

RIVM Rapport 609023005/2003

**Bepaling ad-hoc humane risicogrenzen voor
sediment en oppervlaktewater i.v.m. ‘calamiteit
Vredestein’ te Enschede**

P.F. Otte, P.J.C.M. Janssen, M.T.M. van Raaij,
F.A. Swartjes

Deze rapportage werd opgesteld in opdracht van het RIZA, in het kader van het project M/609023, ‘Ad hoc ondersteuning andere overheden’

Abstract

This report describes the derivation of ad hoc maximum permissible risk (MPR) levels for a list of 23 compounds released into the environment during a fire in a tyre factory in Enschede in 2003. Risk levels for these compounds in sediment and water (used for drinking-water production) were also determined and concentrations of the compounds in fish estimated. Because of the urgency of the situation, a *quick scan* was performed to derive MPRs from the toxicological data. The scan was also applied to the physico-chemical parameters needed as input for the SEDISOIL exposure model. The available data was sufficient to derive MPRs and determine risk levels in sediment and water for 11 compounds. Due to lack of formalisation, the resulting values are provisional. For this reason, they are only applicable to this specific situation.

Samenvatting

Bij een brand bij de bandenfabriek Vredestein te Enschede op 22 augustus 2003 zijn met het bluswater verschillende verbindingen in het milieu terechtgekomen. Het RIZA heeft een lijst met 23 verbindingen geleverd die in het oppervlaktewater zijn aangetroffen, met de vraag om de humane risico's van deze verbindingen in te schatten.

Meer specifiek hield dit in:

- Het afleiden van ad hoc waarden MTR-humaan;
- Het afleiden van risicogrenzen voor sediment voor het standaardscenario viswater;
- Het afleiden van risicogrenzen voor water ten behoeve van drinkwaterbereiding;
- Het schatten van de concentratie in vis.

Aangezien de risicogrenzen op korte termijn gewenst zijn is een *quick scan* uitgevoerd van de beschikbare toxicologische literatuur over deze verbindingen. De aangetroffen data zijn onderworpen aan een summiere beoordeling en waar mogelijk zijn er provisionele MTR's (Maximaal Toelaatbaar Risico) voor humane blootstelling afgeleid. Voor 12 verbindingen waren de toxicologische gegevens zelfs niet toereikend om een provisioneel MTR vast te stellen. Voor de overige 11 verbindingen is voor de benodigde fysisch-chemische gegevens eveneens een *quick scan* uitgevoerd. Op basis van de provisionele MTR's en de fysisch-chemische gegevens zijn vervolgens blootstellingsscenario's doorgerekend om humane risicogrenzen af te leiden. Hierbij is gebruik gemaakt van het blootstellingsmodel SEDISOIL. De resulterende risicogrenzen worden door het RIZA gebruikt ter beoordeling van de situatie bij Vredestein te Enschede.

De berekende risicogrenzen zijn niet formeel vastgesteld, zoals voor interventiewaarden het geval is, en hebben derhalve geen wettelijke status. Ze moeten worden beschouwd als zogenaamde ad hoc risicogrenzen, en zijn derhalve alleen toepasbaar voor de beoordeling van het geval Vredestein-Enschede. Volgens de Wet bodembescherming dient bij overschrijding van (ad hoc) risicogrenzen een actuele (locatie-specifieke) risicobeoordeling te volgen middels een Nader Onderzoek (NO). Gezien de relatief beperkte betrouwbaarheid van de afgeleide risicogrenzen moet worden overwogen dit ook te doen indien de gevonden concentraties de ad hoc risicogrenswaarden benaderen.

Inhoud

1. Inleiding	5
2. Ad hoc waarden MTR-humaan	6
3. Ad hoc humane risicogrenzen voor sediment	8
3.1 Berekening en status risicogrenzen	8
3.2 Vaststelling fysisch-chemische gegevens	9
3.2.1 <i>Koc</i>	10
3.3 Resultaten	11
3.4 Overwegingen	13
4. Afleiden ad-hoc humane risicogrenzen voor water ten behoeve van drinkwaterbereiding	14
4.1 Berekening en status risicogrenzen	14
4.2 Resultaten	15
5. Conclusies	16
Referenties	17
Bijlage A: Profielen waaruit de provisionele waarden voor MTR-humaan zijn afgeleid	18
Bijlage B1: Invoergegevens standaard scenario	28
Bijlage B2: Invoergegevens scenario viswater	30
Bijlage C: A short introduction to EPIWIN	32
Bijlage D: Overzicht modelberekeningen (inclusief gebruikte parameterwaarden)	33

1. Inleiding

Bij een brand bij de bandenfabriek Vredestein te Enschede op 22 augustus 2003, zijn met het bluswater verschillende verbindingen in het milieu terechtgekomen. Het RIZA heeft een lijst geleverd met verbindingen die in het oppervlaktewater zijn aangetroffen. Dit betrof in eerste instantie 14 verbindingen en in later stadium 9 additionele verbindingen (lijst Vredestein). Voor deze verbindingen waren op korte termijn risicogrenzen gewenst.

De volgende werkzaamheden werden opgedragen aan het RIVM:

- Het inschatten van humane risico's van de contaminanten

Meer specifiek hield dit in:

- Het afleiden van waarden MTR-humaan;
- Het afleiden van risicogrenzen voor sediment voor het standaardscenario en het scenario viswater;
- Het afleiden van risicogrenzen voor water ten behoeve van drinkwaterbereiding;
- Het schatten van de concentratie in vis.

In dit rapport wordt het resultaat van deze werkzaamheden beschreven. Het vormt de achtergrondrapportage bij de getallen die in de loop van het project aan RIZA zijn geleverd. De resultaten zelf zijn in diverse tabellen weergegeven.

2. Ad hoc waarden MTR-humaan

Aangezien de risicogrenzen op korte termijn gewenst zijn is een *quick scan* uitgevoerd van de beschikbare toxicologische literatuur over deze verbindingen. De aangetroffen data zijn onderworpen aan een summiere beoordeling en waar mogelijk zijn er provisionele MTR- (Maximaal Toelaatbaar Risico) waarden voor humane blootstelling afgeleid. Deze waarden zijn nodig om de risicogrenzen te kunnen berekenen, zoals wordt uitgelegd in paragraaf 3.1. Uitdrukkelijk wordt er op gewezen dat alle gepresenteerde waarden gebaseerd zijn op slechts een beperkte beoordeling van de data en derhalve slechts een *voorlopig* karakter hebben. De resultaten van de beoordeling zijn weergegeven in Tabel 2.1. In Bijlage A zijn de profielen weergegeven, waarop de provisionele waarden voor de MTR-humaan gebaseerd zijn.

Tabel 2.1: Provisionele waarden voor het Maximaal Toelaatbaar Risico voor blootstelling (MTR-humaan)

Verbinding	CAS-nummer	Provisionele MTR-humaan ($\mu\text{g}/\text{kg}$ lichaamsgewicht/ dag)
N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine	101-72-4	19
Trimethyldihydroquinoline	26780-96-1	130
2-2-Dibenzothiazyl-disulfide	120-78-5	94 ^a
2-Mercaptobenzothiazol	149-30-4	94
N-Tert-butyl-2-benzothiazolsulfenamiel	95-31-8	Geen waarde afleidbaar
2-Morfolino(thio)benzothiazol	102-77-2	Geen waarde afleidbaar
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide	95-33-0	28
4,4,15,15-Tetra-ethoxy-3,16-dioxy-8,9,10,11-tetrathia-4,15-disila- octodecaan	40372-72-3	Geen waarde afleidbaar
Hexamethoxymethylmelamine	3089-11-0	Geen waarde afleidbaar
Resorcinol	108-46-3	20
Hexamethylenetetramine	100-97-0	150
N-(cyclohexylthio)ftalimide (PVI)	17796-82-6	7.5
Difenyguanidine	102-06-7	10
Benzothiazol	95-16-9	Geen waarde afleidbaar
2-Benzothiazolamine	136-95-8	Geen waarde afleidbaar
Kodaflex TXIB	6846-50-0	Geen waarde afleidbaar
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolamine	Onbekend	Verbinding niet identificeerbaar
2-(Methylthio)-benzothiazol	615-22-5	Groeps-MTR-humaan o.b.v. 2-mercaptobenzothiazol; 94 ^a
2-(Sec-butylamino)-benzothiazol	Onbekend	Verbinding niet identificeerbaar
N-butylbenzeensulfonamide	3622-84-2	Geen waarde afleidbaar
Fenazine	92-82-0	Geen waarde afleidbaar
Phytol	7541-49-3	Geen waarde afleidbaar
1-Decene	872-05-9	1 mg/kg lg/dag

^aDeze waarden zijn gebaseerd op data voor 2-mercaptobenzothiazol.

Zoals uit de tabel blijkt, zijn voor diverse verbindingen de data ontoereikend voor zelfs een provisionele MTR-humaan. Voor N-tert-butyl-2-benzothiazolsulfenamiel en 2-morfolino(thio)benzothiazol kan de provisionele MTR-humaan voor 2-mercaptobenzothiazol gebruikt worden als grove indicatie. Dit op basis van de verwantschap in chemische structuur. De stof benzothiazol, waarvoor nauwelijks gegevens beschikbaar zijn, zou eveneens met dezelfde MTR-humaan kunnen worden beoordeeld. Dit leidt tot een som-MTR van 94 $\mu\text{g}/\text{kg}$ lichaamsgewicht/dag voor vier van de vijf benzothiazolen op de lijst. Alleen N-cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide heeft

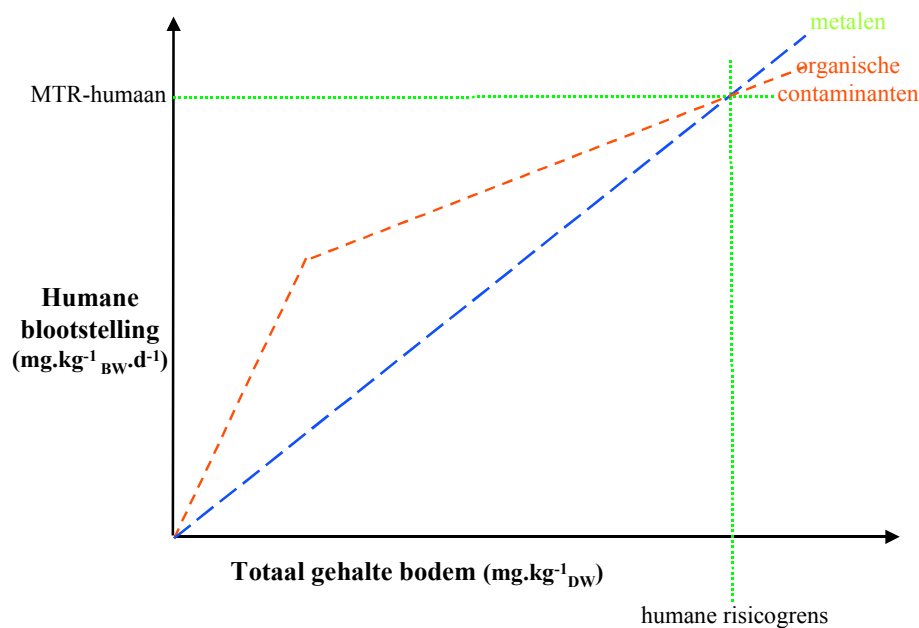
een aparte voorlopige MTR-humaan (van 28 $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{lichaamsgewicht}}/\text{dag}$). Voor hexamethoxymethylmelamine en 4,4,15,15-tetra-ethoxy-3,16-dioxy-8,9,10,11-tetrathia-4,15-disila-octodecaan bevinden zich in bovenstaande groep geen verwante verbindingen. Daarom zijn voor deze twee verbindingen geen MTR's afgeleid.

