14	2.96	3.55	4.56	3.76	2.28	2.23
3.08	3.83	2.42	2.98	4.03	2.88	2.28	2.23
2.72	3.87	2.49	2.96	4.10	2.90	2.28	2.23

$$^{11} \text{PAF}_{i,w} = \text{PAF}_i \cdot A_i/A_{\text{tot}} : \text{PAF}_{\text{parathion,w}} = \text{PAF}_{\text{parathion}} \cdot A_{\text{bespoten}}/A_{\text{totaal}}$$

waarin: PAF_i PAF van het bestrijdingsmiddel op het bespoten landbouwareaal

A_i Areaal waarop het bestrijdingsmiddel is toegepast

BIJLAGEN**Bijlage Ia. Emissies van PCB's in Europa**

Bijlage Ia1: Directe emissies van PCB's in Europa [kg/jaar] in 1990

land	lucht	water	rwzi	stedelijk gebied
Europa	122405	103881	49035	88262
Albanië	25	21	10	18
Oostenrijk	1307	1109	524	942
België	5189	4404	2079	3742
Bulgarije	307	261	123	221
Zwitserland	1651	1401	661	1190
Tsjechoslowakije	2881	2445	1154	2077
Duitsland	42917	36422	17192	30946
Denemarken	990	840	397	714
Spanje	8524	7234	3415	6146
Finland	2616	2220	1048	1886
Frankrijk	19666	16690	7878	14181
Groot-Brittannië	8930	7579	3577	6439
Griekenland	251	213	101	181
Hongarije	329	279	132	237
Ierland	63	53	25	45
Italië	5816	4936	2330	4194
Luxemburg	106	90	42	76
Noorwegen	386	328	155	278
Polen	1161	985	465	837
Portugal	522	443	209	376
Roemenië	542	460	217	391
Rusland	15359	13035	6153	11075
Zweden	1930	1638	773	1392
voormalig Joegoslavië	937	795	375	676

Bijlage Ia2:Emissies van PCB's in Europa in 2000 naar compartiment [kg/jaar]

land	atmosfeer	water	rwzi	stedelijk gebied
Europa	48734	35465	17733	22197
Albanië	11	8	4	5
Oostenrijk	564	410	205	257
België	2203	1603	802	1003
Bulgarije	207	151	75	94
Zwitserland	669	487	243	305
Tsjechoslowakije	1134	825	413	517
Duitsland	18596	13533	6766	8470
Denemarken	425	309	155	194
Spanje	3245	2362	1181	1478
Finland	1183	861	430	539
Frankrijk	7146	5200	2600	3255
Groot-Brittannië	1163	846	423	530
Griekenland	214	156	78	97
Hongarije	176	128	64	80
Ierland	34	25	12	15
Italië	1461	1063	532	665
Luxemburg	51	37	19	23
Noorwegen	159	116	58	72
Polen	835	608	304	380
Portugal	224	163	82	102
Roemenië	350	255	127	159
Rusland	7319	5326	2663	3334
Zweden	797	580	290	363
voormalig Joegoslavië	568	413	207	259

Bijlage Ib. Emissie van organische verbindingen (koolwaterstoffen) in Europa

Bijlage Ib1: Emissie naar lucht en water van VOS (NM) en toluen in 1994 in Europa [ton]

Land	VOS (NM) 1994 1000 ton	Tolueen lucht 1994 [ton]	Tolueen water 1994 [ton]
Europa		1233661	33399
Oostenrijk	364	23380	633
Belgie	350	22480	609
Bulgarije	205	13167	356
Belarus	372	23893	647
Zwitserland	226	14516	393
Czechoslowakije	507	32564	882
Oost+West	2405	154473	4182
Denemarken	161	10341	280
Spanje	1196	76819	2080
Estland	50	3211	87
Finland	195	12525	339
Frankrijk	2197	141113	3820
Groot-Britannie	2042	131157	3551
Griekenland	325	20875	565
Hongarije	143	9185	249
Ierland	185	11883	322
Italie	2590	166355	4504
Lithauen	112	7194	195
Luxemburg	17	1092	30
Letland (Latvia)	49	3147	85
Moldavië	116	7451	202
Polen	295	18948	513
Portugal	831	53375	1445
Roemenie	231	14837	402
Rusland	505	32436	878
Zweden	2861	183761	4975
Oekraïne	502	32243	873
Joegoslavië	175	11240	304

Bijlage Ib2: Emissies van benz[a]pyreen en fluorantheen in West-Europa in 1995 [ton].

Land	Benzeen		Benz[a]pyreen		Fluorantheen		stedelijk
	lucht	lucht	water	lucht	water	landbouw	
West Europa	215613	448	211	8064	550	183	367
België	7462	8	3	144	10	3	7
Denemarken	3597	91	36	1638	112	37	74
Duitsland	49857	39	16	702	48	16	32
Finland	3139	19	8	342	23	8	16
Frankrijk	40078	6	2	108	7	2	5
Griekenland	5973	9	4	162	11	4	7
Groot-Brittannië	27182	47	19	846	58	19	38
Ierland	2515	10	4	180	12	4	8
Italië	37876	27	11	486	33	11	22
Luxemburg	191	27	11	486	33	11	22
Noorwegen	3949	4	2	72	5	2	3
Oostenrijk	4499	12	5	216	15	5	10
Portugal	3555	18	7	324	22	7	15
Spanje	16310	59	24	1062	72	24	48
Zweden	5900	7	3	126	9	3	6
Zwitserland	3530	65	26	1170	80	27	53

Bijlage Ic. Emissies van pesticiden in Europa

BijlageIc1: Geschatte emissies van pesticiden in Europa in 1995 [kg/jaar]

