



Rijksinstituut voor Volksgezondheid
en Milieu
Ministerie van Volksgezondheid,
Welzijn en Sport

Evaluatie van de interim- methodiek

Evaluatie van de interim-methodiek
voor het afleiden van indicatieve milieurisicogrenzen

Road-map Normstelling



Rijksinstituut voor Volksgezondheid
en Milieu
*Ministerie van Volksgezondheid,
Welzijn en Sport*

Evaluatie van de methodiek voor het afleiden van indicatieve milieurisicogrenzen

Road-map Normstelling

RIVM Rapport 601357006/2011

Colofon

© RIVM 2011

Delen uit deze publicatie mogen worden overgenomen op voorwaarde van bronvermelding: 'Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu (RIVM), de titel van de publicatie en het jaar van uitgave'.

J. Postma, Ecofide
R. Keijzers, Ecofide
R. van Herwijnen, RIVM - eindverantwoordelijk

Contact:
René van Herwijnen
Stoffen Expertise Centrum
rene.van.herwijnen@rivm.nl



Dit onderzoek werd verricht in opdracht van het ministerie van Infrastructuur en Milieu, Directie Risicobeleid, in het kader van het project Nationaal Stoffenbeleid

Rapport in het kort

Evaluatie van de interim-methodiek voor het afleiden van indicatieve milieurisicogrenzen

Het RIVM en onderzoeks- en adviesbureau Ecofide hebben de methodiek geëvalueerd die nationaal wordt gebruikt om indicatieve risico's te bepalen van stoffen voor het milieu (indicatieve milieurisicogrenzen). Deze methode is door het RIVM ontwikkeld om sneller dan de gedegen methodiek een eerste indicatie te geven van eventuele milieuvervuilingen. De evaluatie is uitgevoerd om na te gaan in hoeverre indicatieve milieurisicogrenzen een realistisch beeld geven van de risico's van stoffen in het milieu en of ze deze over- of onderschatten.

Verschillen

Voor deze evaluatie zijn de indicatieve milieurisicogrenzen van 25 stoffen vergeleken met de Maximaal Toelaatbare Risiconiveaus (MTR) die zijn afgeleid volgens de gedegen methodiek van het kader (Inter)nationale Normen Stoffen (INS). Voor 80% van de stoffen bleek de indicatieve waarde minder dan een factor 10 te verschillen van het MTR. Daarnaast is bekeken van hoeveel stoffen de indicatieve waarde minder streng was dan de gedegen waarde. Daaruit bleek dat voor 30 tot 40% van de onderzochte stoffen de indicatieve waarde te hoog was. In deze gevallen zou het milieu onvoldoende worden beschermd.

Aanbevelingen

Het rapport bevat een uitgebreide lijst met aanbevelingen om de indicatieve methodiek te verfijnen. Een voorbeeld hiervan is om beter aan te geven hoe om te gaan met aanvullende informatie over een stof, zoals over het werkingsmechanisme ervan. Een andere aanbeveling is de toepassing van een extra veiligheidsfactor of om een gedegen milieurisicogrens af te leiden als een indicatieve milieurisicogrens dichtbij de concentratie ligt die in het milieu wordt gemeten. Vanwege de onzekerheidsmarges in de indicatief afgeleide milieurisicogrenzen wordt zo een nauwkeuriger beeld verkregen. Dit kan kostbare vervolgmaatregelen of mogelijke risico's voorkomen.

Trefwoorden:

indicatieve milieurisicogrenzen, evaluatie

Abstract

Evaluation of the interim-methodology for the derivation of indicative environmental risk limits

The RIVM and the consultancy Ecofide have evaluated the Dutch method for the derivation of indicative environmental risk limits (ERLs). This methodology of the RIVM is used in the Netherlands to get a quick and low cost impression of possible human and environmental risks of substances in the environment. The evaluation has been performed in order to see whether indicative ERLs give a realistic indication of the risks of substances in the environment and if they might under- or overestimate this risk.

Differences

For the purpose of this evaluation, indicative ERLs of 25 substances have been compared with ERLs that have recently been derived according to the more thorough guidance for derivation of ERLs of the framework "(Inter)nationale Normen Stoffen" (INS). Comparison of the different ERLs showed that for 80% of the substances the difference was less than a factor 10. Furthermore we have checked for how many substances the indicative value was higher than the more thoroughly derived value. This was the case for 30 to 40% of the substances. In these cases the environment could be underprotected.

Suggestions

The report contains an extensive list with suggestions on how to improve the guidance for derivation of indicative ERLs. One example is to indicate how to deal with additional information on a substance, like the mode of action. Another suggestion is to apply an additional assessment factor or that a more thorough ERL should be derived when the indicative ERL is close to a monitored or predicted value. Considering the insecurity in the indicative ERL the risks would be better interpreted and expensive measures or possible risks could be prevented.

Keywords:

indicative environmental risk limits, evaluation

Voorwoord

Road-map Normstelling

Het ministerie van Infrastructuur en Milieu heeft in 2009 het traject 'Vernieuwde visie op normstelling' in gang gezet. De reden is dat het huidige bouwwerk van normstelling voor stoffen niet meer aansluit bij ontwikkelingen, zoals nieuwe Europese wet- en regelgeving (bijvoorbeeld REACH) en een veranderende verdeling van verantwoordelijkheden tussen bedrijfsleven en overheid.

De interne notitie 'Op weg naar een vernieuwde visie op normstelling voor stoffen' uit juni 2009 schetst wegen om het doel, de realisatie van een geïntegreerd normenstelsel dat is afgestemd op de relevante (inter)nationale beleidskaders, te bereiken. Binnen het ministerie wordt sinds 2009 nader invulling gegeven aan de nieuwe opzet van het nationale stoffenbeleid en de positie van normstelling.

De Road-map Normstelling vormt de overkoepelende meerjaren(presentatie)structuur waarin de RIVM-activiteiten plaatsvinden die bijdragen aan de onderbouwing van het gewenste normenstelsel. De producten binnen deze Road-map geven richting aan de totstandkoming van dit stelsel. Het voorliggende RIVM-rapport 'Evaluatie van de interim-methodiek voor het afleiden van indicatieve milieurisicogrenzen' is één van die producten. Meer informatie over de Road-map Normstelling: charles.bodar@rivm.nl

Inhoud

Samenvatting—11

1 Inleiding—13

- 1.1 Vraagstelling—13
- 1.2 Leeswijzer—14

2 Gevolgde methodiek—15

- 2.1 Stofselectie—15
- 2.2 Data verzameling—17
- 2.3 Afleiden van de indicatieve milieurisicogrenzen—18

3 Inleiding tot de resultaten—19

- 3.1 Beperkingen van de resultaten—19

4 Verschillen tussen de MTR-waarden—21

- 4.1 MTR_{water} —21
- 4.2 $MTR_{\text{eco, water}}$ —25
- 4.3 $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ —27
- 4.4 MTR_{bodem} —32
- 4.5 $MTR_{\text{eco, bodem}}$ —35
- 4.6 $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ —37
- 4.7 MTR_{sediment} en MTR_{lucht} —38

5 Verschillen tussen de gebruikte gegevens—39

- 5.1 Inleiding—39
- 5.2 Aquatische ecotoxicologie—39
- 5.3 BCF-waarden—46
- 5.4 $\log K_{ow}$ en $\log K_{oc}$ —50
- 5.5 Oplosbaarheid, dampdruk en de Henry-coëfficiënt—52

6 Schatting van $MTR_{\text{eco, water}}$ met QSAR's—57

- 6.1 Methodiek—57
- 6.2 Resultaten—57
- 6.3 Aandachtspunten—59

7 Conclusies en aanbevelingen—61

- 7.1 Conclusies—61
- 7.2 Aanbevelingen—62

Referenties—65

Bijlage 1—67

Samenvatting

In 2009 is een interim-versie verschenen van de handreiking voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen (van Herwijnen et al., 2009). Deze handreiking speelt in op de groeiende vraag naar normen voor chemische stoffen. Het volgen van de gangbare Europese afleidingsmethoden voor normen of advieswaarden is een tijdrovende exercitie. Voor vergunningverleners en bedrijven is een indicatie van de hoogte van de norm, die binnen korte tijd en tegen lage kosten kan worden gegenereerd, vaak al voldoende. Om aan deze wens tegemoet te komen biedt het RIVM in het kader van het project INS ((Inter)nationale Normen Stoffen) een methodiek aan waarmee op een snelle, eenvoudige, wetenschappelijke manier indicatieve milieurisicogrenzen kunnen worden afgeleid. Het zogenoemde indicatieve MTR (Maximaal Toelaatbare Risiconiveau), ook wel aangeduid als *ad hoc*-MTR, kan worden gebruikt om een indicatie te krijgen van de omvang van het eventuele milieuprobleem voordat, indien gewenst, wordt overgegaan tot de gedegen onderbouwing conform de Europese werkwijze. Ook kan de indicatieve methodiek in de toekomst gebruikt worden voor stoffen waarvoor te weinig gegevens beschikbaar zijn om een gedegen norm af te leiden.

Voordat de interim-versie uit 2009 omgezet kan worden in een definitieve versie, is eerst een evaluatie uitgevoerd naar de betrouwbaarheid van de indicatieve milieurisicogrenzen. Doel van deze evaluatie is om vast te stellen of de indicatieve methodiek tot normen leidt die meer beschermend zijn ten opzichte van de gedegen methodiek. Er is namelijk behoefte aan zekerheid dat indicatieve normen het risico van een stof niet onderschatten. Voor deze controle zijn in dit rapport gedegen milieurisicogrenzen vergeleken met voor dezelfde stof afgeleide indicatieve milieurisicogrenzen.

De belangrijkste conclusie uit dit rapport is dat voor 80% van de onderzochte stoffen de indicatieve waarde minder dan een factor 10 verschilt van de MTR-waarde uit de gedegen afleiding. Tegelijkertijd echter leidt de indicatieve methode voor 30% tot 40% van de onderzochte stoffen tot een te laag beschermingsniveau in vergelijking met het gedegen MTR. Verder bevat het rapport een uitgebreide lijst met aanbevelingen waar de indicatieve methodiek aangepast kan worden. Deze aanbevelingen zullen voornamelijk leiden tot verfijning van de bestaande methodiek. Zo is het wenselijk om in de methodiek beter aan te geven hoe men aanvullende informatie over bijvoorbeeld het werkingsmechanisme van een stof beter kan benutten. Een andere aanbeveling is de toepassing van een extra veiligheidsfactor of om een gedegen milieurisicogrens af te leiden als een indicatieve milieurisicogrens binnen een factor 10 van de verwachte blootstellingsconcentratie ligt. Vanwege de onzekerheidsmarges in de indicatief afgeleide milieurisicogrenzen is in die situatie een nauwkeuriger inzicht in mogelijke risico's nodig.

1 Inleiding

Door de groeiende aandacht voor het verantwoord omgaan met stoffen groeit de vraag naar normen voor chemische stoffen. Het volgen van de gangbare Europese afleidingsmethoden voor normen of advieswaarden is echter een tijdrovende exercitie. Voor vergunningverleners en bedrijven is als eerste stap een indicatie van de hoogte van de norm, die binnen korte tijd en tegen lage kosten kan worden gegenereerd, vaak al voldoende. Om aan deze wens tegemoet te komen biedt het RIVM in het kader van het project INS ((Inter)nationale Normen Stoffen) een methodiek aan waarmee op een snelle, eenvoudige, wetenschappelijke manier indicatieve milieurisicogrenzen kunnen worden afgeleid. Het zogenoemde indicatieve Maximaal Toelaatbare Risiconiveau, ook wel aangeduid als ad hoc MTR, kan worden gebruikt om een indicatie te krijgen van de omvang van het eventuele milieuprobleem alvorens, indien gewenst, wordt overgegaan tot de gedegen onderbouwing conform de Europese richtsnoeren. De indicatieve methodiek kan ook gebruikt worden als er voor een stof te weinig gegevens beschikbaar zijn om een gedegen norm af te leiden.

In 2009 is een interim-versie verschenen van de handreiking voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen (van Herwijnen et al., 2009). De directie Risicobeleid van het ministerie van Infrastructuur en Milieu heeft opdracht gegeven om de betrouwbaarheid van de indicatieve risicogrenzen te evalueren, voordat deze interim-versie kan worden omgezet in een definitieve versie. Doel van deze evaluatie is om vast te stellen of de indicatieve methodiek tot normen leidt die beschermend zijn ten opzichte van de gedegen methodiek. Er is namelijk behoefte aan zekerheid dat indicatieve normen het risico van een stof niet onderschatten. Voor deze controle zijn gedegen milieurisicogrenzen vergeleken met voor dezelfde stof afgeleide indicatieve milieurisicogrenzen.

1.1 Vraagstelling

De centrale vraagstelling van het project is daarmee "Hoe verhouden indicatieve milieurisicogrenzen zich tot de gedegen waarden en welke factoren spelen een rol bij eventuele verschillen?"

Bij het uitwerken van deze centrale vraagstelling spelen meerdere deelvragen een rol, zoals:

- Zijn de indicatieve milieurisicogrenzen inderdaad aan de 'veilige' kant?
- Hoe groot zijn eventuele verschillen?
- Zijn deze verschillen verklaarbaar vanuit de procedures, veiligheidsfactoren en/of stoffeigenschappen?

Gezamenlijk leiden deze vergelijkingen tot een verbeterd inzicht in de gevoeligheid van de methodiek en kunnen er aanbevelingen gedaan worden over eventuele aanpassingen van de indicatieve methodiek.

In dit rapport wordt gesproken over MTR-afleiding, indicatieve MTR-waarden en risicogrenzen. Met nadruk wordt erop gewezen dat de risicogrenzen in dit rapport alleen zijn afgeleid ten behoeve van deze evaluatie en niet gebruikt kunnen worden voor andere doelen. De geldende milieunormen voor chemische stoffen zijn te vinden op de website Risico's van Stoffen. Voor enkele van de in dit rapport genoemde stoffen zijn de normen nog niet officieel vastgesteld.

1.2 Leeswijzer

In hoofdstuk 2 wordt beschreven hoe de studie is uitgevoerd. Dit betreft de selectie van de stoffen, het verzamelen van de benodigde gegevens en de wijze waarop de risicogrenzen zijn afgeleid. In hoofdstuk 3, 4, 5 en 6 worden de resultaten beschreven. Hierbij wordt van grof naar fijn gewerkt. Aangezien de resultaten over drie hoofdstukken verdeeld zijn, wordt in hoofdstuk 3 eerst een algemene inleiding op de resultaten gegeven. In hoofdstuk 4 worden vervolgens de verschillende MTR-waarden nader geanalyseerd. Als eerste wordt ingegaan op het MTR_{water} . Omdat dit MTR_{water} door verschillende blootstellingsroutes kan zijn bepaald, wordt vervolgens gekeken naar het achterliggende $MTR_{\text{eco, water}}$ voor directe ecotoxiciteit en $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ voor blootstelling van mensen via vis. Dezelfde exercitie wordt uitgevoerd voor het MTR_{bodem} , respectievelijk $MTR_{\text{eco, bodem}}$ en $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$. Daarna wordt in hoofdstuk 5 ingegaan op eventuele verschillen in de onderliggende gegevens (ecotoxicologische data, BCF-waarden en fysisch/chemische eigenschappen). Tenslotte wordt in hoofdstuk 6 gekeken naar het gebruik van kwantitatieve structuur-activiteitsrelaties (QSAR's) voor ecologische toxiciteit bij het afleiden van het $MTR_{\text{eco, water}}$. In hoofdstuk 7 staan de belangrijkste conclusies en worden aanbevelingen gedaan om de indicatieve methode verder te verbeteren. In Bijlage 1 staat een verklarende woordenlijst voor de gebruikte termen.

2 Gevolgde methodiek

Voor de vergelijking zijn stoffen gebruikt waarvoor recent (2008, 2009 en begin 2010) door het RIVM milieurisicogrenzen zijn gerapporteerd die zijn afgeleid volgens de gedegen methodiek. Deze afleidingen werden daarna getoetst in een *peer review*. Vanuit de lijst met 64 potentiële stoffen is een selectie gemaakt van 25 stoffen waarmee de vergelijking is uitgevoerd. Voor ieder van deze 25 stoffen is ook volgens de indicatieve methodiek een milieurisicogrens afgeleid die vergeleken kan worden met de gedegen milieurisicogrens.

Bij het evalueren van de methodiek is van grof naar fijn gewerkt. Allereerst zijn de uiteindelijke MTR-waarden (inclusief die van de achterliggende deelprocessen, ecotoxicologie en humaan) vergeleken. Met de uitkomsten hiervan ontstaat inzicht in de belangrijkste deelaspecten, die de uitkomsten beïnvloeden. Hierbij kan gedacht worden aan de beschikbare ecotoxicologische informatie, de gehanteerde veiligheidsfactoren of bijvoorbeeld de log K_{ow} - of log K_{oc} -waarden. Door vervolgens ook deze aspecten in de vergelijking te betrekken ontstaat inzicht in de vraag of er verbeteringen mogelijk zijn.

2.1 Stofselectie

De stofselectie (zie Tabel 2) is uitgevoerd op een lijst van 64 stoffen die zijn gesorteerd op basis van chemische overeenkomst. Uit deze lijst zijn op afgemeten afstand 25 stoffen geselecteerd. Bijvoorbeeld stof nummer 1, 3, 6, 8, 11, 13, ... et cetera. De geselecteerde stoffen zijn vervolgens op basis van een aantal eigenschappen vergeleken om te zien of er een voldoende brede stofselectie is verkregen. Hierbij spelen ook een aantal niet-chemische eigenschappen mee, zoals het kader waarin het MTR is afgeleid, de hoeveelheid gegevens die voor de afleiding beschikbaar was en of er veel studies afgekeurd waren bij de gedegen MTR-afleiding (zie Tabel 1). Deze lijst bevat factoren die mogelijke van invloed kunnen zijn op de afgeleide milieurisicogrenzen en is samengesteld na het raadplegen van meerdere experts op het gebied van de afleiding van milieurisicogrenzen.

Tabel 1 Overzicht van de factoren die een rol hebben gespeeld bij de stofselectie

Factor, mogelijk van invloed op de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen	Range binnen de 25 geselecteerde stoffen
log K_{ow}	variërend van 0,57 tot 5,9
BCF	variërend van 0,6 tot 17.000
vluchtigheid	dampspanning 10^{-10} tot 10^5 Pa Henry-coëfficiënt 10^{-11} tot 10^4 Pa m ³ /mol
oplosbaarheid	10^{-1} tot 10^4 mg/l
afbreekbaarheid (volgens EPIWIN (US EPA, 2009))	DT ₅₀ -waarden van de bulk variërend van 0,2 tot 120 dagen en extremen van 4100 en 7115 dagen
Ecosar stofclassificatie	de selectie beslaat 15 Ecosar-stofklassen
wel of geen zout	2 van de 25 stoffen zijn een zout: TFT en PFOS
wel of geen halogeen	20 van de 25 stoffen bevatten een halogeen
wel of geen aromatische ring in de structuur	6 van de 25 stoffen hebben geen aromatische ring
hoeveelheid beschikbare gegevens	bij een steekproef is bevestigd dat er stoffen zijn met weinig (10 tot 20 studies), gemiddeld (20 tot 100 studies) en veel (100 tot 726 studies) beschikbare eindpunten voor de gedegen afleiding*
verhouding tussen hoeveelheid eindpunten voor gedegen afleidingen en in databanken voor indicatieve afleidingen	bij een steekproef is gezien dat de hoeveelheid eindpunten in de databanken en in de rapporten meestal evenredig met elkaar is**
hoeveelheid studies die bij de gedegen afleiding een Ri3 (onbetrouwbaar) hebben gekregen	bij een steekproef is bevestigd dat er stoffen zijn waarvan de beschikbare studies weinig, gemiddeld of veel Ri3's hebben gekregen
afleidingskader van de gedegen norm***	9 INS, 7 KRW en 9 Ctgb (voor 1 Ctgb-stof is ook een INS-norm voor water uit 2008)

* Na beoordeling van de studies binnen de gedegen afleiding is deze spreiding kleiner, variërend van 0 tot 166 eindpunten, omdat een deel van de studies bij nadere evaluatie geen betrouwbaar eindpunt oplevert.

** De hoeveelheid eindpunten voor de indicatieve afleiding is over het algemeen 10% tot 60% van de hoeveelheid eindpunten voor de gedegen afleiding, dat wil zeggen dat bij de start van een indicatieve afleiding er minder gegevens zijn dan bij de gedegen afleiding. Na beoordeling in het gedegen rapport ligt dit anders en varieert het aantal eindpunten in de indicatieve afleiding van 10% tot 200% van de eindpunten voor de gedegen afleiding, met een uitschieter van 900%. Dit komt omdat een deel van de eindpunten bij nadere evaluatie afvalt. Zie ook de opmerking hierboven.

*** Normafleidingen voor het Ctgb betreffen gewasbeschermingsmiddelen en beslaan zowel het water- als het bodemcompartiment. KRW-normen zijn afgeleid voor water en in enkele gevallen ook voor sediment. Binnen INS worden in principe normen voor alle compartimenten afgeleid.

Als bij de vergelijking werd opgemerkt dat een parameter niet goed vertegenwoordigd was, is de selectie handmatig aangepast, bijvoorbeeld door een stof te vervangen door een andere stof die chemisch vergelijkbaar is. Een paar parameters zijn niet heel goed verdeeld. Er zijn bijvoorbeeld weinig zouten. Gezien de beperkte basisset van 64 stoffen kon deze verdeling echter niet verbeterd worden. De uiteindelijk geselecteerde stoffen zijn weergegeven in Tabel 2.

Tabel 2 De 25 voor dit rapport geselecteerde stoffen

stof	RIVM-rapportnummer gedegen normafleiding	referentie
4-chloor-3-methylfenol	601714006	Moermond en Heugens (2009b)
chloortolueen	601782021	van Herwijnen en van Leeuwen (2009)
2,4-dichloorfenol	601714007	Moermond en Heugens (2009a)
3-chloorfenol	601714006	Moermond en Heugens (2009b)
2,3,4-trichloorfenol	601714005	Moermond en Heugens (2009c)
dichloorbenzenen	601782020	van Leeuwen et al. (2010)
xylenen	601782011	van Leeuwen (2009)
chloorthalonil	12110	vertrouwelijk
benzylchloride	601714016	Smit (2010)
bromoxynil-octanoaat	12367	vertrouwelijk
prosulfocarb	12196	vertrouwelijk
novaluron	12361	vertrouwelijk
chryseen		Verbruggen en van Herwijnen (in prep.)
epoxiconazool	124038/12415	vertrouwelijk/vertrouwelijk
imidacloprid	12346/601716018	vertrouwelijk/Posthuma-Doodeman (2008)
diflufenican	12218/12244	vertrouwelijk/vertrouwelijk
flubendiamide	12140/12142	vertrouwelijk/vertrouwelijk
trifenylytin		van Herwijnen et al. (in prep.)
foramsulfuron	12013	vertrouwelijk
1,3-dichloorpropeen	601782013	Fleuren et al. (2009)
1,1,2,2-tetrachloorethaan	601782013	Fleuren et al. (2009)
1,1,1-trichloorethaan	601782013	Fleuren et al. (2009)
2-chloorbutadieen	601782013	Fleuren et al. (2009)
PFOS	601714013/601050002	Moermond et al. (2010), Bodar et al. (2011)
1,2-dichloorethyleen	601782013/601782002	Fleuren et al. (2009), de Jong et al. (2007)

2.2 Data verzameling

Om beide methoden te kunnen vergelijken is ernaar gestreefd om ook de set beschikbare gegevens zo vergelijkbaar mogelijk te houden. Voor de gedegen normen is gebruik gemaakt van de informatie en afwegingen, zoals die zijn opgenomen in de verschillende RIVM-rapporten (zie Referenties). Voor het afleiden van de indicatieve milieurisicogrenzen zijn de volgende randvoorwaarden gehanteerd.