Een opvallend punt, tot slot, is dat vele stoffen sensibiliserend zijn voor de huid. Dermaal contact met verontreinigd sediment zou dus kunnen leiden tot overgevoeligheidsreacties.

3. Ad hoc humane risicogrenzen voor sediment

3.1 Berekening en status risicogrenzen

De humane blootstelling (levenslang gemiddeld) aan contaminanten afkomstig van verontreinigde waterbodem wordt gekwantificeerd met het blootstellingsmodel SEDISOIL 1999. Wanneer deze blootstelling wordt getoetst aan het MTR-humaan (zie hoofdstuk 2) kunnen humane risicogrenzen voor waterbodems worden afgeleid (zie Fig. 3.1).



Figuur 3.1: *Bepaling humane risicogrenzen op basis van blootstelling en MTR-humaan*

Wordt de humane risicogrens overschreden dan is er sprake van een mogelijk ontoelaatbaar risico (een potentieel risico). Als de concentraties in het sediment zich onder deze risicogrens bevinden dan zijn ontoelaatbare risico's onwaarschijnlijk. Belangrijk hierbij is wel om te realiseren dat de humane risicogrenzen geldig zijn voor een bepaald scenario (gebruik) en voor een standaard (water)bodem.

Op verzoek van het RIZA zijn humane risicogrenzen voor sediment afgeleid voor de volgende scenario's.

- 1) Standaard scenario: 'de mogelijkheid van recreatie en visvangst'.
Hierbij vindt blootstelling plaats via 6 routes; ingestie van sediment, ingestie van oppervlaktewater, ingestie van zwevend stof, dermale opname van verontreinigingen in sediment, dermale opname van verontreinigingen in oppervlaktewater en beperkte consumptie van zelfgevangen vis (10% van de totale visconsumptie afkomstig uit eigen vangst).

- 2) Scenario 'viswater, sportvisserij'
- Hierbij vindt blootstelling uitsluitend plaats via de consumptie van zelfgevangen vis (50% van de totale visconsumptie afkomstig uit eigen vangst). Voor viswater zijn op verzoek van RIZA twee gevallen doorgerekend: a) consumptie van verschillende vissoorten met een gemiddeld vetpercentage van 5% en b) consumptie van paling met een gemiddeld vetpercentage van 20%.

Een uitvoerige beschrijving van deze scenario's wordt gegeven in RIZA-werkdocument 2000.084x (Otte et al., 2000). In Bijlage B worden de verschillende parameterwaarden gegeven.

De voor deze rapportage berekende risicogrenzen zijn niet formeel vastgesteld, zoals voor interventiewaarden het geval is, en hebben derhalve geen wettelijke status. Ze moeten worden beschouwd als zogenaamde ad hoc risicogrenzen, zoals verwoord in de Circulaire streef- en interventiewaarden (VROM, 2000; Bijlage D, 'Richtlijn voor het omgaan met niet-genormeerde stoffen') en zijn derhalve alleen toepasbaar voor de beoordeling van het geval Vredestein-Enschede.

Voor de modelmatige afleiding van de risicogrenzen zijn voor elke verbinding fysisch-chemische gegevens benodigd. Gezien de urgentie van de oplevering van risicogrenzen, zoals gevraagd door het RIZA, zijn deze fysisch-chemische gegevens middels een *quick scan* vastgesteld. Bovendien is voor het vaststellen van de risicogrenzen niet een breed adviestraject doorlopen, hetgeen voor interventiewaarden wel gebeurt. Daarom moet er op worden gewezen dat de gepresenteerde risicogrenzen een relatief beperkte betrouwbaarheid hebben.

3.2 Vaststelling fysisch-chemische gegevens

Voor de vaststelling van de fysisch-chemische parameters is gebruik gemaakt van EPIWIN versie 3.10 (zie voor nadere informatie over EPIWIN Bijlage C).

Het gaat hierbij om:

- molecuulgewicht;
- wateroplosbaarheid;
- log Kow;
- log Koc;
- pKa (voor dissociërende stoffen).

De BCF (BioConcentratieFactor) voor vis wordt voor organische stoffen op basis van de Kow berekend (Otte et al., 2000).

EPIWIN stelt de verschillende parameterwaarden vast op basis van structuur en middels verschillende QSARS. Indien experimentele data beschikbaar zijn, worden deze vermeld. Bij de vaststelling zijn beide waarden (experimenteel en middels QSARS) in overweging genomen. Overigens waren voor de meeste stoffen geen experimentele waarden beschikbaar.

De oplosbaarheid (meestal gegeven voor 25 °C) is gecorrigeerd voor standaard bodemtemperatuur (10 °C).

Voor resorcinol waren bij de evaluatie van de interventiewaarden (Otte et al., 2001; Lijzen et al., 2001) fysisch-chemische parameterwaarden vastgesteld. Hiervan is

gebruik gemaakt voor de afleiding van de risicogrenzen. De geselecteerde fysisch-chemische parameterwaarden zijn gegeven in de overzichten van de modelberekeningen in Bijlage D.

3.2.1 Koc

De keuze van de Koc verdient speciale aandacht. De berekening van de risicogrenzen is zeer gevoelig voor deze parameter. Daarbij is de parameter moeilijk nauwkeurig te bepalen, met name als het gaat om een waarde voor de generieke risicobeoordeling zoals gebruikelijk is voor de afleiding van normen. In het kader van de evaluatie van de interventiewaarden werd in overleg met een aantal 'gebruikers' van Koc's binnen het RIVM en het RIZA een procedure afgesproken om Koc's te bepalen, zodat in ieder geval de uniformiteit van de selectiemethodiek gegarandeerd was (Otte, 2001, Appendix 3). Echter leunt deze procedure zwaar op *gemeten* Koc's, welke voor de betreffende stoffen geheel ontbreken. Daarom wordt de Koc voor de verbindingen op de lijst Vredestein geheel bepaald door een *berekende* Koc en is de waarde voor de Koc derhalve afhankelijk van de gekozen rekenprocedure. Aanbevolen wordt de Koc te berekenen op basis van Sabljic et al. (1995) uitgaande van een betrouwbare (gemeten) Kow-waarde. Voor de lijst Vredestein is dit echter moeilijk vanwege twee oorzaken:

- er zijn geen betrouwbare Kow's, deze zijn namelijk afgeleid op basis van Molecuul topologie via SMILES notatie;
- de stoffen zijn lastig in te delen in een van de 19 chemische groepen waarvoor Sabljic een relatie tussen Koc en Kow heeft opgesteld.

Bovendien kan de validiteit van de relaties voor deze verbindingen alleen worden beoordeeld na bestudering van de wijze waarop deze relaties tot stand zijn gekomen (Welke stoffen zijn gebruikt voor het fitten van de relaties? Wat is de onzekerheid?). Daarom is besloten te conformeren aan de benadering van EPIWIN versie 1.66 (Meylan et al., 1992). De resulterende Koc-waarden zijn weergegeven in Tabel 3.1.

Uit de evaluatie Interventiewaarden bleek al dat verschillen van 1 log-eenheid tussen gemeten of berekende Koc-waarden geen uitzondering zijn. Indien voldoende data beschikbaar zijn, wordt een standaard afwijking van 0,3 tot 0,5 log-eenheid frequent vastgesteld. Echter, soms worden grotere verschillen vertoond en aangezien voor bepaalde stoffen de berekening van de risicogrenzen zeer gevoelig is voor de Koc kan dit resulteren in aanzienlijke verschillen in berekende risicogrenzen. Indien in het onderhavige geval de Koc's bepaald zouden zijn op basis van de Kow – Koc-relaties van Lyman (1990) dan resulteert voor sommige verbindingen een Koc die ruim één log-eenheid verschilt van de gebruikte Koc. Aangezien de waarde van de Koc voor sommige scenario's lineair doorwerkt in de berekende risicogrens voor sediment, zou voor deze verbindingen eveneens een risicogrens volgen die ruim een factor 10 zou verschillen. Dit betekent derhalve dat de betrouwbaarheid van de risicogrenzen relatief beperkt is en de risicogrenzen met zorgvuldigheid dienen te worden gehanteerd.

Tabel 3.1 Log Koc-waarden

Verbinding	log Koc
N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine	4,10
Trimethyldihydroquinoline	2,96
2-2Dibenzothiazylidisulfide	5,88
2-Mercaptobenzothiazol	3,21
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide	4,28
Resorcinol	1,14
Hexamethylenetetramine	1,74
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)	2,89
Difenylguanidine	3,77
2-(Methylthio)-benzothiazolamine	3,49
1-Decene	3,24

3.3 Resultaten

De berekende ad hoc risicogrenzen voor het standaardscenario zijn weergegeven in Tabel 3.2. De berekende ad hoc risicogrenzen voor het scenario viswater zijn weergegeven in Tabel 3.3. In deze tabellen zijn tevens de berekende concentraties in vis weergegeven (uitgedrukt op basis van versgewicht). Zoals vermeld in paragraaf 3.1 zijn voor het scenario viswater grenswaarden berekend voor 'gemiddelde' vis met een vetpercentage van 5% (Tabel 3.3.a) en voor paling, met een vetpercentage van 20% (Tabel 3.3.b).

