

Technische handleiding SediSoil

Valesca Harezlak
Leonard Osté

1202337-004

Titel
Technische handleiding SediSoil

Opdrachtgever
Rijkswaterstaat Waterdienst

Project
1202337-004

Kenmerk
1202337-004-BGS-0025-

Pagina's
57

Trefwoorden

Sedisoil, humane risico's, visconsumptie, recreatie, MTR-humaan.

Samenvatting

Dit rapport is een technische beschrijving van het model SediSoil. SediSoil berekent humane risico's ten gevolge van verontreinigingen in de waterbodem en het oppervlaktewater. Het rapport is bedoeld voor mensen die exact willen weten hoe Sedisoil de risico's berekent en voor mensen die het model verder ontwikkelen. Humane blootstelling van verontreinigingen wordt berekend via inname van sediment, zwevend stof, water en vis. De route via visconsumptie is voor de meeste stoffen de belangrijkste stoffen. De blootstelling wordt getoetst aan het MTR-humaan.

Versie	Datum	Auteur	Paraaf	Review	Paraaf	Goedkeuring	Paraaf
	Feb. 2011	Valesca Hareziak		Paul van Noort		Kees Bons	
		Leonard Osté					

Status
definitief

Inhoud

1 Inleiding	1
1.1 Beleid	1
1.1.1 De Wet Bodembescherming (Wbb) en de Waternet	1
1.1.2 Het Besluit bodemkwaliteit (Bbk)	1
1.2 Leeswijzer	1
2 Berekening blootstelling van de mens aan een verontreinigde waterbodem	3
2.1 Schets van het SediSoil model	3
2.2 Verdeling over de fasen	4
2.2.1 Waterbodem – oppervlaktewater	4
2.2.2 Zwevend slib - oppervlaktewater	5
2.3 Gehalte in vis	6
2.4 Directe blootstelling	10
2.4.1 Ingestie waterbodem	10
2.4.2 Ingestie oppervlaktewater	10
2.4.3 Ingestie zwevend slib	11
2.4.4 Dermale opname via waterbodem	11
2.4.5 Dermale opname via oppervlaktewater	11
2.5 Indirecte blootstelling	12
2.6 TEQ	12
2.7 Kwik	12
2.8 Totale blootstelling	13
2.9 Risicobeoordeling	13
2.9.1 Tijdfracties	13
2.9.2 Blootstellingsscenario's in SediSoil	13
2.10 Toetsing	14
2.11 Combinatie toxiciteit	14
3 Literatuurlijst	15
Bijlage(n)	
A Formularium SediSoil	A-1
A.1 Verdeling over de fasen	A-1
A.2 Opname door vis	A-2
A.3 Ingestie waterbodem	A-2
A.4 Ingestie van oppervlaktewater	A-3
A.5 Ingestie zwevend slib	A-3
A.6 Dermale opname via waterbodem	A-3
A.7 Dermale opname via oppervlaktewater	A-3
A.8 Indirecte blootstelling	A-4
A.9 Totale blootstelling	A-4
B Parameters en verdeling over de vaste fase	B-1
C Inname zwevend stof en waterbodem	C-1

D Parameters en dermale opname	D-2
E Visconsumptie	E-3
F Vetgehalte vis	F-4
G Tijdfracties en Tijdsduren	G-1
H Bronnen metalen	H-1
I MTR waarden	I-1
J Parameters in SEDISOIL	J-6
K Achtergrondinformatie van IMARES t.a.v.:	K-1
L Literatuur	K-1

1 Inleiding

Vanaf 1996 wordt er aan SediSoil gewerkt. Bockting et al. (1996) hebben een technisch document geschreven voor de eerste versie van Sedisoil. Daarna zijn er verschillende updates van het model uitgevoerd (Van Elswijk et al., 2001 en 2004; Otte et al., 2001, Rusch, ongepubliceerd) en deze zijn grotendeels in rapportages verantwoord. Er was echter geen volledige beschrijving meer van het model Sedisoil. Dit document is gemaakt om een correcte technische beschrijving van Sedisoil beschikbaar te maken.