	2,4D	atrazin	azin-phos-methyl	bentazon	carbendazim	dichlorvos	diquat	diuron
Albania	2.29E+04	8.72E+04	4.00E+03	2.96E+05	4.31E+05	1.63E+04	3.19E+03	2.18E+03
Austria	8.51E+04	9.74E+04	6.08E+02	8.66E+05	1.26E+06	8.44E+03	2.38E+04	6.21E+04
Belgium-Lux	4.53E+04	2.93E+05	5.02E+02	2.78E+05	4.05E+05	6.60E+04	1.60E+04	2.89E+04
Belarus	2.84E+05	6.74E+05	3.09E+04	1.72E+06	2.50E+06	1.26E+05	1.63E+05	2.04E+05
Bulgaria	2.11E+05	4.38E+05	2.01E+04	2.45E+06	3.56E+06	8.21E+04	1.77E+04	7.90E+04
Czechoslovakia	2.57E+05	4.42E+05	2.03E+04	1.89E+06	2.75E+06	8.28E+04	7.61E+04	1.72E+05
Denmark	1.59E+05	1.38E+05	4.55E+02	9.96E+05	1.45E+06	6.32E+03	4.12E+04	1.29E+05
Estonia	3.87E+04	9.23E+04	4.23E+03	2.38E+05	3.47E+05	1.73E+04	9.83E+03	3.97E+04
Finland	7.19E+04	4.67E+04	6.21E+02	6.07E+05	8.83E+05	8.62E+03	2.11E+04	8.34E+04
France	8.31E+05	1.43E+06	2.60E+04	8.89E+06	1.29E+07	3.61E+05	2.09E+05	4.61E+05
Germany	6.49E+05	6.65E+05	1.84E+04	4.50E+06	6.55E+06	2.55E+05	2.83E+05	4.68E+05
Greece	1.64E+05	1.21E+05	1.00E+04	1.27E+06	1.85E+06	1.39E+05	3.69E+04	1.06E+05
Hungary	1.99E+05	3.19E+05	4.52E+03	3.47E+06	5.04E+06	6.28E+04	3.49E+04	1.09E+05
Iceland	1.82E+04	1.72E+05	7.91E+03	4.41E+04	6.42E+04	3.23E+04	2.10E+02	0.00E+00
Ireland	6.15E+04	5.75E+04	6.89E+02	2.57E+05	3.74E+05	9.56E+03	5.66E+03	3.19E+04
Italy	3.86E+05	5.38E+05	4.65E+04	4.26E+06	6.20E+06	6.46E+05	1.34E+05	4.01E+05
Latvia	7.61E+04	1.79E+05	8.23E+03	4.33E+05	6.30E+05	3.36E+04	1.91E+04	4.97E+04
Lithuania	1.42E+05	2.51E+05	1.15E+04	8.02E+05	1.17E+06	4.71E+04	2.74E+04	1.06E+05
Norway	2.93E+04	2.68E+04	7.23E+01	2.23E+05	3.25E+05	1.00E+03	6.35E+03	3.27E+04
Poland	7.38E+05	6.22E+05	4.53E+03	5.47E+06	7.96E+06	6.29E+04	4.51E+05	2.55E+05
Portugal	5.58E+04	2.62E+05	1.15E+04	7.03E+05	1.02E+06	1.59E+05	2.77E+04	3.55E+04
Romania	4.18E+05	1.10E+06	5.03E+04	8.64E+06	1.26E+07	2.06E+05	9.55E+04	1.74E+05
Russian Fed.	5.72E+06	9.07E+06	4.16E+05	3.89E+07	5.67E+07	1.70E+06	7.92E+05	2.82E+06
Spain	6.92E+05	9.23E+05	8.99E+04	4.52E+06	6.58E+06	1.25E+06	1.21E+05	8.56E+05
Sweden	8.02E+04	5.72E+04	6.38E+01	6.64E+05	9.66E+05	8.85E+02	3.56E+04	7.27E+04
Switzerland	2.74E+04	3.54E+04	1.01E+03	1.70E+05	2.48E+05	1.40E+04	1.05E+04	2.06E+04
UK	3.99E+05	9.62E+05	2.66E+03	2.05E+06	2.99E+06	3.69E+05	1.19E+05	2.17E+05
Ukraine	1.26E+06	2.97E+06	1.36E+05	1.02E+07	1.49E+07	5.56E+05	3.58E+05	8.13E+05
Yugoslavia former	3.40E+05	1.39E+06	6.38E+04	6.79E+06	9.88E+06	2.61E+05	1.15E+05	1.40E+05
Total (tonnes)	13455.88	23455.07	991.972	111641.1	162467.2	6579.857	3252.564	7968.667

Bijlage Ic2:Emissies van pesticiden in Europa [kg/jaar]

	DNOC	fentin- acetaat	lindaan	malathion	maneb	mecoprop	metamitron	methabenz thiazuron
Albania	3.04E+04	1.33E+04	1.27E+04	1.09E+04	6.39E+04	1.23E+05	0.00E+00	6.73E+04
Austria	7.91E+04	4.13E+04	3.45E+04	9.01E+02	2.24E+05	5.09E+05	7.21E+04	1.99E+05
Belgium-Lux	8.84E+04	6.40E+04	1.51E+04	7.44E+02	3.26E+05	1.82E+05	1.35E+05	1.22E+05
Belarus	1.21E+06	9.99E+05	6.62E+04	8.42E+04	4.55E+06	9.62E+05	7.48E+04	4.60E+05
Bulgaria	1.76E+05	5.34E+04	1.04E+05	5.47E+04	2.70E+05	6.10E+05	1.36E+04	6.72E+05
Czechoslovakia	3.33E+05	2.00E+05	5.26E+04	5.52E+04	9.46E+05	5.26E+05	1.91E+05	8.22E+05
Denmark	1.26E+05	6.00E+04	9.03E+03	6.74E+02	2.94E+05	1.51E+05	8.98E+04	5.23E+05
Estonia	7.49E+04	5.74E+04	3.50E+03	1.15E+04	2.61E+05	9.24E+04	0.00E+00	1.00E+05
Finland	9.85E+04	4.80E+04	5.62E+03	9.20E+02	2.21E+05	3.88E+05	4.49E+04	2.08E+05
France	6.66E+05	2.19E+05	3.50E+05	3.85E+04	1.22E+06	3.31E+06	6.00E+05	2.51E+06
Germany	7.42E+05	4.16E+05	1.22E+05	2.73E+04	1.96E+06	1.83E+06	7.10E+05	1.82E+06
Greece	1.55E+05	6.54E+04	4.24E+04	1.49E+04	3.27E+05	1.11E+06	6.53E+04	4.50E+05
Hungary	1.92E+05	7.47E+04	1.95E+05	6.70E+03	4.00E+05	4.13E+05	1.29E+05	5.76E+05
Iceland	1.44E+03	1.33E+03	8.14E+01	2.15E+04	6.04E+03	5.99E+05	0.00E+00	0.00E+00
Ireland	4.02E+04	2.93E+04	4.48E+03	1.02E+03	1.34E+05	1.14E+06	4.49E+04	9.69E+04
Italy	3.54E+05	1.24E+05	1.81E+05	6.90E+04	7.69E+05	1.41E+06	3.76E+05	1.14E+06
Latvia	1.60E+05	1.17E+05	8.14E+03	2.24E+04	5.36E+05	2.47E+05	1.63E+04	1.63E+05
Lithuania	2.29E+05	1.63E+05	1.25E+04	3.14E+04	7.43E+05	3.78E+05	4.22E+04	3.69E+05
Norway	4.49E+04	2.53E+04	1.55E+03	1.07E+02	1.17E+05	1.04E+05	0.00E+00	9.21E+04
Poland	2.99E+06	2.35E+06	1.85E+05	6.71E+03	1.07E+07	1.47E+06	5.43E+05	1.48E+06
Portugal	1.68E+05	1.17E+05	3.49E+04	1.70E+04	5.48E+05	2.47E+05	1.36E+03	1.29E+05
Romania	6.35E+05	3.32E+05	5.27E+05	1.37E+05	1.59E+06	1.43E+06	1.32E+05	1.20E+06
Russian Fed.	8.57E+06	4.74E+06	5.28E+05	1.13E+06	2.16E+07	1.88E+07	1.82E+06	1.61E+07
Spain	5.21E+05	2.77E+05	7.47E+04	1.33E+05	1.34E+06	2.12E+06	2.45E+05	2.15E+06
Sweden	1.08E+05	4.67E+04	7.00E+03	9.45E+01	2.15E+05	1.99E+05	6.94E+04	2.49E+05
Switzerland	3.73E+04	2.53E+04	6.10E+03	1.50E+03	1.32E+05	1.92E+05	1.91E+04	6.38E+04
UK	4.03E+05	2.28E+05	2.75E+04	3.94E+03	1.06E+06	2.46E+06	2.27E+05	1.17E+06
Ukraine	2.81E+06	2.05E+06	4.65E+05	3.71E+05	9.41E+06	2.53E+06	2.07E+06	3.98E+06
Yugoslavia former	6.72E+05	4.39E+05	4.33E+05	1.74E+05	2.09E+06	2.15E+06	2.14E+05	8.71E+05
Total (tonnes)	21710.44	13376.26	3509.141	2428.702	62111.62	45640.62	7938.821	37815.07