Tabel 3.2. Gehalten in vis (C vis) en ad hoc risicogrenzen voor sediment voor het standaardscenario (mogelijkheid voor recreatie in combinatie met de mogelijkheid tot visvangst)

Verbinding	C vis (mg/kg v.g.)	Ad hoc risicogrens sediment (mg/kg d.s.)
N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine	167	1288
Trimethyldihydroquinoline	1297	688
2-2Dibenzothiazylidisulfide	534	10235
2-Mercaptobenzothiazol	652	2805
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide	297	2205
Resorcinol	54	191
Hexamethylenetetramine	1170	8150
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)	214	34
Difenylguanidine	75	658
2-(Methylthio)-benzothiazolamine	866	2221
1-Decene	5410	>100.000

Tabel 3.3.a: Gehalten in vis (C vis) en ad hoc risicogrenzen voor sediment voor scenario viswater, gemiddelde vis, gemiddelde vis vetpercentage 5 %

Verbinding	C vis (mg/kg v.g.)	Ad hoc risicogrens sediment (mg/kg d.s.)
N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine	47	364
Trimethyldihydroquinoline	323	171
2-2Dibenzothiazylsulfide	234	4480
2-Mercaptobenzothiazol	234	1006
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide	70	517
Resorcinol	50	175
Hexamethylenetetramine	< 373	< 2600
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)	19	3
Difenylguanidine	25	219
2-(Methylthio)-benzothiazolamine	234	600
1-Decene	2490	20

Tabel 3.3. b: Gehalten in vis (C vis) en ad hoc risicogrenzen voor sediment voor scenario viswater, alleen paling (paling vetpercentage 20 %)

Verbinding	C vis (mg/kg v.g.)	Ad hoc risicogrens sediment (mg/kg d.s.)
N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine	47	91
Trimethyldihydroquinoline	323	43
2-2Dibenzothiazylsulfide	234	1120
2-Mercaptobenzothiazol	234	252
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide	70	129
Resorcinol	50	44
Hexamethylenetetramine	< 373	< 649
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)	19	0,73
Difenylguanidine	25	55
2-(Methylthio)-benzothiazolamine	234	150
1-Decene	2490	5

De log Kow voor hexamethylenetetramine is < 0 (-4,15). Dit betekent dat er theoretisch geen sprake is van accumulatie in het vetweefsel van de vis. Dit is echter niet waarschijnlijk. Bovendien is de geldigheid van het gebruikte modelconcept voor de accumulatie van stoffen in vis volgens Veith et al. (1979) gelimiteerd tot verbindingen met een low Kow tussen 1 en 6. Stoffen met lagere Kow zullen derhalve in ieder geval een lagere concentratie in vis hebben dan voor verbindingen met een log Kow = 1. Om deze reden is het gehalte in vis behorend bij een low Kow van 1 in Tabel 3.2 opgenomen als bovengrens voor het vis-gehalte. Hieruit resulteert tevens een bovengrens voor de risicogrens.

3.4 Overwegingen

Bij het toepassen van de ad hoc risicogrenzen zijn de volgende overwegingen van belang:

- a) Bij de toetsing aan de ad hoc risicogrenzen dient gecorrigeerd te worden voor het locatie-specifieke organisch stofgehalte volgens de onderstaande formule

$$RG_{Vredestein} = RG_{sb} \times (\%organische\ stof / 10)$$

Waarin

$RG_{Vredestein}$	=	risicogrens voor Vredestein (mg/kgd.s.)
RG_{sb}	=	risicogrens voor standaard bodem (mg/kgd.s.)
%organische stof	=	gemeten percentage organisch stof (%)

- b) Volgens de Wet bodembescherming dient bij overschrijding van de ad hoc risicogrenzen een actuele risicobeoordeling te volgen middels een Nader Onderzoek (NO). Gezien het voorlopige (ad-hoc) karakter van de afgeleide risicogrenzen moet worden overwogen dit ook te doen indien de gevonden concentraties de ad hoc risicogrenzen benaderen.
- c) Bij uitvoering van een NO verdient het aanbeveling de modelberekeningen aan te vullen met locatie-specifieke metingen. Zinnige aanvullingen zijn: actuele vis- en waterconcentratie en een locatie-specifieke Koc-bepaling.

4. Afleiden ad-hoc humane risicogrens voor water ten behoeve van drinkwaterbereiding

4.1 Berekening en status risicogrenzen

Als water (oppervlaktewater of grondwater) gebruikt wordt voor de bereiding van drinkwater wordt ervan uitgegaan dat de levenslang gemiddelde blootstelling aan contaminanten het MTR-humaan niet mag worden overschreden.

De maximaal toelaatbare concentratie in het grond- of oppervlaktewater is bepaald, waarbij de volgende randvoorwaarden van toepassing zijn:

- 1) Het betreffende grond- of oppervlaktewater wordt direct (zonder zuivering) gebruikt als drinkwater.
- 2) Er wordt aangenomen dat een volwassene 2 liter water per dag en een kind 1 liter water per dag drinkt, gedurende respectievelijk 64 en 6 jaar.
- 3) Toelaatbaar is een levenslang gemiddelde blootstelling gelijk aan het MTR-humaan. Indien de concentratie van het water onder de maximaal toelaatbare concentratie in het grond- of oppervlaktewater ligt, wordt het MTR-humaan dus niet overschreden en is er geen sprake van ontoelaatbare risico's voor de mens.

De maximale toelaatbare concentratie in het grond- of oppervlaktewater wordt als volgt berekend:

$$C_{\max} = \text{MTR-humaan} * 70 / ((64 * \text{QDW_A} / \text{BWA}) + (6 * \text{QDW_C} / \text{BWC})) * 1000$$

[Vgl. 1]

waarin

C _{max} :	maximaal toelaatbare concentratie van de contaminant het grond- of oppervlaktewater [$\mu\text{g/l}$]
MTR-humaan:	het maximaal toelaatbaar risico voor blootstelling [$\text{mg/kg}_{\text{BW}}/\text{dag}$]
QDW_A:	consumptiehoeveelheid water volwassene [2 liter]
QDW_C:	consumptiehoeveelheid water kind [1 liter]
BWA:	lichaamsgewicht volwassene [70 kg]
BWC:	lichaamsgewicht kind [15 kg]

Deze maximaal toelaatbare concentratie in het grond- of oppervlaktewater moet worden beschouwd als de kwaliteit waaraan water (oppervlaktewater of grondwater) moet voldoen om tot bereiding van drinkwater over te gaan. Voor toetsing van drinkwater zelf geldt een andere procedure. Hierbij wordt er van uitgegaan dat er naast inname via drinkwater tevens blootstelling aan de betreffende verbindingen plaatsvindt via andere bronnen, ter grootte van 90% van het MTR-humaan. Bovendien worden bij de toetsing van drinkwater traditioneel iets andere consumptiehoeveelheden drinkwater verondersteld. Resumerend liggen de resulterende drinkwaternormen globaal een factor 10 lager dan de maximaal toelaatbare concentratie in het grond- of oppervlaktewater.

De berekende risicogrenzen zijn niet formeel vastgesteld, zoals voor interventiewaarden het geval is, en hebben derhalve geen wettelijke status.

4.2 Resultaten

Tabel 4.1 geeft voor de 11 verbindingen waarvoor ad hoc MTR-waarden zijn afgeleid, de maximale toelaatbare concentraties in het grond- of oppervlaktewater ten behoeve van drinkwaterbereiding.

Tabel 4.1: Maximale toelaatbare concentraties in het grond- of oppervlaktewater [$\mu\text{g/l}$] ten behoeve van drinkwaterbereiding.

Verbinding	Cmax grond- of oppervlaktewater direct gebruikt als drinkwater ($\mu\text{g/l}$)
N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine	597
Trimethyldihydroquinoline	4083
2-2Dibenzothiazylsulfide	2953
2-Mercaptobenzothiazol	2953
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide	879
Resorcinol	628
Hexamethylenetetramine	4712
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)	236
Difenyguanidine	314
2-(Methylthio)-benzothiazol	2953
1-Decene	31410

5. Conclusies

Naar aanleiding van het verzoek tot afleiden van ad hoc risicogrenzen in het kader van de calamiteit Vredestein zijn de volgende conclusies te trekken:

- Voor 11 van de 23 verbindingen is een ad hoc risicogrens afgeleid voor sedimenten, voor de volgende scenarios:
 - het standaardscenario (Tabel 3.1);
 - het scenario viswater, voor ‘gemiddelde’ vis met een vetpercentage van 5% (Tabel 3.2b) en voor paling, met een vetpercentage van 20% (Tabel 3.2b).
- Voor 11 van de 23 verbindingen is een ad hoc risicogrens afgeleid voor de maximale toelaatbare concentraties in het grond- of oppervlaktewater, gebaseerd op water ten behoeve van drinkwaterbereiding (Tabel 4.1).
- De berekende risicogrenzen zijn niet formeel vastgesteld, zoals voor interventiewaarden het geval is, en hebben derhalve geen wettelijke status. Ze moeten worden beschouwd als zogenaamde ad hoc risicogrenzen en zijn derhalve alleen toepasbaar voor de beoordeling van het geval Vredestein-Enschede. Volgens de Wet bodembescherming dient bij overschrijding van (ad hoc) risicogrenzen een actuele (locatie-specifieke) risicobeoordeling te volgen middels een Nader Onderzoek (NO). Gezien de relatief beperkte betrouwbaarheid van de afgeleide risicogrenzen moet worden overwogen dit ook te doen indien de gevonden concentraties de ad hoc risicogrenzen benaderen.