1.1 Beleid

1.1.1 De Wet Bodembescherming (Wbb) en de Waterwet

Van 1994 tot en met 2009 was voor de beoordeling van een verontreinigde land- en waterbodembodem hetzelfde toetsingskader van toepassing (Wbb). In dit toetsingskader werd voor de milieuhygiënische beoordeling van (water)bodemverontreiniging in de saneringsregeling van de Wbb een drietal fasen doorlopen. Allereerst werd gekeken of er sprake was van een ernstig geval van bodemverontreiniging. Vervolgens werd de vraag beantwoord of er sprake was van een urgent (later: spoedeisend) geval van bodemverontreiniging en als laatste op welk tijdstip met de sanering begonnen moest worden. De beslissing of een geval urgent/spoedeisend was, werd genomen op basis van de *actuele* risico's, ofwel locatiespecifieke risico's, die gezien het gebruik van de bodem optraden. De actuele risico's dienden voor zowel mens en ecosysteem, als ten gevolge van verspreiding te worden bepaald.

Sinds 2010 vindt de beoordeling van waterbodems plaats binnen de Waterwet. Indien de waterbeheerder het sterke vermoeden heeft dat de waterbodembodem kan leiden tot humane risico's (en dus het gebruik belemmert), kan hij dit onderzoeken met de "Handleiding beoordelen waterbodems (jaartal/referentie)". In de eerste stap van de methodiek wordt op basis van totaalgehalten in de waterbodembodem of in vis de humane blootstelling berekend. Dit wordt gedaan met SediSoil.

1.1.2 Het Besluit bodemkwaliteit (Bbk)

Het Bbk regelt het grondverzet in Nederland. Het Bbk kent een generiek kader met vaste normen, maar ook een gebiedsspecifiek kader waarin de vaste normen kunnen worden gewijzigd in lokale normen die worden afgeleid op basis van locatiespecifieke eigenschappen. Bij het afleiden van lokale normen is het verplicht om het milieuhygiënische effect van de lokale normen door te rekenen met de Risicotoolbox Waterbodems (www.risicotoolbox.nl). Sedisoil is onderdeel van de Risicotoolbox Waterbodems.

1.2 Leeswijzer

In deze technische handleiding wordt het formularium voor de kwantificering van de humane blootstelling aan verontreinigde waterbodems beschreven waarbij in hoofdstuk 2 het blootstellingsmodel SediSoil, de verschillende blootstellingsroutes, de gehanteerde parameters en de combinatie toxicologie worden besproken.

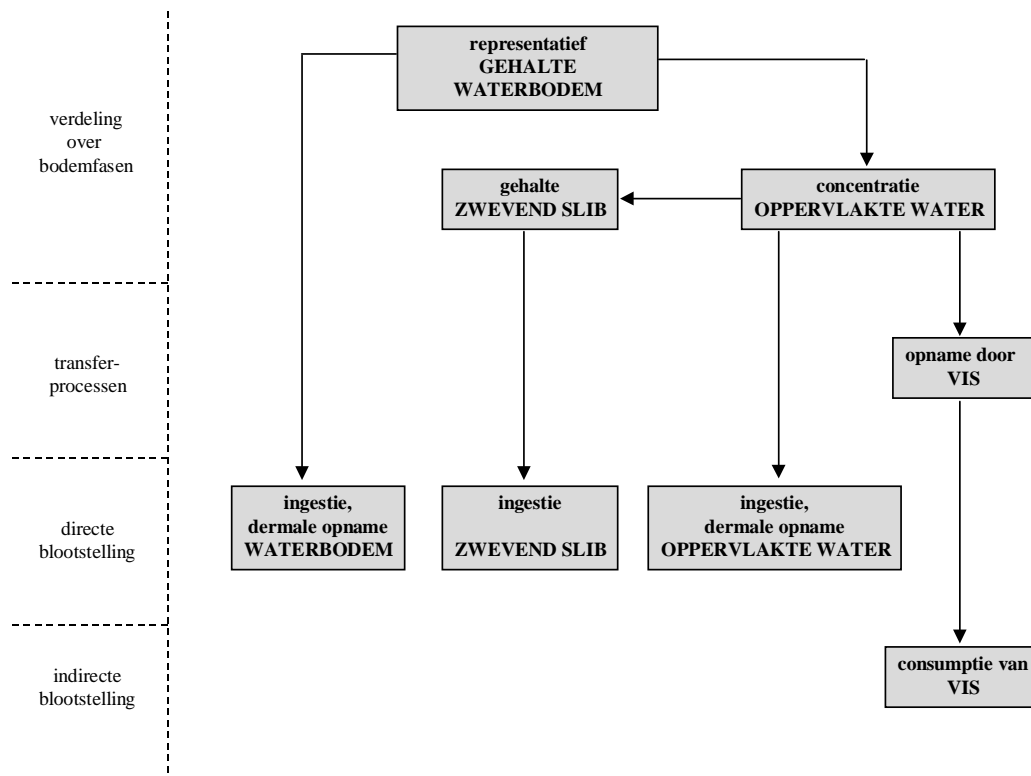
2 Berekening blootstelling van de mens aan een verontreinigde waterbodem