Bijlage Ic3:Emissies van pesticiden in Europa in 1995 [kg/jaar]

	metribuzin	mevinfos	monolinuron	parathion	simazine	thiram	trifluralin
Albania	2.29E+03	1.44E+01	1.86E+03	3.50E+04	5.34E+03	1.56E+03	3.16E+03
Austria	7.11E+03	4.68E+02	5.77E+03	1.06E+05	2.41E+04	5.69E+04	6.68E+02
Belgium-Lux	1.10E+04	4.85E+02	8.93E+03	4.71E+04	1.51E+04	7.90E+04	2.01E+03
Belarus	1.72E+05	3.48E+03	1.39E+05	3.30E+05	4.98E+04	2.74E+04	2.44E+04
Bulgaria	9.17E+03	2.16E+03	7.44E+03	1.16E+05	5.08E+04	2.18E+04	1.59E+04
Czechoslovakia	3.44E+04	2.77E+03	2.79E+04	2.04E+05	5.71E+04	4.88E+04	1.60E+04
Denmark	1.03E+04	6.33E+01	8.37E+03	1.05E+05	3.14E+04	9.94E+03	9.45E+02
Estonia	9.86E+03	3.75E+01	8.00E+03	1.88E+04	7.01E+03	4.41E+03	3.34E+03
Finland	8.25E+03	4.44E+01	6.70E+03	7.29E+04	1.30E+04	9.92E+02	3.20E+02
France	3.76E+04	3.49E+03	3.05E+04	9.97E+05	2.67E+05	2.77E+05	9.80E+03
Germany	7.15E+04	1.82E+03	5.80E+04	4.43E+05	1.71E+05	1.66E+05	4.56E+03
Greece	1.12E+04	3.25E+03	9.11E+03	1.93E+05	7.48E+04	6.68E+04	8.28E+02
Hungary	1.28E+04	1.33E+03	1.04E+04	1.27E+05	6.55E+04	1.02E+05	2.19E+03
Iceland	2.29E+02	0.00E+00	1.86E+02	9.30E+04	0.00E+00	0.00E+00	6.24E+03
Ireland	5.04E+03	3.36E+01	4.09E+03	1.82E+05	5.17E+03	7.87E+02	3.94E+02
Italy	2.13E+04	7.57E+03	1.73E+04	3.06E+05	2.79E+05	4.10E+05	3.69E+03
Latvia	2.02E+04	8.30E+02	1.64E+04	5.12E+04	1.34E+04	6.66E+03	6.49E+03
Lithuania	2.80E+04	4.34E+02	2.27E+04	8.35E+04	2.52E+04	9.63E+03	9.09E+03
Norway	4.36E+03	3.30E+01	3.53E+03	1.67E+04	6.20E+03	8.39E+03	1.84E+02
Poland	4.04E+05	1.14E+04	3.28E+05	7.45E+05	1.59E+05	2.28E+05	4.27E+03
Portugal	2.02E+04	3.58E+03	1.64E+04	1.55E+05	2.60E+04	4.30E+04	1.80E+03
Romania	5.71E+04	2.73E+04	4.63E+04	2.89E+05	1.38E+05	1.65E+05	3.97E+04
Russian Fed.	8.15E+05	1.59E+04	6.62E+05	4.33E+06	9.85E+05	2.30E+05	3.28E+05
Spain	4.77E+04	6.67E+03	3.87E+04	4.59E+05	2.61E+05	1.93E+05	6.33E+03
Sweden	8.02E+03	4.59E+01	6.51E+03	5.79E+04	1.65E+04	8.01E+03	3.93E+02
Switzerland	4.36E+03	8.36E+01	3.53E+03	3.58E+04	1.00E+04	4.37E+04	2.43E+02
UK	3.92E+04	4.99E+02	3.18E+04	5.59E+05	7.01E+04	4.55E+04	6.60E+03
Ukraine	3.52E+05	3.22E+04	2.85E+05	1.41E+06	2.66E+05	2.68E+05	1.07E+05
Yugoslavia former	7.54E+04	1.06E+04	6.12E+04	5.02E+05	1.23E+05	1.41E+05	5.03E+04
Total (tonnes)	2299.101	136.5942	1865.201	12080.22	3215.565	2664.656	655.4759

Bijlage IIa. Aquatische en terrestrische NOEC's organische verbindingen

Bijlage IIa1: Aquatische NOEC's voor benzeen en de bijbehorende cumulatieve frequentie.

Soort	Organisme	NOEC [µg/l]	Frequentie	Referentie
Vissen	<i>Salmo gairdneri</i>	21	0.077	Aquatox
Vissen	<i>Clupea harengus</i>	50	0.154	Aquatox
Geleedpotigen	<i>Cancer magister</i>	180	0.231	Aquatox
Vissen	<i>Oncorhynchus kisuth</i>	900	0.308	Aquatox
Vissen	<i>Pimephales promelas</i>	2900	0.385	Vaal, 1995
Vissen	<i>Morone saxatilis</i>	3100	0.461	Vaal, 1995
Vissen	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	5340	0.538	Vaal, 1995
Algen	<i>Selenastrum capricornutum</i>	9500	0.615	Vaal, 1995
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	10000	0.692	Aquatox
Geleedpotigen	<i>Daphnia magna</i>	10000	0.769	Aquatox
Algen	<i>Dunaliella tertiolecta</i>	10000	0.846	Aquatox
Algen	<i>Champia parvalua</i>	34260	0.923	Vaal, 1995

Bijlage IIa2: Terrestrische NOEC's van Benz[a]pyreen.

Soort	Organisme	% O.M.	test waarde [mg/kg]	Poriewater [µg/l]	Referentie
Wormen	<i>Eisenia f. Fetida</i>	3.9	1	0.0467	Kalf et al., 1996
Wormen	<i>Enchytraeus crypticus</i>	3.9	3.4	0.1588	Kalf et al., 1996
Geleedpotigen	<i>Porcellio scaber</i>	90	25	0.0506	Kalf et al., 1996
Geleedpotigen	<i>Oniscus asellus</i>	90	32	0.0647	Kalf et al., 1996
Geleedpotigen	<i>Porcellio scaber</i>	90	32	0.0647	Kalf et al., 1996

Bijlage IIa3: Aquatische NOEC's voor Benz[a]pyreen.

Soort	Organisme	NOEC [µg/l]	Referentie
Amfibieën	<i>Rana temporaria</i>	2.7	Kalf et al., 1996
Geleedpotigen	<i>Daphnia magna</i>	3.1	Kalf et al., 1996
Geleedpotigen	<i>Aedes aegypti</i>	3.4	Kalf et al., 1996
Algen	<i>Selenastrum capricornutum</i>	5.3	Kalf et al., 1996
Vissen	<i>Brachydanio rerio</i>	6.3	Kalf et al., 1996
Vissen	<i>Leuresthes tenuis</i>	7	Aquatox
Vissen	<i>Pimephales promelas</i>	7.2	Kalf et al., 1996
Slakken	<i>Lymnaea stagnalis</i>	15.4	Kalf et al., 1996
Coelenteraten	<i>Hydra oligactis</i>	16.5	Kalf et al., 1996
Amfibieën	<i>Xenopus laevis</i>	17.3	Kalf et al., 1996
Amfibieën	<i>Ambystoma mexicanum</i>	18.1	Kalf et al., 1996
Geleedpotigen	<i>Cules pipiens</i>	19.4	Kalf et al., 1996

Bijlage IIa4: Aquatische NOEC's voor Fluorantheen.

Soort	Organisme	NOEC [$\mu\text{g/l}$]	Referentie
Geleedpotigen	<i>Aedes aegypti</i>	21	Kalf et al., 1996
Amfibieën	<i>Ambystoma mexicanum</i>	75	Kalf et al., 1996
Bacteriën	<i>Bacillus subtilis</i>	941	Kalf et al., 1996
Vissen	<i>Brachydanio rerio</i>	24	Kalf et al., 1996
Geleedpotigen	<i>Culex pipiens</i>	77	Kalf et al., 1996
Geleedpotigen	<i>Daphnia magna</i>	17	Kalf et al., 1996
Coelenteraten	<i>Hydra oligactis</i>	66	Kalf et al., 1996
Macrophyten	<i>Lemna gibba</i>	200	Kalf et al., 1996
Slakken	<i>Lymnaea stagnalis</i>	61	Kalf et al., 1996
Geleedpotigen	<i>Nitocra spinipes</i>	138	Kalf et al., 1996
Bacteriën	<i>Photobacterium phosphoreum</i>	1893	Kalf et al., 1996
Vissen	<i>Pimephales promelas</i>	29	Kalf et al., 1996
Bacteriën	<i>Pseudomonas putida</i>	2533	Kalf et al., 1996
Amfibieën	<i>Rana temporaria</i>	16	Kalf et al., 1996
Algen	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	287	Kalf et al., 1996
Algen	<i>Selenastrum capricornutum</i>	27	Kalf et al., 1996
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	1482	Kalf et al., 1996
Protozoa	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	791	Kalf et al., 1996
Amfibieën	<i>Xenopus laevis</i>	75	Kalf et al., 1996

Bijlage IIa5: Aquatische NOEC's voor Dibutylhexylftalaat.