Referenties

- Baars AJ, Theelen RMC, Janssen PJCM, Hesse JM, Van Apeldoorn ME, Meijerink MCM, Verdam L, Zeilmaker MJ (2001). Re-evaluation of human-toxicological Maximum Permissible Risk levels. National Institute of Public Health and the Environment. Bilthoven, RIVM rapport 711701025.
- Lijzen J.P.A., A.J. Baars, P.F. Otte, M.G.J. Rikken, F.A. Swartjes, E.M.J. Verbruggen and A.P. van Wezel (2001). Technical evaluation of the Intervention Values for Soil/sediment and Groundwater. Bilthoven. RIVM rapport 711701023.
- Lyman WJ, Reehl WF, Rosenblatt DH. 1990. Handbook of Chemical Property Estimation Methods: Environmental Behavior of Organic Compounds. American Chemical Society, Washington, DC, USA.
- Meylan, W., P.H. Howard and R.S. Boethling, Molecular Topology/Fragment Contribution Method for Predicting Soil Sorption Coefficients, Environ. Sci. Technol. 26: 1560-7 (1992)
- Otte, P., M. van Elswijk, M. Bleijenberg, F. Swartjes, K. van der Guchte. 2000. Berekening van humane risicogrenzen voor waterbodems. Discussienota. Riza-werkdocument 2000.084x. Lelystad
- Otte, P.F, J.P.A. Lijzen, J.G. Otte, F.A. Swartjes and C.W. Versluijs (2001). Evaluation and revision of the CSOIL parameter set. Bilthoven. RIVM rapport 711701021.
- Sabljić, A.; Güsten, H.; Verhaar, H.; Hermens, J. Chemosphere 1995, 31, 4489-4514.
- Veith, G.D., D.L. Defoe and B.V. Bergstedt. 1979. Measuring and estimating the bioconcentration factor of chemicals on fish. J. Fish. Res. Board Can. 36:1040-1048.
- VROM, 2000. Circulaire streefwaarden en interventiewaarden bodemsanering. DBO/1999226863, 4 februari 2000.

Bijlage A: Profielen waaruit de provisionele waarden voor MTR-humaan zijn afgeleid

N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine **CAS-nummer: 147-47-7**

Deze stof is nooit beoordeeld door het RIVM. Op internationaal niveau is er een voorlopige beoordeling in het kader van het High Production Volume Chemicals programma van de OECD uit 2000. De orale LD50 bedraagt 800 mg/kg lichaamsgewicht. De stof is niet irriterend voor huid en ogen maar wel sensibiliserend. Dit laatste blijkt zowel uit proefdierstudies als humane studies. In een semichronische orale toxiciteitstudie werden geen toxische effecten waargenomen (NOAEL 57 mg/kg lichaamsgewicht/dag) hetgeen ook het geval was in een orale 28-dagenstudie (NOAEL 223 mg/kg lichaamsgewicht/dag). In genotoxiciteitsstudies bleek de stof chromosoomafwijkingen te induceren zowel zonder metabole activering als met. In vitro studies voor genmutaties (Amestest, zoogdiercellen) lieten geen effect zien. Carcinogeniteitsgegevens zijn niet beschikbaar. In de enige beschikbare teratogeniteitsstudie trad vertraagde verbening van het skelet op bij doseringsniveaus waarbij zich geen maternale effecten voordeden (NOAEL voor nakomelingen 62,5 mg/kg lichaamsgewicht/dag, NOAEL voor moederdieren 125 mg/kg lichaamsgewicht).

Evaluatie:

Voor deze stof wijzen de data op een mogelijk genotoxisch risico in vivo en daarmee op een mogelijk carcinogeen risico. Dit is een indicatie voor het in acht nemen van een extra ruime veiligheidsmarge bij het afleiden van een voorlopige MTR-humaan. Op basis van de NOAEL van 57 mg/lichaamsgewicht kan met een onzekerheidsfactor van 3000 (10 voor de extrapolatie van proefdier naar mens, 10 voor een extrapolatie naar het gevoelige individu in de populatie, en een somfactor van 30 voor de beperkte studieduur en het mogelijke genotoxische risico) een MTR-humaan worden afgeleid van 19 µg/kg lichaamsgewicht. Dit is een voorlopige waarde gebaseerd op een beperkte beoordeling van de data.

Trimethyldihydroquinoline **CAS-nummer: 26780-96-1**

Het opgegeven CAS-nummer is voor de polymeer van deze stof. De gegevens voor monomeer (CAS 147-47-7) zijn ook relevant. De polymeer noch de monomeer zijn ooit beoordeeld door het RIVM. Ook op internationaal niveau is er geen bruikbare beoordeling beschikbaar. Met de polymeer zijn diverse studies uitgevoerd door de industrie (o.a. chronisch oraal rat, oraal teratogeniteit rat). Deze studies zijn weliswaar opgenomen in de TSCATS-data base van de US-EPA, maar informatie over de resultaten ontbreekt zodat ze niet gebruikt kunnen worden als basis voor een MTR-humaan.

Ook met de monomeer zijn toxicologische experimenten uitgevoerd en wel in het kader van het Amerikaanse National Toxicology Program. Deze proeven waren

gericht op het detecteren van een eventueel carcinogeen effect van de stof via de dermale toedieningsroute. Daartoe werden dermale 90-dagen- en 2-jaarsproeven in rat en muis uitgevoerd een 1-jaars initiatie-promotiestudie in muizen ook met dermale toediening. In de 90-dagenproef in ratten werden naast geringe lokale effecten op de plaats van toediening alleen verhoogde levergewichten waargenomen bij 200 mg/kg lichaamsgewicht/dag (NOAEL 100 mg/kg lichaamsgewicht). In 90-dagenstudie in muizen werden helemaal geen systemische effecten waargenomen (NOAEL 50 mg/kg lichaamsgewicht/dag, 5 dagen/week). Voor wat betreft de mogelijke carcinogene werking leverden de 2-jaarsexperimenten alleen in mannelijke ratten een beperkt bewijs voor een dergelijke werking. De incidenties van de tubulaire adenoma's en carcinoma's waren namelijk in geringe mate verhoogd bij alle doseringsniveaus (36-100 mg/kg lichaamsgewicht/dag, 5 dagen/week). In vrouwelijke ratten en mannelijke en vrouwelijke muizen deden zich geen verhoogde tumorincidenties voor. Ook het dermale initiatie/promotie-experiment was negatief. Niet-carcinogene effecten in de 2-jaarsproef in de rat waren beperkt tot een geringe groeivertraging bij 60 en 100 mg/kg lichaamsgewicht (NOAEL 36 mg/kg lichaamsgewicht, 5 dagen per week). Bij de muis werden in het 2-jaarsexperiment geen niet-carcinogene effecten gevonden (NOAEL 100 mg/kg lichaamsgewicht/dag, 5 dagen/week).

Eveneens in het kader van de US-NTP zijn genotoxiciteitsexperimenten uitgevoerd. Dit was inclusief een in vivo micronucleusstudie. De resultaten wezen niet op een genotoxische werking.

Evaluatie

De toxicologische gegevens voor de polymeer, waaronder een orale 2-jaarsproef in ratten, zouden een goede basis zijn voor een MTR-humaan. Deze gegevens zijn echter niet beschikbaar zodat teruggevallen moet worden op data voor de monomeer. Uit de dermale NTP-studies met de monomeer komt beperkt bewijs voor een carcinogene werking. Op basis hiervan en ook gezien het klaarblijkelijke ontbreken van genotoxische activiteit, luidt de eindconclusie dat de stof waarschijnlijk geen carcinogeen risico met zich meebrengt. Op basis van de dermale NOAEL uit de 2-jaarproef in de rat van 36 mg/kg lichaamsgewicht kan een voorlopige MTR-humaan berekend worden. Uit absorptiestudies blijkt dat de stof dermaal goed wordt opgenomen in het lichaam. Twee studies hiernaar lieten absorptiepercentages van respectievelijk 50 en 80% zien. Ook via de orale route wordt de stof goed opgenomen (exact percentage onbekend). Aannemend dat het orale absorptiepercentage 100% bedraagt (waarschijnlijk enigszins een overschatting) en dermale 50%, kan de dermale NOAEL van 36 mg/kg lichaamsgewicht omgerekend worden naar een orale NOAEL van 18 mg/kg lichaamsgewicht. Deze NOAEL geldt voor 5 dagen week. Omrekening naar 7 dagen week levert op: 13 mg/kg lichaamsgewicht. Met een onzekerheidsfactor van 100 (10 voor de extrapolatie van proefdier naar mens, 10 voor een extrapolatie naar het gevoelige individu in de populatie) kan een MTR-humaan worden afgeleid van 130 µg/kg lichaamsgewicht. Dit is voorlopige waarde gebaseerd op een beperkte beoordeling van de data.

2-2-Dibenzothiazylidisulfide**CAS-nummer: 120-78-5****en****2-Mercaptobenzothiazol****CAS-nummer: 149-30-4**

2-2-Dibenzothiazylidisulfide is een dimeer. De gegevens voor de monomeer (2-mercaptobenzothiazol; CAS 149-30-4) zijn ook relevant. De dimeer is nooit beoordeeld door het RIVM. Wel is er een voorlopige evaluatie uitgevoerd in OECD-kader. De conclusie daarin was dat geen overall-NOAEL afgeleid kan worden en dat op basis van de data voor de monomeer zulks waarschijnlijk wel mogelijk is (conclusie OECD). De monomeer is nooit beoordeeld door het RIVM maar wel door het Scientific Committee van de EU, waarin het RIVM participeerde.

Met de monomeer zijn toxicologische experimenten uitgevoerd in het kader van het Amerikaanse National Toxicology Program (NTP TR 332). De acute orale toxiciteit van de monomeer is gering (2000-3000 mg/kg lg in ratten en muizen). De stof wordt beschouwd als sensibiliserend bij huidcontact. In een beperkte 13-weeken studie door de NTP werden effecten gevonden op het levergewicht bij de laagst geteste dosis van 188 mg/kg lg/dag. In de 2-jaar chronische NTP studie met ratten worden reeds bij de laagste geteste dosis (188 mg/kg lg/dag in vrouwtjes) diverse typen tumoren waargenomen (mononucleaire cel-leukemieën, hypofysetumoren, pheochromocytoma's, e.a.). In de chronische studie met muizen worden eveneens bij de laagst geteste dosis (375 mg/kg lg/dag) diverse typen tumoren waargenomen (levertumoren, hypofysetumoren, en lymfomen in het bloedvormende systeem). Echter, niet voor alle typen tumoren wordt een duidelijke dosis response relatie waargenomen. In een BUA rapport over deze stof wordt slechts in een zeer beperkte summary gemeld dat een dosis van 3 mg/kg lg/dag gedurende 1 jaar geen nadelige effecten zou veroorzaken in honden.

In de evaluatie door het EU-SCF wordt een overall-NOAEL van 94 mg/kg lg/dag opgegeven uit een 90-dagen orale studie in muizen.

Met betrekking tot genotoxiciteit vermeldt het NTP rapport dat 2-mercaptobenzothiazol niet mutageen is in bacteriën maar wel in testen met zoogdiercellen. In vitro, induceert de stof ook SCE's en aberraties hoewel een in vivo studie micronucleustest negatief was. Voor de dimeer wordt in het NTP rapport ook een positieve mutageniteitstudie vermeld. Vergelijkbare effecten worden gemeld in een summary van de BUA (BUA no. 74, 1991).

