

Aanvulling bij

**BASISINFORMATIE VOOR RISICO-
EVALUATIES**

**Cyaniden, gechloreerde solventen en
pesticiden**

Mei 2002

TECHNISCHE FICHE CYANIDEN

Voor details wordt verwezen naar 'Normering van bodemverontreiniging door cyaniden', VITO-rapport 1998/DIA/R/205 van december 1998 door J. Nouwen, C. Cornelis, G. Schoeters en P. Geuzens, een studie uitgevoerd in opdracht van de OVAM.

1. GEGEVENS GEBRUIKT VOOR DE BEREKENING VAN DE BODEMSANERINGS-NORMEN VOOR VRIJE CYANIDEN

De gegevens werden ingevoerd gebaseerd op een organische stof (styreen).

parameter	eenheid	Waarde	Bron	opm.
molmassa	g/mol	26,0 (uitgedrukt als CN ⁻)		
oplosbaarheid	g/m ³	Mengbaar 10 ⁶ (HCN)	Maximale waarde Vlier-Humaan	
dampdruk	Pa	83993 (20°C, HCN)	ATSDR 1997	
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	5168 (20°C)	ATSDR 1997	
Koc	dm ³ /kg	10 ^{3,0} (KCN)	ATSDR 1997	(1)
Kow	g/g	10 ^{0,87}	ATSDR 1997	(2)
Kd	dm ³ /kg	-		
BCF _{st}	droge stof	0	L.E. Towill 1978	(3)
BCF _{wo}	droge stof	0	L.E. Towill 1978	(3)
D _{pe}	m ² /d	0		
D _{pvc}	m ² /d	0		
Diffusiecoëfficiënt lucht	m ² /h	-		
Diffusiecoëfficiënt water	m ² /h	-		
facing	-	0,0	Pearce 1994	(4)
facinh	-	0,0	Pearce 1994	(4)
fexcr	-	1,0		(5)
pKa	-	9,2	ATSDR 1997	
DAR _{volw}	1/h	5. 10 ⁻³		(5)
DAR _{kind}	1/h	1. 10 ⁻²		(5)
TD _{loraal}	mg/kg d	12.10 ⁻³	WHO 1996	
TD _{inhalatoir}	mg/kg d	5,71.10 ⁻²	Berekend uit TCL	
TCL	g/m ³	2.10 ⁻⁴	T.G. Vermeire et al. 1991	
Limiet drinkwater	g/m ³	7.10 ⁻²	WHO 1996	
Limiet plant toxisch gewasnorm	mg/kg ds	-		
vleesnorm	mg/kg vs	-		
Achtergrond lucht	g/m ³	0		
Achtergrond voeding	mg/kg dag	0	T.G. Vermeire et al. 1991	
Inhalatoire achter- grondblootstelling	mg/kg dag	0		
Klassificatie carcinogeniciteit		D niet klasseerbaar als menselijk carcinogeen	IRIS 1998	(6)

- (1) Voor vrije cyaniden werden de berekeningen uitgevoerd met de Koc-waarde van KCN. Het is te verwachten (maar niet zeker) dat cyanide-ionen afkomstig van blauwzuur zich analoog zullen gedragen als cyanide-ionen afkomstig van KCN. Vanuit deze visie is de Koc-waarde van KCN een goede schatting voor de Koc-waarde van HCN.
- (2) De waarde van Kow is het gemiddelde van de twee gegevens voor HCN

- (3) Vrij cyanide wordt niet aangetroffen in hogere planten. Voor de berekeningen wordt daarom aangenomen dat de bioconcentratiefactoren voor opname van vrije cyaniden in de wortels en in de stam verwaarloosbaar zijn.
- (4) Tot nog toe zijn geen vrije cyaniden aangetroffen in de melk van koeien welke Berlijns Blauw toegediend krijgen. Niet lethale dosissen vrij cyanide worden gemetaboliseerd en uitgescheiden als thiocyanaten via de urine (J.O. Egekeze et al. 1980).
- (5) Standaard
- (6) Berekening uitgevoerd als niet carcinogeen

2. GEGEVENS GEBRUIKT BIJ DE BEREKENINGEN VOOR COMPLEXE CYANIDEN

parameter	Eenheid	Waarde	Bron	opm.
molmassa	g/mol	26,0 (uitgedrukt als CN ⁻)		
oplosbaarheid	g/m ³	26	Meeussen 1992	(1)
dampdruk	Pa	0		
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	-		
Log Kow		-		
Koc	dm ³ /kg	-		
Kd	dm ³ /kg	0,0		
BCFst	Droge stof	1,41	Berekend uit Wallace et al. 1977	(2)
BCFwo	Droge stof	2,82	Berekend uit Wallace et al. 1977	(2)
Dpe	m ² /d	0		
Dpvc	m ² /d	0		
Diffusiecoëfficiënt lucht	m ² /h	0		
Diffusiecoëfficiënt water	m ² /h	-		
Facing	-	0,0	Pearce 1994	(3)
Facinh	-	0,0		(3)
Fexcr	-	1,0	Pearce 1994	(3)
DARvolw	1/h	0		(4)
DARkind	1/h	0		(4)
TDloraal	mg/kg d	13.10 ⁻³	T.G. Vermeire et al. 1991	(5)
TDlinhalatoir	mg/kg d	2,86.10 ⁻¹	Berekend uit TCL	
TCL	g/m ³	1.10 ⁻³	ACROS 1998	
Limiet drinkwater	g/m ³	7.10 ⁻²	WHO 1996	
Limiet plant toxisch gewasnorm	mg/kg ds	-		
Vleesnorm	mg/kg vs	-		
Achtergrond lucht	g/m ³	0		
Achtergrond inhalatoir	mg/kg dag	0		
Achtergrond voeding	mg/kg dag	4.10 ⁻⁴	T.G. Vermeire et al. 1991	

- (1) De oplosbaarheid is afhankelijk van o.a. pH en pe. Voor details betreffende de omstandigheden waaronder de vermelde oplosbaarheid van toepassing is, wordt verwezen naar Meeussen 1992.
- (2) Onderzoekers hebben een verhoogde opname van metalen door planten in aanwezigheid van cyaniden vastgesteld. De opname werd gemeten via vergelijking van gemarkeerd ¹⁴C in plant en bodem. (A. Wallace et al. 1977, 1981). Op basis van deze gegevens werd een bioconcentratiefactor voor wortels (BCF_{wortel} = 2,82 (uitgedrukt op basis van droge stof)) en één voor de stam (BCF_{stam} = 1,41 (uitgedrukt op basis van droge stof)) berekend voor gecompliceerde cyaniden. De bioconcentratiefactor voor de wortels werd verondersteld het dubbel te zijn van deze voor de stam. Voor hoge bodemconcentraties aan cyaniden is deze aanname gerechtvaardigd, maar bij lage bodemconcentraties is het mogelijk dat dit aanleiding geeft tot een onderschatting van de opname door planten. Verder werd in de planten ¹⁴C gemeten en niet cyanide, zodat de gemeten ¹⁴C-concentratie de bovengrens van aanwezige cyaniden weergeeft. Via ¹⁴C-bepaling kan immers geen onderscheid gemaakt worden tussen het oorspronkelijk cyanide en de eventueel gevormde metaboliëten.

- (3) Tot nog toe werden geen complexe cyaniden aangetroffen melk van koeien welke Berlijns Blauw toegediend kregen. Verder wordt de toegediende dosis Berlijns Blauw volledig uitgescheiden via de uitwerpselen zodat mag aangenomen worden dat de opname via vlees verwaarloosbaar is (Pearce 1994).
- (4) Er werd geen dermale absorptie verondersteld.
- (5) In de literatuur circuleren meerdere, sterk uiteenlopende TDI-waarden, welke soms meer dan een factor duizend van elkaar verschillen. Organisaties belast met de volksgezondheid geven totnogtoe voorkeur aan de hier geciteerde TDI-waarde. Hoewel op basis van de literatuurgegevens verwacht wordt dat vrij cyanide de meest toxische vorm van cyanide is en complexe cyaniden relatief weinig toxisch zijn, geven de hier vermelde TDI-waarden dit niet weer. In het kader van een pragmatische risico-beoordeling betreffende complexe cyaniden en in afwachting van nieuwe gegevens is het aangewezen de hier geciteerde TDI te hanteren. Als uitgangspunt voor de berekeningen werd verondersteld dat de situatie stationair is. Echter, omzettingen met vorming van vrije cyaniden zijn mogelijk en dienen gecontroleerd te worden.