Soort	Organisme	NOEC [$\mu\text{g/l}$]	Referentie
Geleedpotigen	<i>Gammarus pulex</i>	100	IUCLID
Vissen	<i>Lepomis macrochirus</i>	140	IUCLID
Vissen	<i>Cyprinus carpio</i>	159	IUCLID
Algen	<i>Dunaliella parva</i>	280	IUCLID
Vissen	<i>Salmo gairdneri</i>	500	IUCLID
Vissen	<i>Pimephales promelas</i>	560	IUCLID
Geleedpotigen	<i>Daphnia magna</i>	560	IUCLID
Vissen	<i>Caprinodon variegatus</i>	600	IUCLID
Vissen	<i>Pimephales promelas</i>	940	IUCLID
Geleedpotigen	<i>Daphnia magna</i>	1000	IUCLID
Vissen	<i>Leuciscus idus</i>	2200	IUCLID
Algen	<i>Thalassiosira pseudomona</i>	2800	IUCLID
Bacteriën		200000	IUCLID

Bijlage IIa6: Aquatische NOEC's voor Diethylhexylftalaat.

Soort	Organisme	NOEC [$\mu\text{g/l}$]	Referentie
Vissen	<i>Salmo gairdneri</i>	5	Bakker, 1996
Vissen	<i>Pimephales promelas</i>	62	Bakker, 1996
Geleedpotigen	<i>Daphnia magna</i>	72	Bakker, 1996
Geleedpotigen	<i>Gammarus pulex</i>	100	IUCLID
Geleedpotigen	<i>Chironomus pugia</i>	360	ECPI
Vissen	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	502	IUCLID
Vissen	<i>Oryzia latipes</i>	554	IUCLID
Algen	<i>Scenedesmus quadricauda</i>	10000	Bakker, 1996

Bijlage IIa7: Terrestrische NOEC's voor pentachloorfenol.

Soort	Organisme	% O.M.	Test [mg/kg]	NOEC [µg/l]	Referentie
Planten	<i>Lactuca sativa</i>	5.7	3.2	0.27	Denneman, 1990
Planten	<i>Lactuca sativa</i>	5.7	1	0.35	Denneman, 1990
Planten	<i>Lactuca sativa</i>	1.4	0.32	0.85	Denneman, 1990
Microbiële processen	<i>ATP-gehalte</i>	3.1	2	0.98	Denneman, 1990
Regenwormen	<i>Eisenia foetida</i>	10	8.7	1.32	Denneman, 1990
Planten	<i>Avena sativa</i>	5.7	3.5	2.66	Denneman, 1990
Microbiële processen	<i>Nitrificatie</i>	4.2	11.9	2.88	Denneman, 1990
Regenwormen	<i>Enchytraeus albidus*</i>	10	136	5.51	Denneman, 1990
Regenwormen	<i>Eisenia andrei*</i>	10	87	5.80	Denneman, 1990
Planten	<i>Avena sativa</i>	5.7	11.2	8.51	Denneman, 1990
Microbiële processen	<i>Respiratie</i>	6	83	63.13	Denneman, 1990
Regenwormen	<i>Lumbricus rubellus*</i>	7.2	1196	67.12	Denneman, 1990

* LC50 omgerekend naar NOEC's gebaseerd op acuut-chronisch ratio van *Eisenia foetida* (=3.7)

Bijlage IIa8: Aquatische NOEC's voor pentachloorfenol.

Soort	organisme	NOEC [µg/l]	Referentie
Vissen	<i>Salmo gairdneri, eggs</i>	9	Slooff et al., 1991
Slakken	<i>Lymnaea stagnalis, eggs</i>	10	Slooff et al., 1991
Coelenteraten	<i>Hydra oligactis</i>	32	Slooff et al., 1991
Vissen	<i>Oryzias latipes, eggs</i>	32	Slooff et al., 1991
Amfibieën	<i>Xenopus laevis</i>	32	Slooff et al., 1991
Vissen	<i>Pimephales promelas, fry</i>	47	Slooff et al., 1991
Algen	<i>Scenedesmus pannonicus</i>	100	Slooff et al., 1991
Vissen	<i>Poecilia reticulata</i>	100	Slooff et al., 1991
Geleedpotigen	<i>Daphnia magna</i>	134	Slooff et al., 1991
Bacteriën	<i>Pseudomonas fluorescens</i>	1000	Slooff et al., 1991
Algen	<i>Microcystus aeruginose</i>	1000	Slooff et al., 1991
Macrophyten	<i>Lemna minor</i>	1000	Slooff et al., 1991
Insecten	<i>Culex pipiens</i>	3200	Slooff et al., 1991

Bijlage IIa9: Aquatische NOEC's voor 1,2,3-Trichloorbenzeen

Soort	Organisme	NOEC [µg/l]	Referentie
Bacteriën	<i>Clostridium botulinum</i>	37503.9	QSAR
Bacteriën	<i>Bacillus subtilis</i>	3795.6	QSAR
Bacteriën	<i>Pseudomonas putida</i>	10215.9	QSAR
Bacteriën	<i>Photobacterium phoshoreum</i>	8388.4	QSAR
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	7260.3	QSAR
Algen	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	1955.9	QSAR
Algen	<i>Selenastrum capricornutum</i>	258.1	QSAR
Schimmels	<i>Saccharomyces cerevisiae</i>	47827.4	QSAR
Protozoa	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	4674.7	QSAR
Coelenteraten	<i>Hydra oligactis</i>	446.2	QSAR
Slakken	<i>Lymnaea stagnalis</i>	416.4	QSAR
Geleedpotigen	<i>Nitocra spinipes</i>	775.7	QSAR
Geleedpotigen	<i>Daphnia magna</i>	179.2	QSAR
Geleedpotigen	<i>Aedes aegypti</i>	243.4	QSAR
Geleedpotigen	<i>Culex pipiens</i>	524.2	QSAR
Vissen	<i>Pimephales promelas</i>	202.8	QSAR
Vissen	<i>B. rerio</i>	202.8	QSAR
Amfibieën	<i>Ambystoma mexicanum</i>	27.8	QSAR
Amfibieën	<i>Rana temporaria</i>	4000.4	QSAR
Amfibieën	<i>Xenopus laevis</i>	90.6	QSAR

Bijlage IIa10: Aquatische toxiciteitsgegevens (NOEC's) voor 1,2,4-Trichloorbenzeen

soort	Organisme	NOEC [µg/l]	Referentie
Amfibieën	<i>Ambystoma mexicanum</i>	35.5	QSAR
Amfibieën	<i>Xenopus laevis</i>	113.6	QSAR
Geleedpotigen	<i>Daphnia magna</i>	222.3	QSAR
Vissen	<i>B. rerio</i>	242.9	QSAR
Vissen	<i>Pimephales promelas</i>	242.9	QSAR
Geleedpotigen	<i>Aedes aegypti</i>	305.0	QSAR
Algen	<i>Selenastrum capricornutum</i>	317.5	QSAR
Slakken	<i>Lymnaea stagnalis</i>	497.6	QSAR
Coelenteraten	<i>Hydra oligactis</i>	533.2	QSAR
Geleedpotigen	<i>Culex pipiens</i>	626.5	QSAR
Geleedpotigen	<i>Nitocra spinipes</i>	911.8	QSAR
Algen	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	2337.5	QSAR
Bacteriën	<i>Bacillus subtilis</i>	4333.9	QSAR
Amfibieën	<i>Rana temporaria</i>	4692.5	QSAR
Protozoa	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	5517.7	QSAR
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	8428.6	QSAR
Bacteriën	<i>Photobacterium phoshoreum</i>	9657.8	QSAR
Bacteriën	<i>Pseudomonas putida</i>	11664.8	QSAR
Bacteriën	<i>Clostridium botulinum</i>	44450.5	QSAR
Schimmels	<i>Saccharomyces cerevisiae</i>	56218.2	QSAR

Bijlage IIa11: Aquatische NOEC's voor 1,3,5-Trichloorbenzeen.