2.1 Schets van het SediSoil model

SediSoil berekent de levenslang gemiddelde, dagelijkse blootstelling (dosis) van de mens aan een verontreinigde waterbodem en dus niet de acuut toxische effecten van de waterbodem op de mens. Bij de blootstelling van de mens aan een verontreinigde waterbodem kunnen de volgende blootstellingroutes een rol spelen:

- Ingestie van sediment en oppervlaktewater (inclusief zwevend slib).
- Dermale opname via waterbodem en oppervlaktewater.
- Consumptie van vis (sport- en beroepsvisserij).

De blootstellingroutes zijn weergegeven in figuur 2.1. Het modelconcept bestaat uit drie onderdelen: de verdeling over de fasen, het transport naar de contactmedia en de berekening van de directe en indirecte blootstelling.



Figuur 2.1

Schematische weergaven van het modelconcept SediSoil.

Net als bij de blootstellingsroutes voor landbodems, is er sprake van potentiële blootstellingsroutes. Het wel of niet optreden van de blootstellingsroutes in figuur 2.1 hangt af van de gebruiksvorm op of rondom de locatie, denk bijvoorbeeld aan recreatie of (sport)vissen.

In het vervolg van dit hoofdstuk worden de formules besproken waarmee de blootstelling van de mens via de genoemde blootstellingsroutes met behulp van SediSoil gekwantificeerd kan worden. In Bijlage A zijn de formules voor de blootstellingsberekening samengevat. De keuzes van parameterwaarden waren in eerste instantie gebaseerd op waarden uit twee literatuurevaluaties (BKH, 1991 en BMM, 1993) en waarden uit het CSOIL-formularium. Door voortschrijdend inzicht zijn enkele parameterwaarden aangepast. Enkel wanneer dit laatste het geval is, zal de referentie worden opgenomen. Zo niet, dan is de waarde afkomstig van het oorspronkelijke SediSoil-model.

2.2 Verdeling over de fasen

De concentraties in het oppervlaktewater en zwevend slib kunnen vanuit het gehalte in de waterbodem worden berekend, indien aangenomen wordt dat er evenwicht heerst tussen de drie fasen (waterbodem, oppervlaktewater en zwevend slib). Het is echter onduidelijk in hoeverre in natuurlijke systemen sprake is van evenwichtssituaties. Voor stromende wateren is het bekend dat over het algemeen de kwaliteit van het oppervlaktewater en het zwevend stof niet direct gerelateerd zijn aan de kwaliteit van het sediment op die plaats. Voor dit type water wordt daarom ook aangeraden om concentraties in zowel het oppervlaktewater, als het zwevend slib als het sediment afzonderlijk te meten (Van Elswijk et al., 2001).