Naar aanleiding van de positieve genotoxiciteit voor de monomeer zijn in 1993 additionele studies gevraagd door het EU-SCF, te weten een in vivo UDS test en een extra genmutatietest in muizenlymfoomcellen in vitro. De resultaten van deze studies waren negatief, zo vermeldt de recentste beoordeling door het EU-SCF (uit 2000).

Evaluatie

Het totale pakket van de beschikbare bewijsmateriaal met betrekking genotoxiciteit wijst op afwezigheid van genotoxische potentie. De inductie van diverse typen tumoren in ratten en muizen wijst wel op carcinogene potentie door de stof. Het ontstaan van deze tumoren wordt verondersteld te verlopen via een niet-genotoxisch

mechanisme. Op basis daarvan is het mogelijk een MTR-humaan te berekenen via de drempelwaarde-benadering uitgaande van een overall-NOAEL. Het EU-SCF achtte de beschikbare data onvoldoende voor het berekenen van een definitieve TDI (MTR-humaan). Deze commissie concludeerde wel dat de overall-NOAEL van 94 mg/kg lg/dag uit een 90-dagen orale studie in muizen in principe bruikbaar was in de risicobeoordeling. Op basis van deze NOAEL kan met behulp van een totale onzekerheidsfactor van 1000 (10 voor de extrapolatie van proefdier naar mens, 10 voor een extrapolatie naar het gevoelige individu in de populatie, 10 voor beperkingen in de dataset) een voorlopige MTR-humaan berekend worden van 94 µg/kg lg/dag.

Dit is een voorlopige MTR-humaan omdat de oorspronkelijke studies niet in detail zijn beoordeeld.

Deze norm wordt ook voor de dimeer 2-2-dibenzothiazylidisulfide van toepassing geacht.

N tert-butyl 2 benzothiazolsulfenamiel (TBBS)

CAS-nummer: 95-31-8

Deze stof is nooit eerder beoordeeld door het RIVM. Er zijn ook geen bruikbare evaluaties van andere internationale organisaties beschikbaar. In de TSCATS database zijn enkele genotoxiciteitstudies opgenomen. Uit de beknopte summaries valt op te maken dat de stof waarschijnlijk mutageen is in zoogdiercellen maar niet in bacteriën. In een rapport van BUA staat een 'repeated dose' studie met reproductietoxiciteitscreen vermeld. In deze studie werden effecten op de lever en de nieren waargenomen. Bij de laagst geteste dosis (40 mg/kg lg/dag) werden nog effecten op de nieren waargenomen (eosinofiele lichaampjes bij mannetjes) en waren fertiliteitsindices verlaagd. Zonder verdere specificaties moet deze dosis als LOAEL worden beschouwd.

Evaluatie

Op basis van de thans beschikbare set gegevens kan geen MTR-humaan worden afgeleid.

2-morpholino(thio)benzothiazole

CAS-nummer: 102-77-2

Deze stof is nooit eerder beoordeeld door het RIVM. Er zijn ook geen bruikbare evaluaties van andere internationale organisaties beschikbaar. In de TSCATS database is een groot aantal genotoxiciteitstudies vermeld. Op basis van de beknopte summaries kan voorlopig worden geconcludeerd dat de stof genotoxisch is. Verder zijn enkele acute toxiciteitstudies en irritatiestudies vermeld. Er zijn geen subchronische of chronische studies gemeld.

Evaluatie

Op basis van de thans beschikbare set gegevens kan geen MTR-humaan worden afgeleid.

N-cyclohexyl-2-benzothiazole sulfenamide
CAS-nummer: 95-33-0

Deze stof is nooit eerder beoordeeld door het RIVM. Er zijn ook geen bruikbare evaluaties van andere internationale organisaties beschikbaar. In de IUCLID database staan diverse studies vermeld. Op basis van deze gegevens kan een voorlopige MTR-humaan worden afgeleid. Echter, vermeld dient te worden dat hierbij uitgegaan wordt van de resultaten en beschrijvingen in de IUCLID database en dat de studies dus niet inhoudelijk beoordeeld kunnen worden.

De acute orale toxiciteit is gering (LD50 in muizen en ratten > 4000 mg/kg lg). In dierstudies is de stof niet irriterend voor de huid en de ogen. Uit ervaring met humane blootstelling wordt echter gerapporteerd dat de stof aanleiding kan geven tot huid- en luchtwegirritatie en uit een groot aantal humane patch-testen blijkt de stof sensibiliserend te zijn bij huidcontact. In de IUCLID database staan een aantal orale studies vermeld met herhaalde blootstelling. Echter sommige van deze studies zijn onduidelijk gerapporteerd en soms roepen de vermelde doseringen vraagtekens op. Hier beperken we ons tot de studies die redelijk betrouwbaar lijken. In een 4-wekenstudie met ratten wordt een NOAEL gemeld van 250 mg/kg lg/dag maar in deze studie is geen hematologie, klinische biochemie en histopathologie uitgevoerd. Uit een beperkt gerapporteerde 3-maanden studie met muizen wordt een NOAEL afgeleid van 0,2% in het voer (overkomend met 2000 mg/kg voer en 300 mg/kg lg/dag). In een 78-weken carcinogeniteitstudie met muizen werd bij de enige geteste dosis van 99 mg/kg lg/dag geen verhoogde tumorincidentie waargenomen. In een ontwikkelingstoxiciteitstudie (oraal via gavage) met ratten werd een NOAEL gerapporteerd met maternale toxiciteit bij 300 mg/kg lg/dag. In een tweede ontwikkelingstudie met ratten (oraal via het voer) werd een NOAEL van 70 mg/kg lg/dag gemeld met effecten bij 289 mg/kg lg/dag (verlaagd foetaal gewicht en placentagewicht).

Met betrekking tot genotoxiciteit wordt een reeks van studies gemeld (een groot aantal Ames testen, mouse lymphoma assay, een studie met gist en een dominant lethaal test). Volgens de beschrijvingen in IUCLID zijn al deze studies negatief. Er zijn geen studies beschreven ten aanzien van chromosoomaberraties.

Evaluatie:

De beschikbare set gegevens is uiterst beperkt. Een voorlopige MTR-humaan kan dan ook alleen worden afgeleid met gebruik van extra onzekerheidsfactoren om te compenseren voor de onvolledige data-set. Op basis van de beschikbare data wordt de stof vooralsnog als niet-genotoxisch beschouwd. Als uitgangspunt voor de MTR-humaan-afleiding wordt de NOAEL van 70 mg/kg lg/dag gekozen uit de 'developmental' toxiciteitsstudie met de rat. Deze NOAEL wordt gekozen omdat in deze studie bij lagere doseringen effecten optraden dan in de subacute of subchronische studies. Gebruikmakend van een factor 10 voor interspecies variatie, een factor 10 voor intraspecies variatie, een factor 5 voor extrapolatie van korte naar lange tijdsduur en een factor 5 voor de onvolledige data-set. De voorlopige MTR-humaan wordt dan $[70 \text{ mg/kg lg/dag} / 10 \times 10 \times 5 \times 5] = 28 \text{ } \mu\text{g/kg lg/dag}$.

4,4,15,15-tetra-ethoxy-3,16-dioxy-8,9,10,11-tetrathia-4,15-disila-octodecaan
CAS-nummer: 40372-72-3

Deze stof is nooit eerder beoordeeld door het RIVM. Er zijn ook geen bruikbare evaluaties van andere internationale organisaties beschikbaar. In de IUCLID database staan diverse studies vermeld. De hoeveelheid gegevens is echter zeer beperkt: één acute orale studie met de rat, één acute dermale en één acute inhalatoire studie, één huid- en één oogirritatiestudie, één sensibilisatiestudie, één 28-dagen studie, en één Ames test. Deze informatie is ontoereikend om een (voorlopige) MTR-humaan te kunnen afleiden.

Hexamethoxymethylmelamine
Cas-nummer: 3089-11-0

Deze stof is nooit eerder beoordeeld door het RIVM. Er zijn geen bruikbare internationale evaluaties aangetroffen voor deze stof. SAX vermeldt alleen huid- en oogirritatie met een LD50 van 180 mg/kg lichaamsgewicht intraveneus. De stof komt voor in de TSCATS database. In deze database zijn slechts twee studies te vinden: een dermale sensibilisatiestudie en een 28-dagen inhalatiestudie. Deze informatie is ontoereikend om een MTR-humaan af te leiden.

Resorcinol
Cas-nummer 108-46-3

Deze stof is in 2001 door het RIVM beoordeeld (Baars et al., 2001; RIVM rapport 711701025) en de humane orale MTR-humaan is vastgesteld op 20 µg/kg lg/dag.

Hexamethyleentetramine
Cas-nummer: 100-97-0

De stof wordt gebruikt als conserveermiddel in cosmetica en voeding, daarnaast ook als geneesmiddel (anti-infectans in urinewegen). De stof is nooit eerder door het RIVM beoordeeld. De stof is in 1973 beoordeeld door de Joint Expert Committee on Food Additives van de WHO. Op basis van een uitgebreid pakket aan toxicologisch onderzoek is een ADI afgeleid van 0,15 mg/kg lg/dag. In 1992 heeft de Cosmetic, Toiletry, and Fragrance Association de stof beoordeeld maar deze evaluatie is niet direct beschikbaar bij het RIVM.

Evaluatie

De ADI van 0,15 mg/kg lg/dag van de WHO/JECFA was gebaseerd op een uitgebreide data-set en is derhalve bruikbaar als voorlopige MTR-humaan waarde.

N-(cyclohexylthio)phtalimide (PVI)
Cas-nummer: 17796-82-6

Deze stof is nooit eerder door het RIVM beoordeeld. Er zijn geen bruikbare internationale evaluaties aangetroffen voor deze stof. De stof is aangemeld in het Bestaande Stoffen-programma maar is nog geen Risk Assessment Report van geschreven. In de IUCLID database staan diverse studies vermeld. Op basis van deze gegevens kan een voorlopige MTR-humaan worden afgeleid. Echter, vermeld dient te worden dat hierbij uitgegaan wordt van de resultaten en beschrijvingen in de IUCLID database en dat de studies dus niet inhoudelijk beoordeeld kunnen worden.