Soort	Organisme	NOEC [µg/l]	Referentie
Amfibieën	<i>Ambystoma mexicanum</i>	24	QSAR
Amfibieën	<i>Xenopus laevis</i>	80	QSAR
Vissen	<i>B. rerio</i>	183	QSAR
Vissen	<i>Pimephales promelas</i>	183	QSAR
Geleedpotigen	<i>Daphnia magna</i>	199	Aquatox
Geleedpotigen	<i>Aedes aegypti</i>	215	QSAR
Algen	<i>Selenastrum capricornutum</i>	230	QSAR
Slakken	<i>Lymnaea stagnalis</i>	377	QSAR
Coelenteraten	<i>Hydra oligactis</i>	404	QSAR
Geleedpotigen	<i>Culex pipiens</i>	475	QSAR
Geleedpotigen	<i>Nitocra spinipes</i>	709	QSAR
Algen	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	1772	QSAR
Bacteriën	<i>Bacillus subtilis</i>	3526	QSAR
Amfibieën	<i>Rana temporaria</i>	3661	QSAR
Protozoa	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	4263	QSAR
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	6683	QSAR
Bacteriën	<i>Photobacterium phoshoreum</i>	7757	QSAR
Bacteriën	<i>Pseudomonas putida</i>	9490	QSAR
Bacteriën	<i>Clostridium botulinum</i>	34125	QSAR

Bijlage IIa12: Aquatische NOEC's voor PCB's.

Soort	Organisme	NOEC [µg/l]	Referentie
Vissen	<i>Salmo gairdneri</i>	0.01	Bakker, 1996
Vissen	<i>Cyprinodon variegatus</i>	0.452	Bakker, 1996
Insecten	<i>Tanytarsus dissimilis</i>	0.5	Bakker, 1996
Vissen	<i>Pimephales promelas</i>	1.06	Bakker, 1996
Geleedpotigen	<i>Daphnia magna</i>	1.73	Bakker, 1996
Geleedpotigen	<i>Gammarus pseudolimnaeus</i>	2.65	Bakker, 1996

Bijlage IIa13: Aquatische NOEC's voor 2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-p-dioxine

Soort	Organisme	NOEC [µg/l]	Referentie
Wormen	<i>Paranais sp</i>	0.2	Slooff, 1993
Weekdieren	<i>Physa sp.</i>	0.2	Slooff, 1994
Vissen	<i>Esox lucius</i>	0.001	Slooff, 1995
Vissen	<i>Jordanella floridae</i>	0.0003	Slooff, 1996
Vissen	<i>Oryzias latipes</i>	0.0018	Slooff, 1997
Vissen	<i>Pimephales promelas</i>	0.0007	Slooff, 1998
Vissen	<i>Salmo gairdneri</i>	0.000454	Slooff, 1999

Bijlage IIa14: Aquatische NOEC's voor toluen

Soort	Organisme	NOEC [µg/l]	Referentie
Kreeftachtigen	<i>Daphnia magna</i>	530	Slooff et al., 1988
Vissen	<i>Oncorhynchus kisutch</i>	1400	Slooff et al., 1988
Vissen	<i>Carassius auratus</i>	1500	Verschueren, 1983
Vissen	<i>Cyprinodon variegatus</i>	3200	Slooff et al., 1988
Vissen	<i>Pimephales promelas</i>	4000	Slooff et al., 1988
Algen	<i>Chlorella vulgaris</i> + <i>Nostoc linckia</i>	3314	Denneman & Gestel, 1990

Bijlage IIa15: Terrestrische NOEC's voor toluen

Soort	Organisme	% O.M.	Test [mg/kg]	Poriewater [µg/l]	Referentie
Algen	<i>Chlorella vulgaris</i> + <i>Nostoc linckia</i>	1.8	10	3314	Denneman, 1990
Planten	<i>Lactuca sativa</i>	1.4	100	42607	Denneman, 1990
Regenwormen	<i>Eisenia foetida</i>	10	49.6	2959	Denneman, 1990
Microbiële processen	Respiratie	6	300	29825	Denneman, 1990
Microbiële processen	Respiratie	3	300	59649	Denneman, 1990

Bijlage IIb: Aquatische L(E)₅₀'s voor pesticiden

	Alg EC50 [mg/l]	Kreeft L(E)C50 [mg/l]	Vis L(E)C50 [mg/l]
2,4-D (pH soil > 5)		25	3.2
atrazine	0.69	5.7	4.3
azinphos-methyl	3.6	0.0011	0.0011
bentazone	62	64	510
carbendazim	0.34	0.13	0.007
dichlorvos	52.8	0.000028	0.17
diquat-dibromide	0.011	10.3	21
diuron	0.023	0.16	1.1
DNOC	8.53	0.15	0.066
fentin-acetate	0.002	0.011	0.01
lindane	1	0.0195	0.002
malathion	4.5	0.001	0.062
maneb	3.2	0.0024	0.2
mecoprop/mecoprop-P	220	420	150
metamitron	0.2	102	326
methabenzthiazuron	0.042	30.6	8.4
metribuzin	0.0022	4.5	64
mevinphos	8.53	0.00016	0.017
monolinuron	0.001	32.5	56
parathion	1.17	0.0018	0.57
simazine	0.064	1	0.14
thiram	0.03	0.00006	0.26
trifluralin	2.5	0.56	0.42

Bijlage IIc. Terrestrische NOEC's van zware metalen en arseen

Bijlage IIc.1: Terrestrische toxiciteitsgegevens voor cadmium.