Ecotoxicologische gegevens

Begin 2010 zijn de ecotoxicologische gegevens voor alle stoffen verzameld uit de verschillende databases (PAN, 2010; PPDB, 2010; US EPA, 2010), waardoor er niet veel tijdsverschil zit tussen het moment van verzamelen van gegevens voor de afleiding van de gedegen en de indicatieve milieurisicogrenzen. Ook de gegevens uit de e-toxbase van het RIVM zijn in 2010 gedownload.

Fysisch/chemische gegevens inclusief BCF

Als onderdeel van het project zijn de relevante fysisch/chemische eigenschappen verzameld volgens de bronnen, zoals gespecificeerd in de indicatieve methodiek. Deze gegevens zijn daarmee later verzameld dan voor de gedegen normstelling. Dit is echter geen probleem, omdat deze gegevens niet snel zullen veranderen. Er zijn geen getallen uit de gedegen afleiding overgenomen, omdat hier andere bronnen geraadpleegd kunnen zijn. Ook is om dezelfde reden geen gebruik

gemaakt van eventueel beschikbare DAR's (*Draft Assessment Reports*) uit de Europese toelating voor gewasbeschermingsmiddelen.

Humane risico's

De afleiding van humane risicogrenzen volgens de indicatieve methodiek verschilt over het algemeen niet veel van de gedegen methodiek. Daarom is de ADI (*Acceptable Daily Intake*) uit de gedegen afleiding overgenomen als GH (Geschatte Humane Limietwaarde) voor de indicatieve afleiding. Hier schuilt mogelijk wel het bezwaar dat er een kans is dat de selectie niet representatief is voor stoffen waarvoor weinig humaan-toxicologische gegevens beschikbaar zijn. Als er geen humaan-toxicologische gegevens beschikbaar zouden zijn, was er namelijk waarschijnlijk ook geen gedegen norm afgeleid. In een aanvullende exercitie is daarom ook aandacht besteed aan de in de indicatieve methode geboden optie tot het werken met een *default*-waarde als humaan-toxicologische gegevens ontbreken.

2.3 Afleiden van de indicatieve milieurisicogrenzen

De indicatieve milieurisicogrenzen zijn afgeleid volgens de interim-methodiek uit 2009 (van Herwijnen et al., 2009) op basis van de volgens paragraaf 2.2 verzamelde gegevens. In een paar gevallen betreft dit een zogenaamde som-norm (chloortoluenen, dichloorbenzenen en xylenen), waarbij de gegevens van de individuele stoffen zijn gecombineerd.

In de methodiek voor het afleiden van indicatieve milieurisicogrenzen wordt ook de mogelijkheid geboden om gebruik te maken van QSAR's. Dit wordt aangeraden als er voor een bepaalde stof geen ecotoxicologische gegevens gevonden kunnen worden om er zo voor te zorgen dat er altijd een indicatieve milieurisicogrens kan worden afgeleid. Om na te gaan of deze methode tot andere resultaten leidt, zijn voor dezelfde 25 stoffen ook indicatieve milieurisicogrenzen opgesteld, waarbij voor de ecotoxicologische informatie uitsluitend van QSAR-gegevens gebruik is gemaakt.

3 Inleiding tot de resultaten

In de hoofdstukken 4, 5 en 6 worden de resultaten gegeven van de vergelijking van de uitkomsten van de indicatieve en de gedegen normafleiding. In hoofdstuk 4 wordt gekeken naar de verschillen tussen de MTR-waarden, en in hoofdstuk 5 naar verschillen in de achterliggende gegevens. In hoofdstuk 6 wordt tenslotte gekeken naar de resultaten als er QSAR's voor ecotoxiciteit worden gebruikt bij de indicatieve normafleiding.

Ieder hoofdstuk begint met een korte beschrijving van de methodiek, over hoe de afleiding plaatsvindt en welke parameters daarbij van invloed zijn. Vervolgens worden de resultaten van de uitgevoerde vergelijking besproken, waarbij wordt ingegaan op de mate van verschil (hoogte en aantal stoffen) en de factoren die dit verschil veroorzaken. Waar de bevindingen aanleiding geven tot een mogelijke aanpassing van de indicatieve methodiek zijn deze in de vorm van aanbevelingen aan het einde van iedere paragraaf gespecificeerd. Alvorens op de gedetailleerde resultaten van de vergelijkingen in te gaan is in Tabel 3 voor de 25 stoffen een overzicht gegeven van alle afgeleide milieurisicogrenzen (op basis van zowel experimentele waarden als de QSAR-afleiding). Deze gegevens vormen zo de basis van de vergelijking tussen de gedegen afleiding en de indicatieve methodiek.

Tenslotte nog een algemene opmerking over de mogelijkheid dat een van de in Tabel 1 genoemde factoren een directe relatie met de af te leiden risicogrenzen kan hebben. Voor de parameters oplosbaarheid, $\log K_{ow}$, afbreekbaarheid, dampspanning, Henry-coëfficiënt, BCF, beschikbare hoeveelheid data, verhouding hoeveelheid data tussen indicatief en gedegen en aantal studies die per stof onbetrouwbaar zijn bevonden in de gedegen afleiding, is gekeken of er een eenvoudige correlatie bestaat tussen de hoogte van de factor en het verschil tussen de indicatieve en de gedegen afleiding (= waarde indicatief/waarde gedegen). Dit was voor geen van deze parameters het geval, omdat in alle gevallen de correlatiecoëfficiënt (r^2) (veel) lager was dan 0,5. Ook de factoren Ecosar stofclassificatie, halogeen, zout, aromatische ring, compartiment en afleidingskader van de gedegen norm lijken geen invloed te hebben op het verschil tussen de gedegen en indicatieve normen.

3.1 Beperkingen van de resultaten

Als kanttekening dient vermeld te worden dat de selectie van 25 stoffen mogelijk niet representatief is voor alle mogelijke stoffen die in aanmerking kunnen komen voor een indicatieve milieurisicogrens. De samenstelling van de basisset waaruit de selectie werd gemaakt, werd namelijk bepaald door de aanwezigheid van een recent afgeleide gedegen norm. Een goede representatieve selectie was vanuit budgetredenen niet mogelijk, omdat dan veel kostbare gedegen normafleidingen uitgevoerd zouden moeten worden. Ook zou gezien het grote aantal "factoren die van invloed kunnen zijn" (zie Tabel 1), de stofselectie veel groter moeten zijn voor een goede statistische analyse. De resultaten voor deze 25 stoffen geven dus mogelijk een beperkt beeld van de accuraatheid van de indicatieve methodiek, maar bieden desondanks voldoende aanknopingspunten voor een verdere verbetering ervan.

Tabel 3 Overzicht van de afgeleide indicatieve milieurisicogrenzen en de gedegen milieurisicogrenzen. Bij de indicatieve milieurisicogrenzen is een onderscheid gemaakt naargelang de grens is gebaseerd op experimentele waarden (exp.) of uitsluitend op QSAR-data (QSAR)

Stofnaam	Opp. water (µg/l)			Grondwater (µg/l)			Sediment (µg/kg)			Bodem (µg/kg)			Lucht (µg/m ³)	
	gedegen	indicatief		gedegen	indicatief		gedegen	indicatief		gedegen	indicatief		gedegen	indicatief
		exp	QSAR		exp	QSAR		exp	QSAR		exp	QSAR		
4-chloor-3-methylphenol	6,4	9,2	0,13	(1)	9,2	0,13		nt	nt		114	5,2		gg
chloortoluenen (som)	14	0,47	8,8	14	0,47	59		nt	nt	420	15	166	780	gg
2,4-dichloorphenol	0,54	5,4	0,13	(1)	7,0	0,13		nt	nt		11	11		gg
3-chloorphenol	4	3,5	0,25	(1)	3,5	0,25		nt	nt		7	4,8		nt
2,3,4-trichloorphenol	0,54	0,70	0,070	(1)	1,1	0,070		nt	nt		77	6,7		gg
dichloorbenzenen	0,069	8,4	8,4	0,2	13	58		nt	nt	3,1	200	188		gg
xylenen (som)	2,44	1,0	58	2,4	1,0	58		nt	nt	33,4	14	142	870	870
chloorthalonil	0,06	0,005	0,60	(0,06)	0,005	54		nt	nt		0,21	311		gg
benzylchloride	0,02	0,020	0,020	0,021	0,021	0,021		nt	nt	0,77	0,29	0,29		gg
bromoxynil octanoaat	0,25	0,25	0,023	(0,25)	0,25	0,023		203	19		34	15,2		nt
prosulfocarb	0,55	0,28	0,28	(1,5)	3,8	1,6		nt	nt		10	10		nt
novaluron	0,0006	0,003	0,010	(0,0006)	0,003	0,042		0,42	5,8		0,41	5,8		nt
chryseen	0,0012	0,33	0,13	0,07	0,33	0,13	1600	190	75	23,1	57	57	0,010	0,010
epoxiconazool	0,19	0,078	0,19	(0,19)	0,078	0,19		nt	nt	8,8	0,84	5,7		nt
imidacloprid	0,067	0,065	3,3	(0,067)	0,065	3,3		nt	nt	5	1,5	76		nt
diflufenican	0,01	0,01	0,066	(0,01)	0,01	9,2		7,0	6396	1,18	6,9	33		nt
flubendiamide	0,05	0,66	2,1	(0,05)	0,66	2,1		nt	nt	5,3	4,5	14,4		nt
trifenylnit	0,00023	0,00005	0,084	(0,00023)	0,00005	1,0	0.0022	nt	nt		0,0033	5,3		gg
foramsulfuron	0,036 ^a	0,0065	9748	(0,036)	0,0065	1750		nt	nt	0,18	0,016	355		nt
1,3-dichloorpropeen	0,18	0,087	0,087	0,035	0,035	0,035		nt	nt	0,3	0,36	0,36	0,25	0,25
1,1,2,2-tetrachloorethaan	8	8,4	380	8	8,4	175		nt	nt	70	71	279	65	175
1,1,1-trichloorethaan	21	130	148	21	130	148		nt	nt	150	1227	197	380	380
2-chloorbutadieen	0,19	0,12	0,12	0,14	0,12	0,12		nt	nt	1,4	1,0	1,0	0,02	0,02
PFOS	0,00065	0,0035	0,013	(0,023)	0,0035	0,53		nt	nt	3,2	0,64	1,0		nt
1,2-dichloorethyleen	6,8	2,3	0,49	6,8	2,3	0,49		nt	nt	20	14	3,0	60	60

gg. geen gegevens

nt. niet getriggerd

() staat niet in het gedegen rapport maar is door het RIVM bepaald op basis van het gedegen MTR_{eco, water} en MTR_{dw, water} of ADI uit het gedegen rapport^a alleen een MTR_{eco, water}

4 Verschillen tussen de MTR-waarden

4.1 **MTR_{water}**

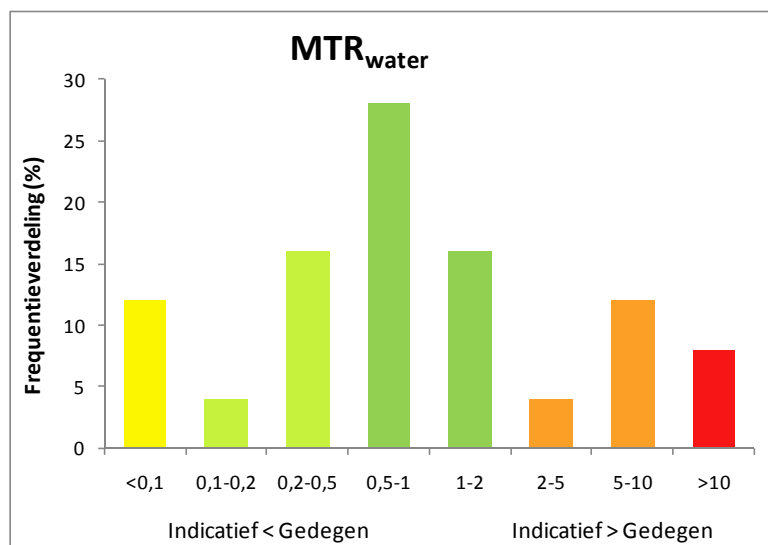
4.1.1 *Methodiek*

Het MTR_{water} wordt bepaald door de laagste waarde van het MTR_{eco, water} en MTR_{humaan, voedsel, water}. Bij het bestuderen van verschillen tussen de gedegen en indicatieve afleiding is daarom gekeken naar de hoogte van een eventueel verschil, naar het aantal stoffen waarvoor een verschil werd aangetroffen en naar de route die het MTR_{water} bepaalt (MTR_{eco, water} dan wel MTR_{humaan, voedsel, water}). Voor stoffen met een opvallend groot verschil is tevens gekeken naar achterliggende factoren zoals de toegepaste veiligheidsfactoren en de beschikbare toxiciteitsgegevens.

De verschillen tussen de indicatieve en gedegen waarden zijn voor elke stof in Figuur 1 geïllustreerd aan de hand van een verschilfactor. Deze is berekend door de waarde uit de indicatieve afleiding te delen door die uit de gedegen afleiding. Bij factoren <1 is het MTR_{water} volgens de indicatieve afleiding lager dan de waarde volgens de gedegen normstelling. Deze zijn in Figuur 1 groen weergegeven. Vanwege de grotere onzekerheden is het namelijk wenselijk dat het indicatieve MTR beschermend is ten opzichte van de gedegen waarde. Alleen als het verschil te groot (verschilfactor <0,1) is, is er toch een aandachtspunt, "geel". Bij factoren >1 is het MTR_{water} volgens de indicatieve afleiding onvoldoende beschermend ten opzichte van de gedegen waarde.

4.1.2 *Resultaten*

Voor 11 van de 25 stoffen (44%) verschilt het MTR_{water} volgens de indicatieve methodiek minder dan een factor 2 met het MTR_{water} volgens de gedegen afleiding. Voor 16 stoffen is het verschil binnen een factor 5 en voor 20 (80%) binnen een factor 10. Tegelijkertijd leidt de indicatieve methode bij 40% van de stoffen tot een indicatieve waarde die hoger is dan de waarde uit de gedegen afleiding. Voor 20% van de stoffen is dit verschil groter dan een factor 5. Verder moet worden opgemerkt dat een gelijke uitkomst ook op toeval kan berusten. Zo verschilt de indicatieve en gedegen milieurisicogrens voor 4-chloor-3-methylfenol minder dan een factor 2 (9,2 versus 6,4 µg/l). De indicatieve waarde is echter gebaseerd op een acute test met een vis, terwijl de gedegen afleiding op een bacterietest is gebaseerd.



Figuur 1 Mate waarin het MTR_{water} verschilt tussen de indicatieve en de gedegen afleiding. Weergegeven op de x-as is "waarde indicatief/waarde gedegen" ($n = 25$ stoffen)

Belangrijkste verschillen

Voor stoffen waarvoor de indicatieve en gedegen normen meer dan een factor 5 verschillen (indicatief/gedegen $< 0,2$ of > 5), is nagegaan welke factoren of parameters het sterkst aan deze verschillen hebben bijgedragen. Dit is samengevat in Tabel 4.

Vervolgens is voor alle stoffen ook bekeken of het MTR_{water} in beide gevallen door hetzelfde proces (ecotoxicologie versus humaan, voedsel) werd bepaald. Dit blijkt in het overgrote deel van de gevallen zo te zijn en wel voor vijftien stoffen op basis van de ecologische risico's en voor vier op basis van de humane risico's. Voor foramsulfuron kon de vergelijking niet gemaakt worden, omdat daar geen $MTR_{humaan, voedsel, water}$ voor is afgeleid¹.

¹ Het $MTR_{eco, water}$ is alleen afgeleid in verband met de afleiding van een $MTR_{eco, bodem}$.

Tabel 4 Overzicht van factoren die het sterkst hebben bijgedragen aan de verschillen tussen indicatief en gedegen: per factor is aangegeven of dit een 'logisch' verschil is tussen beide methodieken (groen) of dat dit een mogelijk verbeterpunt betreft (oranje met *)

Indicatieve / gedegen waarde	Belangrijkste factor voor geconstateerde verschil		Stof	
	Hoofdfactor	Nadere uitleg		
<0,1	Aantal ecotoxicologische gegevens	Bij indicatieve afleiding waren minder ecotoxicologische gegevens beschikbaar (→ hogere AF gebruikt).	chloortoluenen	
	Betrouwbaarheid gegevens	Laagste ecotoxicologische waarde bij indicatieve afleiding wordt in gedegen rapport als Ri3 bestempeld.	chloorthalonil	
	SSD versus AF-methode	Gedegen afleiding is gebaseerd op SSD-methode. De ook beschreven AF-methode komt wel overeen tussen de gedegen en indicatieve afleiding.	trifenylytin	
0,1 – 0,2	Aantal ecotoxicologische gegevens	Bij indicatieve afleiding waren minder ecotoxicologische gegevens beschikbaar (→ hogere AF gebruikt).	foramsulfuron ¹⁾	
5-10	BCF-waarde	Bij gedegen afleiding waren meer gegevens beschikbaar. Daarnaast is bij de gedegen afleiding gebruik gemaakt van een worstcase-aanpak ²⁾ .	2,4-dichloorfenol	*
	Aantal ecotoxicologische gegevens	Bij indicatieve afleiding waren minder ecotoxicologische gegevens beschikbaar (→ grens op hogere NOEC-waarde gebaseerd).	1,1,1-trichloorethaan	
	Andere route	Indicatieve afleiding is gebaseerd op $MTR_{eco, water}$. Gedegen afleiding is gebaseerd op $MTR_{humaan, voedsel, water}$ (door andere BCF&BMF).	PFOS ³⁾	
>10	BCF-waarde	Bij gedegen afleiding is gedetailleerde analyse van het complexe bioaccumulerende gedrag gemaakt.	chryseen	*
	Aantal ecotoxicologische gegevens	Bij indicatieve afleiding waren minder ecotoxicologische gegevens beschikbaar (→ grens op hogere NOEC-waarde gebaseerd).	flubendiamide	

¹⁾ Betreft alleen het $MTR_{water,eco}$, omdat in de gedegen normstelling het humane deel (nog) niet is afgeleid.

²⁾ In het RIVM-rapport wordt, op basis van een expertoordeel, de hoogste BCF voor vis van 340 gekozen, terwijl zowel de INS- als de indicatieve methodiek het gebruik van geometrisch gemiddelde waarden voorschrijft (mits betrouwbaar) en niet de worstcase-aanpak, die hier gekozen is.

³⁾ Bij de indicatieve methode is gesignaleerd dat PFOS te complex is voor de vereenvoudigde werkwijze binnen de indicatieve methode. Resultaten zijn daarmee minder betrouwbaar, wat bijdraagt aan de verschillen met de gedegen afleiding.

Voor vijf stoffen is er een verschil tussen de indicatieve en gedegen MTR_{water} doordat verschillende routes bepalend zijn. Deze zijn hieronder beschreven.

1) Dichloorbenzenen

Bij de gedegen afleiding is het MTR_{water} door doorvergiftiging bepaald. Bij de indicatieve methodiek wordt doorvergiftiging niet meegenomen, maar is aangenomen dat doorvergiftiging wordt beschermd door de route humaan, voedsel. De gedegen MTR's voor deze twee routes zijn nagenoeg gelijk aan elkaar (6,9 µg/l voor doorvergiftiging versus 8,9 µg/l voor humaan, voedsel) en hiermee wordt de aanname uit de indicatieve methodiek onderbouwd.

2) Chryseen

Bij de indicatieve afleiding ligt het humane risico veel lager doordat er een zeer lage BCF is gebruikt (zie paragraaf 5.3).

3) 1,3-dichloorpropeen

Bij de gedegen afleiding is het humane risico niet getriggerd, terwijl dat bij de indicatieve afleiding wel het laagste MTR opleverde. Dit zou overigens ook bij de gedegen afleiding gebeurd zijn, als het humane risico zou zijn afgeleid. De BCF-waarde verschilt namelijk niet tussen beide methoden. Er blijkt hier een fout te zitten in de omschrijving van de triggers binnen de indicatieve methodiek (zie paragraaf 4.3.2)

4) 2-chloorbutadien

Voor deze stof ligt de oorzaak bij het ecologische risico. Voor 2-chloorbutadien zijn in de indicatieve methode namelijk geen experimentele waarden gevonden en is gewerkt met een QSAR met hoge veiligheidsfactor.

5) PFOS

De oorzaak van de verschuiving ligt hier bij zowel de ecologische als de humane risico's. Bij de gedegen afleiding ligt het $MTR_{\text{eco, water}}$ hoger door het gebruik van een kleinere veiligheidsfactor terwijl tegelijkertijd het $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ veel lager ligt door het gebruik van hogere BCF- en BMF-waarden.

4.1.3

Aandachtspunten

- In de indicatieve methodiek kan in meer detail uitgeschreven worden hoe om te gaan met ecotoxicologische gegevens die als < dan wel > zijn opgegeven.
Binnen de gedegen methodiek kunnen "groter dan"- en "kleiner dan"-waarden gedetailleerd bekeken worden. Dit levert aanvullende informatie, waarbij ook de mate van effect kan worden beoordeeld. Dit detailniveau wordt binnen de indicatieve methodiek niet beoogd. Voor enkele, vaak voorkomende, situaties kan echter wel worden vastgelegd hoe hiermee kan worden omgegaan. Dit betreft bijvoorbeeld de situatie waarbij de laagst aangetroffen ecotoxicologische waarde opgegeven is als "<". De waarde zou dan meegenomen kunnen worden met een hogere veiligheidsfactor.
- De BCF-waarde blijkt soms sterk te verschillen tussen de indicatieve en gedegen afleiding. Deels komt dit door het soms complexe gedrag van een stof (bijvoorbeeld PFOS en chryseen) en is het verschil daarmee begrijpelijk. Tegelijkertijd zou een controle van de experimenteel gevonden waarde en een geschatte waarde conform de QSAR uit Veith et al. (1979) verschillen kunnen verkleinen. Ook de keuze tussen een experimentele waarde voor mossel of een geschatte waarde voor vis kan verduidelijkt worden. Zie verder paragraaf 5.3 over de BCF-waarden waar dit in meer detail wordt besproken.
- Verder kan het verstandig zijn om bij de indicatieve afleiding van MTR-waarden kenbaar te maken dat de betrouwbaarheid op orde grootte een factor 10 bedraagt. Bij het nemen van beslissingen binnen dit gebied (bijvoorbeeld als een blootstellingsconcentratie minder dan een factor 10 verschilt van het indicatieve MTR) wordt het afleiden van een gedegen MTR aanbevolen.