3. GEDRAG IN DE BODEM EN HET GRONDWATER

3.1 Algemeen

Cyanide ionen worden niet sterk geadsorbeerd of vertraagd door de bodem. De cyanide zouten van de meeste kationen zijn oplosbaar maar bewegen slechts een korte afstand door de bodem vooraleer afgebroken te worden of gefixeerd te worden door metalen via complexvorming. Cyanide ionen zouden niet betrokken zijn in redoxreacties. In niet steriele bodems wordt de koolstof van cyanide omgezet in carbonaat en de stikstof in ammoniak door microbiële afbraak. Onder anaërobe omstandigheden worden cyaniden omgezet in gasvormige stikstofverbindingen welke terecht komen in de atmosfeer. In water worden cyaniden aangetroffen als vrij HCN, simpele cyaniden, alkali en aardalkalicyaniden, en complexen. Het vrije cyanide in de bodem vervluchtigt snel naar de atmosfeer.

Het gevaar voor de menselijke gezondheid hangt sterk af van de chemische speciatie waaronder het cyanide voorkomt. De verdeling over vrij cyanide en complexvorm is uitermate belangrijk. In zijn vrije vorm kan cyanide vluchtig zijn, is het bioafbreekbaar maar ook veel meer toxisch dan in gecomplexeerde toestand. Het gedrag van ijzercyanidecomplexen in de bodem is vrij goed bestudeerd. Over de andere cyanidecomplexen is beduidend minder informatie beschikbaar. In de hiernavolgende bespreking zal daarom een opsplitsing gemaakt worden tussen ijzercyanidecomplexen en andere cyanidecomplexen.

3.2 Bodemverontreiniging door metaalcyanidecomplexen

3.2.1 Bodemverontreiniging door ijzercyanidecomplexen

Misschien wel het meest duidelijke teken van bodemverontreiniging door cyaniden op sommige gecontamineerde sites, is de karakteristieke blauwe kleur van de ijzercyaniden. Deze kleur is gewoonlijk een aanduiding van de aanwezigheid van het mineraal Berlijns blauw $\text{Fe}_4(\text{Fe}(\text{CN})_6)_3$. Dit mineraal bevat zowel ijzer als ijzercyanide. Uit een uitloogexperiment op stalen van een voormalige gasfabriek blijkt dat ijzercyanidecomplexen de belangrijkste zijn op dergelijke terreinen. Zij maken 97 % uit van al de metaalcomplexen. $\text{Cu}(\text{CN})_3^{2-}$ is in significante maar beperkte hoeveelheden aanwezig, terwijl $\text{Ni}(\text{CN})_4^{2-}$ slechts aanwezig is in sporenhoeveelheden.

Bij bodemverontreiniging met ijzercyanidecomplexen moeten twee evenwichtsreacties beschouwd worden:

- oplossing van Berlijns blauw tot ijzercyanidecomplex in oplossing;
- ontbinding van ijzercyanidecomplex in oplossing tot vrij cyanide.

Een eerste stap in de beoordeling van de stabiliteit van ijzercyanidecomplexen in bodemoplossingen is de studie van de thermodynamische stabiliteit in functie van de bodemomstandigheden (zuurtegraad pH, pe als maat voor de oxydatietoestand en totale cyanideconcentratie). Voor details wordt verwezen naar Meeussen 1992. Zowel de redoxpotentiaal, de pH als de totale cyanideconcentratie beïnvloeden de verdeling over de verschillende vormen substantieel. De pH beïnvloedt de activiteit van de ionen welke bijdragen tot de complexvorming. Bij een lage redoxpotentiaal (pe=6) zijn ijzercyanidecomplexen de dominante species. De fractie cyanide in gecomplexeerde vorm wordt sterk beïnvloed door de totale cyanide concentratie, aangezien er meer

dan één cyanide ion aanwezig is in één ijzercyanidecomplex. Hoe hoger de totale concentratie aan cyanide des te groter de fractie cyanide in gecomplexeerde vorm. Bij hogere pH, lage pe en hoge cyanideconcentratie zijn de complexen de dominerende species.

Wanneer deze omstandigheden vergeleken worden met de natuurlijk voorkomende omstandigheden in de bodem, dan blijkt dat ijzercyanidecomplexen thermodynamisch stabiel zijn enkel onder omstandigheden welke eerder extreem zijn voor bodem en milieu. Dit impliceert dat in de meeste bodems gecomplexeed cyanide de tendens heeft om te ontbinden naar toxisch vrij cyanide. Zelfs onder optimale omstandigheden voor stabiele cyanidecomplexen, is steeds vrij cyanide aanwezig. Metingen hebben aangetoond dat echter nauwelijks vrij cyanide in grondwater wordt aangetroffen. Experimentele bevindingen (uitgevoerd in afwezigheid van licht) geven aan dat de ontbinding van dergelijke cyanidecomplexen in grondwater erg traag gebeurt. Bij blootstelling aan zonlicht daarentegen ontbinden ijzercyanidecomplexen erg snel.

Behalve voormeld gedrag dat zich in belangrijke mate afspeelt in de opgeloste fase, is ook de neerslag tot Berlijns blauw in de vaste fase zeer belangrijk. In waterige oplossing dissocieert Berlijns blauw, resulterend in onder andere $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$ en hydroxiden in de vaste toestand. Het hexacyanoferraat(II)ion kan voorkomen als dibasisch, tribasisch of tetrabasisch ion afhankelijk van de pH. Voor details wordt wederom verwezen naar Meeussen 1992.

Bij een pH zoals voorkomend in zure bodems, is de oplosbaarheid van Berlijns blauw veel lager, zodat neerslag van opgeloste ijzercyanidecomplexen kan optreden.

Algemeen mag men stellen dat wanneer Berlijns blauw neerslaat in de bodem, ijzerhydroxide omgezet zal worden in Berlijns blauw. Indien Berlijns blauw oplost, zal ijzerhydroxide gevormd worden. Bijgevolg hangt de evenwichtsconcentratie van ijzercyanidecomplexen niet alleen af van de oplosbaarheid van Berlijns blauw, maar ook van de oplosbaarheid van het aanwezige ijzerhydroxide.

Overeenkomstig de berekeningen zal Berlijns blauw niet neerslaan in alkalische bodems bij de aangetroffen cyanideconcentraties op de verontreinigde sites. De complexen zullen erg mobiel zijn in bodems met hoge pH. Hoge cyanideconcentraties zullen aangetroffen worden in het grondwater. In zure bodems is neerslag van Berlijns blauw te verwachten. Dit beperkt de mobiliteit en in het grondwater zal slechts een geringe concentratie aangetroffen worden. Dit wordt bevestigd door metingen.

In bodems met een hoge pH wordt tientallen jaren na storting van ijzercyaniden nog steeds cyanide in de vorm van Berlijns blauw aangetroffen, ondanks de goede oplosbaarheid onder die omstandigheden. Men vermoedt dat dit veroorzaakt wordt door de erg lage, mogelijk transport-gelimiteerde (adsorptie, precipitatie van andere ijzercyanidemineralen welke ijzercyanide binden aan de vaste fase) oplossingsnelheid van Berlijns blauw. Recente gegevens suggereren dat de oplosbaarheid gestuurd wordt door evenwicht met mangaanijzercyanide ($\text{Mn}_2\text{Fe}(\text{CN})_6$ (s)). Dit mineraal heeft een veel lagere oplosbaarheid (geschat: $\log K_s = -24$) welke afhangt van de pH, de redoxpotential, de totale hoeveelheid beschikbaar Mn en de oplosbaarheid van mangaanoxide aanwezig in de bodem (M.G. Keizer et al. 1995).