organisme	pH	% O.M.	% Klei	exp.tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	log K _{p,s/l} test	Porievocht [µg/l]	Referentie
Planten									
Raphanus sativa	5.4	3.0	18.0	42	NOEC	10.7	2.50	33.8	Denneman & van Gestel, 1990
Picea sitchensis	3.3	77.0	0.0	100	NOEC	1.6	2.49	5.1	Denneman & van Gestel, 1990
Graan	5.6	1.6	7.8	150	NOEC	13.0	2.40	51.4	Denneman & van Gestel, 1990
Graan	5.4	2.4	26.0	150	NOEC	7.1	2.43	26.3	Denneman & van Gestel, 1990
Graan	5.2	3.2	37.7	150	NOEC	51.0	2.42	191.8	Denneman & van Gestel, 1990
Graan	5.0	3.4	2.6	150	NOEC	6.4	2.35	28.8	Denneman & van Gestel, 1990
Graan	5.4	6.8	3.3	150	NOEC	50.0	2.75	88.3	Denneman & van Gestel, 1990
Graan	4.6	19.4	2.6	150	NOEC	7.0	2.69	14.2	Denneman & van Gestel, 1990
Oligochaeta (regenwormen)									
Dendrobaena rubida oligo	6.5	9.7	5.0	90	NOEC	101.0	3.39	41.1	Denneman & van Gestel, 1990
Lumbricus rubellus	7.3	3.4	17.0	84	NOEC	10.0	3.45	3.5	Denneman & van Gestel, 1990
Enchytraeus albidus	6.5	10.0	20.0	28	LC50	3680.0	3.40	146.5	Denneman & van Gestel, 1990
Microbiele processen									
Ademhaling	5.1	5.7	9.0	310	NOEC	150.0	2.55	418.2	Denneman & van Gestel, 1990
Ademhaling	7.4	2.6	19.0	630	NOEC	151.0	3.42	57.9	Denneman & van Gestel, 1990
Ademhaling	6.8	3.2	60.0	560	NOEC	150.0	3.19	96.3	Denneman & van Gestel, 1990
Ademhaling	4.3	12.8	5.0	574	NOEC	400.0	2.42	1520.3	Denneman & van Gestel, 1990
Glutaminezuur afbraak	7.7	1.6	2.0	455	EC50	150.0	3.41	5.8	Denneman & van Gestel, 1990
Glutaminezuur afbraak	7.4	2.6	19.0	455	EC50	1000.0	3.42	38.3	Denneman & van Gestel, 1990
Decompositie cellulose	3.0	18.0	25.0	-	EC50	149.0	1.90	187.0	Denneman & van Gestel, 1990

Bijlage IIc.1

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp. tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	log $K_{p,sl}$ test	Porievocht [µg/l]	Referentie
Enzymactiviteit									
Urease	7.7	1.6	2.0	455	EC50	120.0	3.41	4.7	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	5.1	5.7	9.0	455	EC50	17.0	2.55	4.7	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	7.4	2.6	19.0	455	EC50	521.0	3.42	20.0	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	6.8	3.2	60.0	455	EC50	370.0	3.19	23.7	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	7.7	1.6	2.0	455	EC50	120.0	3.41	4.7	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	5.1	5.7	9.0	455	EC50	1830.0	2.55	510.2	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	7.4	2.6	19.0	455	EC50	141.0	3.42	5.4	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	6.8	3.2	60.0	455	EC50	1020.0	3.19	65.5	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	7.7	1.6	2.0	455	EC50	310.0	3.41	12.0	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	7.4	2.6	19.0	455	EC50	220.0	3.42	8.4	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	6.8	3.2	60.0	455	EC50	5390.0	3.19	345.9	Denneman & van Gestel, 1990

NOEC = LC50/10

NOEC = EC50/10

Indien er meerdere toxiciteitsgegevens van hetzelfde organisme zijn dan wordt het geometrisch gemiddelde berekend.

Bijlage IIc2: Terrestrische toxiciteitsgegevens voor koper.

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp.tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	log $K_{p,s/l}$ test	Porievocht [µg/l]	Referentie
Planten									
Graan	5.6	1.6	7.8	150	NOEC	206	2.40	827.7	Denneman & van Gestel, 1990
Graan	5.4	2.4	26.0	150	NOEC	124	2.32	588.1	Denneman & van Gestel, 1990
Graan	5.2	3.2	37.7	150	NOEC	125	2.25	699.7	Denneman & van Gestel, 1990
Graan	5.0	3.4	2.6	150	NOEC	195	2.18	1288.4	Denneman & van Gestel, 1990
Graan	5.4	6.8	3.3	150	NOEC	190	2.32	901.1	Denneman & van Gestel, 1990
Oligochaeta (regenwormen)									
Eisenia andrei wormen	6.0	8.0	10.0	7	NOEC	66	2.54	190.3	Denneman & van Gestel, 1990
Dendrobaean rubida	6.5	9.7	5.0	90	NOEC	122	2.72	232.5	Denneman & van Gestel, 1990
Lumbricus rubellus	7.3	3.4	17.0	84	NOEC	30	3.01	29.5	Denneman & van Gestel, 1990
Lumbricus rubellus	7.3	3.4	17.0	84	NOEC	13	3.01	12.8	Denneman & van Gestel, 1990
Octolasion cyaneum	4.8	5.4		14	NOLC	153	2.11	1193.1	Denneman & van Gestel, 1990
Octolasion cyaneum	4.5	72.4		14	NOLC	1214	2.00	12140.0	Denneman & van Gestel, 1990

Bijlage IIc2, vervolg

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp.tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	log $K_{p,sl}$ test	Porievocht [µg/l]	Referentie
Microbiële processen									
Ademhaling	7.7	1.6	2.0		NOEC	154	3.15	108.5	Denneman & van Gestel, 1990
Ademhaling	5.1	5.7	9.0		NOEC	6.5	2.22	39.5	Denneman & van Gestel, 1990
Ademhaling	7.4	2.6	19.0		NOEC	422	3.04	381.3	Denneman & van Gestel, 1990
Ademhaling	4.3	12.8	5.0		NOEC	405.5	1.93	4786.2	Denneman & van Gestel, 1990
Glutaminezuurafbraak	7.7	1.6	2.0	455	EC50	204	3.15	14.4	Denneman & van Gestel, 1990
Glutaminezuurafbraak	7.4	2.6	19.0	455	EC50	822	3.04	74.3	Denneman & van Gestel, 1990
Glutaminezuurafbraak	6.8	3.2	60.0	455	EC50	1252	2.83	186.0	Denneman & van Gestel, 1990
Glutaminezuurafbraak	4.3	12.8	20.0	455	EC50	805.5	1.93	950.7	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	7.0	1.6	2.0	455	EC50	624	2.90	78.6	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	7.7	2.6	19.0	455	EC50	2022	3.15	142.5	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	7.5	3.2	60.0	455	EC50	1132	3.08	94.2	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	7.7	1.6	2.0	455	EC50	284	3.15	20.0	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	5.1	5.7	9.0	455	EC50	550	2.22	334.5	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	7.4	2.6	19.0	455	EC50	760	3.04	68.7	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	6.8	3.2	60.0	455	EC50	4962	2.83	737.3	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	7.7	1.6	2.0	455	EC50	154	3.15	10.9	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	5.1	5.7	9.0	455	EC50	1887	2.22	1147.6	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	7.4	2.6	19.0	455	EC50	752	3.04	68.0	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	6.8	3.2	60.0	455	EC50	2832	2.83	420.8	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	4.3	12.8	5.0	455	EC50	2316	1.93	2733.6	Denneman & van Gestel, 1990

NOEC = EC50/10

Als er meerdere toxiciteitsgegevens voor een organisme zijn dan wordt hiervan het geometrisch gemiddelde berekend voor de PAF

Bijlage IIc3: Terrestrische toxiciteitsgegevens voor lood. Alle gegevens overgenomen uit Denneman en van Gestel, 1990.