4.2 **MTR_{eco, water}**

Zowel de indicatieve als de gedegen afleiding heeft zich gericht op het afleiden van MTR_{eco, water}-waarden voor alle 25 stoffen. Dit is voor 24 ook gelukt. De uitzondering is benzylchloride, waar bij de gedegen afleiding is geconstateerd dat er onvoldoende betrouwbare ecotoxicologische gegevens voorhanden zijn om een MTR_{eco, water} af te leiden. Onderstaande vergelijking richt zich op de resterende 24 stoffen.

4.2.1 *Methodiek*

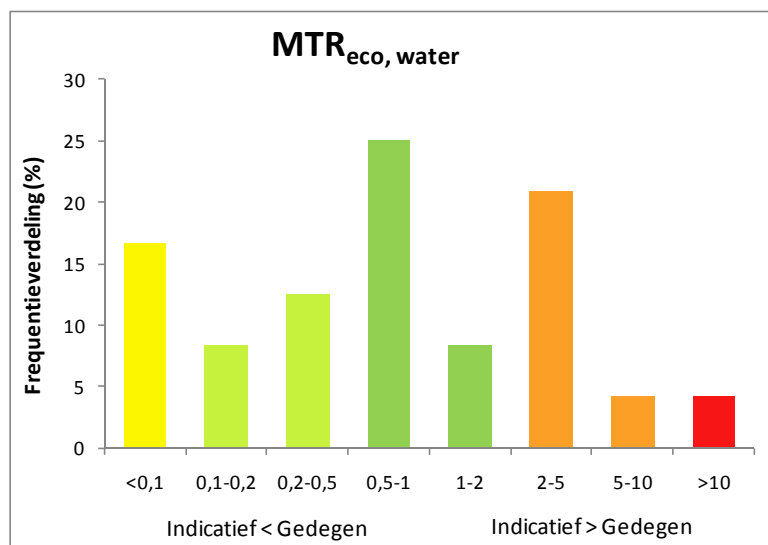
Het MTR_{eco, water} wordt bepaald door de 'kritische' ecotoxicologische waarde te delen door een veiligheidsfactor. Deze veiligheidsfactor hangt af van de hoeveelheid beschikbare ecotoxicologische informatie. De kritische ecotoxicologische parameter is meestal de laagst beschikbare EC₅₀ of (in het geval van chronische testen) NOEC-waarde². De verschillen tussen de gedegen en indicatieve methode zijn daarmee vaak te wijten aan verschillen in de gevonden hoeveelheid ecotoxicologische gegevens. Dit beïnvloedt namelijk zowel de laagst aangetroffen ecotoxicologische waarde als de benodigde veiligheidsfactor. Daarnaast wordt bij de gedegen afleiding ook de betrouwbaarheid van de gegevens getoetst. Hierdoor kunnen gegevens worden afgewezen, die bij de indicatieve afleiding (waar deze beoordeling niet plaatsvindt) wel worden meegenomen.

4.2.2 *Resultaten*

Uit paragraaf 4.1.2 bleek dat voor 15 van de 24 stoffen het MTR_{water} bij zowel de indicatieve als de gedegen afleiding wordt bepaald door het MTR_{eco, water}. De verschillen zoals geïllustreerd in Figuur 2 vertonen daarmee veel overeenkomsten met de verschillen zoals in paragraaf 4.1 besproken voor het MTR_{water}. Ook voor het MTR_{eco, water} geldt dat voor 83% van de stoffen (20 van de 24) de indicatieve methode niet meer dan een factor 10 verschilt van de gedegen afleiding. Daarnaast is voor 9 van de 24 stoffen (37,5%) het MTR_{eco, water} volgens de indicatieve methode hoger dan de waarde volgens de gedegen normstelling. Ook dit percentage komt goed overeen met het MTR_{water,r} waar dit verschil voor 40% van de stoffen werd aangetroffen.

Voor stoffen met meer dan een factor-10-verschil tussen de indicatieve en gedegen afleiding (indicatief/gedegen >10 dan wel <0,1) zijn de belangrijkste redenen voor dit verschil hieronder weergegeven om zo te beoordelen of de indicatieve methodiek op onderdelen verder aangescherpt kan worden.

² Als er voldoende ecotoxicologische gegevens voorhanden zijn, kan men bij de gedegen methodiek ook gebruik maken van een statistische methode (SSD-methode) om de kritische ecotoxicologische waarde vast te stellen.



Figuur 2 Mate waarin het $MTR_{eco, water}$ verschilt tussen de indicatieve methodiek en de gedegen afleiding. Weergegeven op de x-as is "waarde indicatief/waarde gedegen" ($n=24$ stoffen)

Belangrijkste verschillen

In Tabel 5 is aangegeven voor welke stoffen de grootste verschillen zijn geconstateerd en welke factoren daar het sterkst aan hebben bijgedragen. Tevens is per factor aangegeven of dit een 'logisch' verschil is tussen beide methodieken (groen) of dat dit een mogelijk verbeterpunt betreft (oranje met *).

Voor zeven van de acht stoffen werd het verschil met name veroorzaakt doordat bij de gedegen afleiding een uitgebreidere set ecotoxicologische gegevens beschikbaar was. Dit leidde voor twee stoffen tot een lagere NOEC-waarde, voor drie stoffen tot een lagere veiligheidsfactor, voor één stof tot het gebruik van experimentele gegevens in plaats van een QSAR en voor één stof tot het gebruik van statistische extrapolatie (SSD-methode) in plaats van een veiligheidsfactor op het laagste eindpunt. Voor de achtste stof werd het testresultaat dat bij de afleiding voor de indicatieve methode als "laagste ecotoxicologische waarde" is gebruikt, als onbetrouwbaar (Ri3) bestempeld in de gedegen afleiding.

Tabel 5 Overzicht van factoren die het sterkst hebben bijgedragen aan de verschillen tussen indicatief en gedegen $MTR_{eco, water}$: per factor is aangegeven of dit een 'logisch' verschil is tussen beide methodieken (groen) of dat dit een mogelijk verbeterpunt betreft (oranje met *)

Indicatieve / gedegen waarde	Belangrijkste factor voor geconstateerde verschil		Stof
	Hoofdfactor	Nadere uitleg	
<0,1	Andere veiligheidsfactor	Indicatieve afleiding heeft een kleinere ecotoxicologische dataset en daarmee een hogere veiligheidsfactor.	chloortoluenen
	Betrouwbaarheid van de gegevens	Ecotoxicologische waarde wordt in gedegen rapport als Ri3 bestempeld en daarmee niet gebruikt.	chloorthalonil
	SSD versus AF-methode	Gedegen afleiding is gebaseerd op SSD-methode. De ook beschreven AF-methode komt wel overeen tussen de gedegen en indicatieve afleiding.	trifenylnit
	QSAR versus experimentele data	Bij de indicatieve methode zijn geen geschikte ecotoxgegevens gevonden en is van een QSAR met hoge AF gebruik gemaakt.	2-chloorbutadieen
0,1 – 0,2	Andere veiligheidsfactor	Indicatieve afleiding heeft een kleinere ecotoxicologische dataset en daarmee een hogere veiligheidsfactor.	foramsulfuron PFOS
5 – 10	Hogere NOEC	Bij indicatieve afleiding waren minder ecotoxicologische gegevens beschikbaar waardoor waarde op hogere NOEC-waarde is gebaseerd.	1,1,1-trichloorethaan
>10	Hogere NOEC	Bij indicatieve afleiding waren minder ecotoxicologische gegevens beschikbaar waardoor waarde op hogere NOEC-waarde is gebaseerd.	flubendiamide

4.2.3 Aandachtspunten

De geconstateerde verschillen zijn begrijpelijk vanuit de gekozen opzet en doelstelling van de indicatieve methodiek. Aanpassingen kunnen de methodiek op dit aspect dan ook nauwelijks verbeteren, met uitzondering van een kleine toevoeging:

- In Bijlage 2 van de indicatieve methode is een overzicht opgenomen van te gebruiken informatiebronnen. Hierin worden ook de EU-DAR's genoemd zoals die voor meerdere gewasbeschermingsmiddelen beschikbaar zijn. Deze rapporten leveren nuttige informatie voor zowel ecotoxicologische als fysisch/chemische gegevens. Met de opgegeven twee referenties konden echter niet alle beschikbare DAR's gevonden worden. Daarom is ook van een derde site gebruik gemaakt: <http://dar.efsa.europa.eu/dar-web/provision>.

4.3 $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$

4.3.1 Methodiek

Bij zowel de indicatieve als de gedegen methode wordt een $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ alleen afgeleid als bepaalde stoffeigenschappen zoals de BCF, $\log K_{ow}$ of bepaalde R-zinnen daartoe aanleiding geven. Verder wordt het $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ binnen de indicatieve afleiding ook geacht dekkend te zijn voor doorvergiftiging

van vogels en zoogdieren (het $MTR_{DV, water}$) dat in de gedegen methodiek als derde route voor het MTR_{water} wordt afgeleid. De criteria voor het afleiden van een $MTR_{humaan, voedsel, water}$ in de indicatieve afleiding zijn daarom breder geformuleerd dan in de gedegen methodiek. Verschillen tussen de indicatieve en gedegen afleiding kunnen daarmee zowel een gevolg zijn van verschillen in de gebruikte criteria als van de eigenlijke afleiding. Beide oorzaken worden hieronder bekeken.

4.3.2 Resultaten

Gebruikte criteria

Door de bredere formulering van de criteria mag verwacht worden, dat binnen de indicatieve methodiek eerder tot het afleiden van een $MTR_{humaan, voedsel, water}$ wordt overgegaan. Dit blijkt ook uit de resultaten, aangezien binnen de indicatieve methodiek voor 10 van de 25 stoffen $MTR_{humaan, voedsel, water}$ -waarden zijn afgeleid, waar deze afleiding in de gedegen methode niet nodig wordt geacht.

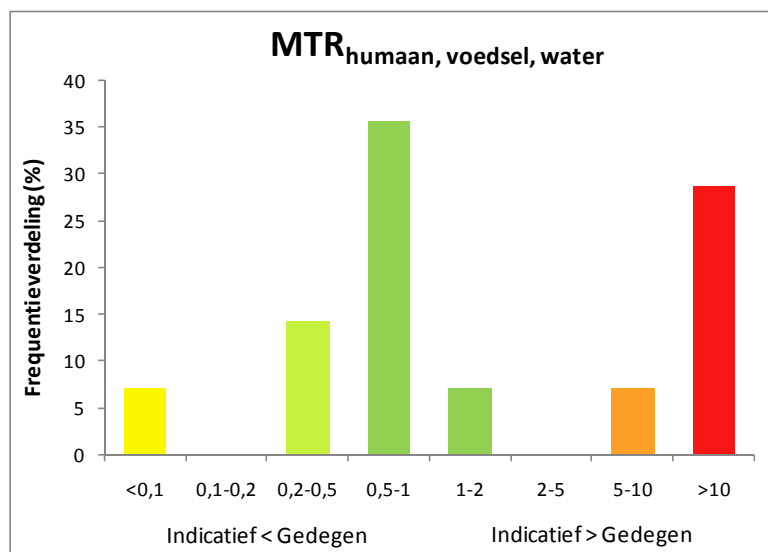
Bij een nadere analyse blijkt dat bij de meeste van deze tien stoffen de humane route wordt meegenomen door uitsluitend het aantreffen van een of meerdere van de genoemde R-zinnen (R21, R22, R24, R25, R27, R28 of R48). Dit blijkt echter te berusten op een beschrijving in de indicatieve methodiek, aangezien binnen de gedegen afleiding het *uitsluitend* aantreffen van deze R-zinnen onvoldoende reden is voor het uitvoeren van een $MTR_{humaan, voedsel, water}$ - dan wel $MTR_{DV, water}$ -afleiding.

Voor negen van deze tien stoffen heeft dit verschil in de interpretatie van de criteria overigens niet geleid tot een verschil in het uiteindelijke MTR_{water} , omdat het $MTR_{eco, water}$ in die gevallen kleiner was dan het $MTR_{humaan, voedsel, water}$. Voor 1,3-dichloorpropeen treedt er echter wel een verschil op. Voor deze stof werd het MTR_{water} bij de indicatieve methode (onnodig) door het humane risico bepaald, terwijl meenemen van het humane risico in de gedegen afleiding niet vereist was en binnen de indicatieve methode uitsluitend was gebaseerd op het aantreffen van twee van de genoemde R-zinnen.

Verder kan het $MTR_{humaan, voedsel, water}$ ook voor foramsulfuron niet worden vergeleken, omdat deze nog niet binnen de gedegen methode is afgeleid. Hiermee resulteren er veertien stoffen waarvoor bekeken is of er ook in de afleiding zelf een verschil optreedt tussen de indicatieve en gedegen afleiding.

Afleiding en hoogte van het $MTR_{humaan, voedsel, water}$

De verhouding tussen het $MTR_{humaan, voedsel, water}$ volgens de indicatieve en gedegen methode is weergegeven in Figuur 3 (op de x-as staat "indicatieve waarde/gedegen waarde"). In dit geval geldt dat voor 64% van de stoffen (negen van de veertien) de indicatieve methode niet meer dan een factor 10 verschilt van de gedegen afleiding. Wat hierbij met name opvalt is het relatief grote aantal stoffen (vier van de veertien = 28%) waar de indicatieve waarde meer dan een factor 10 hoger is dan de waarde volgens de gedegen methode. Ook voor twee andere stoffen is het $MTR_{humaan, voedsel, water}$ volgens de indicatieve methode hoger dan in de gedegen afleiding (maar wel minder dan een factor 10). De achterliggende redenen zijn hieronder nader toegelicht.



Figuur 3 Mate waarin het $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ verschilt tussen de indicatieve methodiek en de gedegen afleiding. Weergegeven op de x-as is "waarde indicatief/waarde gedegen".

Belangrijkste verschillen

In Tabel 6 zijn de belangrijkste verschillen nader geduid. Aangezien binnen dit project de ADI-waarden uit de gedegen afleiding telkens zijn overgenomen als GHM-waarden³ voor de indicatieve afleiding (zie hoofdstuk 2), betreffen deze verschillen altijd verschillen in de BCF- en/of BMF-waarden. Wat met name opvalt, is dat de grootste verschillen in BCF-waarden (>factor 10) worden gevonden bij stoffen waarvoor in de gedegen afleiding een uitgebreide analyse van de beschikbare gegevens is uitgevoerd en uitgebreid wordt beargumenteerd welke waarde de voorkeur heeft. Deze detaillering is in de indicatieve methode niet mogelijk. Gezien het belang van de BCF-waarden op het $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ is deze factor in meer detail bekeken in paragraaf 5.2.

³ ADI = Acceptable Daily Intake; GHM = Geschatte Humane Limietwaarde

Tabel 6 Overzicht van de belangrijkste verschillen tussen indicatief en gedegen $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ per factor is aangegeven of dit een 'logisch' verschil is tussen beide methodieken (groen) of dat dit een mogelijk verbeterpunt betreft (oranje met *)

Indicatieve / gedegen waarde	Belangrijkste factor voor geconstateerde verschil		Stof	
	Hoofdfactor	Nadere uitleg		
<0,1	Betrouwbaarheid van de gegevens	Wegens onbetrouwbare gegevens is de BCF in de gedegen afleiding lager (factor 10) vastgesteld.	chloorthalonil	
5 - 10	Meer gegevens	Bij de gedegen afleiding waren meer gegevens voorhanden (waaronder een 10 maal hogere BCF).	2,4-dichloorfenol	
>10	Meer gegevens	Bij de gedegen afleiding waren meer gegevens voorhanden.	chryseen trifenylytin ⁴	
	Keuze tussen data voor vis c.q. schelpdier	Bij de indicatieve methode zijn experimentele gegevens (lage BCF) voor een schelpdier gebruikt. Een geschatte waarde voor vis had het verschil met de gedegen waarde verkleind.	chryseen	*
	Gedetailleerde beoordeling	BCF-waarde wordt in de gedegen afleiding uitgebreid beargumenteerd.	chryseen flubendiamide PFOS	
	Andere BMF	In de gedegen afleiding wordt een BMF van 2 gehanteerd; bij de indicatieve afleiding wordt 1 gebruikt.	trifenylytin	

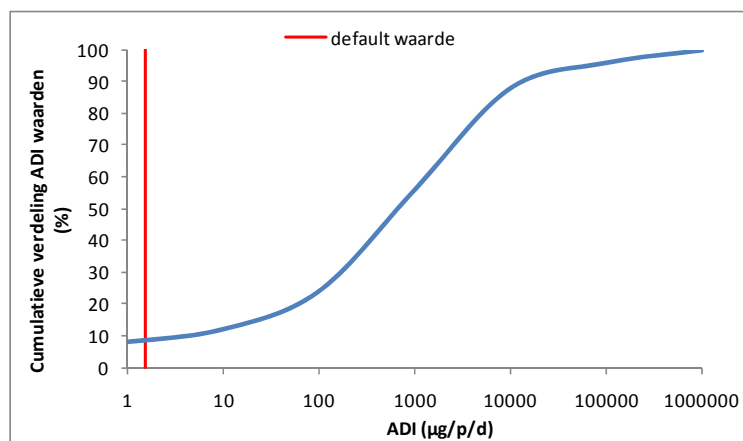
Gebruik van een default-waarde

Voor stoffen waarvoor geen humaan-toxicologische gegevens beschikbaar zijn, wordt gewerkt met een standaardwaarde als GHL. Deze *default* is gebaseerd op de 'Threshold of Regulatory Concern' (TRC). De US FDA hanteert een TRC van 1,5 microgram per persoon per dag ($\mu\text{g}/\text{p}/\text{d}$) bij de beoordeling van de mogelijke risico's van slecht onderzochte stoffen. Deze waarde wordt ook binnen de indicatieve methode gehanteerd en kan daarom direct met de werkelijke afleiding gebruikte ADI worden vergeleken.

In Figuur 4 is de cumulatieve verdeling van ADI-waarden uit de huidige studie weergegeven. Deze variëren over vele ordegrottes. Ten opzichte van deze brede range is de gehanteerde *default*-waarde van 1,5 $\mu\text{g}/\text{p}/\text{d}$ vrijwel altijd aan de (zeer) veilige kant. Van de 25 stoffen ligt de ADI in slechts twee gevallen onder de 1,5 $\mu\text{g}/\text{p}/\text{d}$, namelijk voor benzylchloride ($\text{ADI}=0,42 \mu\text{g}/\text{p}/\text{d}$) en 1,3-dichloropropene ($\text{ADI}=0,7 \mu\text{g}/\text{p}/\text{d}$). Gebruik van de *default*-waarde levert daarmee een voldoende veilige aanpak voor situaties waar geschikte gegevens ontbreken. Tegelijkertijd is de voorspellende waarde van de hiermee afgeleide MTR_{humaan} -waarden beperkt. Op het rapportageformulier zou daarom een expliciete opmerking gemaakt moeten worden als er van de *default*-waarde gebruik is gemaakt. Gelukkig is de noodzaak hiertoe steeds minder frequent. Gebruik van de *default*-waarde betekent ook een verandering van de meest gevoelige route. Bij gebruik van de oorspronkelijke ADI-waarden is het $MTR_{\text{eco, water}}$ voor 19 van de 25 stoffen lager dan het $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$. Bij gebruik van de *default*-waarde zou dit volledig omgekeerd zijn en is het

⁴ Opvallend is dat de lage BCF-waarden, zoals die bij de indicatieve afleiding zijn gevonden, bij de gedegen afleiding niet zijn opgenomen in de dataset. Het rapport betreft echter nog een conceptversie.

$MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ voor 22 stoffen het laagst. De uitzonderingen zijn trifenyltin, imidacloprid en foramsulfuron.



Figuur 4 Cumulatieve verdeling van de ADI (Acceptable Daily Intake)-waarden, zoals gebruikt bij de indicatieve afleiding ten opzichte van de default-waarde van 1,5 µg/p/d ($n = 25$ stoffen)

4.3.3 Aandachtspunten

- In de indicatieve methode dienen de genoemde R-zinnen als afzonderlijke criteria te vervallen (c.q. laatste twee regels uit Tabel 6 van de indicatieve methodiek verwijderen).
- Bij de indicatieve methode heeft een experimentele waarde voor schelpdieren altijd de voorkeur boven een berekende waarde voor vis (QSAR volgens Veith et al. (1979)). Voor meerdere stoffen (bijvoorbeeld 2,4-dichloorfenol, chloorthalonil) blijkt echter dat BCF-waarden voor schelpdieren soms flink lager liggen dan (al dan niet geschatte) waarden voor vis. Daarom wordt een wijziging in de indicatieve methode voorgesteld, waarbij de BCF wordt gebaseerd op de *worst case* tussen a) schelpdier, b) experimentele data van vis, en c) QSAR-data voor vis (zie ook paragraaf 5.3.3).
- Bij het afleiden van een MTR_{water} wordt bij de indicatieve methodiek verondersteld dat doorvergiftiging niet als extra route beoordeeld hoeft te worden, omdat die wordt afgedekt door het meewegen van de humane blootstelling via vis. Dit is voor de meeste stoffen ook het geval. Er zijn twee uitzonderingen, namelijk dichloorbenzenen en epoxiconazool. In beide gevallen ligt het $MTR_{\text{DV, water}}$ lager dan het $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$. Bij epoxiconazool is dit meer dan een factor 10. Dit verschil is echter ontstaan door een hoge veiligheidsfactor die bij de gedegen afleiding ter discussie staat. Alleen bij de dichloorbenzenen wordt het MTR_{water} ook door doorvergiftiging bepaald. In dit geval liggen de drie onderliggende MTR-waarden overigens vrij dicht bij elkaar (gedegen afleiding: $MTR_{\text{DV, water}} = 6,9$; $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}} = 8,9$; $MTR_{\text{eco, water}} = 20 \mu\text{g/l}$). Hieruit kan worden geconcludeerd dat de verschillen begrijpelijk zijn vanuit de gekozen opzet en doelstelling van de indicatieve methodiek. Aanpassingen zullen de methodiek op dit aspect waarschijnlijk niet verbeteren.