3.2.2 Bodemverontreiniging door andere metaalcyanidecomplexen

Wanneer cyanide in de bodem terechtkomt dient men niet alleen de gevormde ijzercyanidecomplexen te beschouwen, maar ook de complexen met andere metaalionen aanwezig in de bodem. In de metaal- (kopercyaniden, zinkcyaniden, cadmiumcyaniden), de verf- (bloedloogzouten), de grafische industrie (zilvecyaniden) en de mijnbouw worden eveneens cyaniden gebruikt. De bodemverontreiniging veroorzaakt door dergelijke activiteiten is niet vergelijkbaar met bodemverontreiniging veroorzaakt door gasfabrieken. Dergelijke emissies zijn zeker belangrijk voor oppervlaktewater maar worden doorgaans als middelmatig beschouwd voor bodem op basis van een studie van voormalige bedrijfsactiviteiten in Noord-Brabant (J. Nieuwkoop 1993). Op dit ogenblik is het onduidelijk in welke mate dergelijke cyanideverontreinigingen bijdragen tot de bodemverontreiniging in Vlaanderen.

Cyanide vormt een hele reeks van complexen met verschillende transitietalen. De gecumuleerde vormingsconstanten (ook wel stabiliteitsconstante genoemd) bekomen onder standaard testmethoden, zijn weergegeven in tabel 3. Een hoge vormingsconstante betekent dat het evenwicht naar het complex ligt en dat dus het complex het dominerend species is. Zn en Cd vormen

gemakkelijk ontbindbare complexen in tegenstelling tot Co en Fe. De stabiliteit van de Ni en Cu-complexen is intermediair tussen voornoemden (E.L. Towill et al. 1978).

De dissociatie van het complex speelt een belangrijke rol in de toxiciteit omwille van de vrijstelling van vrij cyanide.

Wanneer enkel thermodynamische aspecten spelen, zijn voormelde complexen minder stabiel dan ijzercyanidecomplexen (uitgezonderd cobaltcyanidecomplexen). De bodemkenmerken bepalen uiteraard de thermodynamische ligging van het evenwicht (cfr. ijzercyanidecomplexen). Het is op dit ogenblik niet duidelijk in welke mate voor deze metalen de thermodynamische stabiliteit van de cyanidecomplexen beïnvloed wordt door onder andere de zuurtegraad en overeenstemmende redoxprocessen aangetroffen in natuurlijke bodems. De literatuurgegevens (T.L. Theis et al. 1994, N.S. Shifrin et al. 1996, M.T. Beck 1987) suggereren dat de stabiliteit van metaalcyaniden (uitgezonderd ijzer- en cobaltcyanidecomplexen) zo laag is dat deze onder normale bodemomstandigheden indien niet volledig dan toch voor een belangrijk deel dissociëren in vrije cyanide- en metaalionen.

3.3 Bodemverontreiniging door vrije cyaniden

In geval van bodemverontreiniging door cyaniden in vrije vorm, zal cyanide enkel reageren met ijzer(hydr)oxide met vorming van hexacyanoferraat in aanwezigheid van zeer hoge concentraties vrij cyanide. Bij lage vrije cyanideconcentraties zal helemaal geen hexacyanoferraat gevormd worden en blijft cyanide aanwezig in de vrije vorm. Bijgevolg zal er in de laatste situatie steeds een significante bodemverontreiniging zijn door vrije cyaniden. In dit geval zal de cyanideverontreiniging, onafhankelijk van de pH, zich vrijwel uitsluitend in de water- of gasfase bevinden. De pKa van HCN bedraagt 9,2 wat tot gevolg heeft dat bij normale bodemomstandigheden een aanzienlijk deel van het cyanide als HCN aanwezig is en dus kan vervluchtigen. De dampdruk van HCN bedraagt 58,8 kPa bij 13°C. Een dergelijke verontreiniging is zeer mobiel en zal zich ook via verdamping kunnen verspreiden. Lage concentraties aan vrije cyaniden zijn biodegradeerbaar onder aërobe omstandigheden (H. Meeussen et al. 1993). Biodegradatie is een belangrijk proces in natuurlijk oppervlaktewater en afhankelijk van onder andere pH, temperatuur, beschikbaarheid van voedingsstoffen en dergelijke. Weinig is geweten over biodegradatie en stabiliteit van cyaniden onder anaërobe omstandigheden.

4. REFERENTIES

Acros Organics Catalog, 'Material Safety Data Sheet Prussian blue', <http://www.fisher1.com/fb/itv?16..f97.1.msa0013.47..1.9>, 11.09.1998.

Agency for Toxic Substances and Disease Registry U.S. Department of Health and Human Services, Division of Toxicology in cooperation with the U.S. Environmental Protection Agency 'Toxicological Profile for Cyanide ' (1997).

J.O. Egekeze, F.W. Oehme, 'Cyanides and their toxicity: A literature review', the Veterinay Quaterly, vol. 2, 104-114 (1980).

International Agency for Research on Cancer, "International Agency for Research on Cancer IARC (online database <http://www.iarc.fr>)" (1998).

IRIS, "Integrated Risk Information System (IRIS) (online database <http://www.epa.gov/ngispgm3/iris/>)", U.S. Environmental Protection Agency, Office of Health and Environmental Assessment, Environmental Criteria and Assessment Office, Cincinnati, OH,(1998).

J. Nouwen, C. Cornelis, G. Schoeters en P. Geuzens 'Normering van bodemverontreiniging door cyaniden', VITO-rapport 1998/DIA/R/205, een studie uitgevoerd in opdracht van de OVAM (1998).

H. Meeussen, 'Chemical Speciation and Behaviour of Cyanide in Contaminated Soils', Ph. D., 133p., (1992).

J. Pearce, 'Studies of any toxicological effects of Prussian blue compounds in mammals- a review', Fd. Chem. Toxic., vol. 32, nr. 6, p. 577-582 (1994).

L. E. Towill, J.S. Drury, B.L. Whitfield, E.B. Lewis, E.L. Calyan, A.S. Hammons, 'Reviews of the environmental effects of pollutants V. Cyanide', 190 p., (1978).

T.G. Vermeire, M.E. Apeldoorn, J.C. Fouw, P.J.C.M. Janssen, "Voorstel voor de humaantoxicologische onderbouwing van C-(toetsings)waarden", RIVM report 725201005 (1991).

A. Wallace, J.W. Cha, R.T. Mueller, 'Cyanide effects on transport of trace metals in plants', Commun. in Soil Science and Plant Analysis, vol.8 (9), p. 709-712, (1977).

A. Wallace, E.M. Romney, R.T. Mueller, Sr., M. Soufi, 'Plant uptake and transport of ²⁴¹Am', Soil Science, vol. 132, p. 114-119, (1981).

World Health Organization, 'Guidelines for drinking-water quality, Health criteria and other supporting information", Volume 2, Geneva, Second Edition 92-4-154480-5 (1996).

TECHNISCHE FICHE VLUCHTIGE GECHLOREERDE ORGANISCHE STOFFEN

Voor details wordt verwezen naar 'Finale voorstel tot normering van bodemverontreiniging door gechloreerde solventen', VITO-rapport 1998/DIA/R/105 van augustus 1998 door J. Nouwen, C. Cornelis, een studie uitgevoerd in opdracht van de OVAM.

1. GEGEVENS GEBRUIKT BIJ DE BEREKENINGEN VOOR DE GECHLOREERDE ORGANISCHE STOFFEN

De gegevens werden ingevoerd gebaseerd op een organische stof (1,2-dichloorethaan).

1.1 1,1,1-trichloorethaan

parameter	eenheid	Waarde	bron	opm.
Molmassa	g/mol	133,41	Verschueren 1996	
Oplosbaarheid	g/m ³	1023 (20°C)		(1)
Dampdruk	Pa	14346 (20°C)		(2)
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	726 (10°C)		(3)
Kow	g/g	10 ^{2,45}		(4)
Koc	dm ³ /kg	10 ^{2,01}		(5)
Kd	kg/dm ³			(6)
BCFwo	droge stof	-		
BCFst	droge stof	-		
Dpe	m ² /d	2.10 ⁻⁶	Kreule et al. 1995	
Dpvc	m ² /d	2.10 ⁻⁹		
Diffusiecoëfficiënt lucht	m ² /h	-		
Diffusiecoëfficiënt water	m ² /h	-		
Facing	-	1,0		
Facinh	-	1,0		
DARvolw	1/h	5.10 ⁻³		(7)
DARkind	1/h	1.10 ⁻²		(7)
TDIoraal	mg/kg d	0,580	WHO 1996	(8)
TDlinhalatoir	mg/kg d	0,233	Hassauer et al. 1993	(9)
TCL	g/m ³	8,2.10 ⁻⁴		(10)
Limiet drinkwater	g/m ³	2	WHO 1996	(11)
Limiet plant toxisch	mg/kg vs	-		
Gewasnorm	mg/kg vs	-		
Vleesnorm	mg/kg vs	-		
Achtergrond lucht	g/m ³	0,3. 10 ⁻⁶ type II, III, IV 0,8.10 ⁻⁶ type V	VMM 1995-1996	
Achtergrond voeding	mg/kg d	0,07. 10 ⁻³	PCJM Jansen et al. 1995	
Achtergrond inhalatoir	mg/kg d	1,43. 10 ⁻⁴ type V		
Carcinogeniciteit		Klasse 3	IARC	(12)

(1) De oplosbaarheid is het gemiddelde van 6 gegevens.