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp. tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	log K _{p,sl} test	Portievocht [µg/l]	Referentie
Planten									
<i>Avena sativa</i>	3.0	18.0	25	42	NOEC	150	3.10	119.1	Denneman & van Gestel, 1990
<i>Raphanus sativa</i>	5.4	3.0	18	42	NOEC	150	3.94	17.2	Denneman & van Gestel, 1990
<i>Picea sitchensis</i>	3.3	77.0		100	NOEC	70	3.21	43.7	Denneman & van Gestel, 1990
Oligochaeta (regenwormen)									
<i>Dendrobaena rubida</i>	6.5	9.7	5	90	NOEC	560	4.33	26.5	Denneman & van Gestel, 1990
<i>Dendrobaena rubida</i>	5.5	9.7	5	90	NOEC	564	3.98	59.7	Denneman & van Gestel, 1990
<i>Dendrobaena rubida</i>	4.5	9.7	5	90	NOEC	130	3.63	30.8	Denneman & van Gestel, 1990
<i>Lumbricus rubellus</i>	7.3	3.4	17	84	NOEC	200	4.61	5.0	Denneman & van Gestel, 1990

Vervolg Bijlage IIc3

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp. tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	log K _{p,sl} test	Porievocht [µg/l]	Referentie
Microbiële processen									
Bodemademhaling	7.7	1.6	2	490	NOEC	182	4.75	3.3	Denneman & van Gestel, 1990
Bodemademhaling	5.1	5.7	9	301	NOEC	163	3.84	23.8	Denneman & van Gestel, 1990
Bodemademhaling	7.4	2.6	19	630	NOEC	1042	4.64	23.9	Denneman & van Gestel, 1990
Bodemademhaling	6.8	3.2	60	560	NOEC	3130	4.43	116.3	Denneman & van Gestel, 1990
Bodemademhaling	4.3	12.8	5	574	NOEC	176	3.56	49.0	Denneman & van Gestel, 1990
Nitrificatie	6.5	2.2	14	14	NOEC	1000	4.33	47.3	Denneman & van Gestel, 1990
Enzymactiviteit									
Urease	7.7	1.6	2	455	EC50	1632	4.75	2.9	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	5.1	5.7	9	455	EC50	543	3.84	7.9	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	7.4	2.6	19	455	EC50	7992	4.64	18.3	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	6.8	3.2	60	455	EC50	1460	4.43	5.4	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	7.7	1.6	2	455	EC50	9042	4.75	16.3	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	7.7	1.6	2	455	EC50	4652	4.75	8.4	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	7.7	1.6	2	455	EC50	12930	4.75	23.3	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	7.4	2.6	19	455	EC50	6542	4.64	15.0	Denneman & van Gestel, 1990

NOEC = EC50/10

Als er meerdere toxiciteitsgegevens voor een organisme zijn dan wordt het geometrisch gemiddelde gebruikt voor de PAF-berekening

Bijlage IIc4: Terrestrische NOEC's voor zink.

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp.tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	log K _{p,s/l} test	Pontievocht [µg/l]	Referentie
Enzymactiviteit									
Arylsulfatase	7.7	1.6	2	455	EC50	914	3.39	37.6	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	5.1	5.7	9	455	EC50	1746	2.61	431.0	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	7.4	2.6	19	455	EC50	2753	3.84	40.0	Denneman & van Gestel, 1990
Arylsulfatase	6.8	3.2	60	455	EC50	1025	3.87	13.9	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	6.5	4.0	23	0.04	NOEC	162	3.48	53.4	Slooff et al., 1993
Fosfatase	10.0	9.0	34	0.04	NOEC	162	5.16	1.1	Slooff et al., 1993
Fosfatase	7.7	1.6	2	455	EC50	164	3.39	6.7	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	5.1	5.7	9	455	EC50	2374	2.61	586.1	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	7.4	2.6	19	455	EC50	1754	3.84	25.5	Denneman & van Gestel, 1990
Fosfatase	6.8	3.2	60	455	EC50	975	3.87	13.2	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	9.0	6.0	30	0.08	NOEC	32	4.68	0.7	Slooff et al., 1993
Urease	9.0	6.0	34	0.08	NOEC	32	4.71	0.6	Slooff et al., 1993
Urease	7.7	1.6	2	455	EC50	304	3.39	12.5	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	5.1	5.7	9	455	EC50	49	2.61	12.1	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	7.4	2.6	19	455	EC50	2054	3.84	29.9	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	6.8	3.2	60	455	EC50	103	3.87	1.4	Denneman & van Gestel, 1990
Urease	4.3	12.8	5	455	EC50	79	2.09	63.6	Denneman & van Gestel, 1990

NOEC = EC50/10

Als er meerdere toxiciteitsgegevens voor een organisme zijn dan wordt het geometrisch gemiddelde gebruikt voor de PAF-berekening.

Bijlage IIc4

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp.tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	log $K_{p,sn}$ test	Porievocht [µg/l]	Referentie
Microbiële processen									
Ademhaling	7.7	1.6	2	490	NOEC	164	3.39	67.5	Denneman & van Gestel, 1990
Ademhaling	5.1	5.7	9	1267	NOEC	167	2.61	412.3	Denneman & van Gestel, 1990
Ademhaling	7.4	2.6	19	630	NOEC	3100	3.84	450.9	Denneman & van Gestel, 1990
Ademhaling	6.8	3.2	60	560	NOEC	626	3.87	85.1	Denneman & van Gestel, 1990
Ammonificatie	6.2	3.0	17	90	NOEC	1057	3.27	569.9	Slooff et al., 1993
Glutamine zuur	7.4	3.0	19	455	NOEC	503	3.84	73.2	Slooff et al., 1993
Glutamine zuur	6.8	3.0	60	455	NOEC	626	3.87	85.1	Slooff et al., 1993
Glutaminezuuraafbraak	7.7	1.6	2	455	EC50	414	3.39	17.0	Denneman & van Gestel, 1990
Glutaminezuuraafbraak	6.8	3.2	60	455	EC50	1726	3.87	23.5	Denneman & van Gestel, 1990
N-mineralisatie	6.9	2.0	44	90	NOEC	107	3.83	15.8	Slooff et al., 1993
Nitrificatie	7.0	3.0	17	90	NOEC	157	3.63	37.0	Slooff et al., 1993
Nitrificatie	5.5	2.4	28.1	49	NOEC	236	3.08	194.4	Denneman & van Gestel, 1990
Nitrificatie	6.2	1.6	7.6	49	NOEC	124	3.06	108.4	Denneman & van Gestel, 1990
Nitrificatie	5.1	1.1	2.4	49	NOEC	17	2.26	92.8	Denneman & van Gestel, 1990
Oligochaeta (regenwormen)									
Eisenia fetida wormen	6.0	88.0	8	14	NOEC	200	2.98	208.5	Slooff et al., 1993

NOEC = EC50/10

Als er meerdere toxiciteitsgegevens voor een organisme zijn dan wordt het geometrisch gemiddelde gebruikt voor de PAF-berekening.

Bijlage IIc4

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp.tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	log $K_{p,s/l}$ test	Porievocht [µg/l]	Referentie
Planten									
Avena sativa	5.6	2.0	12	150	NOEC	147	2.91	181.9	Slooff et al., 1993
Avena sativa	5.4	2.0	40	150	NOEC	257	3.13	190.0	Slooff et al., 1993
Avena sativa	5.0	3.0	4	150	NOEC	215	2.35	957.6	Slooff et al., 1993
Avena sativa	5.4	7.0	5	150	NOEC	428	2.59	1101.7	Slooff et al., 1993
Lactuca sativa	4.9	3.0	16	35	NOEC	63	2.67	135.5	Slooff et al., 1993
Lactuca sativa	5.0	3.0	16	35	NOEC	103	2.71	199.7	Slooff et al., 1993
Medicago sativa	4.9	3.0	16	56	NOEC	103	2.67	221.5	Slooff et al., 1993
Zea mays	4.9	3.0	16	56	NOEC	103	2.67	221.5	Slooff et al., 1993

NOEC = EC50/10

Als er meerdere toxiciteitsgegevens voor een organisme zijn dan wordt het geometrisch gemiddelde gebruikt voor de PAF-berekening.

Bijlage IIc5: Terrestrische NOEC's voor Chroom.