De acute orale toxiciteit is gering, de laagste LD50 is 2010 mg/kg lichaamsgewicht. De stof is irriterend voor de ogen en uit humane patch-testen blijkt dat de stof moet worden beschouwd als sensibiliserend. Voor orale blootstelling zijn er 5 studies beschreven: een 28-dagen studie in de rat, een 2-jaar carcinogeniteitstudie in de rat, een 2-generatie reproductiestudie en een tweetal 'developmental' toxiciteitsstudies met konijnen. In de 28-dagen studie werd een NOAEL gerapporteerd van 300 ppm in het voer (overeenkomstig met 30 mg/kg lg/dag). In de chronische carcinogeniteitstudie werd een LOAEL gerapporteerd van 50 mg/kg lg/dag, gebaseerd op effecten op het lichaamsgewicht, de lever en de nieren. Bij hogere doseringen werden goedaardige levertumoren waargenomen. In de reproductiestudie werd een NOAEL gerapporteerd van 150 ppm in het voer (overeenkomstig met 7,5 mg/kg lg/dag) terwijl in de twee 'developmental' toxiciteitsstudies NOAELs werden gerapporteerd van respectievelijk 30 en 5 mg/kg lg/dag. Het pakket aan genotoxische informatie is beperkt en niet bij alle studies is een resultaat vermeld. In-vitro lijkt de stof niet mutageen te zijn. Ten aanzien van clastogene effecten kan geen definitieve uitspraak worden gedaan.

Evaluatie

Hoewel de beschikbare informatie m.b.t. genotoxiciteit een definitieve conclusie niet toestaat, lijkt de stof niet genotoxisch te zijn. Additionele gegevens in de IUCLID database suggereren dat de waargenomen tumoren in de chronische studie worden veroorzaakt door promotie-activiteit van de stof in de lever. Voorlopig wordt daarom uitgegaan van een drempelwaardebenadering. De NOAEL uit de 2-generatiereproductie studie van 7,5 mg/kg lg/dag wordt als startpunt genomen voor de afleiding van een voorlopige humane MTR-humaan. De onzekerheidsfactoren zijn 10 voor interspecies variatie, 10 voor intraspecies variatie en een factor 10 voor onzekerheid in de database en ontbrekende gegevens. De voorlopige MTR-humaan is dan 7,5 µg/kg lg/dag.

Diphenylguanidine
Cas-nummer 102-06-7

Deze stof is nooit eerder door het RIVM beoordeeld. Echter de stof maakt deel uit van het OECD-HPVC programma waar het RIVM ook bij betrokken is. De beschikbare documentatie van de OECD – SIDS is in conceptvorm beschikbaar op het RIVM. Onderstaande informatie is gebaseerd op dit document.

De acute orale LD50 waarde van difenylguanidine is 350-460 mg/kg lg voor de rat. De stof is irriterend voor de ogen maar niet voor de huid. In subchronische orale studies (rat en muis) worden vooral effecten op het lichaamsgewicht en de voedselconsumptie waargenomen. Mogelijk houdt dit verband met de afwijkende smaak van deze stof. Er werden geen andere toxicologisch relevante effecten waargenomen. In deze studies werd een NOAEL gerapporteerd van 17 mg/kg lg/dag. De OECD-SIDS meldt dat de beschikbare carcinogeniteitsinformatie niet voldoende is voor evaluatie. In een reproductiestudie werden geen effecten waargenomen bij de hoogst geteste dosis (16 mg/kg lg/dag). In een tweetal 'developmental' toxiciteitsstudies werden NOAELs gerapporteerd van respectievelijk 5 mg/kg lg/dag in de rat en 4 mg/kg lg/dag in de muis (voor zowel maternale als foetotoxiciteit). Er was een redelijk pakket aan genotoxiciteitstesten beschikbaar. Afgezien van één host-mediated mutageniteitstudie die positief was maar niet kon worden gereproduceerd zijn alle testen negatief (Ames test, in-vitro mammalian assays, in vivo aberratietest, micronucleustest). De stof wordt derhalve beschouwd als niet-genotoxisch.

Evaluatie

De beschikbare informatie staat de afleiding van een voorlopige MTR-humaan toe. Vermeld dient te worden dat het RIVM de primaire data niet beoordeeld heeft en dus uitgaat van de OECD-SIDS. Als uitgangspunt voor de humane MTR-humaan afleiding wordt de NOAEL van 5 mg/kg lg/dag gebruikt in de rat. Deze NOAEL is vrijwel identiek aan de NOAEL van 4 mg/kg lg/dag in de ontwikkelingsstudie in de muis en dekt tevens de NOAEL van 17 mg/kg lg/dag uit de subchronische studie. De onzekerheidsfactoren zijn 10 voor interspecies variatie, 10 voor intraspecies variatie en een factor 5 voor het ontbreken van adequaat chronisch onderzoek. De voorlopige MTR-humaan is derhalve (5 mg/kg lg/dag)/500, dus 10 µg/kg lg/dag.

Benzothiazole

Cas-nummer 95-16-9

Deze stof is nooit eerder beoordeeld door het RIVM. Er zijn geen bruikbare internationale evaluaties aangetroffen voor deze stof. SAX en de TSCATS database vermelden alleen enkele acute mortaliteitstudies (oraal, dermaal en inhalatoir). Deze informatie is ontoereikend om een MTR-humaan af te leiden.

2-Benzothiazolamine

CAS-nummer: 136-95-8

Deze stof is nooit beoordeeld door het RIVM. Ook op internationaal niveau is er geen beoordeling beschikbaar. Het met deze stof uitgevoerde toxicologische is zeer beperkt (items: acuut oraal LD50, Amestest, huidirritatie). Voor deze stof is geen MTR afleidbaar.

Kodaflex TXIB**CAS-nummer: 6846-50-0**

Deze stof is in 2001 beoordeeld door het RIVM in verband met de toepassing in drinkwatermaterialen. De stof was negatief (geen effect) in drie in vitro genotoxiciteitsstudies. Twee semichronische orale studies van zeer oude datum (1972) waren beschikbaar. In de rat was er bij het laagste geteste doseringsniveau van 0,1% in het voer (50 mg/kg lg/dag) nog een effect op de lever terwijl in de andere semichronische proef, in de hond, bij het laagste niveau van 0,1% (25 mg/kg lg/dag) geen effect optrad (NOAEL). Beide proeven waren gebrekkig van opzet en de eindconclusie was dan ook dat geen TDI (MTR) afgeleid kon worden.

2-(Methylthio)-benzothiazol**CAS-nummer: 615-22-5**

Deze stof is nooit beoordeeld door het RIVM. Ook op internationaal niveau is er geen beoordeling beschikbaar. Er is nauwelijks toxicologisch onderzoek uitgevoerd met deze stof en daarom kan geen MTR worden afgeleid. Qua structuur is de stof nauw verwant met 2-mercaptobenzothiazol. Voor deze laatste stof hebben we in ons eerdere document een MTR voorgesteld van 94 µg/kg lichaamsgewicht. We stelden toen voor deze MTR te hanteren voor de groep van verwante thiazolen zoals voorkomend op de eerdere lijst. Ook 2-(methylthio)-benzothiazol zou met deze MTR kunnen worden beoordeeld.

N-butylbenzeensulfonamide**CAS-nummer: 3622-84-2**

Deze stof is nooit eerder beoordeeld door het RIVM. Er zijn ook geen bruikbare evaluaties van andere internationale organisaties beschikbaar. Bekend is dat de stof bij intraperitoneale toediening neurotoxisch werkt. Verdere toxicologische studies (via andere toedieningsroutes) ontbreken echter zodat geen MTR kan worden afgeleid.

Fenazine**CAS-nummer: 92-82-0**

Deze stof is nooit eerder beoordeeld door het RIVM. Er zijn ook geen bruikbare evaluaties van andere internationale organisaties beschikbaar. Voor zover bekend is er zo goed als geen toxicologisch onderzoek met deze stof uitgevoerd. Een MTR is daarom niet afleidbaar.

Phytol**CAS-nummer: 150-86-7**

Deze stof is nooit eerder beoordeeld door het RIVM. Er zijn ook geen bruikbare evaluaties van andere internationale organisaties beschikbaar. De stof is een afbraakproduct van chlorofyl. Voor zover bekend is er nauwelijks toxicologisch onderzoek mee uitgevoerd. De toxiciteit is zeer gering, zo suggereren de schaarse data (LD50 > 5 gram/kg lg). Er is geen MTR afleidbaar.

1-Deceen**CAS-nummer: 872-05-9**

Deze stof is nooit eerder beoordeeld door het RIVM. De verpakkingsmiddelenwerkgroep van het Wetenschappelijk Comité van de EU heeft de stof in 1996 beoordeeld. Het beoordeelde pakket aan gegevens was beperkt tot drie in vitro genotoxiciteitsstudies die allemaal negatief waren (geen effect). In het kader van de OECD-SIDS is 1-deceen beoordeeld als onderdeel van de zgn. *alfa olefins* (1-hexeen t/m 1-tetradeceen). De proefdierdata voor deze groep stoffen wijzen op geringe tot zeer geringe toxiciteit. Sub-chronische NOAELs waren ≥ 100 mg/kg lg/dag.

Op basis van deze NOAEL kan met een veiligheidsfactor 100 (10 voor extrapolatie van proefdier naar mens en 10 voor extrapolatie naar gevoelige individuen in de populatie) van een voorlopige MTR berekend worden van 1 mg kg lg/dag.