4.4 **MTR_{bodem}**

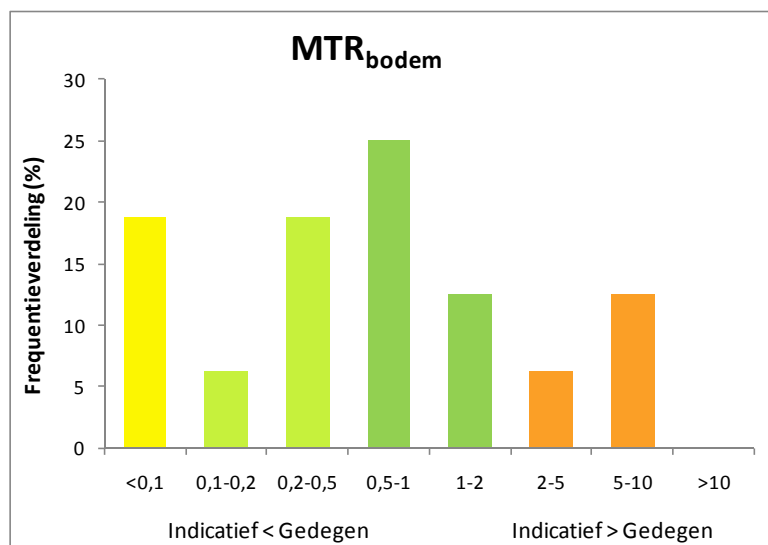
4.4.1 *Methodiek*

Voor zestien stoffen kon het MTR_{bodem} afgeleid volgens de indicatieve methode worden vergeleken met de waarde uit de gedegen afleiding. Voor de andere negen stoffen is namelijk geen MTR_{bodem} volgens de gedegen methode afgeleid. Het MTR_{bodem} wordt bepaald door de laagste waarde van het MTR_{eco, bodem} op basis van directe ecotoxiciteit en het MTR_{humaan, voedsel, bodem} voor blootstelling van mensen via voedsel. Bij het bestuderen van verschillen tussen de gedegen en indicatieve afleiding is gekeken naar de hoogte van een eventueel verschil, naar het aantal stoffen waarvoor een verschil werd aangetroffen en naar de route die het MTR_{bodem} bepaalt (MTR_{eco, bodem} dan wel MTR_{humaan, voedsel, bodem}). Voor stoffen met een opvallend groot verschil is tevens gekeken naar de achterliggende factoren.

Verder is het van belang om te realiseren dat het MTR_{eco, bodem} op twee verschillende berekeningen gebaseerd kan zijn. Waar mogelijk worden experimentele gegevens van bodemorganismen gebruikt om door middel van een veiligheidsfactor een MTR_{eco, bodem, exp} af te leiden. Deze gegevens zijn echter niet voor alle stoffen voorhanden. In dat geval kan een MTR_{eco, bodem} ook worden berekend via evenwichtspartitie vanuit het MTR_{eco, water}. Deze waarde wordt aangeduid als MTR_{eco, bodem, EP}. Binnen de indicatieve afleiding worden beide berekeningen uitgevoerd (mits er natuurlijk gegevens voor bodemorganismen voorhanden zijn) en bepaalt de laagste het MTR_{eco, bodem}. Bij de gedegen afleiding hebben experimentele gegevens de voorkeur en wordt de berekening via evenwichtspartitie alleen toegepast als de set experimentele gegevens onvoldoende is.

4.4.2 *Resultaten*

In Figuur 5 zijn de verschillen tussen de indicatieve en gedegen afleiding gepresenteerd. Overeenkomstig met de presentatie bij het MTR_{water} is het verschil geïllustreerd door middel van een factor, berekend door de waarde uit de indicatieve afleiding te delen door die uit de gedegen afleiding. Een belangrijke constatering is dat er wederom bij 80% van de stoffen minder dan een factor-10-verschil is tussen de waarde volgens de indicatieve en gedegen afleiding. Voor de drie stoffen met een groter verschil (tussen de 10 en 100) is de indicatieve waarde telkens lager dan de waarde volgens de gedegen afleiding. Tegelijkertijd blijkt uit Figuur 5 ook dat voor vijf van de zestien stoffen (31%) het MTR_{bodem} volgens de indicatieve methode hoger is dan bij de gedegen afleiding.



Figuur 5 Mate waarin het MTR_{bodem} verschilt tussen de indicatieve methodiek en de gedegen afleiding. Weergegeven op de x-as is "waarde indicatief/waarde gedegen" ($n=16$ stoffen)

Belangrijkste verschillen

Voor de stoffen met het grootste verschil tussen de waarde uit de indicatieve en de gedegen afleiding is in Tabel 7 aangegeven welke factoren hieraan hebben bijgedragen. Tevens is per factor aangegeven of dit een 'logisch' verschil is tussen beide methodieken (groen) of dat dit een mogelijk verbeterpunt betreft (oranje met *). In de volgende paragrafen wordt in meer detail stilgestaan bij de verschillen in het $MTR_{eco, bodem}$ (paragraaf 4.5) en de genoemde fysisch/chemische factoren (paragraaf 5.4 en 5.5).

Vervolgens is bekeken of het MTR_{bodem} in beide methoden ook door hetzelfde proces werd bepaald ($MTR_{eco, bodem}$ of $MTR_{humaan, voedsel, bodem}$). Dit blijkt voor dertien van de zestien stoffen zo te zijn en wel voor tien stoffen op basis van de ecologische risico's en voor drie op basis van de humane risico's. Er zijn drie stoffen waar een verschil optreedt. Dit zijn:

PFOS

Bij de gedegen afleiding speelt doorvergiftiging een bepalende rol, terwijl deze route geen onderdeel uitmaakt van de indicatieve methode. Daarnaast werd in de gedegen afleiding ook geconcludeerd dat het humane risico niet kan worden ingeschat. PFOS is namelijk een ioniseerbare stof die aan eiwitten bindt, terwijl de beschikbare risicobeoordeling is gericht op stoffen die zich in vetweefsel ophopen. Aan de andere kant heeft PFOS toch een hoge $\log K_{oc}$. Verder is bij de indicatieve afleiding een $\log K_{ow}$ gegeven, terwijl in de gedegen afleiding staat dat een berekening van de $\log K_{ow}$ niet mogelijk is. Al met al is PFOS een complexe stof met een ingewikkeld milieuchemisch gedrag. Bij de indicatieve methode is daarom signaleerd dat deze stof zich niet leent voor de pragmatische aanpak die binnen de indicatieve afleiding wordt gevolgd.

Chloortoluenen en 2-chloorbutadien

Door een verschil in het $MTR_{eco, water}$ is bij de indicatieve methode het ecologische risiconiveau voor de bodem ($MTR_{eco, bodem, EP}$) groter dan het humane risiconiveau, terwijl dat bij de gedegen afleiding andersom ligt. Voor beide stoffen geldt tevens dat de berekeningen van het humaan risiconiveau slechts in geringe mate verschilt tussen de indicatieve en de gedegen afleiding. Deze

wijziging in de gevoeligste route is daarmee een direct gevolg van het verschil in het $MTR_{eco, water}$ zoals besproken in paragraaf 4.2 en hoeft daarom niet nader te worden toegelicht.

*Tabel 7 Overzicht van de belangrijkste verschillen tussen indicatief en gedegen MTR_{bodem} : per factor aangegeven of dit een 'logisch' verschil is tussen beide methodieken (groen) of dat dit een mogelijk verbeterpunt betreft (oranje met *)*

Indicatieve / gedegen waarde	Belangrijkste factor voor geconstateerde verschil		Stof	
	Hoofdfactor	Nadere uitleg		
<0,1	Verschil in $MTR_{eco, bodem, EP}$	i) $MTR_{eco, water}$ verschilt tussen indicatieve en gedegen afleiding (paragraaf 4.5) en daarmee ook het $MTR_{eco, bodem, EP}$ ¹⁾ .	chloortoluenen foramsulfuron	
		ii) Henry-coëfficiënt verschilt en daarmee de $K_{bodem/water}$ en dus de EP-berekening.	foramsulfuron	*
0,1 – 0,2	Betrouwbaarheid gegevens	Experimentele waarde gebruikt bij indicatieve afleiding werd bij gedegen als onbetrouwbaar beoordeeld. Indicatieve waarde betreft daarmee een $MTR_{eco, bodem, exp}$ en de gedegen waarde een $MTR_{eco, bodem, EP}$.	epoxiconazool	
		Andere route	Bij de gedegen afleiding is doorvergiftiging het gevoeligst, terwijl deze in de indicatieve afleiding niet afzonderlijk wordt beoordeeld. Bij de indicatieve methode blijkt $MTR_{eco, bodem}$ het gevoeligst te zijn. Ook het complexe milieuchemische gedrag van PFOS speelt een rol.	PFOS
5 – 10	Verschil in $MTR_{eco, bodem, EP}$	i) $MTR_{eco, water}$ verschilt tussen indicatieve en gedegen afleiding (paragraaf 4.5) en daarmee ook het $MTR_{eco, bodem, EP}$.	1,1,1-trichloorethaan	
		ii) Log K_{oc} en Henry-coëfficiënt verschilt en daarmee de $K_{bodem/water}$ en dus de EP-berekening.	diflufenican	

¹⁾ Door dit verschil in $MTR_{eco, water}$ blijkt ook de bepalende route voor het MTR_{bodem} te verschillen (indicatief= $MTR_{eco, bodem, EP}$; gedegen= $MTR_{huumaan, voedsel, bodem}$).

4.4.3

Aandachtspunten

- De Henry-coëfficiënt blijkt voor sommige stoffen sterk te verschillen tussen de indicatieve en gedegen afleiding. Dit lijkt met name te gebeuren als deze waarde wordt berekend door middel van de formule uit de handreiking. Zie verder paragraaf 5.5 waar dit in meer detail wordt besproken.
- Bij de indicatieve methode is de aanname dat doorvergiftiging wordt afgedekt door het meenemen van de humane blootstelling via groente, vlees of melk. In het geval van PFOS blijkt dit niet het geval. Het is moeilijk om te beoordelen of dit een incident is of dat de aanname moet worden heroverwogen, maar ook bij de indicatieve afleiding werd al gesignaleerd dat PFOS een stof is met een dusdanig afwijkend milieuchemisch gedrag dat een indicatieve afleiding niet werd aangeraden. Het is echter moeilijk om op basis van deze ene stof criteria te definiëren waarmee stoffen kunnen worden uitgesloten die zich niet lenen voor de pragmatische aanpak binnen de indicatieve methode. Vooralsnog wordt daarom alleen aanbevolen om bij de rapportage van de indicatieve methode ruimte te bieden om grote twijfels over de betrouwbaarheid aan te duiden, zodat de beoordelaar of gebruiker daar rekening mee kan houden en het afleiden van een norm volgens de gedegen

methode in overweging kan nemen. Omdat niet alle stoffen passen binnen het rekenschema dat voor indicatieve normen is ontworpen, wordt gebruikers aangeraden bij twijfel over de berekeningen deze te rapporteren en zonodig collega's te raadplegen. Daarnaast wordt aanbevolen om bij herziening van de handreiking een lijst op te nemen met stofgroepen of stoffen met bepaalde karakteristieken waarvoor beter geen indicatieve milieurisicogrens afgeleid kan worden. Stofgroepen die op deze lijst geplaatst zouden kunnen worden, zijn bijvoorbeeld stoffen die sterk aan eiwit binden, stoffen met een hoge achtergrondconcentratie zoals sommige metalen, en stoffen met een heel specifieke werking waardoor grote verschillen binnen of tussen taxonomische groepen kunnen optreden. Deze lijst is slechts een eerste suggestie en kan verder uitgewerkt worden bij de herziening van de indicatieve methodiek.

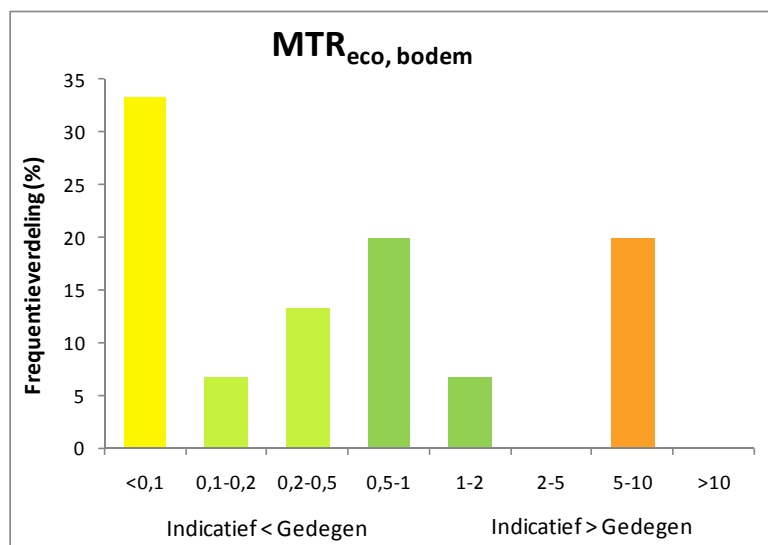
4.5 **MTR_{eco, bodem}**

4.5.1 *Methodiek*

Zoals hierboven bij het MTR_{bodem} al is vermeld, kan het MTR_{eco, bodem} op twee manieren worden berekend, namelijk op basis van experimentele gegevens voor bodemorganismen (als die er zijn) (MTR_{eco, bodem, exp}) of via evenwichtspartitie uit het MTR_{eco, water}, waarbij dan over het MTR_{eco, bodem, EP} wordt gesproken. Stoffen waarvoor het MTR_{eco, bodem} met name afwijkt door verschillen in het MTR_{eco, water} worden hieronder niet diepgaand besproken. Hiervoor wordt verwezen naar paragraaf 4.2. Daarnaast kunnen er stoffen zijn waarvoor de verschillen met name een gevolg zijn van de fysisch/chemische parameters die bepalend zijn voor de $K_{\text{bodem/water}}$, zoals die in de evenwichtspartitieformules wordt gehanteerd. Deze situaties worden hieronder wel besproken.

4.5.2 *Resultaten*

De verschillen tussen de indicatieve en gedegen methode zijn samengevat in Figuur 6. Deze figuur vertoont grote overeenkomsten met Figuur 5 waar de verschillen voor het MTR_{bodem} werden geïllustreerd. Dit is niet verrassend, aangezien hierboven al werd geconcludeerd dat het MTR_{bodem} in de meeste gevallen door het MTR_{eco, bodem} wordt bepaald. Het meest opvallende verschil is het hogere aantal stoffen waar het indicatieve MTR_{eco, bodem} meer dan een factor 10 lager is dan de gedegen variant. Hierdoor zit niet langer 80% maar 67% van de stoffen binnen een factor 10 van de waarde uit de gedegen afleiding. Verder blijkt dat het MTR_{eco, bodem} volgens de indicatieve methode bij vier van de vijftien stoffen (27%) groter is dan de waarde bij de gedegen afleiding.



Figuur 6 Mate waarin het $MTR_{eco, bodem}$ verschilt tussen de indicatieve methodiek en de gedegen afleiding. Weergegeven op de x-as is "waarde indicatief/waarde gedegen" ($n=15$ stoffen)

Belangrijkste verschillen

Voor de stoffen met het grootste verschil tussen de waarde uit de indicatieve en de gedegen afleiding is in Tabel 8 aangegeven welke factoren hieraan hebben bijgedragen. Tevens is per factor aangegeven of dit een 'logisch' verschil is tussen beide methodieken (groen) of dat dit een mogelijk verbeterpunt betreft (oranje met *). Om de paragrafen zelfstandig te kunnen lezen zijn in onderstaand overzicht ook de stoffen opgenomen waar tijdens het bespreken van het MTR_{bodem} (paragraaf 4.4) al op een verschil in het $MTR_{eco, bodem}$ is gewezen.

Uit dit overzicht blijkt dat het merendeel van de verschillen in het $MTR_{eco, bodem}$ wordt veroorzaakt door verschillen in het $MTR_{eco, water}$ (zie paragraaf 4.2) dan wel de waarden voor de fysisch/chemische parameters waarmee de evenwichtspartitie wordt uitgerekend (bijvoorbeeld de Henry-coëfficiënt; zie paragraaf 5.5). Er zijn maar weinig stoffen waar het $MTR_{eco, bodem}$ bij zowel de indicatieve als de gedegen afleiding door experimentele ecotoxicologische gegevens wordt bepaald, namelijk alleen de dichloorbenzenen. Een nadere studie van mogelijke verschillen door een verschillende beoordeling van dit type gegevens is daarom niet zinvol. Wel is bekeken of beide methoden nog andere verschillen laten zien bij hun voorkeur voor een MTR gebaseerd op experimentele gegevens dan wel een via evenwichtspartitie berekende waarde. Voor tien van de vijftien stoffen blijken beide methoden het $MTR_{eco, bodem}$ te baseren op het $MTR_{eco, bodem, EP}$ (en dus het $MTR_{eco, water}$ en de evenwichtspartitie). Voor chryseen en epoxiconazool is de indicatieve afleiding op experimentele gegevens gebaseerd, maar werden deze gegevens bij de gedegen afleiding als onvoldoende betrouwbaar beoordeeld. Bij imidacloprid is sprake van de omgekeerde situatie. De indicatieve afleiding is gebaseerd op een evenwichtspartieberekening ($MTR_{eco, bodem, EP} < MTR_{eco, bodem, exp}$), terwijl de gedegen methode concludeert dat er voldoende betrouwbare experimentele gegevens voorhanden zijn en daarom geen $MTR_{eco, bodem, EP}$ wordt berekend. Deze optie is niet beschreven in de indicatieve afleiding.

Tabel 8 Overzicht van de belangrijkste verschillen tussen indicatief en gedegen $MTR_{eco, bodem}$

Indicatieve / gedegen waarde	Belangrijkste factor voor geconstateerde verschil		Stof	
	Hoofdfactor	Nadere uitleg		
<0,1	Verskil in $MTR_{eco, water}$	Het $MTR_{eco, water}$ verschilt tussen indicatieve en gedegen afleiding (paragraaf 4.2) en daarmee ook het $MTR_{eco, bodem, EP}$.	chloortoluenen foramsulfuron (2-chloorbutadieen)	
	Verskil in $K_{bodem/water}$	Henry-coëfficiënt verschilt en daarmee de $K_{bodem/water}$ en dus de EP-berekening.	foramsulfuron 2-chloorbutadieen	*
	Betrouwbaarheid gegevens	Experimentele waarde gebruikt bij indicatieve afleiding werd bij gedegen als onbetrouwbaar beoordeeld. Indicatieve waarde betreft daarmee een $MTR_{eco, bodem, exp}$ en de gedegen waarde een $MTR_{eco, bodem, EP}$.	epoxiconazool chryseen ¹⁾	
0,1 – 0,2	Andere route	Bij de gedegen afleiding is doorvergiftiging het gevoeligst binnen het $MTR_{eco, bodem}$, terwijl deze in de indicatieve afleiding niet afzonderlijk wordt beoordeeld.	PFOS	*
5 – 10	Verskil in $MTR_{eco, water}$	$MTR_{eco, water}$ verschilt tussen indicatieve en gedegen afleiding (paragraaf 4.2) en daarmee ook het $MTR_{eco, bodem, EP}$.	1,1,1-trichloorethaan 1,3-dichloorpropeen	
	Verskil in $K_{bodem/water}$	Log K_{oc} en Henry-coëfficiënt verschilt en daarmee de $K_{bodem/water}$ en dus de EP-berekening.	diflufenican	

¹⁾ In de gedegen afleiding zijn wel experimentele gegevens besproken, maar zijn de betrouwbare data allemaal opgegeven als ">".

4.5.3 Aandachtspunten

- Er kan worden overwogen om ook in de indicatieve methode aan te geven wanneer de set experimentele ecotoxiciteitsgegevens voldoende betrouwbaar is voor een afleiding van het $MTR_{eco, bodem}$, waarbij het $MTR_{eco, bodem, EP}$ niet langer berekend hoeft te worden. Wel is het van belang om na te gaan of deze criteria dan ook voldoende eenduidig zijn uit te schrijven.

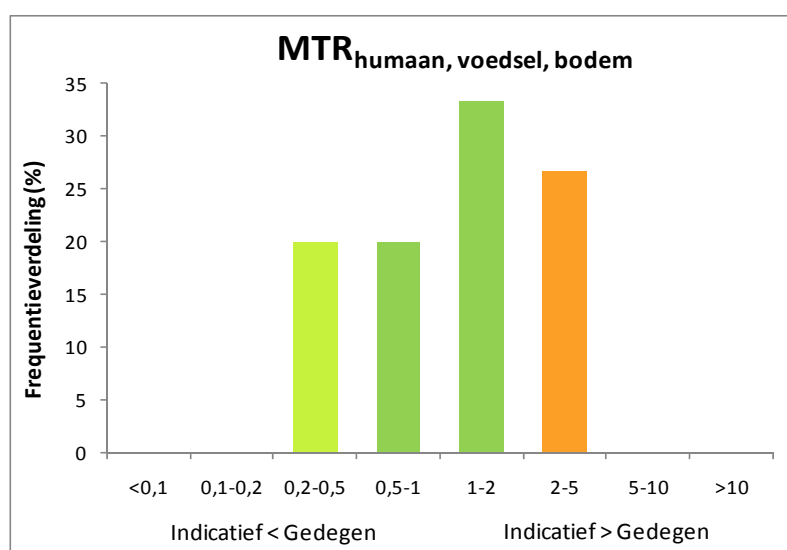
4.6 $MTR_{humaan, voedsel, bodem}$

4.6.1 Methodiek

Niet voor alle 25 stoffen was een $MTR_{humaan, voedsel, bodem}$ volgens de gedegen methode beschikbaar. Onderstaande vergelijking is daarom op vijftien stoffen gebaseerd. Het $MTR_{humaan, voedsel, bodem}$ wordt berekend op basis van het ADI (Acceptable Daily Intake) waarbij meerdere fysisch/chemische parameters in de berekeningen een rol spelen (Henry-coëfficiënt, oplosbaarheid, K_{oc} en K_{ow}). Voor de huidige indicatieve afleiding is de ADI overgenomen uit de gedegen afleiding. Eventuele verschillen in het $MTR_{humaan, voedsel, bodem}$ zijn daarom uitsluitend te wijten aan de genoemde fysisch/chemische parameters.

4.6.2 Resultaten

Figuur 7 laat een zeer goede overeenstemming tussen beide methoden zien, waarbij de MTR-waarden ten hoogste een factor 5 van elkaar verschillen. Het $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ volgens de indicatieve methode is daarbij voor negen van de vijftien stoffen (60%) groter dan de waarde volgens de gedegen afleiding. Vanwege deze goede overeenstemming zijn eventuele verschillen niet nader in deze paragraaf toegelicht. Wel is er een aanvullende exercitie uitgevoerd om de invloed van de Henry-coëfficiënt op het $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ nader te karakteriseren. De Henry-coëfficiënt blijkt namelijk tussen de indicatieve en gedegen methode soms meer dan een factor 1000 te verschillen. De resultaten van deze exercitie zijn opgenomen in paragraaf 5.5.2.