(2) Voor de dampdruk werd gebruik gemaakt van het gemiddelde van 6 metingen, gezien de talrijke data bij 20 °C.

(3) De Henry-coëfficiënt werd berekend door regressie op basis van 23 metingen.

(4) Kow is het geometrisch gemiddelde van 12 gegevens.

(5) Koc is het geometrisch gemiddelde van 8 gegevens.

(6) Kd-gegevens waren beschikbaar maar werden niet gebruikt. Kd werd berekend op basis van Koc.

(7) Standaard aanname

(8) De TDIoraal is slechts provisioneel

- (9) De TDlinhalatoir met referentie WHO (1987) werd buiten beschouwing gelaten aangezien de originele referentie niet kon geverifieerd worden.
 (10) Berekend uit TDlinhalatoir (Hassauer et al. 1993)
 (11) Provisionele waarde
 (12) Berekening uitgevoerd als niet carcinogeen

1.2 1,1,2-trichloorethaan

parameter	eenheid	Waarde	bron	opm.
Molmassa	g/mol	133,41	Verschueren 1996	
Oplosbaarheid	g/m ³	4440 (20°C)		(1)
Dampdruk	Pa	2533 (20°C)		(2)
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	80 (20°C)		(3)
Kow	g/g	10 ^{2,10}		(4)
Koc	dm ³ /kg	10 ^{1,80}		(5)
Kd	kg/dm ³	Niet gebruikt		(6)
BCFwo	droge stof	-		
BCFst	droge stof	-		
Dpe	m ² /d	2. 10 ⁻⁶		(7)
Dpvc	m ² /d	2.10 ⁻⁹		
Diffusiecoëfficiënt lucht	m ² /h	-		
Diffusiecoëfficiënt water	m ² /h	-		
Facing	-	1,0		
Facinh	-	1,0		
DARvolw	1/h	5.10 ⁻³		(8)
DARkind	1/h	1.10 ⁻²		(8)
TDloraal	mg/kg d	4.10 ⁻³	IRIS 1998	
TDlinhalatoir	mg/kg d	11.10 ⁻³	Hassauer 1993	
TCI	g/m ³	39.10 ⁻⁶		(9)
Limiet drinkwater	g/m ³	0,012		(10)
Limiet plant toxisch	mg/kg vs	-		
Gewasnorm	mg/kg vs	-		
Vleesnorm	mg/kg vs	-		
Achtergrond lucht	g/m ³	4,9.10 ⁻⁷	E.J. Van de Plassche et al. 1993	
Achtergrond voeding	mg/kg d	0		
Achtergrond inhalatoir	mg/kg d	3,1. 10 ⁻⁵ type V		
Carcinogeniciteit		Klasse 3	IARC	(11)

- (1) De oplosbaarheid is het gemiddelde van 4 gegevens.
 (2) Voor de dampdruk werd gebruik gemaakt van het gemiddelde van 2 metingen en niet van de regressieresultaten gelet op de beperkte data.
 (3) De Henry-coëfficiënt werd berekend op basis van het gemiddelde van 4 metingen en niet op basis van de regressieresultaten gelet op de beperkte data. De Henry-coëfficiënt dient aan de hand van de formules van VLIER-HUMAAN omgerekend worden naar deze bij 10°C, gezien geen gegevens bij 10°C beschikbaar waren.
 (4) Kow is het geometrisch gemiddelde van 6 gegevens.
 (5) Koc is het geometrisch gemiddelde van 12 gegevens.
 (6) Kd-gegevens waren beschikbaar maar werden niet gebruikt. Kd werd berekend op basis van Koc.
 (7) Idem als 1,1,1-trichloorethaan, gezien de structuurgelijkenis.
 (8) Standaard aanname
 (9) Berekend uit TDlinhalatoir (Hassauer et al. 1993)
 (10) Berekend uit TDloraal (IRIS)
 (11) Berekening uitgevoerd als niet carcinogeen

1.3 1,1-dichloorethaan

parameter	eenheid	Waarde	bron	opm.
-----------	---------	--------	------	------

Molmassa	g/mol	98,96	Verschuieren 1996	
Oplosbaarheid	g/m ³	5400 (20°C)		(1)
Dampdruk	Pa	25771 (20°C)		(2)
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	249 (10°C)		(3)
Kow	g/g	10 ^{1,79}		(4)
Koc	dm ³ /kg	10 ^{1,55}		(5)
Kd	kg/dm ³	Niet gebruikt		(6)
BCFwo	droge stof	-		
BCFst	droge stof	-		
Dpe	m ² /d	3. 10 ⁻⁷	Kreule et al. 1995	
Dpvc	m ² /d	3.10 ⁻¹⁰	Kreule et al. 1995	
Diffusiecoëfficiënt lucht	m ² /h	-		
Diffusiecoëfficiënt water	m ² /h	-		
Facing	-	1,0		
Facinh	-	1,0		
DARvolw	1/h	5.10 ⁻³		(7)
DARkind	1/h	1.10 ⁻²		(7)
TDloraal	mg/kg d	0,08	Kreule et al. 1995	(8)
TDlinhalatoir	mg/kg d	0,11		(9)
TCI	g/m ³	0,370.10 ⁻³ (TCA)	PCJM Jansen et al. 1995	
Limiet drinkwater	g/m ³	0,24		(10)
Limiet plant toxisch	mg/kg vs	-		
Gewasnorm	mg/kg vs	-		
Vleesnorm	mg/kg vs	-		
Achtergrond lucht	mg/kg d	0,0		
Achtergrond voeding	mg/kg d	5. 10 ⁻⁵		
Achtergrond inhalatoir	mg/kg d	0,0		
Carcinogeniciteit		Klasse 3	IARC	(11)

- (1) De oplosbaarheid is het gemiddelde van 5 gegevens.
(2) De dampdruk werd berekend door regressie van 13 data.
(3) De Henry-coëfficiënt werd berekend op basis van regressie van 15 data.
(4) Kow is het geometrisch gemiddelde van 7 gegevens.
(5) Koc is het geometrisch gemiddelde van 6 gegevens.
(6) Kd-gegevens waren beschikbaar maar werden niet gebruikt. Kd werd berekend op basis van Koc.
(7) Standaard aanname
(8) De gerapporteerde waarde is provisioneel. Gezien de originele referentie niet gecontroleerd kon worden, werd de TDloraal met referentie WHO 1987 niet beschouwd.
(9) Berekend uit TCL(RIVM). Gezien de originele referentie niet gecontroleerd kon worden, werd de TDlinhalatoir met referentie WHO 1987 niet beschouwd.
(10) Berekend uit TDloraal (RIVM)
(11) Berekening uitgevoerd als niet carcinogeen

1.4 Cis-1,2-dichlooretheen

parameter	eenheid	waarde	bron	opm.
Molmassa	g/mol	96,95	Verschuieren 1996	
Oplosbaarheid	g/m ³	800 (20°C)		(1)
Dampdruk	Pa	20990 (20°C)		(2)
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	226 (10°C)		(3)
Kow	g/g	10 ^{1,14}		(4)
Koc	dm ³ /kg	10 ^{1,67}		(4)
Kd	kg/dm ³			(5)
BCFwo	droge stof	-		
BCFst	droge stof	-		