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp.tijd [dagen]	Effect	Resultaat [mg/kg d.s.]	log K _{p,sl} test	Porievocht [µg/l]	Referentie
Planten									
Graan	5.6	1.6	7.8	150	NOEC	671	3.81	102.5	Denneman & van Gestel
Graan	5.4	2.4	26	150	NOEC	273	3.77	45.9	Denneman & van Gestel
Graan	5.2	3.2	37.7	150	NOEC	288	3.73	53.4	Denneman & van Gestel
Graan	5	3.4	2.6	150	NOEC	419	3.69	85.5	Denneman & van Gestel
Graan	5.4	6.8	3.3	150	NOEC	220	3.77	37.0	Denneman & van Gestel
Oligochaeta (regenwormen)									
Eisenia andrei	6	7.7	10.4	21	NOEC	287	3.90	36.1	Denneman & van Gestel
Microbiele processen									
Ademhaling	5.1	5.7	9	301	NOEC	152	3.71	29.6	Denneman & van Gestel
Ademhaling	7.4	2.6	19	630	NOEC	184	4.19	11.8	Denneman & van Gestel
Ademhaling	6.8	3.2	60	560	NOEC	476	4.07	40.7	Denneman & van Gestel
Glutaminezuur afbraak	7.7	1.6	2	455	EC50	604	4.26	3.3	Denneman & van Gestel
Enzymactiviteit									
Urease	7.7	1.6	2	455	EC50	634	4.26	3.5	Denneman & van Gestel
Urease	6.8	3.2	60	455	EC50	486	4.07	4.2	Denneman & van Gestel
Arylsulfatase	7.7	1.6	2	455	EC50	184	4.26	1.0	Denneman & van Gestel
Arylsulfatase	5.1	5.7	9	455	EC50	13	3.71	0.2	Denneman & van Gestel
Arylsulfatase	7.4	2.6	19	455	EC50	444	4.19	2.8	Denneman & van Gestel
Arylsulfatase	6.8	3.2	60	455	EC50	646	4.07	5.5	Denneman & van Gestel
Fosfatase	5.1	5.7	9	455	EC50	2782	3.71	54.1	Denneman & van Gestel
Fosfatase	7.4	2.6	19	455	EC50	4234	4.19	27.1	Denneman & van Gestel

NOEC = EC50/10

Als er meerdere toxiciteitsgegevens voor een organisme zijn dan wordt het geometrisch gemiddelde gebruikt voor de PAF-berekening.

Bijlage IIc6: Terrestrische NOEC's voor Nikkel.

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp. Tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	log $K_{p,sl}$ test	Portievocht [µg/l]	Referentie
Oligochaeta (regenwormen)									
<i>Lumbricus rubellus</i>	7.3	3.4	17	84	NOEC	50	3.53	14.9	Denneman & van Gestel
Microbiële processen									
Ademhaling	5.1	5.7	9	301	EC50	6002	2.82	910.7	Denneman & van Gestel
Ademhaling	6.8	3.2	60	560	NOEC	1039	3.71	200.9	Denneman & van Gestel
Glutaminezuurafbraak	7.7	1.6	2	455	EC50	308	3.10	24.7	Denneman & van Gestel
Glutaminezuurafbraak	6.8	3.2	60	455	EC50	1239	3.71	24.0	Denneman & van Gestel
Glutaminezuurafbraak	4.3	12.8	5	455	EC50	604	2.47	203.1	Denneman & van Gestel
Enzymactiviteit									
Urease	7.7	1.6	2	455	EC50	414	3.10	33.1	Denneman & van Gestel
Urease	7.4	2.6	19	455	EC50	1365	3.58	36.0	Denneman & van Gestel
Urease	6.8	3.2	60	455	EC50	409	3.71	7.9	Denneman & van Gestel
Urease	4.3	12.8	5	455	EC50	2344	2.47	788.0	Denneman & van Gestel
Arylsulfatase	7.7	1.6	2	455	EC50	98	3.10	7.8	Denneman & van Gestel
Arylsulfatase	5.1	5.7	9	455	EC50	1412	2.82	214.2	Denneman & van Gestel
Arylsulfatase	7.4	2.6	19	455	EC50	110	3.58	2.9	Denneman & van Gestel
Arylsulfatase	6.8	3.2	60	455	EC50	2489	3.71	48.1	Denneman & van Gestel
Fosfatase	7.7	1.6	2	455	EC50	758	3.10	60.7	Denneman & van Gestel
Fosfatase	7.4	2.6	19	455	EC50	1120	3.58	29.5	Denneman & van Gestel

NOEC = EC50/10

Als er meerdere toxiciteitsgegevens voor een organisme zijn dan wordt het geometrisch gemiddelde gebruikt voor de PAF-berekening.

Bijlage IIc7 terrestrische NOEC's voor Arseen.

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp. tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	Ctest	portievocht [µg/l]	Referentie
Planten									
Gossypium hirsutum	-	3.0	18	42	NOEC	18.0	23.40	90.4	Denneman & van Gestel
Gossypium hirsutum	-	3.2	35	42	NOEC	149.0	30.28	578.5	Denneman & van Gestel
Glycine ma L. merr	-	3.2	35	42	NOEC	75.0	30.28	291.2	Denneman & van Gestel
Enzymactiviteit									
Urease	6.8	7.4	42	0.08	EC44	375.0	34.76	253.6	Denneman & van Gestel
Microbiele processen									
Urease	7.8	6.4	30	0.08	EC0	68.7	29.56	273.2	Denneman & van Gestel
Urease	7.4	9.3	34	0.08	EC0	68.7	32.32	249.9	Denneman & van Gestel

EC44/10 = NOEC

EC0 = NOEC

Bijlage IIc8: Terrestrische NOEC's voor Kwik.

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp. Tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	Ctest	Porievocht [µg/l]	Referentie
Microbiële processen									
respiratie	7.4	2.9	18	3	NOEC	70	0.27	384.8	Slooff et al., 1994
respiratie	8.1	2.7	40	28	NOEC	10	0.31	47.7	Slooff et al., 1994
respiratie	7.5	3.2	29	28	NOEC	100	0.30	481.2	Slooff et al., 1994
respiratie	8.3	1.5	12	28	NOEC	100	0.24	599.1	Slooff et al., 1994
respiratie		7.7	0	28	NOEC	12	0.33	53.1	Slooff et al., 1994
respiratie	8.3	6.7	50	42	NOEC	40	0.31	186.7	Slooff et al., 1994
respiratie (glucose)	8.1	2.7	40	6h	NOEC	40	0.31	190.9	Slooff et al., 1994
respiratie (glucose)	6.6	11.4	25	6h	NOEC	40	0.30	192.3	Slooff et al., 1994
respiratie (glucose)	8.3	2.9	25	6h	NOEC	200	0.29	1009.2	Slooff et al., 1994
respiratie (glucose)	7.5	3.2	29	6h	NOEC	40	0.30	192.5	Slooff et al., 1994
respiratie (glucose)	8.3	1.5	12	6h	NOEC	200	0.24	1198.2	Slooff et al., 1994
Ammonificatie	7.7	5.6	45	42	NOEC	7.4	0.31	34.8	Slooff et al., 1994
Ammonificatie	7.5	1.5	5	42	NOEC	7.4	0.22	49.1	Slooff et al., 1994
Nitrificatie	7.7	5.6	45	42	NOEC	7.4	0.31	34.8	Slooff et al., 1994
Nitrificatie	7.5	1.5	5	42	NOEC	7.4	0.22	49.1	Slooff et al., 1994
Amylase	7.4	2.9	18	3	NOEC	70	0.27	384.8	Slooff et al., 1994
Fosfatase	4.3	93	1	3h	NOEC	2000	0.36	8094.0	Slooff et al., 1994
ATP-gehalte	6.4	3.2	33.6	48	NOEC	1.5	0.31	7.1	Slooff et al., 1994

Vervolg Bijlage IIc8

Organisme	pH	% O.M.	% Klei	Exp. Tijd [dagen]	Effect	Resultaat test bodem [mg/kg d.s.]	Ctest	Porievocht [µg/l]	Referentie
Oligochaeta (regenwormen)									
Eisenia foetida		59	3	84	NOEC	3.2	0.31	15.1	Slooff et al., 1994
Weekdieren									
Arion ater		95	0	-	NOEC	10	0.36	40.5	Slooff et al., 1994