Figuur 7 Mate waarin het $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ verschilt tussen de indicatieve methodiek en de gedegen afleiding. Weergegeven op de x-as is "waarde indicatief/waarde gedegen" ($n=15$ stoffen)

4.7 MTR_{sediment} en MTR_{lucht}

Beide MTR-waarden zijn niet in de vergelijking betrokken doordat het MTR_{sediment} en het MTR_{lucht} in beide methodieken niet altijd worden afgeleid. In veel gevallen was het afleiden van een MTR_{sediment} niet vereist volgens de huidige criteria. Voor stoffen waar de afleiding wel nodig was, bleek daarnaast dat geschikte gegevens in veel gevallen ontbraken of dat de afleiding volgens de gedegen methode om andere redenen niet was uitgevoerd. Bijvoorbeeld, omdat er geen opdracht was verstrekt tot het afleiden van een MTR_{lucht} .

5 Verschillen tussen de gebruikte gegevens

5.1 Inleiding

Uit de bespreking van verschillen tussen de MTR-waarden in hoofdstuk 4 blijkt dat meerdere parameters hierbij een rol kunnen spelen. In onderstaande paragrafen worden deze daarom nader bestudeerd. Allereerst wordt in paragraaf 5.2 gekeken naar de gebruikte ecotoxicologische gegevens voor waterorganismen en in paragraaf 5.3 naar de BCF-waarden. Daarna volgen de fysisch/chemische parameters $\log K_{ow}$ en $\log K_{oc}$ (paragraaf 5.4) en de oplosbaarheid, dampdruk en Henry-coëfficiënt (paragraaf 5.5).

Bij de analyse in dit rapport staat niets over het gebruik van gegevens uit een eventueel REACH-dossier. Dit komt omdat de REACH-dossiers nog niet als bron voor gegevens zijn opgenomen in de huidige indicatieve methodiek. Daarnaast waren de gegevens uit de REACH-dossiers ten tijde van het uitvoeren van de afleidingen die in dit rapport zijn beoordeeld nog niet of beperkt beschikbaar. Wel wordt het aanbevolen om bij aanpassing van de indicatieve methodiek een (eventueel) REACH-dossier op te nemen als bron voor (eco)toxicologische en fysisch/chemische gegevens. Mogelijk kan ook worden onderzocht of de in het REACH-dossier afgeleide PNEC met of zonder extra veiligheidsfactor overgenomen kan worden als indicatieve milieurisicogrens.

5.2 Aquatische ecotoxicologie

5.2.1 Methodiek

Bij het bestuderen van de verschillen in het $MTR_{eco, water}$ (paragraaf 4.2) werd geconstateerd dat het merendeel hiervan is veroorzaakt doordat er bij de gedegen afleiding een uitgebreidere dataset is gebruikt. Deze dataset beïnvloedt zowel de "laagst aangetroffen waarde" als de veiligheidsfactor waarvan gebruik wordt gemaakt. Een directe vergelijking tussen de laagste ecotoxicologische waarde uit beide methoden is daarmee minder zinvol. De aandacht is daarom verlegd naar twee onderliggende deelvragen, namelijk:

- a) Wordt de laagste waarde zoals aangetroffen in de indicatieve afleiding ook bij de gedegen afleiding gebruikt en is die dan ook het laagste? En zo niet, waarom dan niet?
- b) Stel dat men bij de indicatieve methode over dezelfde set ecotoxicologische gegevens beschikt zou hebben, zou men dan tot eenzelfde veiligheidsfactor zijn gekomen?

Beide worden hieronder besproken.

5.2.2 Resultaten

Ad a) Wordt de laagste ecotox-waarde ook bij de gedegen afleiding gebruikt?

Bij de 25 stoffen waarvoor een $MTR_{eco, water}$ is afgeleid, is voor acht stoffen de laagste ecotoxicologische waarde hetzelfde bij de indicatieve en gedegen afleiding. Bij nog eens acht stoffen wordt de waarde wel in beide afleidingen opgenomen, maar is deze bij de gedegen afleiding niet de laagste. In drie gevallen wordt de waarde in de gedegen afleiding als "niet betrouwbaar"

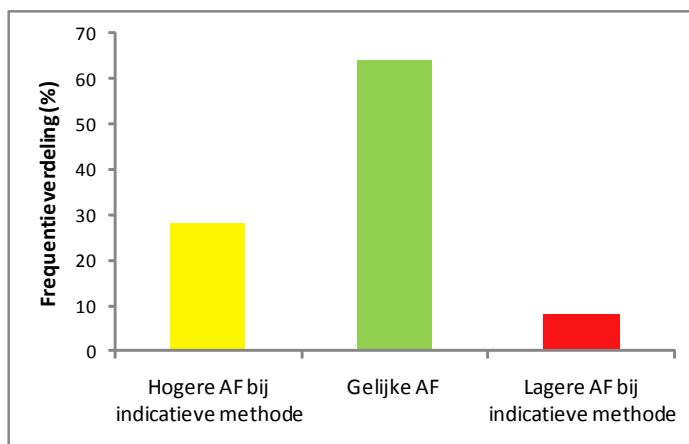
beoordeeld en in twee gevallen kon de vergelijking niet gemaakt worden, omdat de achterliggende gegevens nog niet beschikbaar zijn (chryseen) of omdat er bij de indicatieve methode geen experimentele data zijn gevonden (2-chloorbutadien). Dit zijn daarmee heel logische verschillen tussen de indicatieve en de gedegen methode, die verder weinig aandacht behoeven. Anders kan dat zijn voor de vier resterende stoffen. Voor 2,3,4-trichloorfenol, prosulfocarb, imidacloprid en diflufenican kon de waarde die bij de indicatieve methode is gebruikt, niet direct in de gedegen afleiding worden teruggevonden. Dit zou theoretisch gezien niet mogen. Wellicht is dit toch veroorzaakt door een verschil in het moment waarop de gegevens uit de verschillende databases zijn betrokken. Dit speelt zeker voor imidacloprid, aangezien met name de laatste drie jaar relatief veel nieuwe studies zijn gepubliceerd, die ten tijde van de gedegen normafleiding (uitgevoerd in 2007-2008) nog niet beschikbaar waren.

Ad b) Keuze van de veiligheidsfactor

De veiligheidsfactor wordt vooral gestuurd door de hoeveelheid ecotoxicologische gegevens. Daarnaast kan het ook gebeuren dat bij eenzelfde dataset bij de indicatieve afleiding toch een andere veiligheidsfactor is gekozen dan bij de gedegen afleiding. Dit is dan een gevolg van de methodiek of de manier waarop deze is toegepast. Om dit aspect inzichtelijk te maken, zijn de datasets die in de gedegen afleiding zijn gebruikt (dus nadat eventuele minder betrouwbare gegevens zijn verwijderd) opnieuw beoordeeld maar dan conform de methodiek van de indicatieve methode. Op deze manier kan een directe vergelijking van de veiligheidsfactoren gemaakt worden.

De resultaten hiervan zijn opgenomen in Figuur 8 en laten zien dat men bij de meeste stoffen (16 van de 25) op dezelfde veiligheidsfactor uitkomt. Bij de andere negen stoffen treden dus wel verschillen op. In zeven gevallen is bij de indicatieve methode gekozen voor een hogere veiligheidsfactor (dit heeft een lagere norm tot gevolg), terwijl voor twee stoffen de veiligheidsfactor bij de indicatieve methode lager ligt (bij beoordeling van de dataset conform Tabel 9 uit de indicatieve methodiek).

Deze verschillen kunnen begrijpelijk zijn, omdat de tabel met veiligheidsfactoren conform de INS-guidance (gedegen afleiding) enigszins verschilt van die uit de indicatieve methode. Op basis van de bevindingen en geconstateerde verschillen kan echter wel bekeken worden of een nadere aanscherping van de indicatieve methode is aan te bevelen.



Figuur 8 Mate waarin de veiligheidsfactor (Assessment Factor=AF) zou verschillen als men bij de indicatieve afleiding over dezelfde set aquatische, ecotoxicologische gegevens beschikt als bij de gedegen afleiding (n=25)

Belangrijkste verschillen

Bij het beoordelen van de verschillen in het omgaan met ecotoxicologische gegevens zijn enkele bevindingen gedaan. Deze worden hieronder gespecificeerd. Allereerst wordt nader ingegaan op de negen hierboven genoemde, afwijkende stoffen (eerst de zeven met een hogere AF bij de indicatieve methode en dan de twee met een lagere). Daarna zijn enkele andere bevindingen opgenomen.

*Stoffen waarvoor bij de indicatieve methode een hogere veiligheidsfactor (AF) wordt gekozen**1) Xyleen*

[AF_{indicatief} = 1000 over de laagste LC₅₀ óf NOEC; AF_{gedegen} = 1000 over de laagste LC₅₀]

In de gedegen afleiding wordt gebruik gemaakt van een complete basisset en een chronische NOEC voor een alg. Conform de INS-guidance wordt gekozen voor een factor 1000 over de laagste LC₅₀, ondanks het feit dat de NOEC voor de alg lager is.

Bij de indicatieve methode ontstaat een keuze. Men kan kiezen voor de regel "NOEC voor 1 van de 3 basisgroepen" en daarmee voor een factor 1000 over de laagste NOEC, of men kiest voor de regel "LC₅₀'s voor de basisset" en daarmee voor een factor 1000 over de laagste LC₅₀.⁵ Daarom wordt aanbevolen om de indicatieve methodiek op dit punt beter aan te laten sluiten op de INS-guidance.

2) Benzylchloride

[AF_{indicatief} = 1000; AF_{gedegen} = 'geen afleiding mogelijk']

In de gedegen afleiding is een dataset beschreven bestaande uit acute en chronische waarden voor *Daphnia* en een acute waarde voor vis. De basisset is daarmee niet compleet en de schrijvers concluderen dat daarmee geen betrouwbare MTR is af te leiden. Deze conclusie wijkt af van de INS-guidance waarin staat "If the base set is incomplete, but at least an acute toxicity study with *Daphnia* is available, the MPC is derived by applying an assessment factor of 1000 to the L(E)C50 for *Daphnia*. No guidance is available for cases where the base set is incomplete, and a *Daphnia* study is not available". Dit zou resulteren in een MTR_{eco water} van 3,2 µg/L (LC₅₀ *Daphnia* / 1000). Er moet echter worden opgemerkt dat deze regel in de nieuwe guidance voor het afleiden van waternormen volgens de Kaderrichtlijn Water (EC, 2011) en in de REACH-guidance (ECHA, 2008) niet meer voorkomt.

Binnen de indicatieve methodiek zou in deze situatie gekozen worden voor de regel "NOEC voor één van de drie basisgroepen" en daarmee een factor 1000 over de NOEC-waarde. Het MTR_{eco, water} kan daardoor verschillen tussen 0,1 µg/l (NOEC van 0,1 mg/l/1000; indicatief) en 3,2 µg/l (LC₅₀ *Daphnia* / 1000). Een nadere afstemming tussen de indicatieve methode en de INS-guidance is daarom ook op dit punt wenselijk. Hierbij moet wel de consistentie met zowel de REACH- als de nieuwe KRW-guidance worden meegenomen.

⁵ De optie "complete basisset + 1 chronische NOEC" is namelijk alleen voor *Daphnia* en vis gespecificeerd.

3) Chryseen

[AF_{indicatief} = 100; AF_{gedegen} = 10]

Voor chryseen zijn onder andere een acute waarde voor *Daphnia* en drie chronische NOEC-waarden voor alg, *Daphnia* en vis aanwezig (maar wel deels >oplosbaarheid). In de gedegen rapportage wordt gekozen voor een factor 10, omdat er uitgebreid beargumenteerd wordt dat acute toxiciteit nauwelijks wordt gevonden bij concentraties onder de oplosbaarheid. De indicatieve methode komt zonder die afweging uit op een factor 100 (3 NOEC's voor de basisset). Punt van aandacht hierbij is dat de acute LC₅₀-waarde het laagst is. De veiligheidsfactor toepassen op deze laagste waarde is dan logischer dan over de hogere NOEC-waarden (>oplosbaarheid). Daarom wordt aanbevolen om bij de indicatieve methode aan te geven dat de veiligheidsfactor in principe over de laagste aangetroffen waarde moet worden toegepast. Daarnaast is het wenselijk om aan te geven hoe om te gaan met ecotoxicologische waarden boven de oplosbaarheid.

4) 1,3-dichloorpropeen

[AF_{indicatief} = 100; AF_{gedegen} = 50]

Bij de gedegen afleiding zijn ondermeer de complete basisset en twee chronische NOEC-waarden voor een alg en *Daphnia* als voldoende betrouwbaar bestempeld. De MTR-waarde wordt, conform de INS-guidance, afgeleid met een veiligheidsfactor van 50 over de laagste NOEC. Voor dezelfde situatie kiest de indicatieve methode echter voor een veiligheidsfactor van 100 (aangezien in dit geval de laagste acute en laagste chronische waarden uit twee verschillende trofische niveaus stammen: vis respectievelijk alg). Verder zou het in deze situatie onduidelijk zijn geweest welke veiligheidsfactor gekozen had moeten worden als de laagste LC₅₀ aan een alg toebehoorde.

5) Diflufenican

[AF_{indicatief} = 100; AF_{gedegen} = 10]

Voor deze stof is een uitgebreide set ecotoxicologische gegevens aanwezig, waaronder acht NOEC's, voor onder andere alg, *Daphnia* en vis. In de gedegen afleiding wordt voor een veiligheidsfactor van 10 gekozen, ondermeer met de toevoeging dat diflufenican een herbicide is. Strikt genomen zou men bij de indicatieve afleiding voor een veiligheidsfactor van 100 moeten kiezen, omdat de basisset in dit geval niet compleet is (een acute waarde voor *Daphnia* ontbreekt). Deze strikte argumentatie zou heroverwogen moeten worden, omdat ze onlogisch is als er wel een complete set chronische NOEC-waarden aanwezig is. Punt van aandacht is verder ook de vraag of extra informatie (in dit geval de specifieke werking) al dan niet beargumenteerd kan worden meegenomen. Nu is wel vastgelegd dat bij het ontbreken van organismen uit de meest gevoelige groep⁶ een extra factor 10 moet worden gehanteerd. Dan zou andersom ook kunnen gelden: bij aanwezigheid van organismen uit de gevoeligste groep zou *expert judgement* wellicht ook bij de indicatieve methode tot een aanpassing kunnen leiden.

6) 1,2-dichloorethyleen

[AF_{indicatief} = 3000; AF_{gedegen} = 1000]

Voor deze stof zijn alleen acute waarden voor kreeftachtigen en vis beschikbaar. De gedegen afleiding kiest daarom voor een factor van 1000 over de laagste LC₅₀-waarde (wat in dit geval conform de INS-guidance ook de kreeftachtige is),

⁶ De aanduiding "meest gevoelige groep" kan wellicht beter worden vervangen door "potentieel gevoelige taxa".

terwijl in de indicatieve afleiding voor een factor 3000 wordt gekozen (LC₅₀ voor twee van de drie basisgroepen).

7) 2-chloorbutadieen

[AF_{indicatief} = 1000; AF_{gedegen} = 100]

De beschikbare data bestaan uit acute LC₅₀-waarden voor een alg en een vis en een chronische NOEC voor *Daphnia*. De gedegen afleiding kiest voor een factor 100 over de NOEC. Dit lijkt af te wijken van de INS-guidance waarin wordt gesteld dat "Hence, no MPC is derived following INS guidance when the base set is incomplete and when a short-term study with *Daphnia* is not available". Deze afwijking is toegepast, omdat de chronische NOEC voor *Daphnia* als vervangend voor de acute LC₅₀ wordt gezien. Volgens de indicatieve methode zou men in deze situatie kiezen voor een factor 1000 over de NOEC.

Stoffen waarvoor bij de indicatieve methode een lagere veiligheidsfactor (AF) wordt gekozen

De twee stoffen waar de indicatieve methode, op basis van de dataset uit de gedegen afleiding, voor een lagere veiligheidsfactor kan kiezen, zijn:

1) PFOS

[AF_{indicatief} = 20; AF_{gedegen} = 100]

Voor deze stof is een uitgebreide set gegevens voorhanden waaronder zowel acute als chronische data voor de drie basisgroepen (alg, *Daphnia*, vis). Normaliter zou dan gekozen worden voor een factor 10 over de laagste NOEC. In dit geval is de laagste waarde echter een LOEC. Voor die situatie is bij de gedegen afleiding voor "een factor 100 over deze LOEC" gekozen en bij de indicatieve afleiding is een NOEC berekend (LOEC gedeeld door 2)⁷ om vervolgens die waarde door 10 te delen (netto een factor 20).

2) Novaluron

[AF_{indicatief} = 10; AF_{gedegen} = 50]

De set betrouwbare gegevens bestaat uit één acute waarde voor *Daphnia* en drie chronische NOEC-waarden voor alg, *Daphnia* en vis. In de gedegen afleiding wordt als basis voor een factor 10 gekozen, maar wordt deze vervolgens verhoogd naar 50. Betrouwbare informatie over het gevoeligste organisme (insecten) ontbreekt namelijk, terwijl de wel aanwezige gegevens (veelal op basis van nominale concentraties) duiden op effecten bij lagere concentraties dan de laagst beschikbare NOEC voor *Daphnia*. Bij de indicatieve methode wordt deze afweging niet gemaakt. Strikt genomen zou, op basis van de valide set gegevens zoals gebruikt bij de gedegen afleiding, een veiligheidsfactor van 100 over de laagste NOEC gekozen worden. Bij de indicatieve afleiding zijn echter ook acute gegevens van alg, *Daphnia* en vis gevonden. Daarom is een factor 10 toegepast. In de gedegen afleiding zijn deze acute gegevens als niet betrouwbaar beoordeeld.

Net zoals hierboven bij diflufenican werd geconcludeerd, zou de indicatieve normafleiding voor novaluron tot betere resultaten leiden als eventueel beschikbare informatie over het werkingsmechanisme bij de afleiding gebruikt kan worden.

⁷ De laagste NOEC-waarde is een "kleiner dan" en dus in feite een LOEC. Specificaties hoe met deze situatie kan worden omgegaan ontbreken bij de indicatieve methode. De gekozen oplossing (LOEC/2) is één van de opties.

Andere situaties en bevindingen, die tot onduidelijkheid en verschillen kunnen leiden

1) Mag men LC₅₀- en/of NOEC-waarden opgegeven als "> ..." mee laten wegen bij het vaststellen van de veiligheidsfactor?

Het zou bijvoorbeeld mogelijk moeten zijn om op basis van "groter dan"-waarden te concluderen dat een bepaalde groep organismen waar verder geen andere gegevens voor zijn, minder gevoelig is dan de organismegroep met het laagste eindpunt. In die situatie kunnen "groter dan"-waarden wel meegewogen worden bij het vaststellen (verlagen) van de veiligheidsfactor.

2) Kunnen andere ongewervelde dieren (insecten, mollusken et cetera) een ontbrekende waarde voor *Daphnia* vervangen? En zo ja, welke groepen wel en welke niet?

Nu is gespecificeerd dat andere kreeftachtigen een ontbrekende waarde voor *Daphnia* kunnen vervangen. Dit kan wellicht worden uitgebreid, alhoewel een dekkend systeem voor alle situaties niet mogelijk is. Zo zou men bijvoorbeeld kunnen opnemen dat bij insecticiden ook gegevens voor een insect als vervanging van *Daphnia* kunnen dienen. Datzelfde geldt in het geval van een herbicide voor waterplanten als vervanging voor algen.

3) In hoeverre blijft een afleiding beperkt tot de eigenlijke stof dan wel kunnen aanverwante stoffen worden meegenomen?

Bij bromoxynil is de gedegen afleiding gericht op de octanoaatvorm, maar werd voor planten (en algen) ook de fenolvariant meegenomen (vanwege het achterliggende werkingsmechanisme). Ecotoxicologische informatie over de fenolvorm werd bij andere organismegroepen niet meegenomen. Dergelijke afwegingen vergen echter een goed inzicht in de stof en haar werkingsmechanismen. Aanpassing van de pragmatische insteek binnen de indicatieve methode wordt daarom niet aanbevolen.

4) Hoe moet worden omgegaan met somnormen, zoals stoffen met een cis-transvoorkomen of juist een ortho-, meta- en para-vorm?

Alhoewel de uiteindelijke keuze bij de aanvrager van de risicoschatting ligt, is het wenselijk om in de indicatieve methode enige toelichting op dit aspect op te nemen. Zo zou men vanuit de productie vooral gericht kunnen zijn op de ortho-vorm en die dan ook aanvragen, terwijl in het ecosysteem juist de para-vorm het giftigst kan zijn en de stof alleen als somnorm wordt geanalyseerd. Dit is echter geen specifiek probleem voor de indicatieve methode. Ook bij de gedegen afleiding moeten deze overwegingen gemaakt worden.

5) Wordt informatie over mariene soorten meegenomen tenzij de gegevens een systematisch verschil aanduiden of niet?

Vooraf bij de gewasbeschermingsmiddelen is nu sprake van een variabel patroon, dat te maken heeft met een wijziging hierover binnen de KRW-methodiek. Aanbevolen wordt om de laatste stand van zaken binnen de KRW ook in de indicatieve methode op te nemen.

6) Stel: er is een dataset met één acute LC₅₀ (bijvoorbeeld watervlo) en twee chronische NOEC-waarden (bijvoorbeeld alg en vis) én de acute LC₅₀ < laagste NOEC, welke regel wordt dan gehanteerd?

Binnen de indicatieve methode kiest men in dit geval voor een factor 300 over de laagste NOEC. Aanbevolen wordt echter om dit te wijzigen in de regel "de veiligheidsfactor altijd toepassen over de laagste waarde". Ook op andere punten binnen de indicatieve methodiek wordt tenslotte voor een worstcase-aanpak gekozen.

7) Wanneer wordt geconcludeerd dat informatie over het doelorganisme al dan niet aanwezig is?

Zijn ecotoxicologische gegevens voor *Daphnia* bijvoorbeeld te gebruiken als "doelorganisme" bij insecticiden? Idem voor fungiciden (zie bijvoorbeeld epoxiconazool). Voor dit aspect kunnen geen vuistregels worden vastgesteld die voor alle situaties dekkend zijn. Wel kunnen er enkele voorbeelden worden genoemd, waar dit wel voor kan worden aangegeven én kan ruimte worden geboden om op basis van "expert judgement" keuzes te maken. Dit kan trouwens ook betekenen dat men vastlegt wanneer een *Daphnia* juist niet als doelorganisme voor bijvoorbeeld een insecticide is te zien (bijvoorbeeld voor stoffen die werken via verstoring van de vervelling, of neonicotinoïden).