Dpe	m ² /d	4. 10 ⁻⁸	Kreule et al. 1995	
Dpvc	m ² /d	4.10 ⁻¹¹		
Diffusiecoëfficiënt lucht	m ² /h	-		
Diffusiecoëfficiënt water	m ² /h	-		
Facing	-	1,0		
Facinh	-	1,0		
DARvolw	1/h	5.10 ⁻³		(6)
DARkind	1/h	1.10 ⁻²		(6)
TDloraal	mg/kg d	0,017	WHO 1996*	
TDlinhalatoir	mg/kg d	8,6.10 ⁻³		(7)
TCL	g/m ³	3.10 ⁻⁵	Kreule et al. 1995	(8)
Limiet drinkwater	g/m ³	50.10 ⁻³	WHO 1996*	
Limiet plant toxisch	mg/kg vs	-		
Gewasnorm	mg/kg vs	-		
Vleesnorm	mg/kg vs	-		
Achtergrond lucht	g/m ³	0,04.10 ⁻⁶ type II,III,IV 0,3.10 ⁻⁶ type V	WHO 1996	
Achtergrond voeding	mg/kg d	0,15.10 ⁻³	Kreule et al. 1995**	
Achtergrond inhalatoir	mg/kg d	1,8. 10 ⁻⁵ type V		
Carcinogeniciteit		Niet geëvalueerd D	IARC IRIS	(9)

* voor cis- en trans-isomeer

** niet gespecificeerd voor de afzonderlijke isomeren

- (1) De oplosbaarheid is het gemiddelde van 2 gegevens.
- (2) De dampdruk werd berekend door regressie van 9 data.
- (3) De Henry-coëfficiënt werd berekend op basis van de regressie van 8 data.
- (4) Kow en Koc zijn het geometrisch gemiddelde van 4 gegevens.
- (5) Kd-gegevens waren beschikbaar maar werden niet gebruikt. Kd werd berekend op basis van Koc.
- (6) Standaard aanname
- (7) Berekend uit TCL-(RIVM)
- (8) Provisionele waarde
- (9) Berekening uitgevoerd als niet carcinogeen

1.5 Trans-1,2-dichlooretheen

parameter	eenheid	waarde	bron	opm.
Molmassa	g/mol	96,95	Verschuieren 1996	
Oplosbaarheid	g/m ³	600 (20°C)		(1)
Dampdruk	Pa	34438 (20°C)		(2)
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	449 (10°C)		(3)
Kow	g/g	10 ^{1,41}		(4)
Koc	dm ³ /kg	10 ^{1,68}		(5)
Kd	kg/dm ³			(6)
BCFwo	droge stof	-		
BCFst	droge stof	-		
Dpe	m ² /d	4. 10 ⁻⁸	Kreule et al. 1995	
Dpvc	m ² /d	4.10 ⁻¹¹		
Diffusiecoëfficiënt lucht	m ² /h	-		
Diffusiecoëfficiënt water	m ² /h	-		
Facing	-	1,0		
Facinh	-	1,0		
DARvolw	1/h	5.10 ⁻³		(7)
DARkind	1/h	1.10 ⁻²		(7)
TDloraal	mg/kg d	0,017	WHO 1996*	
TDlinhalatoir	mg/kg d	2,3.10 ⁻²		(8)

TCl	g/m ³	8.10 ⁻⁵	Kreule et al. 1995	(9)
Limiet drinkwater	g/m ³	50.10 ⁻³	WHO 1996*	
Limiet plant toxisch	mg/kg vs	-		
Gewasnorm	mg/kg vs	-		
Vleesnorm	mg/kg vs	-		
Achtergrond lucht	g/m ³	10,3 .10 ⁻⁶	WHO 1996*	
Achtergrond voeding	mg/kg d	0,15.10 ⁻³	Kreule et al. 1995**	
Achtergrond inhalatoir	mg/kg d	6,38. 10 ⁻⁴ type V		
Carcinogeniciteit		Niet geëvalueerd D	IARC, IRIS	(10)
			US-EPA drinkwaterrichtlijnen	

* voor cis- en trans-isomeer

** niet gespecificeerd voor de afzonderlijke isomeren

- (1) De oplosbaarheid is het gemiddelde van 2 gegevens.
- (2) De dampdruk werd berekend door regressie van 9 data.
- (3) De Henry-coëfficiënt werd berekend op basis van de regressie van 11 data.
- (4) Kow is het geometrisch gemiddelde van 3 gegevens.
- (5) Koc is het geometrisch gemiddelde van 5 gegevens.
- (6) Kd-gegevens waren beschikbaar maar werden niet gebruikt. Kd werd berekend op basis van Koc.
- (7) Standaard aanname
- (8) Berekend uit TCl-(RIVM)
- (9) Provisionele waarde
- (10) Berekening uitgevoerd als niet carcinogeen

2. GEDRAG IN BODEM EN GRONDWATER

2.1. 1,1,1-trichloorethaan

Geoaccumulatie wordt niet verwacht op basis van de fysico-chemische eigenschappen en bodemsorptie studies. De coëfficiënt Koc wijst op een lage bodemsorptie. Aldus mag een hoge mobiliteit in de bodem verwacht worden en bijgevolg uitloging naar het grondwater.

De halfwaardetijd in een niet-verontreinigde anaërobe aquifer varieert met de organische koolstofinhoud van 9 dagen (1 % organische stof) tot 16 jaar (0,001 %). Biodegradatie halfwaardetijden in bodem variëren van 6 tot meer dan 485 dagen, afhankelijk van de omstandigheden.

2.2. 1,1,2-trichloorethaan

Als 1,1,2-Trichloorethaan vrijgesteld wordt in de bodem wordt het uitgelooft naar het grondwater (lage Koc). Vanuit het grondwater vervluchtigt het in de atmosfeer. In het grondwater treedt anaërobe biodegradatie op. Informatie over de reactiesnelheden ontbreekt of is niet altijd even eënduidig. Het mechanisme van de biodegradatie is reductieve dehalogenering. De beperkte data die beschikbaar zijn suggereren zeer langzame biodegradatie. De halfwaardetijd voor afbraak van 1,1,2-trichloorethaan in een niet-verontreinigde anaërobe aquifer varieert met de organische koolstofinhoud van 6 dagen (1 % organische stof) tot 16 jaar (0,001 %). Sommige studies spreken zelfs over jaren wanneer het degradatie in bodem en grondwater betreft. In de bodem kan afhankelijk van de omstandigheden (o. a. geschikt inoculum) biodegradatie optreden.

2.3. 1,1-Dichloorethaan

De fysico-chemische eigenschappen geven aan dat de stof vlot uitlooft naar het grondwater. De stof is relatief goed wateroplosbaar, adsorbeert slecht aan de bodem (lage Koc). De halfwaardetijd van 1,1-dichloorethaan voor bodemverdamping wordt verondersteld langer te zijn dan de halfwaardetijd voor verdamping uit water. Het verlies van 1,1-dichloorethaan uit de bodem door biodegradatie wordt verondersteld verwaarloosbaar te zijn. Vervluchtiging uit de bodem draagt in belangrijke mate bij tot de verwijdering van 1,1-dichloorethaan uit de bodem (ATSDR 1997).

2.4. Cis- en trans-1,2-dichlooretheen

Op basis van de Koc-waarde is absorptie aan bodem, sediment en gesuspendeerde deeltjes weinig waarschijnlijk. Aldus moet rekening gehouden worden met uitloging naar het grondwater. In de bodem treedt anaërobie biodegradatie op. De halfwaardetijd wordt geschat op 6 maanden.

REFERENTIES

M. Hassauer, F. Kalberlah, J. Oltmanns, K. Schneider, "Basisdaten Toxikologie für Umweltrelevante Stoffe zur Gefahrenbeurteilung bei Altlasten", Eds. Erich Schmidt Verlag Berlin, ISBN 3-503-03467-6 (1993).

International Agency for Research on Cancer, "International Agency for Research on Cancer IARC (online database)" (1998).

IRIS, "Integrated Risk Information System (IRIS) (online database)", U.S. Environmental Protection Agency, Office of Health and Environmental Assessment, Environmental Criteria and Assessment Office, Cincinnati, OH, (1998). (Op internet <http://www.epa.gov/ngispgm3/iris/>)

P.J.C.M. Janssen, M.E. van Apeldoorn, J.E.M. van Koten-Vermeulen & W.C. Mennes, "Human-Toxicological Criteria for Serious Soil Contamination: Compounds evaluated in 1993 & 1994", RIVM report 715810009 (1995).