2.2.1 Waterbodem – oppervlaktewater

De berekening van de verdeling van een contaminant over de waterbodem en het oppervlaktewater gebeurt in SediSoil voor een groot deel op dezelfde wijze als voor de verdeling over de vaste fase van de bodem en het poriënwater in geval van landbodems, zoals beschreven in het CSOIL-formularium (Van den Berg, 1991, 1994 en 1995). Dit houdt in dat er evenwicht verondersteld wordt tussen waterbodem en oppervlaktewater. Wanneer contaminanten enkel in de waterbodem zijn gemeten, dan kan met de volgende formule de concentratie van het oppervlaktewater worden berekend:

$$C_{sw} = (SD_{se} * C_{se}) / (SD_{se} * Kd_{se} + Vw_{se}) \quad (1)$$

Waarbij C_{sw} de concentratie in het oppervlakte water is (mg/l), SD_{se} een constante van de volumieke massa droge waterbodem (1,3 in kg/l), C_{se} het totaal van de contaminant in de waterbodem (mg/kg_{dw}), Kd_{se} de verdelingscoëfficiënt tussen waterbodem-oppervlaktewater (l/kg) en Vw_{se} een constante volumefractie van water in waterbodem (0,4, (-)). De onderscripts sw en se slaan respectievelijk op "surface water" en "sediment". Voor de keuze van parameterwaarden zie bijlage B tot en met G.

Voor metalen wordt de verdelingscoëfficiënt tussen waterbodem en oppervlaktewater (Kd_{se} , in l/kg) gelijk gesteld aan de verdelingscoëfficiënt tussen landbodem en poriënwater (Kd_{ts} , in l/kg). Deze is overgenomen uit het CSoil model. De afkorting ts in het subscript is in originele documenten niet te achterhalen, maar duidt op de verdelingscoëfficiënt tussen bodem en poriënwater.

$$Kd_{se} = Kd_{ts} \quad (2)$$

De waarden van de Kd_{ts} voor metalen zijn afkomstig van OMEGA4.0 en Verbruggen et al., 2001 (zie bijlage H).

Voor organische stoffen wordt de verdelingscoëfficiënt berekend als functie van de verdelingscoëfficiënt van organisch koolstofgehalte (K_{oc} , in l/kg) en het organisch koolstofgehalte van de waterbodem ($f_{oc,se}$, constante fractie van 0.058 (-)):

$$Kd_{se} = K_{oc} * f_{oc,se} \quad (3)$$

In 2001 (Otte et al., 2001) en 2010 (van Noort, 2010) is een revisie uitgevoerd voor de gehanteerde K_{oc} waarden van eerdere SediSoil versies. In de revisie van 2010 is gebruik gemaakt van de Abraham solvation vergelijking om zo betrouwbaar K_{oc} waarden te kunnen schatten. Dit is voor de meeste stoffen gedaan. Voor welke dit niet gedaan is, zijn de waarden uit 2001 overgenomen.

Voor dissociërende contaminanten, zoals fenol en pyridine, vindt correctie plaats voor de niet-gedissoceerde fractie (f_{nd} , (-)), volgens:

$$Kd_{se} = Kd_{se} * f_{nd} \quad (5)$$

Waarbij de fractie berekend wordt met:

$$f_{nd} = 1 / (1 + 10^{pH-pK_a}) \quad (6)$$

In formule 6 is pH de gemeten zuurgraad van de waterbodem (-) en pK_a de zuurdissociatieconstante van de contaminant (-). De herkomst van de gebruikte pK_a en wateroplosbaarheidwaarden in SediSoil zijn grotendeels onbekend. Voor een paar stoffen zijn de waarden nog te herleiden naar van Elswijk et al., 2004.