Bijlage B1: Invoergegevens standaard scenario

INVOER GEGEVENS (dataset)

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
SCENARIO		de mogelijkheid voor recreatie in combinatie met de mogelijkheid tot visvangst	
type stof:		organische contaminant	
Stofspecifieke parameters			
molmassa	M		[g/mol]
wateroplosbaarheid	S		[mol/m ³]
octanol-water verdelingscoëfficiënt	log Kow		[-]
OC gecorrigeerde verdelingscoëff.	Koc		[dm ³ /kg]
sediment-water verdelingscoëff. metalen	Kd_se		[dm ³ /kg]
bioconcentratiefactor water-vis	BCFfi		[(mg/kg versgewicht)/(mg/dm ³)]
zuurdissociatieconstante	pKa		[-]
fractie niet gedissocieerde stof	fnd		[-]
dermale absorptiesnelheid watercontact	DARw		[mg/m ² /mg/dm ³ /h]
Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau	MTR		[mg/(kg l.g. d)]
interventiewaarde humaan (landbodern)	HUM-TOX EBVC		[mg/kg] int
interventiewaarde humaan (sediment)	HUM-TOX EVWC		[mg/(kg l.g. d)]

EIGENSCHAPPEN CONTAMINANT

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
octanol-watervedelingscoëfficiënt	Kow		[-]
verdelingscoëfficiënt zwevend slib-oppervlaktew	Kd_sm		[dm ³ /kg]
bioconcentratiefactor water-vis (FAT WEIGHT)	BCFfi_f		[(mg/kg FAT)/(mg/dm ³)]
vetfractie vis	Ff_fi	0.05	[kg vet/kg versgewicht]
vetfractie vis (onderzoek Mackay)	Ff_fi_Mackay	0.05	[kg vet/kg versgewicht]
bioconcentratiefactor water-vis (vetbasis) (met	BCFfi_dw	-	[(mg/kg)/(mg/l)]
drooggewichtfractie vis	fdw_fi	0.10	[kg dw/kg vg]

LOCATIE SPECIFIEKE GEGEVENS

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
totaalgehalte waterbodern (input-parameter)	C_se		[mg/kg d.w.]
gehalte in zwevend slib	C_sm		[mg/kg d.w.]
concentratie oppervlaktewater (berekend A1)	C_sw		[mg/dm ³]
maximale wateroplosbaarheid	C_wo		(mg/l)
gehalte in vis (berekend A2)	C_fi		[mg/kg]
volumieke massa van droge waterbodern	SD_se	1.30	[kg/dm ³]
volumieke massa van zwevend slib	SD_sm	1.30	[kg/dm ³]
volumefractie water in waterbodern	Vw_se	0.40	[-]
volumefractie water in zwevend slib	Vw_sm	0.40	[-]
fractie organische koolstof, waterbodern	foc_se	0.058	[-]
fractie organische koolstof, zwevend slib	foc_sm	0.116	[-]
zuurgraad, waterbodern	pH	8.00	[-]
zwevend slibgehalte oppervlaktewater	Pc	3.00E-05	[kg/dm ³]

BLOOTSTELLINGSPARAMETERS (ALGMEEN)

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
relatieve absorptiefactor	fa	1	[-]
matrixfactor	fm	0.15	[-]
fractie verontreinigde vis	FV fi	0.1	[-]

BLOOTSTELLINGSPARAMETERS KIND

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
lichaamsgewicht	Wc	15	[kg]
totaal lichaamsopp dermale opname oppervl w:	Ac_tot	0.456	[m2]
tijdfractie recreatie (aantal dagen per jaar/365)	tf_sec	0.027397	[-]
dagelijkse inname hoeveelheid waterbodem	AIDc_se	1.00E-03	[kg d.w./d]
dagelijkse inname oppervlaktewater	AIDc_sw	5.00E-02	[dm3/d]
blootgesteld oppervlak	Aexpc_se	0.28	[m2]
bedekkingsgraad	DAEc	0.51	[mg grond/cm2]
absorptiesnelheid	DARc	0.01	[1/h]
tijdsduur van de blootstelling	tb_sec	8	[h/d]
tijdsduur zwemmen	tbsw_c	2	[h/d]
visconsumptie	Qfic	0.003	[kg versgewicht/d]

BLOOTSTELLINGSPARAMETERS VOLWASSENE

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
lichaamsgewicht	Wa	70	[kg]
totaal lichaamsopp dermale opname oppervl w:	Aa_tot	1.448	[m2]
tijdfractie recreatie (aantal dagen per jaar/365)	tf_sea	0.027397	[-]
dagelijkse inname hoeveelheid waterbodem	AIDa_se	3.50E-04	[kg d.w./d]
dagelijkse inname oppervlaktewater	AIDa_sw	5.00E-02	[dm3/d]
blootgesteld oppervlak	Aexpa_se	0.95	[m2]
bedekkingsgraad	DAEa	3.75	[mg grond/cm2]
absorptiesnelheid	DARa	0.01	[1/h]
tijdsduur van de blootstelling	tb_sea	8	[h/d]
tijdsduur zwemmen	tbsw_a	1	[h/d]
visconsumptie	Qfia	0.011	[kg versgewicht/d]

Bijlage B2: Invoergegevens scenario viswater

INVOER GEGEVENS (dataset)

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
SCENARIO	viswater		
type stof:	organische contaminant		
Stofspecifieke parameters			
molmassa	M		[g/mol]
wateroplosbaarheid	S		[mol/m ³]
octanol-water verdelingscoëfficiënt	log Kow		[-]
OC gecorrigeerde verdelingscoëff.	Koc		[dm ³ /kg]
sediment-water verdelingscoëff. metalen	Kd_se		[dm ³ /kg]
bioconcentratiefactor water-vis	BCFfi		[(mg/kg versgewicht)/(mg/dm ³)]
zuurdissociatieconstante	pKa		[-]
fractie niet gedissocieerde stof	fnd		[-]
dermale absorptiesnelheid watercontact	DARw		[mg/m ² /mg/dm ³ /h]
Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau	MTR		[mg/(kg l.g. d)]
interventiewaarde humaan (landbodern)	HUM-TOX EBVC		[mg/kg] int
interventiewaarde humaan (sediment)	HUM-TOX EVWC		[mg/(kg l.g. d)]

EIGENSCHAPPEN CONTAMINANT

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
octanol-watervedelingscoëfficiënt	Kow		[-]
verdelingscoëfficiënt zwevend slib-oppervlaktew	Kd_sm		[dm ³ /kg]
bioconcentratiefactor water-vis (FAT WEIGHT)	BCFfi_f		[(mg/kg FAT)/(mg/dm ³)]
vetfractie vis	Ff_fi	0.05 of 0.20	[kg vet/kg versgewicht]
vetfractie vis (onderzoek Mackay)	Ff_fi_Mackay	0.05	[kg vet/kg versgewicht]
bioconcentratiefactor water-vis (vetbasis) (met	BCFfi_dw	-	[(mg/kg)/(mg/l)]
drooggewichtfractie vis	fdw_fi	0.10	[kg dw/kg vg]

LOCATIE SPECIFIEKE GEGEVENS

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
totaalgehalte waterbodern (input-parameter)	C_se		[mg/kg d.w.]
gehalte in zwevend slib	C_sm		[mg/kg d.w.]
concentratie oppervlaktewater (berekend A1)	C_sw		[mg/dm ³]
maximale wateroplosbaarheid	C_wo		(mg/l)
gehalte in vis (berekend A2)	C_fi		[mg/kg]
volumieke massa van droge waterbodern	SD_se	1.30	[kg/dm ³]
volumieke massa van zwevend slib	SD_sm	1.30	[kg/dm ³]
volumefractie water in waterbodern	Vw_se	0.40	[-]
volumefractie water in zwevend slib	Vw_sm	0.40	[-]
fractie organische koolstof, waterbodern	foc_se	0.058	[-]
fractie organische koolstof, zwevend slib	foc_sm	0.116	[-]
zuurgraad, waterbodern	pH	8.00	[-]
zwevend slibgehalte oppervlaktewater	Pc	3.00E-05	[kg/dm ³]

BLOOTSTELLINGSPARAMETERS (ALGMEEN)

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
relatieve absorptiefactor	fa	1	[-]
matrixfactor	fm	0.15	[-]
fractie verontreinigde vis	FV fi	0.5	[-]

BLOOTSTELLINGSPARAMETERS KIND

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
lichaamsgewicht	Wc	15	[kg]
totaal lichaamsopp dermale opname oppervlakte	A _{total}	0.456	[m ²]
tijdfractie recreatie (aantal dagen per jaar/365)	f _{sea}	-	[-]
dagelijkse inname hoeveelheid waterbodem	AIDc_se	1.00E-03	[kg d.w./d]
dagelijkse inname oppervlaktewater	AIDc_sw	5.00E-02	[dm ³ /d]
blootgesteld oppervlak	Aexpc_se	0.28	[m ²]
bedekkingsgraad	DAEc	0.51	[mg grond/cm ²]
absorptiesnelheid	DARc	0.01	[1/h]
tijdsduur van de blootstelling	tb_sec	8	[h/d]
tijdsduur zwemmen	tbsw_c	2	[h/d]
visconsumptie	Qfic	0.015	[kg versgewicht/d]

BLOOTSTELLINGSPARAMETERS VOLWASSENE

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
lichaamsgewicht	Wa	70	[kg]
totaal lichaamsopp dermale opname oppervlakte	A _{total}	1.448	[m ²]
tijdfractie recreatie (aantal dagen per jaar/365)	f _{sea}	-	[-]
dagelijkse inname hoeveelheid waterbodem	AIDa_se	3.50E-04	[kg d.w./d]
dagelijkse inname oppervlaktewater	AIDa_sw	5.00E-02	[dm ³ /d]
blootgesteld oppervlak	Aexpa_se	0.95	[m ²]
bedekkingsgraad	DAEa	3.75	[mg grond/cm ²]
absorptiesnelheid	DARa	0.01	[1/h]
tijdsduur van de blootstelling	tb_sea	8	[h/d]
tijdsduur zwemmen	tbsw_a	1	[h/d]
visconsumptie	Qfia	0.055	[kg versgewicht/d]

Bijlage C: A short introduction to EPIWIN

The Estimations Programs Interface for Windows (EPIWIN) is an interface program that transfers a single SMILES notation to ten separate structure estimation programs that require SMILES notations. The ten stand-alone programs, that are part of the EPI Suite of Programs, are:

- AOPWIN - estimates atmospheric oxidation rates
- BCFWIN - estimates bioconcentration factor (BCF)
- BIOWIN - estimates biodegradation probability
- ECOSAR - estimates aquatic toxicity (LD50, LC50)
- HENRYWIN - estimates Henry's law constant
- HYDROWIN - estimates aqueous hydrolysis rates (acid-, base-catalyzed)
- KOWWIN - estimates octanol-water partition coefficient
- MPBPWIN - estimates melting pt, boiling pt, and vapor pressure
- PCKOCWIN - estimates soil sorption coefficient (Koc)
- WSKOWWIN - estimates water solubility

They do not require the EPIWIN program itself to run. The EPIWIN program is designed specifically to execute the ten programs and capture their output.

The EPIWIN interface program is a convenience for users because it automatically executes each program in succession without user interaction. In addition, the interface program executes the WVOLWIN (Volatilization Rate from Water), STPWIN (Sewage Treatment Plant Fugacity Model), and LEVEL3NT (Level III Fugacity Model) programs by transferring the Molecular Weight, the Henry's Law Constant, log octanol-water partition coefficient and various volatilization parameters to WVOLWIN, STPWIN and LEVEL3NT. Please remember that any of the estimation programs (with the exception of STPWIN, WVOLWIN and LEVEL3NT) can be run by themselves. These are the same estimation programs that are available from Syracuse Research Corporation on an individual basis!