5.2.3

Aandachtspunten

De grootste verschillen in de $MTR_{eco, water}$ zijn te wijten aan een verschil in de gebruikte ecotoxicologische dataset (omvang en betrouwbaarheid). Tegelijkertijd zijn er ook meerdere situaties aangetroffen waar een nadere afstemming tussen de indicatieve en gedegen afleiding tot een verbetering bij de indicatieve afleiding leidt. De centrale aanbeveling die hieruit volgt is dat het schema waarmee binnen de indicatieve methode een veiligheidsfactor wordt gekozen beter kan worden afgestemd op de INS-methode. Dit betreft ondermeer:

- Situaties waar de afleiding binnen de indicatieve methode niet tot een eenduidige keuze leidt, moeten verbeterd worden. Het kan hiervoor nuttig blijken om de volgorde van de regels binnen de tabel om te draaien: voor de laagste AF-waarden kan men het meest specifiek aangeven aan welke voorwaarden de dataset moet voldoen; vervolgens kan men bij afwijkingen en kleinere datasets in steeds hogere AF-waarden terecht komen.
- Beoordeel in hoeverre recente wijzigingen in de REACH- en KRW-guidance ook in de INS- en indicatieve methode moeten worden opgenomen
- Specificeer dat binnen de indicatieve methode de veiligheidsfactor altijd wordt toegepast op de laagst aangetroffen waarde.
- Specificeer hoe om te gaan met ecotoxicologische waarden boven de oplosbaarheid.
- Specificeer dat een complete set chronische NOEC de 'basisset' kan vervangen.
- Bekijk welke guidance men kan geven bij het omgaan met aanvullende informatie over bijvoorbeeld het werkingsmechanisme en de vraag of representanten van de doelorganismen vertegenwoordigd zijn.
- Specificeer hoe om te gaan als de laagst aangetroffen waarde een "kleiner dan"-waarde betreft.

- Specificeer of en wanneer "groter dan"-waarden kunnen worden meegewogen bij het vaststellen van de veiligheidsfactor.
- Verstrek aanvullende guidance hoe om te gaan met situaties waarbij verschillende vormen van een stof voor kunnen komen.

5.3 BCF-waarden

5.3.1 Methodiek

Bij BCF-waarden >100 l/kg moet het $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ worden afgeleid. Dit geldt voor zowel de gedegen als de indicatieve methode. Onderstaande vergelijking van BCF-waarden is daarom alleen uitgevoerd voor de veertien stoffen waarbij ten minste in één van beide methoden een BCF-waarde >100 l/kg werd gehanteerd. Verschillen tussen de methodes kunnen dan bestaan uit:

- situaties waarin slechts bij één methode een BCF-waarde >100 l/kg is gevonden. Het $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ is dan in de ene situatie wel en in de andere niet vereist en afgeleid.
- situaties waarin bij beide methoden een BCF-waarde >100 l/kg is gevonden. Het verschil in de BCF-waarde heeft dan een direct gevolg voor de hoogte van het $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$.

Om de verschillen in BCF-waarden per stof te kunnen weergeven is de vergelijking gebaseerd op de factor, berekend door de BCF-waarde uit de gedegen afleiding te delen door de waarde uit de indicatieve afleiding. Waarden >1 (de rechterkant in Figuur 9) betreffen daarmee situaties waar de risicoschatting volgens de indicatieve methode onvoldoende veilig is, aangezien de BCF-waarde is onderschat.

Voor de indicatieve methodiek is gebruik gemaakt van BCF-waarden uit de literatuur⁸ of is een waarde berekend op basis van de QSAR, zoals in de handreiking gespecificeerd. De waarden zijn niet onderzocht op validiteit. Ook de gedegen methodiek maakt gebruik van literatuurgegevens, maar daar zijn de BCF-studies wel gescreend op betrouwbaarheid. Verschillen in BCF-waarden kunnen daarmee veroorzaakt worden door:

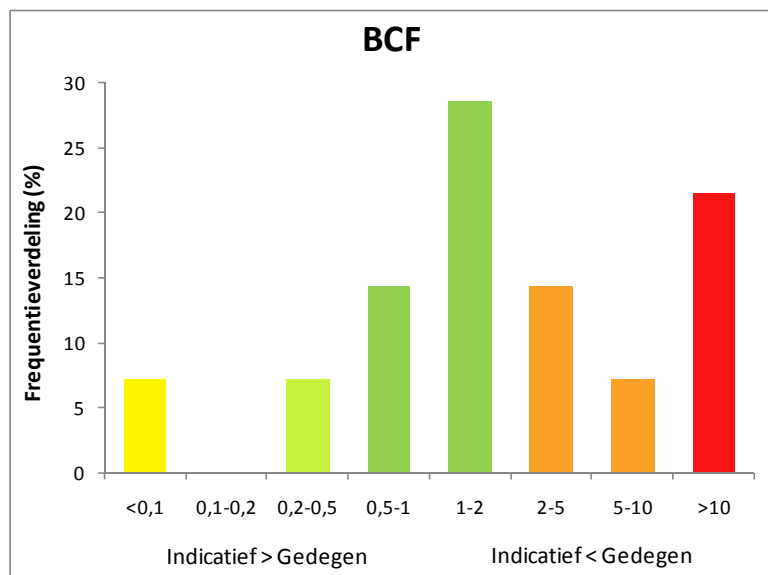
- een verschil in de omvang van de aangetroffen dataset;
- het verwerpen van onbetrouwbare gegevens bij de gedegen afleiding;
- een QSAR-waarde (indicatief) versus een experimentele waarde (gedegen);
- een verschil in de methode (gemiddelde waarde versus *worst case*; eventuele voorkeur voor data van vis ten opzichte van schelpdieren et cetera).

5.3.2 Resultaten

De verschillen zijn geïllustreerd in Figuur 9. Voor tien van de veertien stoffen (71%) was de BCF-waarde bij de indicatieve afleiding lager dan bij de gedegen afleiding. Dit leidt bij de indicatieve methodiek tot een onderschatting van de

⁸ De in de handreiking genoemde NITE-database is vernieuwd en lijkt geen BCF-waarden meer te bevatten. Als alternatief is ook gezocht in <http://ambit.sourceforge.net/euras/>. Deze site kan in de handreiking worden toegevoegd.

risicogrens voor humane blootstelling. Deze onderschatting ligt voor zes stoffen (43%) onder de factor 5 en voor drie stoffen (21%) boven de factor 10.



Figuur 9 Mate waarin de BCF verschilt tussen de indicatieve methodiek en de gedegen afleiding (op x-as: waarde uit gedegen afleiding gedeeld door indicatieve waarde) (n=14 stoffen)

Belangrijkste verschillen

Zoals in paragraaf 5.3.1 is beschreven, kunnen verschillen in BCF-waarden leiden tot i) verschillen in de noodzaak tot het al dan niet afleiden van de $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ en ii) andere uitkomsten van het $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ door een andere invoerwaarde van de BCF. Wil de tweede situatie relevant zijn, dan gaat het meestal om de wat grotere verschillen tussen de BCF-waarden van de indicatieve en de gedegen afleiding. Voor de eerste situatie kunnen heel kleine verschillen ook relevant zijn; een BCF van 99 l/kg is kleiner dan de drempelwaarde en een waarde van 101 l/kg is groter. Voor meer inzicht in deze aspecten zijn in Tabel 9 de BCF-waarden van de veertien stoffen met een $BCF > 100$ l/kg gespecificeerd. De stoffen zijn hierbij geordend op basis van aflopende BCF-waarden bij de gedegen afleiding. Uit deze tabel blijkt dat voor drie stoffen het afleiden van een $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ onder de indicatieve afleiding niet nodig was, terwijl dat bij de gedegen methode wel noodzakelijk bleek. Daarnaast is er ook één stof waar het omgekeerde gebeurt: bij de indicatieve afleiding van epoxiconazool is het $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ afgeleid, terwijl dat bij de gedegen methode niet nodig bleek. Verder blijkt uit Tabel 9 ook dat er voor drie van deze vier stoffen sprake is van meer dan een factor-10-verschil tussen de BCF-waarden van de gedegen en de indicatieve afleiding. Een dergelijk verschil (factor > 10) werd ook gevonden voor trifenyltin. Deze vijf stoffen zijn hieronder daarom nader toegelicht.

Tabel 9 Overzicht van de oplosbaarheid en BCF-waarden, zoals gehanteerd binnen de gedegen en de indicatieve methode. BCF-waarden <100 zijn groen gekleurd, omdat in die gevallen het afleiden van een $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ niet wordt getriggerd

Stofnaam	Indicatieve afleiding		Gedegen afleiding	
	Oplosbaarheid (mg/l)	BCF (l/kg)	Oplosbaarheid (mg/l)	BCF (l/kg)
Chryseen	0,001	8,2	0,002	1693
Novaluron	0,053	6019	0,003	16963
Flubendiamide	0,005	9,3	0,03	1687
Bromoxynil	0,08	7763	0,03	230
Diflufenican	0,05	1381	<0,05	1596
Chloorthalonil	0,6	2719	0,81	2300
Epoxiconazool	6,6	166	7,1	70
Trifenylnit	0,4-9	209	0,078-40	3783
Prosulfocarb	13,2	553	13	553
Dichloorbenzenen	112	442	90-124	69-728
Chloortoluenen	115	139	117-123	161
PFOS	0,12	708	370	2800
2,3,4-trichloorfenol	915	263	500	339
2,4-dichloorfenol	4600	34	4500	340

1) 2,4-dichloorfenol

[$BCF_{\text{indicatief}} = 34$; $BCF_{\text{gedegen}} = 340$]

De experimentele gegevens waar de BCF bij de indicatieve methode op is gebaseerd, zijn bij de gedegen afleiding als onbetrouwbaar beoordeeld. Daarnaast maakt de gedegen afleiding van een bredere dataset gebruik. Dat hierdoor verschillen ontstaan, is logisch en kan moeilijk voorkomen worden. Wel valt op dat er bij de gedegen afleiding voor de hoogste BCF-waarde is gekozen en niet voor een geometrisch gemiddelde, zoals beschreven in de INS-guidance. De reden voor deze afwijking zal op expert judgement zijn gebaseerd waarbij de hoogste waarde het meest betrouwbaar werd geacht, maar dit is in de afleiding niet nader toegelicht.

2) Trifenylnit

[$BCF_{\text{indicatief}} = 209$; $BCF_{\text{gedegen}} = 3783$]

Zowel de indicatieve als de gedegen afleiding maakt gebruik van een geometrisch gemiddelde van experimentele gegevens. Deze zijn ook op dezelfde onderzoekgegevens gebaseerd. Dat er toch zo'n groot verschil ontstaat komt doordat binnen de gedegen afleiding juist de lagere waarden als onbetrouwbaar zijn beoordeeld.

3) Epoxiconazool

[$BCF_{\text{indicatief}} = 166$; $BCF_{\text{gedegen}} = 70$]

In absolute zin is het verschil tussen beide BCF-waarden relatief gering (circa factor 2). Alleen ligt de ene net boven en de ander net onder de drempelwaarde van een $BCF > 100$ l/kg. Binnen de indicatieve afleiding is daarom een $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ afgeleid, alhoewel dat volgens de gedegen methode niet nodig was. Dit verschil heeft uiteindelijk ook geen invloed op het MTR_{bodem} , omdat deze MTR-waarde ook bij de indicatieve afleiding door de ecologische risico's werd bepaald.

4) Flubendiamide en chryseen

[Flubendiamide: $BCF_{\text{indicatief}} = 9,3$; $BCF_{\text{gedegen}} = 1687$; Chryseen: $BCF_{\text{indicatief}} = 8,2$; $BCF_{\text{gedegen}} = 1693$]

In beide gevallen is er bij de gedegen afleiding een uitgebreide onderbouwing, die in een indicatieve afleiding niet geëvenaard kan worden. Dit is het risico dat men neemt bij een indicatieve methode. Het leidde in deze twee gevallen echter

tot een onderschatting van de humane risico's met ten minste een factor 100. Dit is onwenselijk.

Daarom is gekeken naar de oplosbaarheden van de verschillende stoffen als mogelijke extra controlestep. De oplosbaarheden van de stoffen zijn daarom ook in Tabel 9 opgenomen. Zoals te verwachten is, worden over het algemeen de hoogste BCF-waarden bij stoffen met de laagste oplosbaarheden aangetroffen. Als vuistregel zou men bijvoorbeeld kunnen aanhouden dat men extra voorzichtig moet zijn bij een BCF-waarde <1000 l/kg, als de oplosbaarheid van de stof <1mg/l is. Aan de andere kant kan ook gekozen worden voor een worstcase-aanpak, zoals die in paragraaf 4.3 al is besproken. In dat geval wordt bij de indicatieve methode de hoogst aangetroffen BCF-waarde gebruikt, waarbij zowel experimentele gegevens van schelpdieren als vissen als de QSAR-schattingen worden gebruikt. Juist de QSAR-schattingen zijn geschikt om de hier geconstateerde verschillen bij chryseen en flubendiamide te ondervangen. Deze aanpak verdient daarom de voorkeur.

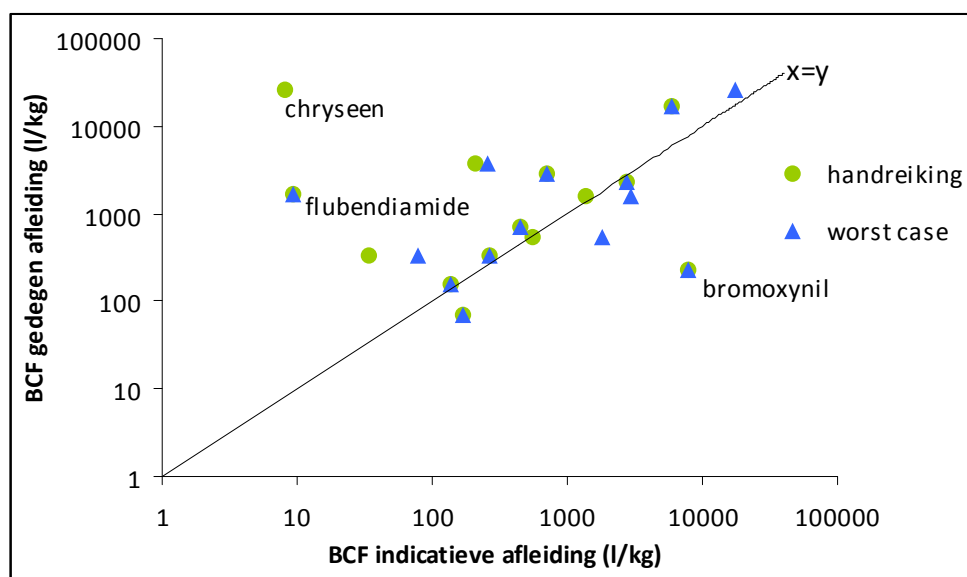
5.3.3 Aandachtspunten

- In de indicatieve methode wordt aangegeven dat de QSAR-berekening van de BCF volgens Veith et al. (1979) alleen geldig is bij een log K_{ow} tussen de 2-6. Bij hogere waarden wordt een andere QSAR voorgesteld. In de gedegen afleiding van flubendiamide staat daarentegen dat de QSAR volgens Veith et al. boven een log K_{ow} van 4 onbetrouwbaar is en vervangen kan worden door een schatting volgens Epiwin. Dit behoeft een nadere afstemming.
- Bij het afleiden van BCF-waarden binnen de indicatieve methode wordt aanbevolen om uit te gaan van een worstcase-aanpak. De hoogste BCF-waarde van zowel de experimentele gegevens (zowel schelpdier als vis) als de QSAR schatting bepaalt daarbij de waarde waarmee de afleiding plaatsvindt. De effecten hiervan zijn in Tabel 10 en Figuur 10 toegelicht. Flubendiamide (zie ook Tabel 10) blijft ook in de worstcase-aanpak sterk afwijken. Dit komt echter niet door de 'worstcase'-aanpak, maar doordat de log K_{ow} voor deze stof ook een groot verschil laat zien (1,96 vs. 4,13; zie paragraaf 5.4).

Tabel 10 Overzicht van BCF-waarden en hun herkomst

Stof	Indicatieve afleiding				Gedegen afleiding			
	BCF (l/kg)	EXP _{schelpdier}	EXP _{vis}	QSAR _{vis}	BCF (l/kg)	oorsprong		
Chryseen	8,2	8,2	?	17318	26000	EXP _{vis}	uitgebreide studie	
Flubendiamide	9,3	?	?	9,3	1687	EXP _{vis}	gem	
2,4 dichloorfenol	34	?	34	80	340	EXP _{vis}	worst case; EXP _{mosseel} = 5,8 en 59,6	
Chloortoluenen	138	?	?	138	161	QSAR	worst case ¹	
Epoxiconazool	167	?	?	167	70	EXP _{vis}	worst case	
Trifenylytin	209	?	209	258	3783	EXP _{vis}	gemiddelde	
2,3,4-trichloorfenol	263	?	?	263	339	QSAR		
Dichloorbenzenen	442	?	442	174	728	EXP _{vis}	worst case; waarden tussen 69-728	
Prosulfocarb	553	?	553	1789	553	EXP _{vis}	gemiddelde	
PFOS	708	?	?	708	2800	EXP _{vis}	uitgebreide studie	
Diflufenican	1381	?	1381	2917	1596	EXP _{vis}	worst case (van 2 waarden uit 1 studie)	
Chloorthalonil	2719	<0,1	2719	78	2300	EXP _{vis}	1 studie DAR	
Novaluron	6019	?	?	6019	16963	EXP _{vis}	berekend volgens 2-comp.-model	
Bromoxynil	7763	?	?	7762	230	EXP _{vis}	worst case	

¹ worst case van o-, m-, en p-chloortolueen; bij indicatief is gemiddeld.



Figuur 10 Een vergelijking tussen de BCF-waarde uit de indicatieve methode (x-as) en uit de gedegen methode (y-as), waarbij op de x-as zowel de oorspronkelijk BCF-waarden zijn opgenomen (groene bolletjes) als de BCF-waarden die zouden ontstaan bij de voorgestelde worstcase-aanpak (blauwe driehoekjes)

5.4 log K_{ow} en log K_{oc}

5.4.1 Methodiek

De log K_{ow} - en log K_{oc} -waarden zijn om twee redenen van belang. Ze worden gebruikt bij het berekenen van de $MTR_{waarden}$ voor bodem en ze worden gebruikt als criterium voor het meenemen van doorvergiftiging en/of humane blootstelling. Er is een goede overeenstemming tussen de indicatieve en de gedegen methode over welke bron de voorkeur heeft bij het achterhalen van deze waarden. Alleen bij de log K_{oc} zal de beschikbaarheid van experimentele gegevens bij de indicatieve methode kleiner zijn. Op voorhand is daarom te verwachten dat de verschillen niet al te groot zijn.

5.4.2 Resultaten

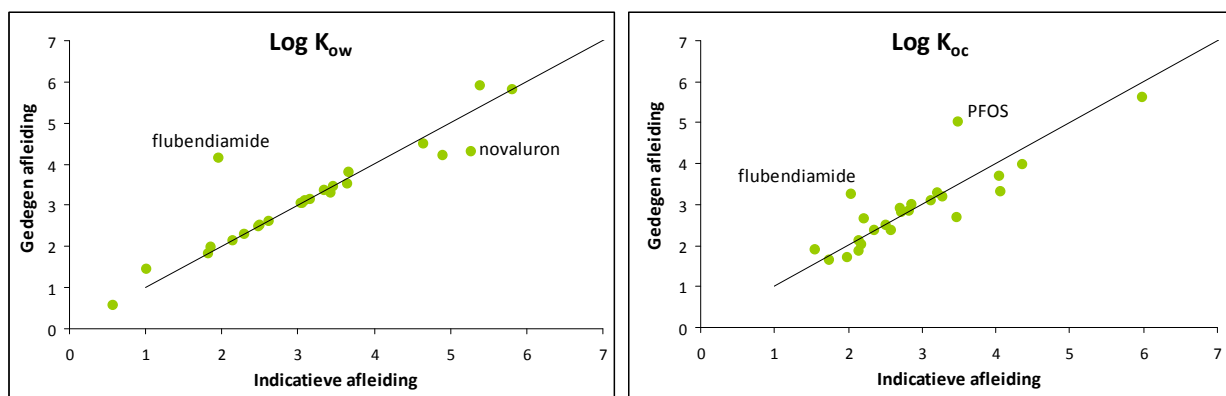
De vergelijking van de log K_{ow} - en log K_{oc} -waarden uit de indicatieve en gedegen afleiding is opgenomen in Figuur 11 in de vorm van scatterplots. De opgenomen lijn $y=x$ illustreert dat de verschillen inderdaad klein zijn. De grootste afwijking is aangetroffen voor de log K_{ow} van flubendiamide (1,96 versus 4,13). Deze en enkele andere kleinere afwijkingen worden hieronder nader toegelicht.

Het is van belang om te realiseren dat kleine verschillen soms toch een effect kunnen hebben op de afleiding van de risicogrenzen. Enkele voorbeelden:

- De log K_{ow} van diflufenican wordt geschat op 4,9 en 4,2 bij respectievelijk de indicatieve en gedegen afleiding. Dit heeft gevolgen voor het $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ omdat in het ene geval met een BMF van 2 en in het andere geval met een waarde van 1 wordt gerekend.
- Verder treden er ook verschillen op ten aanzien van het al dan niet moeten afleiden van een MTR voor sediment. Het criterium is hier een log $K_{p,susp-water} \geq 3$, wat overeenkomt met een log $K_{oc} \geq 4$. Dit levert voor drie stoffen

verschillen op, namelijk bromoxynil (log K_{oc} van 4,1 of 3,7), diflufenican (log K_{oc} van 4,1 of 3,3) en PFOS (log K_{oc} van 3,5 of 5,0 voor de indicatieve respectievelijk gedegen afleiding).

Dit soort verschillen zal echter altijd kunnen optreden en is niet te voorkomen. De effecten zijn ook relatief gering.



Figuur 11 Log K_{ow} - en log K_{oc} -waarden uit zowel de indicatieve als de gedegen afleiding

Belangrijkste verschillen

Voor sommige stoffen wordt hieronder kort stilgestaan bij enkele bevindingen.

1) Flubendiamide

Tijdens de indicatieve afleiding werd een log K_{ow} -waarde van 1,96 geschat via ClogP, maar werd tegelijkertijd ook signaleerd dat Epiwin een schatting van 4,68 genereert. Omdat de Epiwinmethode voor deze stof geen experimentele log K_{ow} oplevert maar alleen een geschatte, is de handreiking zo geïnterpreteerd dat de ClogP dan de voorkeur heeft. Vervolgens veroorzaakt deze lage log K_{ow} ook een afwijkende BCF (zie hiervoor) en log K_{oc} . Dit soort situaties is waarschijnlijk een uitzondering, die nooit helemaal is te voorkomen. Tegelijkertijd blijkt dat als ook de DAR als bron voor fysisch/chemische waarden was gebruikt het verschil sterk was verkleind. Deze dient daarom in de lijst van potentiële informatiebronnen te worden toegevoegd en mogelijk als voorkeursbron aangemerkt te worden.