Voor alle contaminanten geldt dat voor de berekening van de concentratie ervan in oppervlaktewater rekening moet worden gehouden met de wateroplosbaarheid. Indien volgens de berekening de concentratie van het oppervlaktewater (C_{sw}) hoger is dan de wateroplosbaarheid (C_{wo} , in mg/l), dan wordt de concentratie in het oppervlaktewater gelijk gesteld aan die van de wateroplosbaarheid:

$$C_{sw} > C_{wo} \Rightarrow C_{sw} = C_{wo} \quad (7)$$

2.2.2 Zwevend slib - oppervlaktewater

Voor contaminanten in/aan zwevend slib wordt, net als voor contaminanten in de waterbodem, verondersteld dat er een evenwicht met het oppervlaktewater bestaat. Echter, vanwege de in het algemeen hogere organische stofgehalte en de kleinere korrelgrootte van zwevend slib wordt een hogere verdelingscoëfficiënt verondersteld. De berekening van contaminanten in/aan zwevend slib is als volgt:

$$C_{sm} = C_{sw} * (SD_{sm} * Kd_{sm} + V_{w,sm}) / SD_{sm} \quad (8)$$

Waar C_{sm} het totaalgehalte aan zwevend slib is (mg/kg_{dw}) (het onderscript sm staat voor suspended matter), SD_{sm} de volumieke massa van zwevend slib, met een constante waarde van $1.3 \text{ kg}/\text{l}$, Kd_{sm} de verdelingscoëfficiënt tussen waterbodem en zwevend slib (l/kg) en Vw_{sm} de volumefractie water in zwevend slib die een constante waarde van $0.4 (-)$ heeft.

In analogie met DBW/RIZA (1989) wordt voor metalen uitgegaan van een 1,5 maal hogere verdelingscoëfficiënt zwevend slib-oppervlaktewater dan voor de verdelingscoëfficiënt vaste fase waterbodem-poriewater:

$$Kd_{sm} = 1,5 * Kd_{se} \quad (9)$$

De hogere verdelingscoëfficiënt voor organische stoffen komt tot uiting in het hogere organisch koolstofgehalte van het zwevend slib (foc_{sm} , een constante waarde van $0.116, (-)$).

$$Kd_{sm} = K_{oc} * foc_{sm} \quad (10)$$

Door de aanname dat er geen verdunning ten gevolge van menging met schoon, of minder gecontamineerd water beschouwd wordt, wordt de concentratie van het oppervlakte water in feite gelijk gesteld aan de concentratie in het poriënwater van het zwevend slib.

2.3 Gehalte in vis

De gehalten van contaminanten in vis (C_{fi} , in mg/kg_{fw}) kunnen worden berekend vanuit de concentratie van het oppervlaktewater (C_{sw}), met behulp van een contaminant-specifieke bioconcentratiefactor (BCF_{fi} , in $(\text{mg}/\text{kg}_{dw})/(\text{mg}/\text{l})$):

$$C_{fi} = BCF_{fi} * C_{sw} \quad (11)$$

Voor de waarden van de BCF_{fi} 's voor metalen wordt altijd uitgegaan van experimentele gegevens (zie Tabel 2.1), omdat voor deze stoffen geen betrouwbare methoden voor het schatten van BCF_{fi} 's bestaan. Voor die metalen waarvoor geen BCF_{fi} 's beschikbaar zijn, kunnen via deze rekenmethode dus geen contaminantgehalten in vis worden berekend.

Tabel 2.1 Biocconcentratiefactoren vis-oppervlaktewater (BCF_{fi}) voor metalen (Otte et al., 2000).

Metaal	BCF_{fi} (l/kg _{dw})
arseen	50
cadmium	100
chromium	200
koper	1000
kwik	1000
lood	5000
nikkel	200
zink	10000