The STPWIN program is a version of the Toronto Model originally developed by Donald Mackay at the University of Toronto (Clark et al., 1995). The WVOLWIN program is based upon the methodology outlined in Chapter 15 of W.J. Lyman's book 'Handbook of Chemical Property Estimation Methods' (Lyman et al., 1990). The Level III Fugacity Model is described in recent journal articles (Mackay et al., 1996a, 1996b); the Level III model incorporated into EPIWIN is a Syracuse Research Corporation adaptation of this methodology.

Bijlage D: Overzicht model berekeningen (inclusief gebruikte parameterwaarden)

SCENARIO: DEFAULT

BLOOTSTELLING (PROCENTUELE BIJDRAGE AAN DE LEVENSLANG GEMIDDELD DAGELIJKSE BLOOTSTELLING)

CONTAMINANT	HUM-TOX EWVC mg/kg d.s.	DI-sel	DI-swI	DI_sml	DA_sel	DA_swI	FII	DOSIS
N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine	1.29E+03	1.91%	0.24%	0.01%	53.68%	30.01%	14.16%	100%
Trimethyldihydroquinoline	6.88E+02	0.15%	0.26%	0.00%	4.19%	79.36%	16.05%	100%
2-2dibenzothiazylidisulfide	4.68E+03	3.07%	0.01%	0.02%	86.21%	1.56%	9.14%	100%
2-Mercaptobenzothiazol	1.28E+03	0.84%	0.82%	0.00%	23.63%	63.56%	11.15%	100%
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide	2.20E+03	2.22%	0.18%	0.01%	62.34%	18.19%	17.06%	100%
Resorcinol	1.91E+02	0.27%	22.21%	0.00%	7.58%	65.56%	4.38%	100%
Hexamethylenetetramine	9.32E+03	1.75%	45.90%	0.01%	49.17%	3.17%	0.00%	100%
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)	3.36E+01	0.13%	0.26%	0.00%	3.54%	50.09%	45.99%	100%
Difenyguanidine	6.58E+02	1.85%	0.50%	0.01%	52.06%	33.55%	12.03%	100%

SCENARIO: DEFAULT

CONTAMINANT	HUM-TOX EWVC mg/kg d.s.	M	S	log Kow	Koc	Kd sed	BCF vis	pKa	MTR
		g.mol-1	mol.m-3			dm ³ .kg-1	vers gewicht		mg/kg.d
N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine	1288	2.26E+02	1.22E-01	3.28E+00	1.26E+04	7.34E+02	9.53E+01	-	1.90E-02
Trimethyldihydroquinoline	688	1.73E+02	2.84E-01	3.30E+00	9.06E+02	5.26E+01	9.98E+01	-	1.30E-01
2-2dibenzothiazylidisulfide	4682	3.32E+02	1.32E-03	4.66E+00	7.55E+05	4.38E+04	2.29E+03	-	4.30E-02
2-Mercaptobenzothiazol	1283	1.67E+02	8.52E-01	2.64E+00	1.61E+03	9.36E+01	2.18E+01	-	4.30E-02
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide	2205	2.67E+02	1.11E+00	3.47E+00	1.89E+04	1.10E+03	1.48E+02	-	2.80E-02
Resorcinol	191	1.10E+02	9.09E+02	8.00E-01	1.38E+01	8.01E-01	3.15E-01	9.70E+00	2.00E-02
Hexamethylenetetramine	9316	1.40E+02	3.39E+03	-4.15E+00	5.47E+01	3.17E+00	3.54E-06	-	1.50E-01
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)	34	2.61E+02	2.64E-02	3.76E+00	7.71E+02	4.47E+01	2.88E+02	-	7.50E-03
Difenyguanidine	658	2.11E+02	3.75E+00	2.89E+00	5.87E+03	3.41E+02	3.88E+01	-	1.00E-02

CONTAMINANT	C se mg/kg d.s.	C opp. water mg/dm3	C zw. slib mg/kg d.s.	C vis mg/kg v.g.	max. wateropl. mg/dm3
SCENARIO: DEFAULT					
N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine	1.29E+03	1.76E+00	2.58E+03	1.67E+02	2.76E+01
Trimethyldihydroquinoline	6.88E+02	1.30E+01	1.37E+03	1.30E+03	4.91E+01
2-2dibenzothiazyldisulfide	4.68E+03	1.07E-01	9.36E+03	2.44E+02	4.40E-01
2-Mercaptobenzothiazol	1.28E+03	1.37E+01	2.56E+03	2.98E+02	1.43E+02
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide	2.20E+03	2.01E+00	4.41E+03	2.97E+02	2.98E+02
Resorcinol	1.91E+02	1.73E+02	3.30E+02	5.45E+01	1.00E+05
Hexamethylenetetramine	9.32E+03	2.68E+03	1.78E+04	9.47E-03	4.75E+05
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)	3.36E+01	7.45E-01	6.69E+01	2.14E+02	6.91E+00
Difenyguanidine	6.58E+02	1.93E+00	1.31E+03	7.48E+01	7.91E+02

CONTAMINANT	HUM-TOX EWVC mg/kg d.s.	DI-sel	DI-swl	DI_sml	DA_sel	DA_swl	FII	DOSIS
SCENARIO: VISWATER								
N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine	364.02	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
Trimethyldihydroquinoline	171.39	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
2-2dibenzothiazyldisulfide	2,049.55	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
2-Mercaptobenzothiazol	460.34	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide	516.97	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
Resorcinol	174.76	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)	2.92	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
Difenyguanidine	218.56	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%

CONTAMINANT	SCENARIO: VISWATER	HUM-TOX EWVC mg/kg d.s.	M g.mol-1	S mol.m-3	log Kow	Koc	Kd sed dm3.kg-1	BCF vis vers gewicht	pKa	MTR mg/kg.d
N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine		364.02	2.26E+02	1.22E-01	3.28E+00	1.26E+04	7.34E+02	9.53E+01	-	1.90E-02
Trimethyldihydroquinoline		171.39	1.73E+02	2.84E-01	3.30E+00	9.06E+02	5.26E+01	9.98E+01	-	1.30E-01
2-2dibenzothiazylidysulfide		2,049.55	3.32E+02	1.32E-03	4.66E+00	7.55E+05	4.38E+04	2.29E+03	-	4.30E-02
2-Mercaptobenzothiazol		460.34	1.67E+02	8.52E-01	2.64E+00	1.61E+03	9.36E+01	2.18E+01	-	4.30E-02
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide		516.97	2.67E+02	1.11E+00	3.47E+00	1.89E+04	1.10E+03	1.48E+02	-	2.80E-02
Resorcinol		174.76	1.10E+02	9.09E+02	8.00E-01	1.38E+01	8.01E-01	3.15E-01	9.70E+00	2.00E-02
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)		2.92	2.61E+02	2.64E-02	3.76E+00	7.71E+02	4.47E+01	2.88E+02	-	7.50E-03
Difenyguanidine		218.56	2.11E+02	3.75E+00	2.89E+00	5.87E+03	3.41E+02	3.88E+01	-	1.00E-02

CONTAMINANT	SCENARIO: VISWATER	C se mg/kg d.s.	C opp. water mg/dm3	C zw. slib mg/kg d.s.	C vis mg/kg v.g.	max. wateropl. mg/dm3
N-Isopropyl-N'-fenyleendiamine		3.64E+02	4.96E-01	7.28E+02	4.73E+01	2.76E+01
Trimethyldihydroquinoline		1.71E+02	3.24E+00	3.42E+02	3.23E+02	4.91E+01
2-2dibenzothiazylidysulfide		2.05E+03	4.68E-02	4.10E+03	1.07E+02	4.40E-01
2-Mercaptobenzothiazol		4.60E+02	4.90E+00	9.19E+02	1.07E+02	1.43E+02
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide		5.17E+02	4.72E-01	1.03E+03	6.96E+01	2.98E+02
Resorcinol		1.75E+02	1.58E+02	3.01E+02	4.97E+01	1.00E+05
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)		2.92E+00	6.48E-02	5.82E+00	1.87E+01	6.91E+00
Difenyguanidine		2.19E+02	6.41E-01	4.37E+02	2.49E+01	7.91E+02

CONTAMINANT	HUM-TOX EWVC mg/kg d.s.	DI-sel	DI-swl	DI_sml	DA_sel	DA_swl	FII	DOSIS
SCENARIO: VISWATER (PALING)								
N-Isopropyl-N'-feyleendiamine	91.00	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
Trimethyldihydroquinoline	42.85	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
2-2dibenzothiazidisulfide	512.39	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
2-Mercaptobenzothiazol	115.09	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide	129.24	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
Resorcinol	43.69	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)	0.73	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%
Difenyguanidine	54.64	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	0.00%	100.00%	100%

CONTAMINANT	HUM-TOX EWVC mg/kg d.s.	M g.mol-1	S mol.m-3	log Kow	Koc	Kd sed dm3.kg-1	BCF vis vers gewicht	pKa	MTR mg/kg.d
SCENARIO: VISWATER (PALING)									
N-Isopropyl-N'-feyleendiamine	91.00	2.26E+02	1.22E-01	3.28E+00	1.26E+04	7.34E+02	3.81E+02	-	1.90E-02
Trimethyldihydroquinoline	42.85	1.73E+02	2.84E-01	3.30E+00	9.06E+02	5.26E+01	3.99E+02	-	1.30E-01
2-2dibenzothiazidisulfide	512.39	3.32E+02	1.32E-03	4.66E+00	7.55E+05	4.38E+04	9.14E+03	-	4.30E-02
2-Mercaptobenzothiazol	115.09	1.67E+02	8.52E-01	2.64E+00	1.61E+03	9.36E+01	8.73E+01	-	4.30E-02
N-Cyclohexyl-2-benzothiazolsulfenamide	129.24	2.67E+02	1.11E+00	3.47E+00	1.89E+04	1.10E+03	5.90E+02	-	2.80E-02
Resorcinol	43.69	1.10E+02	9.09E+02	8.00E-01	1.38E+01	8.01E-01	1.26E+00	9.70E+00	2.00E-02
N(cyclohexylthio)ftalamide (PVI)	0.73	2.61E+02	2.64E-02	3.76E+00	7.71E+02	4.47E+01	1.15E+03	-	7.50E-03
Difenyguanidine	54.64	2.11E+02	3.75E+00	2.89E+00	5.87E+03	3.41E+02	1.55E+02	-	1.00E-02