2) Chloortoluenen

Ondanks het feit dat de log K_{oc} -waarden goed overeenkomen, is het opmerkelijk dat bij de indicatieve methode gebruik wordt gemaakt van een rekenkundig gemiddelde, terwijl er bij de gedegen afleiding voor een geometrisch gemiddelde wordt gekozen. Dit laatste is mogelijk een verkeerde interpretatie van de INS-guidance, omdat normaliter een geometrisch gemiddelde van de K_{oc} en niet van de log K_{oc} wordt genomen.

3) Dichloorbenzenen

In de indicatieve methode wordt gekozen voor het middelen van beschikbare log K_{oc} waarden (experimenteel en geschat), terwijl bij de gedegen afleiding juist de hoogste waarde de voorkeur blijkt te verdienen. Deze voorkeur zal op een analyse van de betrouwbaarheid gebaseerd zijn, die binnen de indicatieve methode niet wordt nagestreefd. Wel kan worden overwogen of binnen de indicatieve methode ook voor deze parameters een worstcase-aanpak de voorkeur verdient.

4) 2-chloorbutadien

Bij zowel de indicatieve als de gedegen afleiding wordt de log K_{oc} -waarde geschat via QSAR's. Opvallend is echter dat bij een vergelijkbare log K_{ow} van 2,15 de indicatieve afleiding kiest voor een QSAR voor niet-hydrofobe verbindingen en de gedegen afleiding voor hydrofobe verbindingen. Dit aspect moet dan ook nader tussen beide methoden worden afgestemd.

5) Novaluron

Bij zowel de indicatieve als de gedegen afleiding is de log K_{ow} gebaseerd op experimentele gegevens. Alleen de bron verschilt (SRC Physprop versus DAR). Dit is daarmee een logisch verschil tussen beide methoden. Zoals ook boven is aangegeven, kan de DAR worden toegevoegd aan de lijst van potentiële informatiebronnen en mogelijk als voorkeursbron aangemerkt worden.

6) PFOS

Het verschil in de log K_{oc} -waarden bij PFOS behoeft weinig aandacht, omdat die zijn gebaseerd op geschatte waarden (indicatieve methode) of gegevens uit een OECD-studie (gedegen afleiding).

5.4.3

Aandachtspunten

De belangrijkste constatering is dat de verschillen tussen beide methodes bij de keuze van log K_{ow} - en log K_{oc} -waarden relatief klein zijn. Zij vormen zelden een bepalende factor bij de verschillen in de uiteindelijke MTR's. Tegelijkertijd zijn er ook enkele bevindingen gedaan die tot vermijdbare verschillen leiden. Deze worden met onderstaande aanbevelingen voorkomen.

- Het verdient voorkeur om bij de QSAR-afleiding van de log K_{oc} -waarde in de indicatieve afleiding een grenswaarde (bijvoorbeeld op basis van de log K_{ow}) vast te leggen om zo het onderscheid tussen hydrofoob en niet-hydrofoob vast te leggen.
- Verder wordt aanbevolen om ook de keuze tussen een geometrisch en een rekenkundig gemiddelde te beschrijven.
- Tenslotte wordt aanbevolen om voor de indicatieve methode na te gaan of het terecht is dat een worstcase-aanpak bij de ene parameter (bijvoorbeeld ecotoxicologie) juist wel en bij de andere parameter (bijvoorbeeld log K_{ow} - en log K_{oc} -waarden) juist niet de voorkeur verdient.
- Aanbevolen wordt om de DAR als bron voor fysisch/chemische waarden toe te voegen aan de lijst van potentiële informatiebronnen en mogelijk aan te merken als voorkeursbron.

5.5 Oplosbaarheid, dampdruk en de Henry-coëfficiënt

5.5.1

Methodiek

Deze parameters spelen vooral een rol bij het schatten van het MTR_{bodem} . De Henry-coëfficiënt speelt verder een rol als criterium voor het al dan niet afleiden van een MTR voor het compartiment lucht. Aan dit compartiment is in deze studie weinig aandacht besteed, omdat er veelal geen gegevens voorhanden zijn.

5.5.2 Resultaten

De verschillen tussen de indicatieve en gedegen afleiding zijn in Tabel 11, Tabel 12 en Tabel 13 per parameter geïllustreerd.

Let op: Voor iedere parameter zijn de stoffen telkens opnieuw gesorteerd naar een oplopende waarde binnen de gedegen afleiding. De volgorde van de stoffen verschilt dus per parameter. Deze werkwijze heeft als voordeel dat tegelijkertijd ook geïllustreerd kan worden of het verschil tussen de indicatieve en gedegen methode afhangt van de hoogte van de parameter. De verschillen zijn daartoe door middel van een kleurcode aangeduid.

Als eerste valt op dat de verschillen in oplosbaarheid meevallen. Bij twee stoffen wordt een verschil van meer dan een factor 100 aangetroffen, terwijl dat er voor zowel de dampdruk als de Henry-coëfficiënt vijf zijn. Deze twee verschillen zijn echter wel opvallend groot. Voor PFOS, met zijn complexe milieuchemische gedrag, is dit wellicht nog voor te stellen (indicatief heeft de waarde geschat met Epiwin; gedegen gebruikt experimentele waarden), maar het verschil bij 2-chloorbutadieen is zeer opmerkelijk en lijkt bijna op een verschil in eenheden te duiden. De oorzaak kon echter niet achterhaald worden. De indicatieve waarde betreft experimentele gegevens uit Mackay en ook in de gedegen afleiding is van experimentele gegevens gebruik gemaakt.

Verder lijkt het erop dat voor zowel de dampdruk als de Henry-coëfficiënt de grootste verschillen worden aangetroffen bij stoffen met een extreme (veelal kleine) waarde. Alhoewel dit niet altijd opgaat, zijn hieronder juist deze stoffen toegelicht.

Tabel 11 Verschillen in de waarden voor de Henry-coëfficiënt tussen de indicatieve en gedegen methode ■ =verschilfactor <10; ■ =verschilfactor >10 en <100; ■ =verschilfactor >100

Stof	Henry-coëf. (Pa·m ³ /mol)		
	Gedegen	Indicatief	Factor
foramsulfuron	5,8E-12	3,8E-17	6,6E-06
imidacloprid	1,7E-10	1,7E-10	1,0
flubendiamide	2,0E-09	8,0E-09	4,0
PFOS	4,3E-07	3,5E-03	8065
epoxiconazool	4,7E-04	1,9E-03	4,0
bromoxynil	1,3E-03	3,22	2477
prosulfocarb	1,5E-02	1,3E-03	0,09
chloorthalonil	0,03	0,02	0,8
diflufenican		0,03	
chryseen	0,25	0,53	2,1
4-chloro-3-methylfenol	0,25	0,25	1,0
2,4-dichloorfenol	0,52	0,35	0,7
3-chloorfenol	0,54	0,04	0,06
2,3,4-trichloorfenol	0,66	0,40	0,6
novaluron	2,0	1,1E-04	5,5E-05
trifenylytin	10,3	0,23	0,02
1,1,2,2-tetrachloorethaan	33,9	48,5	1,4
benzylchloride	41,7	41,8	1,0
dichloorbenzenen	211	246	1,2
chloortoluenen	362	362	1,0
xylenen	651	648	1,0
1,3-dichloorpropeen	900	360	0,4
1,2-dichloorethyleen	959	413	0,4
1,1,1-trichloorethaan	1669	3620	2,2
2-chloorbutadieen	5684	2,13	3,7E-04

Tabel 12 Verschillen in de waarden voor de oplosbaarheid tussen de indicatieve en gedegen methode. ■ =verschilfactor <10; ■ =verschilfactor >10 en <100; ■ =verschilfactor >100

Stof	Oplosbaarheid (mg/l)		
	Gedegen	Indicatief	Factor
chryseen	1,6E-03	1,2E-03	0,7
novaluron	3,0E-03	5,3E-02	17,7
flubendiamide	3,0E-02	4,7E-03	0,2
bromoxynil	0,03	0,08	2,7
diflufenican	0,05	0,05	1,0
chloorthalonil	0,81	0,60	0,7
epoxiconazool	7,1	6,6	0,9
Prosulfocarb	13,0	13,2	1,0
foramsulfuron	37,0	352	9,5
dichloorbenzenen	107	112	1,0
chloortoluenen	120	115	1,0
PFOS	370	0,12	3,3E-04
xylenen		175	
2,3,4-trichloorfenol	500	915	1,8
benzylchloride	525	525	1,0
imidacloprid	610	610	1,0
2-chloorbutadien	856	964000	1126
1,3-dichloorpropeen	1080	2700	2,5
1,1,1-trichloorethaan	1300	864	0,7
1,1,2,2-tetrachloorethaan	2900	3000	1,0
4-chloro-3-methylfenol	3800	3990	1,1
1,2-dichloorethyleen	3810	3500	0,9
2,4-dichloorfenol	4500	4600	1,0
3-chloorfenol	22000	26000	1,2
trifenylytin ¹			

¹ brede range, min en max oplosbaarheid van de indicatieve methode valt in de range van de gedegen afleiding

Tabel 13 Verschillen in de waarden voor de Henry-coëfficiënt, oplosbaarheid en dampdruk tussen de indicatieve en gedegen methode. ■ = verschilfactor <10; ■ = verschilfactor >10 en <100; ■ = verschilfactor >100

Stof	Dampdruk (Pa)		
	Gedegen	Indicatief	Factor
flubendiamide	3,8E-10	5,5E-14	1,5E-04
imidacloprid	4,0E-10	4,0E-10	1,0
trifenylytin		4,7E-05	
foramsulfuron		3,0E-17	
bromoxynil	<1,0E-08	6,4E-04	>64000
chryseen	2,1E-06	4,0E-06	1,9
diflufenican	4,3E-06	4,2E-06	1,0
novaluron	1,6E-05	1,2E-08	7,6E-04
chloorthalonil	7,6E-05	8,1E-03	106
epoxiconazool	1,0E-05	3,8E-05	3,8
PFOS	3,3E-04	7,9E-07	2,4E-03
prosulfocarb	7,9E-04	6,9E-05	0,09
2,3,4-trichloorfenol	2,24	1,0	0,4
4-chloro-3-methylfenol	6,67	6,67	1,0
3-chloorfenol	30,0	16,7	0,6
2,4-dichloorfenol	68,0	15,2	0,2
dichloorbenzenen	160	176	1,1
benzylchloride	164	173	1,1
chloortoluenen	452	432	1,0
1,1,2,2-tetrachloorethaan	702	800	1,1
1,3-dichloorpropeen	4533	3333	0,7
1,1,1-trichloorethaan	16866	14604	0,9
2-chloorbutadien	33595	23194	0,7
1,2-dichloorethyleen	35197	26791	0,8
xylenen		1048	

Belangrijkste verschillen

1) Dampdruk

Voor alle stoffen is gekeken naar de oorsprong van de gegevens bij de indicatieve afleiding. Hierbij valt op dat stoffen met een dampdruk >1 Pa over het algemeen zijn gebaseerd op gegevens uit MacKay. Ook geldt voor deze stoffen dat de range waarin de waarden liggen die MacKay weergeeft vrij klein is. Dit lijken daarmee betrouwbare schattingen, hetgeen wordt bevestigd door het kleine verschil met de waarden uit de gedegen afleiding.

Anders ligt dit bij stoffen met een dampdruk <1 Pa. Voor deze stoffen kon er minder vaak van experimentele gegevens uit Mackay of Physprop gebruik worden gemaakt. Als dergelijke experimentele gegevens wel voorhanden waren, was de variatie ertussen veelal groot. De betrouwbaarheid van de getallen kan daarmee op voorhand als lager worden ingeschat, hetgeen wordt bevestigd met de over het algemeen grotere verschillen ten opzichte van de gedegen afleiding. Waar beide methoden wel goed overeenkomen (zoals bijvoorbeeld voor imidacloprid en diflufenican) lijkt dit veroorzaakt te worden door een zeer beperkt aantal experimentele gegevens (bijvoorbeeld 1), die door beide methoden worden aangehaald. Dit is daarmee eerder toeval dan dat het een goede indicatie voor een betrouwbare schatting oplevert.

Hierboven werd echter ook geconstateerd dat de invloed van de dampdruk op de uiteindelijke MTR-waarden beperkt is. Vooralsnog lijkt het daarom niet noodzakelijk om dit aspect in de indicatieve methode te verbeteren.

2) Henry-coëfficiënt

Ook voor de Henry-coëfficiënt is nagegaan waar de waarden binnen de indicatieve afleiding op zijn gebaseerd. Voor twaalf stoffen was de waarde afkomstig van experimentele gegevens of berekend (met MacKay als gegevensbron). Voor elf van deze twaalf stoffen verschilt de Henry-coëfficiënt minder dan een factor 10 met de waarde uit de gedegen afleiding. De enige uitzondering is 3-chloorfenol.

Voor de andere twaalf stoffen is de Henry-coëfficiënt berekend met de formule uit de handreiking. In dit geval verschilde de Henry-coëfficiënt voor zeven stoffen (58%) meer dan een factor 10 van de waarde uit de gedegen afleiding. Voor vijf van deze stoffen werd dit verschil beïnvloed doordat ook de dampdruk of de oplosbaarheid grote verschillen liet zien (PFOS, bromoxynil, novaluron, prosulfocarb en 2-chloorbutadien). Voor de resterende twee kan dit niet worden uitgesloten, omdat de benodigde gegevens niet achterhaald konden worden voor de gedegen afleiding of slechts als range zijn gegeven. Dit betreft trifenylytin en foramsulfuron.

Verder blijkt uit Tabel 11 dat de Henry-coëfficiënt tussen de indicatieve en de gedegen afleiding soms meerdere ordegroottes verschilt. Dit heeft mogelijk gevolgen voor de humane risico's, zoals die voor het $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ worden berekend (zie ook 4.6.2). Dit punt is daarom aanvullend onderzocht. Bij een eerste vergelijking van de verschillen bij respectievelijk de Henry-coëfficiënt en het daarmee berekende $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ lijkt de invloed van de Henry-coëfficiënt mee te vallen. Zo hebben foramsulfuron en 2-chloorbutadien ieder een verschil in de Henry-coëfficiënt van ten minste een factor 1000, terwijl het $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ minder dan een factor 3 verschilt. Voor andere stoffen met een groot tot zeer groot verschil in de Henry-coëfficiënt (zoals PFOS, bromoxynil, prosulfocarb en novaluron) was geen gedegen afleiding van het humane risico beschikbaar en kon een eventueel effect hiervan niet in bovenstaande vergelijking worden opgenomen. Op basis van de gegevens uit het rapport met de gedegen afleiding kan echter geconcludeerd worden dat het effect voor bromoxynil, prosulfocarb en novaluron ook klein is met

hoogstens een factor 2 verschil. Voor PFOS kan deze vergelijking moeilijker gemaakt worden, omdat in de gedegen methodiek is geconcludeerd dat een K_{ow} voor PFOS niet bepaald kan worden.

Vervolgens is een exercitie uitgevoerd, waarbij zowel de Henry-coëfficiënt als de K_{ow} zijn gevarieerd. Deze exercitie laat zien dat bij log K_{ow} -waarden boven de 3 de Henry-coëfficiënt bijna geen effect heeft op het berekende $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$ (ten hoogste een factor 4). Bij lagere K_{ow} waarden kunnen grotere effecten optreden, zoals een verschil van een factor 34 bij een verschil in Henry-coëfficiënt van een factor 1000 en een log K_{ow} van 1. Dit effect treedt overigens pas op bij Henry-coëfficiënten boven 10^{-4} Pa m³/mol en onder 10^{-1} Pa m³/mol. Onder deze ondergrens en boven de bovengrens lijkt een verschil in Henry-coëfficiënt ook bij lage K_{ow} geen invloed te hebben op het berekende $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$. Uit deze exercitie kan geconcludeerd worden dat de kans klein is dat een variatie in de Henry-coëfficiënt een groot effect heeft op de uiteindelijke uitkomst van het $MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$.

5.5.3 *Aandachtspunten*

Uit de uitgevoerde analyses blijkt dat de invloed van variaties in de oplosbaarheid, dampdruk en de Henry-coëfficiënt op het $MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$ klein is. Het is daarom niet nodig om deze aspecten in de indicatieve methode te verbeteren.

6 Schatting van $MTR_{eco, water}$ met QSAR's

6.1 Methodiek

Bij sommige stoffen worden er tijdens de indicatieve afleiding geen experimentele gegevens gevonden over de ecotoxicologische effecten. Om in die gevallen toch het $MTR_{eco, water}$ en daaraan gekoppelde MTR's af te kunnen leiden, biedt de indicatieve methode de mogelijkheid tot het gebruik van QSAR's.

In de huidige studie bleek dit voor één van de 25 stoffen noodzakelijk (2-chloorbutadien). Dit is een te magere basis voor een goede vergelijking. Daarom zijn aanvullend ook voor alle andere stoffen nieuwe $MTR_{eco, water}$ -waarden berekend door uitsluitend van QSAR's gebruik te maken. In dit geval is, in tegenstelling tot de methodiek, geen expert geraadpleegd bij het gebruik van de QSAR's. Dit is gedaan om te zien of het raadplegen van een expert echt noodzakelijk is.

Conform de handreiking is hierbij een extra veiligheidsfactor van 10 toegepast, tenzij de stof door Epiwin/Ecosar wordt ingedeeld onder "neutral organics". Bij het interpreteren van de QSAR's is op de betrouwbaarheid van de QSAR gelet (R^2 -waarde, aantal stoffen) alsmede op de geldigheid van de QSAR (vaak afhankelijk van de $\log K_{ow}$ -waarde van de betreffende stof).

Om de resultaten vervolgens te kunnen interpreteren zijn de via QSAR's geschatte $MTR_{eco, water}$ -waarden gedeeld door het $MTR_{eco, water}$, zoals die in de gedegen afleiding is berekend. Als deze factor kleiner is dan 1, ligt het $MTR_{eco, water}$ via QSAR's aan de veilige kant (Tabel 14). Soms is deze factor echter (veel) groter dan 1. In die gevallen wordt het $MTR_{eco, water}$ via QSAR's te hoog ingeschat. In die gevallen is het indicatieve $MTR_{eco, water}$ niet beschermend ten opzichte van de gedegen waarde.

6.2 Resultaten

De belangrijkste constatering is dat de MTR-berekening via QSAR's veel minder accuraat is dan de indicatieve afleiding door middel van experimentele gegevens. Ter vergelijking: voor 80% van de stoffen verschilt het $MTR_{eco, water}$ op basis van experimentele gegevens minder dan een factor 10 met de waarde uit de gedegen afleiding. Voor de indicatieve afleiding op basis van QSAR's is dit percentage slechts 29%. Voor een andere 29% ligt de waarde meer dan een factor 10 te laag, terwijl de QSAR-schatting voor de resterende 42% meer dan een factor 10 te hoog ligt. In totaal bleek het $MTR_{eco, water}$ via QSAR's voor 67% van de stoffen hoger te liggen dan het MTR dat bij de gedegen afleiding werd berekend.

Tabel 14 Verschil tussen het $MTR_{eco, water}$ geschat via QSAR's en de waarde volgens de gedegen afleiding uitgedrukt als factor ($MTR_{QSAR} / MTR_{gedegen}$)

	Specifiek	Specifiek, maar via Neutral organics SAR	Neutral organics
0,01-0,1	bromoxynil 4-chloro-3 methylfenol 2,3,4-trichloorfenol 3-chloorfenol 2,4-dichloorfenol 2-chloorbutadieen 1,2-dichloorethyleen		
0,1-0,5			
0,5-1,0	epoxiconazool		
1-2	1,3-dichloorpropeen	prosulfocarb	chryseen
2-10			dichloorbenzenen chloortoluenen 1,1,1-trichloorethaan
10-100	imidacloprid	novaluron	xylenen flubendiamide 1,1,2,2-tetrachloorethaan
100-1000		diflufenican	chloorthalonil
>1000			PFOS foramsulfuron trifenylytin

Belangrijkste verschillen

Om zicht te krijgen op de achterliggende oorzaken zijn in Tabel 14 de verschillende stoffen in drie categorieën ingedeeld. Allereerst zijn er stoffen die door Ecosar/Epiwin aan een bepaalde specifieke groep (zoals de fenolen, halides of amides) worden toegekend én waarvoor de bijbehorende QSAR's voldoende betrouwbaar waren om voor tenminste één organisme een waarde op te leveren (linker kolom in Tabel 14). Daarnaast zijn er stoffen die door Epiwin aan een vergelijkbare specifieke groep worden toegekend, maar waarbij de QSAR's onvoldoende betrouwbaar zijn. In dat geval wordt gebruik gemaakt van de QSAR voor *neutral organics*, waarbij de extra veiligheidsfactor 10 wél is toegepast, omdat de stof zelf geen *neutral organic* is (middelste kolom in Tabel 14). Tenslotte zijn er stoffen onderzocht die door Epiwin/Ecosar als *neutral organic* worden ingedeeld met de bijbehorende QSAR. In dit geval is de extra factor 10 conform de handreiking niet toegepast (rechter kolom in Tabel 14). Tabel 14 illustreert dat de geconstateerde verschillen tussen de QSAR-schattingen en de gedegen afleiding duidelijk met deze indeling samenhangen. Voor stoffen uit een specifieke groep met een specifieke QSAR zijn de geschatte indicatieve $MTR_{eco, water}$ -waarden bijna allemaal lager dan de gedegen norm. Het merendeel van de waarden ligt tussen een factor 10 en 100 onder de waarde volgens de gedegen afleiding. Men kan daarom overwegen om voor deze situatie de extra factor 10 (omdat er van QSAR's gebruik wordt gemaakt) te laten vervallen. De geschatte $MTR_{eco, water}$ -waarden zouden dan in dit geval minder van de waarden uit de gedegen afleiding verschillen. Het probleem is echter dat het een relatief beperkte groep stoffen is en dat de algemene geldigheid van dit voorstel nog onvoldoende onderbouwd is. Daarnaast zijn er ook enkele uitzonderingen, met name imidacloprid. Deze stof wordt door Ecosar ingedeeld onder de *alifatic amines*, maar het lijkt erop dat de specifieke werking van dit insecticide door de bestaande QSAR wordt onderschat. Dit pleit ervoor om eventueel aanwezige kennis over de specifieke werking van een stof mee te nemen bij de te maken keuzes. Alhoewel gerealiseerd wordt dat dit wellicht te ver voert voor de pragmatische aanpak binnen de indicatieve methode, zou de mogelijkheid open gelaten kunnen worden voor die situaties waar de kennis wel aanwezig is.