P. Kreule, R. van den Berg, M.F.W. Waitz, F.A. Swartjes, "Calculation of human-toxicological serious soil contamination concentrations and proposals for intervention values for clean-up of soil and groundwater: Third series of compounds", RIVM report 715810010 (1995).

J. Nouwen, C. Cornelis, "Finale voorstel tot normering van bodemverontreiniging door gechloreerde solventen", VITO-rapport 1998/DIA/R/105, een studie uitgevoerd in opdracht van de OVAM (1998).

E.J. van de Plassche, G.J.M. Bockting, "Towards integrated environmental quality objectives for several volatile compounds", RIVM report 679101011 (1993).

Karel Verschueren "Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals", Van Nostrand Reinhold, New York, Third Edition, ISBN 0-442-01916-5 (1996).

Vlaamse Milieumaatschappij, "Luchtkwaliteit 1995-1996", Jaarverslag Immissiemeetnet 1995-1996.

World Health Organization, Regional Office for Europe, "Air quality guidelines for Europe", WHO Regional Publications, European Series 23, Copenhagen, ISBN 92-890-1114-9 (1987).

World Health Organization, "Guidelines for drinking-water quality, Health criteria and other supporting information", Volume 2, Geneva, Second Edition 92-4-154480-5 (1996).

TECHNISCHE FICHE PESTICIDEN

Voor details wordt verwezen naar 'Voorbereiding normering pesticiden', VITO-rapport 1998/DIA/R/128 van september 1998 door J. Nouwen, C. Cornelis en L. Kinnaer, een studie uitgevoerd in opdracht van de OVAM.

1. RELEVANTE TOXICOLOGISCHE GEGEVENS

1.1 DDT en metabolieten

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
molmassa	g/mol	355,49	ATSDR 1997
oplosbaarheid	g/m ³	0,0034 (25°C) 0,001 0,003	ATSDR 1997 WHO 1996 RIVM 1994a
dampdruk	Pa	7,33 · 10 ⁻⁴ (20°C) 2,53 · 10 ⁻⁵ (20°C)	ATSDR 1997 WHO 1996
Henry-coëfficiënt	atm m ³ /mol	51,98 (25°C)	ATSDR 1997
Kow	g/g	10 ^{6,19} 10 ^{7,48} 10 ^{6,91}	ATSDR 1997 WHO 1996 RIVM 1994a
Koc	dm ³ /kg	10 ^{5,38} 10 ^{5,63}	ATSDR 1997 RIVM 1994a
TDloraal	mg/kg d	2 · 10 ⁻² DDT+DDE+DDD 5 · 10 ⁻⁴	WHO 1996 IPCS RIVM 1991 IRIS
TCI	g/m ³	5 · 10 ⁻⁴ (TWA)*	ACGIH
Limiet drinkwater	g/m ³	2 · 10 ⁻³ DDT+DDE+DDD	WHO 1996
Achtergrond lucht	g/m ³	1-22 · 10 ⁻⁹ (landbouwgebied) <1-2,36 · 10 ⁻⁹ (niet landbouwgebied)	WHO 1996
Achtergrond voeding	mg/kg d	2,9 · 10 ⁻⁵ 1,0 · 10 ⁻⁴	WHO 1996 RIVM 1991
Classificatie carcinogeniteit		2B B2	IARC IRIS

* Tijd gewogen gemiddelde blootstellingsconcentratie voor een normale 8 tot 10 uren werkdag en een 40 uren werkweek.

1.2 Aldrin/dieldrin

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
molmassa	g/mol	364,93	ATSDR 1997
oplosbaarheid	g/m ³	0,2 (25°C) 0,027 (20°C) aldrin 0,186 (20°C) technisch dieldrin 0,17 dieldrin	ATSDR 1997 WHO 1996 WHO 1996 RIVM 1994a
dampdruk	Pa	1,0. 10 ⁻³ (20°C) aldrin 1,9. 10 ⁻² (25°C) aldrin 8,6. 10 ⁻³ (20°C) aldrin 4. 10 ⁻⁴ (20°C) technisch dieldrin 2,4. 10 ⁻⁵ (20°C) dieldrin 1,0. 10 ⁻⁴ (25°C) dieldrin	ATSDR 1997 ATSDR 1997 WHO 1996 WHO 1996 ATSDR 1997 ATSDR 1997
Henry-coëfficiënt	atm m ³ /mol	32,42 (25°C) aldrin 1,53 (25 °C) dieldrin	ATSDR 1997 ATSDR 1997
Kow	g/g	10 ^{3,01} aldrin 10 ^{3,0} aldrin 10 ^{4,6} technisch dieldrin 10 ^{4,32} dieldrin 10 ^{4,55} dieldrin	ATSDR 1997 WHO 1996 WHO 1996 RIVM 1994a ATSDR 1997
Koc	dm ³ /kg	10 ^{4,69} aldrin 10 ^{3,87} dieldrin	ATSDR 1997 ATSDR 1997
TDloraal	mg/kg d	1. 10 ⁻⁴ aldrin + dieldrin 3. 10 ⁻⁵ aldrin 5. 10 ⁻⁵ dieldrin	WHO 1996 IPCS 1996 RIVM 1991 IRIS IRIS
TCI	g/m ³	2,5. 10 ⁻⁴ (TWA)* aldrin 2,5. 10 ⁻⁴ (TWA)* dieldrin	ACGIH
Limiet drinkwater	g/m ³	3 . 10 ⁻⁵ aldrin + dieldrin	WHO 1996
Achtergrond lucht	g/m ³	4,0. 10 ⁻⁸ (buiten) dieldrin 4,0 - 700,0. 10 ⁻⁸ (binnen) dieldrin	WHO 1996
Achtergrond voeding	mg/kg d	1,0.10 ⁻⁴ (1978) dieldrin 0,0 - 2,0.10 ⁻⁴ (1980-1982) dieldrin < 4,3 . 10 ⁻⁸ 2,5. 10 ⁻⁴ dieldrin	WHO 1996 WHO 1996 RIVM 1991
Classificatie carcinogeniteit		3 aldrin + dieldrin B2 aldrin + dieldrin	IARC IRIS

* Tijd gewogen gemiddelde blootstellingsconcentratie voor een normale 8 tot 10 uren werkdag en een 40 uren werkweek.