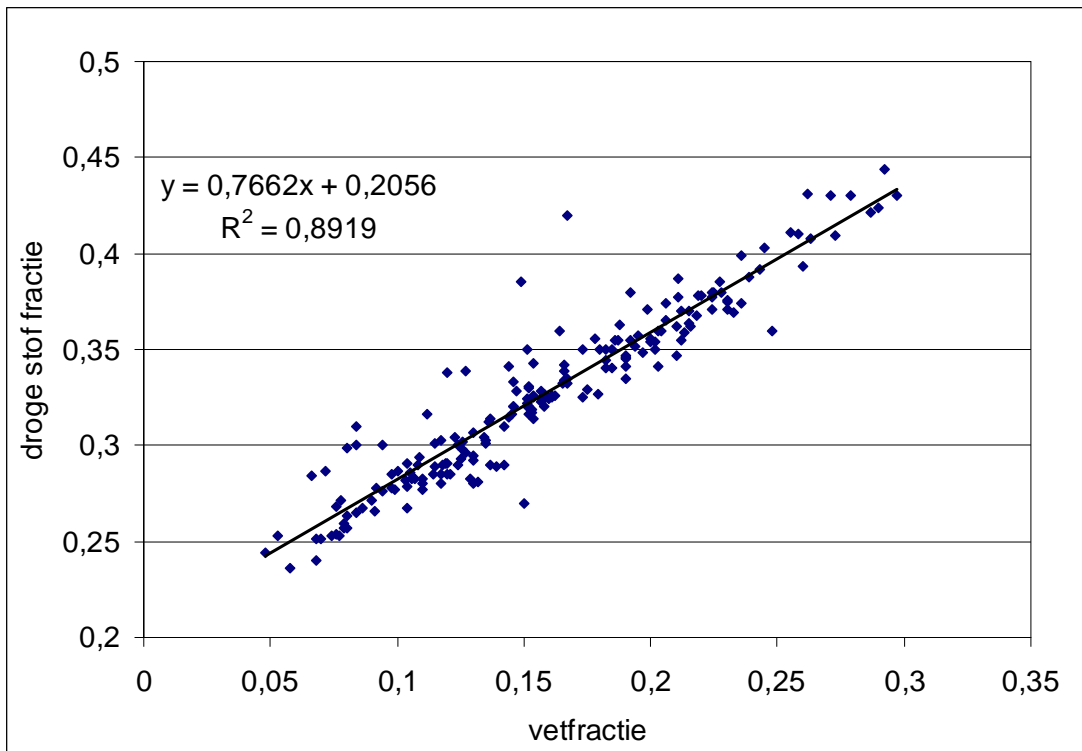
Aangezien deze BCF_{fi} 's weergegeven worden op drooggewichtbasis en de gehalten van metalen in vis op versgewichtbasis, dienen de BCF_{fi} 's omgerekend te worden naar versgewichtbasis.

$$BCF_{fi} = BCF_{fi,dw} * fdw_{fi} \quad (12)$$

De BCF_{fi} (dus op basis van de gehele verse vis) wordt vermeld in de uitvoer van SediSoil.

Omdat in SediSoil onderscheid wordt gemaakt tussen vette vis (zoals aal) en niet-vette vis (overige vis), zijn er twee formules opgesteld om de drooggewichtfractie (fdw_{fi}) op basis van de vetfractie (ff_{fi}) af te kunnen leiden. Dit geeft voor vette vis (zie figuur 2.2):

$$fdw_{fi} = 0,77 * ff_{fi} + 0,21 \quad (\text{voor } ff_{fi} > 0,05) \quad (13)$$



Figuur 2.2 vetgehalte versus droge stofgehalte in aal obv MWTl-data 1992-2006¹.

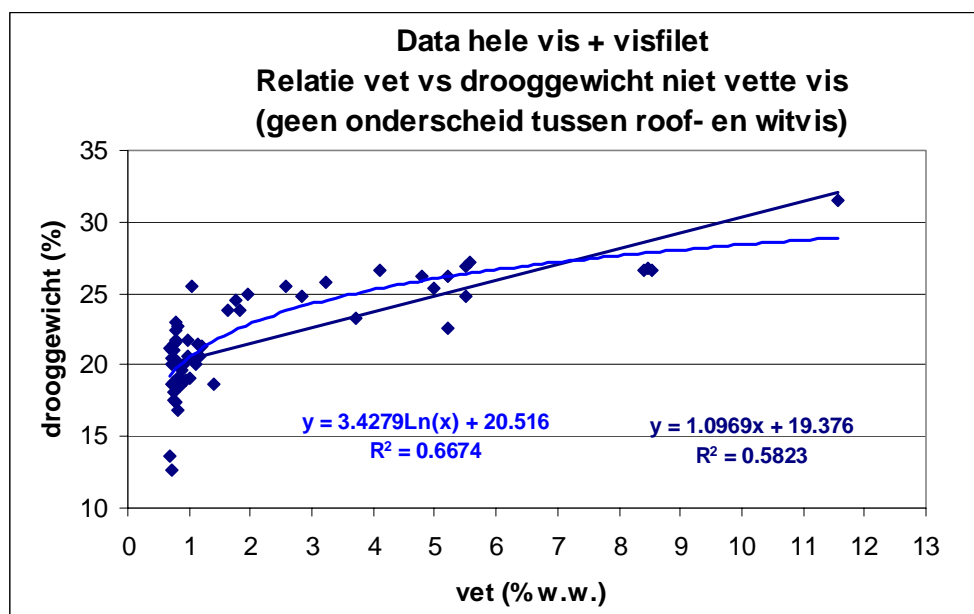
Voor niet-vette vis is de volgende formule afgeleid (zie figuur 2.3):