Voor stoffen, waarvoor de ecotoxiciteit is ingeschat met een QSAR op basis van *neutral organics*, ligt het indicatieve $MTR_{eco, water}$ altijd boven de waarde volgens de gedegen afleiding en zou de inschatting dus onvoldoende veilig zijn geweest. Voor sommige stoffen, zoals chryseen, is het verschil klein. Dit komt zeker voor chryseen overeen met andere gegevens over het milieuchemische/ecotoxicologische gedrag van de stof, die primair op een narcotisch effect duiden. Bij een groot aantal stoffen is het verschil echter groot tot zeer groot. Hierbij lijkt het weinig uit te maken of de stof door Ecosar is ingedeeld onder *neutral organics* (waarbij de extra veiligheidsfactor van 10 achterwege is gebleven) of onder een specifieke groep met een te onbetrouwbare QSAR waardoor alsnog naar de *neutral organics* werd uitgeweken, maar de extra veiligheidsfactor van 10 wel is toegepast. Wel valt op dat de grootste verschillen altijd worden aangetroffen bij stoffen waarbij men op grond van de werking van de stof ook zou moeten twifelen over de aanduiding *neutral organics*. Dit geldt voor de verschillende gewasbeschermingsmiddelen, maar zeker ook voor een stof als PFOS. Ook in de details van de afleiding vallen hierbij zaken op als 'onwaarschijnlijk'. Zo geven de QSAR's voor het insecticide novaluron aan dat de vis het gevoeligste organisme is, terwijl voor het herbicide diflufenican de watervlo het gevoeligst zou zijn. Er zijn echter ook stoffen met een specifiek gebruik (zoals het herbicide prosulfocarb) waar de inschatting met QSAR's goed blijkt uit te vallen.

6.3 Aandachtspunten

- Het is aan te bevelen om $MTR_{eco, water}$ -waarden bij de indicatieve methodiek niet langer af te leiden als Ecosar kiest voor *neutral organics*, terwijl de stof een specifiek werkingsmechanisme kent. Het invoeren van a) de extra factor 10, zoals die bij andere QSAR's ook wordt gehanteerd, of b) een extra factor 10 als het gevoeligste organisme niet lijkt te kloppen met de doelsoort, zou het probleem weliswaar iets verkleinen, maar deze aanpak lijkt nog steeds een te lage betrouwbaarheid op te leveren.
- Verder kan het gebruik van QSAR's op basis van *neutral organics* soms tot vreemde situaties leiden. Twee voorbeelden:
 - i) Stel: een stof wordt door Ecosar ingedeeld in een specifieke groep. Dan geldt hiervoor dat naarmate het aantal betrouwbare QSAR's lager is (van drie naar twee naar één) de veiligheidsfactoren toenemen van 100, 300 naar 1000 (in het geval van NOEC's). Als de QSAR's echter voor alle drie de organismegroepen (vis, alg, watervlo) onvoldoende betrouwbaar zijn, wordt uitgeweken naar *neutral organics* met veelal een complete set met betrouwbare QSAR's. De veiligheidsfactor zakt dan naar 100 (factor 10 vanwege een complete basisset acuut en chronisch en een extra factor 10 vanwege het gebruik van QSAR's), terwijl men tevens mag aannemen dat juist een stof uit een specifieke groep over additionele toxiciteit zal beschikken naast narcotische werking.
 - ii) Dit effect treedt ook op al naargelang er experimentele gegevens voorhanden zijn. Bij een slecht onderzochte stof met slechts één experimentele LC_{50} -waarde wordt een veiligheidsfactor van 10.000 toegepast. Als deze ene studie echter 'toevallig' niet was gevonden of onbetrouwbaar blijkt te zijn, kan worden uitgeweken naar de QSAR *neutral organics*, waarbij de veiligheidsfactor dan plots is gezakt naar een waarde van 10.

- Samenvattend wordt daarom aanbevolen om QSAR's op basis van *neutral organics* alleen toe te passen als er voldoende overwegingen zijn om een dergelijk werkingsmechanisme ook bij de betreffende stof te veronderstellen en op dit aspect de handreiking aan te scherpen.
- Gezien de grote verschillen tussen de gedegen MTR's en de indicatieve MTR's gebaseerd op QSAR's moet de voorwaarde in de huidige indicatieve methodiek dat altijd een expert geraadpleegd dient te worden zeker niet komen te vervallen.

7 Conclusies en aanbevelingen

7.1 Conclusies

7.1.1 MTR_{water} en MTR_{bodem}

Voor 80% van de onderzochte stoffen verschilt de indicatieve waarde minder dan een factor 10 van de MTR-waarde uit de gedegen afleiding. Tegelijkertijd leidt de indicatieve methode voor water bij 40% van de onderzochte stoffen tot een lager beschermingsniveau ($MTR_{indicatief} > MTR_{gedegen}$). Voor bodem is dit 31%. De verschillen zijn vooral veroorzaakt door verschillen in de onderliggende toxiciteitsgegevens en minder door verschillen in de toegepaste veiligheidsfactor. Voor 20% van de onderzochte stoffen is het verschil bij water groter dan een factor 5.

Zoals aangegeven in paragraaf 3.1 geven de resultaten voor deze 25 stoffen mogelijk een beperkt beeld van de accuraatheid van de indicatieve methodiek. Ze bieden desondanks voldoende aanknopingspunten voor een verdere verbetering ervan. Hieronder staan aanbevelingen waarmee het aantal en de omvang van de geconstateerde verschillen verkleind kunnen worden.

7.1.2 $MTR_{eco, water}$ en $MTR_{humaan, voedsel, water}$

De waarden volgens de indicatieve afleiding verschillen voor 80% ($MTR_{eco, water}$) dan wel 64% ($MTR_{humaan, voedsel, water}$) van de stoffen niet meer dan een factor 10 van de gedegen risicogrenzen. Hieruit blijkt het dat indicatieve MTR's gebaseerd op het $MTR_{eco, water}$ betrouwbaarder zijn dan die gebaseerd op het $MTR_{humaan, voedsel, water}$.

Het lagere percentage bij het $MTR_{humaan, voedsel, water}$ kan veroorzaakt zijn doordat de vergelijking met slechts 14 van de 25 stoffen kon worden uitgevoerd. Daarnaast speelt echter ook de BCF-waarde een belangrijke rol. Gerichte aanbevelingen voor de selectie van de te gebruiken BCF-waarden (zie onder) kunnen de foutmarge hier verbeteren en het verschil tussen $MTR_{eco, water}$ en $MTR_{humaan, voedsel, water}$ verkleinen.

7.1.3 $MTR_{eco, bodem}$ en $MTR_{humaan, voedsel, bodem}$

De waarden volgens de indicatieve afleiding verschillen voor 67% danwel 100% van de stoffen ($MTR_{eco, bodem}$ respectievelijk $MTR_{humaan, voedsel, bodem}$) minder dan een factor 10 van de waarde uit de gedegen afleiding. Dat het percentage voor het $MTR_{humaan, voedsel, bodem}$ op 100% ligt, komt omdat het MTR_{humaan} bij water en bodem op dezelfde humane waarde is gebaseerd.

Het lagere percentage bij het $MTR_{eco, bodem}$ wordt vooral veroorzaakt door eerder geconstateerde verschillen in het $MTR_{eco, water}$ alsmede de fysisch/chemische parameters. De aanbevelingen op die onderdelen zullen daarmee ook leiden tot een verbetering van de $MTR_{eco, bodem}$ -inschatting.

7.1.4 *MTR_{eco, water, QSAR}*

De afleiding van het $MTR_{eco, water}$ via QSAR's is duidelijk minder betrouwbaar dan wanneer de indicatieve afleiding wordt uitgevoerd met experimentele gegevens. Zo verschilde de QSAR-afleiding voor slechts 29% van de stoffen minder dan een factor 10. De indicatieve afleidingen voor dit rapport zijn echter niet uitgevoerd in overleg met een expert op het gebied van QSAR's. De voorwaarde in de huidige indicatieve methodiek dat altijd een expert geraadpleegd dient te worden, moet dus zeker niet komen te vervallen. Daarnaast kan expliciet aanbevolen worden om QSAR's voor ecotoxiciteit alleen te gebruiken als er geen experimentele gegevens beschikbaar zijn. Dit laatste wordt in de praktijk nu al toegepast, maar staat niet als zodanig in de handleiding vermeld.

7.1.5 *De default-waarde voor humaan*

Het gebruik van de *default*-waarde als Geschatte Humane Limietwaarde voor het berekenen van de MTR's voor humane blootstelling levert een voldoende veilige aanpak voor situaties waar geschikte gegevens ontbreken. Deze *default* levert over het algemeen wel zeer strenge milieurisicogrenzen op.

7.2 **Aanbevelingen**

7.2.1 *Op hoofdlijnen*

De indicatieve afleiding levert een risicogrens zonder inschatting van de betrouwbaarheid. Tegelijkertijd blijken meerdere van de geconstateerde verschillen terug te voeren op deelaspecten waarbij vraagtekens gezet hadden kunnen worden. Denk bijvoorbeeld aan ecotoxiciteitswaarden boven de oplosbaarheid, BCF-waarden die niet stroken met de $\log K_{ow}$ of grote variatie bij het vergelijken van meerdere bronnen. Voor de indicatieve methode voert het te ver om dergelijke aspecten allemaal uit te zoeken, maar dit soort constatering zou wel kunnen leiden tot een soort "!" bij de afgeleide MTR-waarden. De meeste indicatieve MTR-waarden blijken binnen een factor 10 van de gedegen norm te liggen; op basis hiervan zou aan de gebruiker kunnen worden aangegeven wanneer verdere actie wenselijk is. Als bijvoorbeeld een indicatief MTR overschreden wordt met maximaal een factor 10, is er een redelijke kans dat een gedegen norm niet overschreden zal worden; er zijn dan geen maatregelen nodig. Andersom is het ook mogelijk dat wanneer een monitoringswaarde een factor 10 onder het indicatief MTR ligt, er op basis van een gedegen MTR wel een risico zou zijn. In dat geval wordt het risico onderschat. Daarom wordt het advies gegeven om een gedegen afleiding te overwegen als een blootstellingsconcentratie (verkregen door monitoring of berekening) minder dan een factor 10 van de indicatieve waarde verschilt. Indien men wil dat indicatieve normen altijd of vaker lager zijn dan gedegen normen, zou het toepassen van een extra veiligheidsfactor op indicatieve milieurisicogrenzen overwogen moeten worden.

Verder wordt het aanbevolen om bij aanpassing van de indicatieve methodiek een (eventueel) REACH-dossier op te nemen als bron voor ecotoxicologische en fysisch/chemische gegevens. Mogelijk kan ook worden onderzocht of de in het REACH-dossier afgeleide PNEC met of zonder extra veiligheidsfactor overgenomen kan worden als indicatieve milieurisicogrens.

7.2.2 Op onderliggende parameters

Ecotoxicologie

- Voor de aquatisch ecotoxicologische gegevens geldt als centrale aanbeveling dat het schema waarmee binnen de indicatieve methode een veiligheidsfactor wordt gekozen beter kan worden afgestemd op de INS-methode (zie paragraaf 5.1.2 voor voorbeelden). Dit betreft ondermeer:
 - i) Situaties waar de afleiding binnen de indicatieve methode niet tot een eenduidige keuze leidt, moeten verbeterd worden. Het kan hiervoor nuttig blijken om de volgorde van de regels binnen de tabel om te draaien: voor de laagste veiligheidsfactoren kan men het meest specifiek aangeven aan welke voorwaarden de dataset moet voldoen; vervolgens kan men bij afwijkingen en kleinere datasets in steeds hogere veiligheidsfactoren terechtkomen.
 - ii) Beoordeel in hoeverre recente wijzigingen in de REACH- en KRW-guidance ook in de INS- en indicatieve methode moeten worden opgenomen
 - iii) Specificeer dat binnen de indicatieve methode de veiligheidsfactor altijd wordt toegepast op de laagst aangetroffen waarde.
 - iv) Specificeer hoe om te gaan met ecotoxicologische waarden boven de oplosbaarheid.
 - v) Specificeer dat een complete set chronische NOEC de 'basisset' kan vervangen.
 - vi) Bekijk welke guidance men kan geven bij het omgaan met aanvullende informatie over bijvoorbeeld het werkingsmechanisme en de vraag of soorten uit de potentieel gevoelige taxonomische groepen vertegenwoordigd zijn.
 - vii) Specificeer hoe om te handelen als de laagst aangetroffen waarde een "kleiner dan"-waarde betreft.
 - viii) Specificeer of en wanneer "groter dan"-waarden kunnen worden meegewogen bij het vaststellen van de veiligheidsfactor.
 - ix) Verstrek aanvullende guidance over hoe om te gaan met situaties waarbij verschillende vormen van een stof voor kunnen komen.
- Geef ook in de indicatieve methode aan wanneer de set experimentele terrestrische gegevens voldoende betrouwbaar is voor een afleiding van het $MTR_{eco, bodem}$, waarbij het $MTR_{eco, bodem, EP}$ niet langer berekend hoeft te worden. Hiervoor is het nodig te definiëren aan welke minimumeisen een dataset moet voldoen wat betreft het aantal eindpunten en de verschillende taxonomische groepen die zijn vertegenwoordigd. Het is van belang om hierbij na te gaan of deze criteria voldoende eenduidig zijn uit te schrijven.

Humaan, voedsel, water

- In de indicatieve methode dient het gebruik van de zogenaamde R-zinnen als afzonderlijke triggers te vervallen (c.q. laatste twee regels uit Tabel 6 van de indicatieve methodiek verwijderen) (zie paragraaf 4.3.3).
- Gebruik van de *default*-waarde dient op het rapportageformulier expliciet vermeld te worden (zie paragraaf 4.3.2).

BCF-waarden

- Heroverweeg de prioritering van experimentele gegevens voor schelpdieren versus geschatte waarden voor vis. Bij voorkeur overstappen op gebruiken van de worstcasewaarde van a) schelpdier, b) experimentele data van vis en c) QSAR-data voor vis (zie paragraaf 5.3.3).

- Stem de voorwaarden voor de keuze van de juiste QSAR (op basis van de $\log K_{ow}$) af met het gebruik binnen de gedegen afleiding (zie paragraaf 5.3.3).
- Voeg het gebruik van eventueel beschikbare DAR's, naast het al bestaande gebruik als bron voor ecotoxicologische gegevens, ook toe als bron voor informatie voor zowel BCF-waarden als fysisch/chemische parameters. Neem daarbij tevens een derde site op in de referenties:
<http://dar.efsa.europa.eu/dar-web/provision>

Log K_{ow} en log K_{oc}

- De verschillen voor beide parameters tussen de indicatieve en gedegen afleiding zijn over het algemeen klein. *Fine-tuning* zou zich moeten richten op aspecten als het verschil tussen rekenkundig en geometrisch gemiddelde, grenswaarden waarbinnen een bepaalde QSAR gekozen wordt of voorwaarden waarbij voor een *worst case* gekozen moet worden (zie paragraaf 5.4.3).

Dampdruk en Henry-coëfficiënt

- Zie paragraaf 4.4.2, het is niet nodig om deze aspecten in de indicatieve methode te verbeteren.

Stoffen met een specifiek werkingsmechanisme

- Het wordt aanbevolen om bij herziening van de handreiking een lijst op te nemen met stofgroepen of stoffen met bepaalde karakteristieken waarvoor beter geen indicatieve milieurisicogrens afgeleid kan worden (zie paragraaf 4.4.3).

QSAR's voor ecotoxiciteit

- De adviezen over de te gebruiken veiligheidsfactoren bij het gebruik van QSAR's voor ecotoxiciteit dienen aangepast te worden (zie paragraaf 6.3).
- Met name de keuze van Epiwin voor *neutral organics*, terwijl het gebruik van de stof op een specifieke werking duidt (bijvoorbeeld allerlei gewasbeschermingsmiddelen), zorgt voor grote verschillen. Deze QSAR's zouden daarom alleen moeten worden toegepast als men vanuit de chemische eigenschappen narcose als werkingsmechanisme kan onderbouwen of tenminste aanvoelen.
- QSAR's voor ecotoxiciteit moeten alleen gebruikt worden als er geen experimentele gegevens beschikbaar zijn.
- De voorwaarde in de huidige indicatieve methodiek dat altijd een expert geraadpleegd dient te worden, moet gehandhaafd blijven.

Referenties

- Bodar CWM, Lijzen JPA, Moermond CTA, Peijnenburg WJGM, Smit CE, Verbruggen EMJ, Janssen MPM. 2011. Advies risicogrenzen grond en grondwater voor PFOS. Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 601050002.
- de Jong FMW, Posthuma-Doodeman CJAM, Verbruggen EMJ. 2007. Ecotoxicologically based environmental risk limits for several volatile aliphatic hydrocarbons. Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 60178002.
- EC. 2011. Technical guidance for deriving environmental quality standards. Final draft. Brussels, European Commission.
- ECHA. 2008. Guidance on information requirements and chemical safety assessment. Helsinki, European Chemicals Agency.
- Fleuren RHLJ, Janssen PJCM, de Poorter LRM. 2009. Environmental risk limits for twelvé volatile aliphatic hydrocarbons - An update considering human-toxicological data. Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 601782013.
- Moermond CTA, Heugens EHW. 2009a. Environmental risk limits for 2,4-dichlorophenol. Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 601714007.
- Moermond CTA, Heugens EHW. 2009b. Environmental risk limits for monochlorophenols, 4-chloro-3-methylphenol and aminochlorophenol. Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 601714006.
- Moermond CTA, Heugens EHW. 2009c. Environmental risk limits for trichlorophenols. Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 601714005.
- Moermond CTA, Verbruggen EMJ, Smit CE. 2010. Environmental risk limits for PFOS : A proposal for water quality standards in accordance with the Water Framework Directive Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 601714013.
- PAN. 2010. PAN Pesticide Database. Pesticide Action Network.
- Posthuma-Doodeman CJAM. 2008. Environmental risk limits for imidacloprid. Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 601716018.
- PPDB. 2010. Pesticides Properties Database. University of Hertfordshire.
- Smit CE. 2010. Environmental risk limits for benzyl chloride and benzyldene chloride. Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 601714016.
- US EPA. 2009. EPI Suite (computer programma). Versie 4.0. Washington, DC, U.S. Environmental Protection Agency (EPA) Office of Pollution Prevention Toxics and Syracuse Research Company (SRC).
- US EPA. 2010. Ecotox database. U.S. Environmental Protection Agency.
- van Herwijnen R, Janssen PJCM, Haverkamp THA, de Poorter LRM. 2009. Handreiking voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen (Interimversie 2009). Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 601782025.
- van Herwijnen R, Moermond CTA, van Vlaardingen PLA, de Jong FMW, Verbruggen EMJ, Smit CE. in prep. Environmental risk limits for triphenyltin in water. Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu.

- van Herwijnen R, van Leeuwen LC. 2009. Environmental risk limits for chlorotoluenes (*o*-chlorotoluene, *m*-chlorotoluene, *p*-chlorotoluene). Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 601782021.
- van Leeuwen LC. 2009. Environmental risk limits for xylene (*m*-xylene, *o*-xylene and *p*-xylene). Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 601782011.
- van Leeuwen LC, Moermond CTA, van der Veen M, Van Herwijnen R. 2010. Environmental risk limits for various chlorobenzenes. Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 601782020.
- Veith GD, DeFoe DL, Bergstedt BV. 1979. Measuring and estimating the bioconcentration factor of chemicals in fish. *Journal of the Fisheries Research Board of Canada*. 36: 1040-1048.
- Verbruggen EMJ, van Herwijnen R. in prep. Environmental risk limits for chrysene. Bilthoven, Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu.

Bijlage 1

Verklaring van afkortingen

ADI	Acceptable Daily Intake – aanvaardbare dagelijkse inname
AF	Assessmentfactor of veiligheidsfactor
BCF	Bioncentratiefactor
BMF	Biomagnificatiefactor
Ctgb	College voor de toelating van gewasbeschermingsmiddelen en biociden
DAR	Draft Assessment Report – Rapport voor de toelating van gewasbeschermingsmiddelen
Ecosar	Programma waarmee door middel van QSAR's schattingen gedaan worden van waarden voor ecotoxiciteit
GHL	Geschatte Humane Limietwaarde – waarde gebruikt bij de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen
INS	(Inter)nationale Normstelling Stoffen
$K_{\text{bodem/water}}$	Verdelingscoëfficiënt tussen bodem en water
K_{oc}	Verdelingscoëfficiënt tussen organisch koolstof en water
K_{ow}	Verdelingscoëfficiënt tussen octanol en water
KRW	KaderRichtlijn Water
LC ₅₀	Concentratie waarbij 50% van de blootgestelde organismen sterft
LOEC	Lowest Observed Effect Concentration – laagste concentratie waarbij bij een bepaald organisme een (toxiciteits)effect wordt waargenomen
MTR_{water}	Algemeen MTR voor oppervlaktewater
MTR	Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau
MTR_{bodem}	Algemeen MTR voor bodem
$MTR_{\text{DV, water}}$	MTR voor oppervlaktewater gebaseerd op de consumptie van waterorganismen door vogels en zoogdieren
$MTR_{\text{dw, water}}$	MTR geldend voor oppervlaktewater dat gebruikt wordt voor de bereiding van drinkwater
$MTR_{\text{eco, bodem}}$	MTR voor bodem gebaseerd op directe toxiciteit voor bodemorganismen
$MTR_{\text{eco, bodem, EP}}$	$MTR_{\text{eco, bodem}}$ berekend uit het $MTR_{\text{eco, water}}$ met behulp van evenwichtspartitie
$MTR_{\text{eco, bodem, exp}}$	$MTR_{\text{eco, bodem}}$ berekend uit experimentele gegevens
$MTR_{\text{eco, water}}$	MTR voor oppervlaktewater gebaseerd op directe toxiciteit voor waterorganismen
$MTR_{\text{humaan, voedsel, bodem}}$	MTR voor bodem gebaseerd op de consumptie van groenten, vlees en melk door mensen
$MTR_{\text{humaan, voedsel, water}}$	MTR voor oppervlaktewater gebaseerd op de consumptie van visserijproducten door mensen
MTR_{lucht}	Algemeen MTR voor lucht
MTR_{sediment}	Algemeen MTR voor sediment
NOEC	No Observed Effect Concentration – concentratie waarbij bij een bepaald organisme geen (toxiciteits)effecten worden waargenomen

PNEC	Predicted No Effect Concentration – concentratie waarbij geen effect wordt verwacht
QSAR	Quantitative Structure Acitivity Relationship – vergelijking voor de inschatting van een stofeigenschap op de basis van andere stofeigenschappen
SSD	Statistische extrapolatiemethode

J. Postma | R. Keijzers | R. van Herwijnen

RIVM rapport 601357006/2011

Dit is een uitgave van:

**Rijksinstituut voor Volksgezondheid
en Milieu**

Postbus 1 | 3720 BA Bilthoven
www.rivm.nl

januari 2012