1.3 Lindaan en isomeren

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
molmassa	g/mol	290,83 ($\alpha, \beta, \gamma, \delta$ -HCH)	ATSDR 1997
oplosbaarheid	g/m ³	17 (25°C) (γ -HCH) 7-17 (20°C) (γ -HCH) 7,3 (γ -HCH) 10 (25 °C) (α, δ -HCH) 5 (25 °C) (β -HCH)	ATSDR 1997 WHO 1996 RIVM 1994a ATSDR 1997 ATSDR 1997
dampdruk	Pa	1,25. 10 ⁻³ (20°C) (γ -HCH) 4,34. 10 ⁻³ (20°C) (γ -HCH) 2,66 (20 °C) (α, δ -HCH) 6,7. 10 ⁻¹ (β -HCH)	ATSDR 1997 WHO 1996 ATSDR 1997 ATSDR 1997
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	3,2-7,9. 10 ⁻¹ (25°C) (γ -HCH) 4,8-6,8. 10 ⁻¹ (25°C) (α -HCH) 4,6. 10 ⁻² (25°C) (β -HCH) 2,1. 10 ⁻² (25°C) (δ -HCH)	ATSDR 1997 ATSDR 1997 ATSDR 1997 ATSDR 1997
Kow	g/g	10 ^{3,3-3,61} (γ -HCH) 10 ^{3,2-3,7} (γ -HCH) 10 ^{3,61} (γ -HCH) 10 ^{3,46-3,85} (α -HCH) 10 ^{3,78-4,50} (β -HCH) 10 ^{2,8-4,14} (δ -HCH)	ATSDR 1997 WHO 1996 RIVM 1994a ATSDR 1997 ATSDR 1997 ATSDR 1997
Koc	dm ³ /kg	10 ^{3,0-3,57} (γ -HCH) 10 ^{2,98} (γ -HCH) 10 ^{3,57} (α, β -HCH) 10 ^{3,8} (δ -HCH)	ATSDR 1997 RIVM 1994a ATSDR 1997 ATSDR 1997
TDloraal	mg/kg d	5. 10 ⁻³ (γ -HCH) 3 . 10 ⁻⁴ (γ -HCH) 2. 10 ⁻⁵ (β -HCH) 1. 10 ⁻³ (α, γ, δ -HCH) 8. 10 ⁻³ (γ -HCH, JMPR 1989)	WHO 1996, IRIS RIVM 1991 RIVM 1991 IPCS 1996
TCI	g/m ³	5. 10 ⁻⁴ (TWA)* (γ -HCH) 2,5. 10 ⁻⁷ (α, γ, δ -HCH)	ACGH RIVM 1991
Limiet drinkwater	g/m ³	2. 10 ⁻³ (γ -HCH) 6. 10 ⁻⁵ (α -HCH) 2. 10 ⁻⁴ (β -HCH)	WHO 1996 IRIS IRIS
Achtergrond lucht	g/m ³	0,01-0,7. 10 ⁻⁹ (achtergrondgebied) (γ -HCH) 0,1-2. 10 ⁻⁹ (stedelijke en landbouwgebieden) (γ -HCH) 6-60. 10 ⁻⁶ (binnen) (γ -HCH)	WHO 1996
Achtergrond voeding	mg/kg d	15. 10 ⁻⁶ (α, β, γ -HCH, Nederland) 3 . 10 ⁻⁵ (α, γ, δ -HCH) 1,4. 10 ⁻⁵ (α, γ, δ -HCH)	WHO 1996 RIVM 1991 RIVM 1991
Classificatie carcinogeniteit		2B (γ -HCH) B2 (α -HCH) C (β -HCH) D (δ, ϵ -HCH)	IARC IRIS IRIS IRIS

* Tijd gewogen gemiddelde blootstellingsconcentratie voor een normale 8 tot 10 uren werkdag en een 40 uren werkweek.

1.4 Endosulfan

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
molmassa	g/mol	406,95	ATSDR 1997
oplosbaarheid	g/m ³	0,15-0,16 (22°C) technisch 0,28* 0,28 (25 °C) α-endosulfan 0,53 (25 °C) β-endosulfan	ATSDR 1997 RIVM 1994b ATSDR 1997 ATSDR 1997
dampdruk	Pa	1,33. 10 ⁻³ (25°C) α,β, technisch 1,2 (80°C) technisch 1,74. 10 ⁻⁴ *	ATSDR 1997 RIVM 1994b
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	1,01 (25°C) α, technisch 1,09* 1,93 (25 °C) β-endosulfan	ATSDR 1997 RIVM 1994b ATSDR 1997
Kow	g/g	10 ^{5,55-3,62} technisch endosulfan 10 ^{3,73*} 10 ^{5,55-3,83} α-endosulfan 10 ^{5,52} β-endosulfan	ATSDR 1997 RIVM 1994b ATSDR 1997 ATSDR 1997
Koc	dm ³ /kg	10 ^{3,5} technisch endosulfan 10 ^{3,11*}	ATSDR 1997 RIVM 1994b
TDloraal	mg/kg d	6. 10 ⁻³ α + β-endosulfan + endosulfansulfaat 6. 10 ⁻³ α + β-endosulfan	IPCS IRIS, RIVM 1994b
TCI	g/m ³	1. 10 ⁻⁴ (TWA)**	ACGIH
Limiet drinkwater	g/m ³		
Achtergrond lucht	g/m ³		
Achtergrond voeding	mg/kg d		
Classificatie carcinogeniteit		Niet geklasseerd	

* Niet gespecificeerd

** Tijd gewogen gemiddelde blootstellingsconcentratie voor een normale 8 tot 10 uren werkdag en een 40 uren werkweek.

1.5 Chloordaan

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
molmassa	g/mol	409,76	ATSDR 1997
oplosbaarheid	g/m ³	0,056 (25°C) (cis:trans = 75:25) 1,85* 0,1 (25 °C) cis+trans 0,14 (cis+trans)	ATSDR 1997 ATSDR 1997 WHO 1996, RIVM 1994a RIVM 1994b
dampdruk	Pa	2,93 . 10 ⁻³ (20°C) cis 3,87. 10 ⁻³ (20°C) trans 6,1 10 ⁻² (25°C) (technisch) 1,3. 10 ⁻³ (25°C) (gezuiverd) 4,72 . 10 ⁻³ *	ATSDR 1997 WHO 1996 RIVM 1994b
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	4,91. 10 ⁻⁵ (25°C)* 8,42. 10 ⁻⁵ (25°C) trans 6,7 *	ATSDR 1997 ATSDR 1997 RIVM 1994b
Kow	g/g	10 ^{5,54} (gezuiverd) 10 ^{5,5} (gezuiverd) 10 ^{5,8} *	ATSDR 1997, RIVM 1994a WHO 1996 RIVM 1994b
Koc	dm ³ /kg	10 ^{3,49-4,6} (gezuiverd) 10 ^{6,3} trans 10 ^{4,6} *	ATSDR 1997 ATSDR 1997 RIVM 1994b
TDloraal	mg/kg d	5. 10 ⁻⁴ cis +trans 5. 10 ⁻⁴ technisch	WHO 1996 IPCS RIVM 1994b IRIS
TCI	g/m ³	7. 10 ⁻⁷ technisch 5. 10 ⁻⁴ (TWA)** cis + trans 2. 10 ⁻⁵ (tentatief) cis+trans	IRIS ACGIH RIVM 1994b
Limiet drinkwater	g/m ³	2 . 10 ⁻⁴ cis+trans	WHO 1996
Achtergrond lucht	g/m ³	0,1-60. 10 ⁻⁹ (stad) cis + trans 0,01-1. 10 ⁻⁹ (landelijk) cis + trans 1,0. 10 ⁻³ (binnen) cis + trans	WHO 1996
Achtergrond voeding	mg/kg d	Belangrijke bron van blootstelling voor de gewone bevolking	WHO 1996
Classificatie carcinogeniteit		2B cis + trans B2 technisch	IARC IRIS

* Niet gespecificeerd of het gaat om puur chloordaan, een mengsel van de isomeren of de afzonderlijke isomeren

** Tijd gewogen gemiddelde blootstellingsconcentratie voor een normale 8 tot 10 uren werkdag en een 40 uren werkweek.

2 GEDRAG IN DE BODEM

2.1 DDT en metabolieten

DDT blijft zeer lang aanwezig in de bodem. De gerapporteerde halfwaardetijden in bodem variëren van 2 tot 15 jaar. In de bodem kan DDT afgebroken worden door micro-organismen. Biodegradatie kan gebeuren zowel onder aërobe als onder anaërobe omstandigheden. Metabolieten zijn DDE en DDD. Deze metabolieten ondergaan verdere transformatie. De omvang en de snelheid hangen af van de toestand van de bodem en de microbiële populaties aanwezig in de bodem. Het is niet geweten of DDT hydrolyseert. Andere mechanismen die bijdragen tot de vermindering van DDT in de bodem zijn: transport door de wind bij opwaaien van kleine stofdeeltjes waaraan DDT gehecht is, verwijdering door oogst van gewassen, uitspoeling door water en foto-oxidatie aan de bodemoppervlakte. DDT hecht sterk aan bodemdeeltjes en spoelt nauwelijks uit naar het grondwater.

In water hecht DDT aan gesuspendeerde deeltjes en komt op die manier terecht in sedimenten. Foto-oxidatie, biodegradatie en vervluchtiging leiden tot verwijdering van DDT uit het watercompartiment. Het in water aanwezige DDE absorbeert het korte golflengte UV-licht en ondergaat snelle hydrolyse. Verder ondergaat DDE foto-isomerisatie bij blootstelling aan zonlicht. Fotolyse van deze isomeren verloopt merkelijk trager.

DDT aanwezig in bodem, sediment en water wordt opgenomen door planten en dieren en komt zo terecht in de voedselketen. De concentraties aangetroffen in deze organismen kunnen merkelijk hoger zijn dan de concentraties in het milieu, gezien de langzame afbraak en de accumulatie in vetweefsel (ATSDR 1997, WHO 1996).