$$\text{Drooggewicht (\%)} = 3,43 \cdot \ln(\text{vet (\% w/w)}) + 20,52 \quad (14)$$

Echter, omdat SediSoil rekent met fracties en niet met percentages, is de formule als volgt aangepast:

$$\text{fdw}_{fi} = 3,43 \cdot \ln \text{ff}_{fi} + 0,36 \quad (15)$$

¹ MWTl-data zijn afkomstig uit de landelijke monitoring van de Rijkswateren; de gegevens zijn te downloaden op www.waterstat.nl.



Figuur 2.3 vetgehalte versus drooggewicht in roof- en witvis (KOTTERMAN EN GLORIUS, 2010, bijlage K).

Voor organische contaminanten heeft het de voorkeur om experimentele data voor de BCF_{fi} 's te gebruiken, waarbij de volgende formule gebruikt wordt:

$$BCF_{fi} = BCF_{fi\text{fat}} * ff_{fi} \quad (16)$$

De berekende BCF_{fi} (dus op basis van de gehele verse vis) wordt vermeld in de uitvoer van SediSoil. De basisdata in SediSoil bevatten de bioconcentratiefactor vis-oppervlaktewater op vetbasis ($BCF_{fi\text{fat}}$ in $(\text{mg}/\text{kg}_{\text{fat}})/(\text{mg}/\text{l})$) en de vetfractie van vis (ff_{fi} die dimensieloos is). De vetfractie varieert sterk per vissoort, maar heeft in SediSoil de defaultwaarde 0.05 voor niet-vette vis en 0.15 voor vette vis. De ingestelde vetfractie kan door de gebruiker altijd overschreven worden. Omdat er weinig experimentele data beschikbaar is voor BCFs, is door middel van de Abraham solvation vergelijking een groot aantal BCFs afgeleid (van Noort, 2010). Deze zijn opgenomen in de stoffenlijst. Bij stoffen met zeer hoge BCF's lijkt de opname door vis niet (alleen) bepaald te worden door de water/vet-verdeling, maar door kinetiekprocessen². Daarom is besloten de BCF te maximeren op log BCF 7,5.

Wanneer met de Abraham solvation vergelijking geen BCF is afgeleid, dan worden de aanbevelingen van het EQS (2010) gevolgd. Dit houdt in dat voor stoffen met een log K_{ow} tussen de 2 en 6 de empirische relatie van Veith et al (1979) wordt gebruikt om een log BCF_{fi} te berekenen op grond van de log K_{ow} waarde:

$$\log BCF_{fi} = 0,85 * \log K_{ow} - 0,70 \quad (17)$$

Voor stoffen met een log Kow groter dan 6 wordt een parabolische relatie gebruikt:

$$\log BCF_{fi} = -0,20 * \log K_{ow}^2 + 2,74 * \log K_{ow} - 4,72 \quad (18)$$

2. Over de opname van zeer lipofiele stoffen is discussie. Theoretisch (en ook in geavanceerde labexperimenten) is er een lineair verband te zien cf de Abraham solvation vergelijking, maar in de praktijk wordt minder opname gemeten. Omdat SediSoil een praktijkprogramma is, is de BCF gemaximeerd. Meer informatie hierover is te vinden in Kotterman en Van den Heuvel-Greve, 2010.