2.2 Aldrin/dieldrin

Onder invloed van zonlicht en bacteriën wordt aldrin omgezet in dieldrin. In de bodem wordt aldrin omgezet naar dieldrin door epoxidatie. Dieldrin hecht zeer sterk aan bodemdeeltjes en blijft jaren onveranderd in de bodem aanwezig. Daardoor kan dieldrin over grote afstanden in de atmosfeer getransporteerd worden door depositie van bodemdeeltjes. Dieldrin wordt niet gemakkelijk uitgespoeld en lost zeer slecht op in water. Zowel in de bodem als in het water wordt dieldrin slechts zeer langzaam afgebroken. Het bodemcompartiment en de sedimenten worden het zwaarst belast met dieldrin. Vervluchtiging gebeurt langzaam ten gevolge van de lage dampdruk. Het relatief verlies aan aldrin en dieldrin uit de bodem gedurende de eerste maanden na de toepassing wordt toegeschreven aan vervluchtiging en bedraagt ongeveer 50 %. In warme klimatologische omstandigheden kan dit zelfs oplopen tot 90 %. Zowel aldrin als dieldrin logen slecht uit naar het grondwater. De concentraties van aldrin en dieldrin in waterige middelen zijn doorgaans lager dan 10 ng/l. Hogere niveaus zijn toe te schrijven aan verontreiniging van industriële oorsprong en bodemerosie gedurende landbouwtoepassingen. Dieldrin is veel resistenter ten opzichte van biodegradatie dan aldrin zoals blijkt uit de halfwaardetijden in de bodem (Dieldrin: $T_{1/2} = 868$ dagen, Aldrin: $T_{1/2} = 53$ dagen). Aldrin en dieldrin vertonen sterke bioaccumulatie. In planten is dieldrin voornamelijk gelokaliseerd in de wortels. Aanwezigheid in het blad is zowel het gevolg van transport vanuit de wortels als dampabsorptie vanuit de lucht (ATSDR 1997, WHO 1996).

2.3 Lindaan en isomeren

In de bodem wordt lindaan voornamelijk afgebroken door biodegradatie tot minder toxische substanties. Afhankelijk van de organismen die aanwezig zijn, wordt lindaan gemetaboliseerd tot tetrachloorhexeen, tri-, tetra-, en pentachloorbenzenen, penta- en tetracyclohexanen, andere HCH-isomeren en verwante stoffen. De verblijftijd van HCH-isomeren in de bodem is onbekend. In laboratoriumomstandigheden verloopt anaërobe degradatie sneller dan aërobe degradatie (aëroob $T_{1/2} = 88-1146$ dagen, anaëroob $T_{1/2} = 12-174$ dagen).

Lindaan in de bodem kan uitloggen naar het grondwater maar is over het algemeen weinig mobiel ten gevolge van adsorptie aan bodemdeeltjes. Niettegenstaande dit wordt lindaan in grondwater aangetroffen.

In water is biodegradatie het belangrijkste verwijderingsproces voor lindaan. Hydrolyse en fotolyse gebeuren in mindere mate. Algemeen geldt dat HCH-isomeren snel afgebroken worden in water. In natuurlijk water blijft lindaan doorgaans niet langer dan 30 dagen aanwezig. Lindaan wordt normaal niet aangetroffen in drinkwater (ATSDR 1997, WHO 1996).

2.4 Endosulfan

In de bodem wordt endosulfan afgebroken door fotolyse aan het bodemoppervlak, hydrolyse onder alkalische omstandigheden of biodegradatie. Afhankelijk van de aard van de micro-organismen behoren endosulfansulfaat, endosulfandiol, endosulfanlacton en endosulfanhydroxyether tot de aangetroffen metabolieten. Residu's van endosulfanisomeren zijn over het algemeen verwaarloosbaar na 2-3 weken. Endosulfansulfaat is zeer persistent. Endosulfan hecht zich vast aan bodemdeeltjes en breekt slechts langzaam af in de bodem.

Bij regenval kan endosulfan afgespoeld worden naar het oppervlaktewater. Het lost slecht op in water. In oppervlaktewater hecht endosulfan op gesuspendeerde deeltjes en komt voor in sediment. Opgelost endosulfan breekt af na verloop van tijd. Het ondergaat hydrolyse tot endosulfandiol. De snelheid van de hydrolyse wordt beïnvloed door de pH ($pH=7$ $T_{1/2} = 5$ weken; $pH=5,5$ $T_{1/2} = 5$ maanden; $pH=8$ $T_{1/2} = 1$ dag). Een andere afbraakroute is biodegradatie. Gezien endosulfan slecht oplost in water worden slechts kleine hoeveelheden aangetroffen in grondwater (ATSDR 1997).

2.5 Chloordaan

In de bodem hecht chloordaan sterk aan deeltjes in de bovenste laag van de bodem. Het is niet geweten of chloordaan afbreekt in de bodem. Indien afbraak optreedt, gebeurt dit zeer langzaam. In sommige bodems blijft chloordaan meer dan twintig jaar aanwezig voornamelijk in de bovenste 20 cm. De halfwaardetijd in de bodem wordt geschat op 4 jaar. Persistentie is groter in zware kleiige of organische bodems dan in zandige bodems. Slechts enkele organismen zijn in staat chloordaan af te breken. Afhankelijk van de aard van de organismen worden dichloorchloordeen, oxychloordaan, heptachloor, heptachloor-endo-epoxide, chloordaanchlorohydrin en 3-hydroxy-trans-chloordaan als metaboliëten aangetroffen. De helft van de hoeveelheid chloordaan die op een bodemoppervlak toegepast wordt, verdampst binnen een periode van 2-3 dagen. Na verdeling en sorptie in de bodem verloopt verdamping veel trager. In de atmosfeer wordt chloordaan afgebroken door reactie met licht en stoffen in de atmosfeer. De levensduur in de atmosfeer is echter voldoende lang om verplaatsingen over grote afstand mogelijk te maken. Chloordaan wordt niet gemakkelijk uitgespoeld naar het grondwater. In water wordt chloordaan opgenomen in sediment en hecht zich vast op gesuspendeerde deeltjes. Degradatie van chloordaan in water is niet uitvoerig bestudeerd. Uit de weinige onderzoeksgegevens blijkt dat degradatie in water slechts zeer langzaam gebeurt en dat transport waarschijnlijk het belangrijkste verwijderingsmechanisme is (ATSDR 1997, WHO 1996).

3 REFERENTIES

Agency for Toxic Substances and Disease Registry U.S. Public Health Service, 'ATSDR's Toxicological Profiles on CD-ROM' CRC Press Inc., London ISBN 1-56670-154-6 (1997).

American Conference of Governmental Industrial Hygienists, 'Guide to occupational exposure values - 1994', ISBN: 1-882417-07-0 (1994).

International Programme on Chemical Safety, 'Inventory of IPCS and other WHO pesticide evaluations and summary of toxicological evaluations performed by the Joint Meeting on Pesticide Residues (JMPPR). Evaluations through 1997'

IRIS. 1994. Integrated Risk Information System (IRIS) on Dichloroethylene. U.S. Environmental Protection Agency, Office of Health and Environmental Assessment, Environmental Criteria and Assessment Office, Cincinnati, OH. May 1994.

M.D. Polder, E.M. Hulzebos, D.T. Jager, 'Validation of models on uptake of organic chemicals by plant roots', RIVM rapport 679102024 1994a.

F.A. Swartjes, 'Stofselectie voor afleiden van "voorstellen voor interventiewaarden"', RIVM-rapport 715810016, 1997.

R. van den Berg, G.J.M. Bockting, G.H. Crommentuijn, P.J.C.M. Janssen, 'Proposals for intervention values for soil clean-up: Second series of chemicals' RIVM-rapport 715810004, 1994b.

T.G. Vermeire, M.E. Apeldoorn, J.C. Fouw, P.J.C.M. Janssen, 'Voorstel voor de humaan-toxicologische onderbouwing van C-(toetsings)waarden' RIVM 725201005 (1991).

World Health Organization, 'Guidelines for drinking-water quality, Health criteria and other supporting information', Volume 2, Geneva, Second Edition 92-4-154480-5 (1996).