De gebruikte Kow waarden zijn afgeleid uit de LOGPSTAR waarden uit de MEDCHEM (1996) database.

2.4 Directe blootstelling

Het voorkomen van contaminanten in een contactmedium hoeft niet te leiden tot opname van de contaminanten; hier is namelijk blootstelling aan de contaminanten voor nodig. Wanneer er sprake is van directe blootstelling, dan is de duur van de blootstelling, ofwel de tijdfractie, aan het contactmedium bepalend voor de opnamehoeveelheid van de contaminanten.

De tijdfractie (tf_{se}) is een omgerekend jaargemiddelde naar een tijdfractie per dag (hoeveelheid dag per gebeurtenis, zie hoofdstuk 3). De uiteindelijke opnamehoeveelheid van de contaminanten wordt in SediSoil verrekend naar lichaamsgewicht (dus per kg). Dit wordt gedaan omdat SediSoil de hoeveelheid in- en opgenomen contaminant toetst aan het Maximaal Toelaatbaar Risico (MTR, zie hoofdstuk 3), welke wordt uitgedrukt in $mg/kg_{lichaamgewicht}/d$. De toetsing van totale in- en opname van contaminanten aan het MTR laat zien of de verontreinigde waterbodem een humaan risico vormt of niet.

2.4.1 Ingestie waterbodem

In het CSOIL-formularium voor landbodems wordt er rekening gehouden met blootstelling via ingestie van grond. Ingestie van bodem vindt plaats door hand-mond contact. Indien blootstelling op de oever tot blootstelling van de waterbodem gerekend wordt, dient deze blootstellingsroute in SediSoil te worden beschouwd. Voor kinderen wordt bij waterbodems van een hogere ingestie hoeveelheid uitgegaan dan voor landbodems omdat er bij waterrecreatie sprake is van een directer contact met grond en vochtig sediment blijft goed kleven aan contactoppervlakken. Voor kinderen wordt een ingestie hoeveelheid van sediment (AID_{se}) van $1 \cdot 10^{-3}$ kg/gebeurtenis aangehouden. Voor volwassenen ontbreken literatuurgegevens over de hoeveelheid ingestie van waterbodem en wordt daarom gelijk gesteld aan de blootstelling aan landbodems ($0,35 \cdot 10^{-3}$ kg per gebeurtenis). Voor de verdiscontering van de hoeveelheid contaminant naar lichaamsgewicht (W , in kg) wordt voor kinderen een gemiddeld gewicht van 15 kg verondersteld en 70 kg voor volwassenen. De opname van contaminanten vanuit de waterbodem wordt evenredig geacht met de hoeveelheid ingestie van waterbodem en het gehalte van contaminanten in deze waterbodem. Dit wil zeggen dat de opname van een contaminant gelijk is aan de inname van de contaminant (relatieve absorptiefactor =1, fa (-)). De inname van een contaminant via ingestie van waterbodem (DI_{se} , in $mg/kg/d$) wordt dan als volgt berekend:

$$DI_{se} = (tf_{se} * AID_{se} * fa * C_{se}) / W \quad (19)$$

Opgemerkt dient te worden dat voor een aantal contaminanten bekend is dat de daadwerkelijke opname geringer zal zijn dan 100% van de ingenomen hoeveelheid, maar op dit moment ontbreekt de mogelijkheid om de relatieve absorptiefactor voor een breed scala aan contaminanten te kwantificeren. Alleen voor lood wordt op dit moment wel een aangepaste absorptiefactor (0,6) gebruikt.

2.4.2 Ingestie oppervlaktewater

De ingestie van oppervlaktewater (DI_{sw} , in $mg/kg/d$) treedt op tijdens het zwemmen in oppervlaktewater. Het concept van het formularium is analoog aan het concept van het formularium voor de blootstelling via ingestie van waterbodem. De inname hoeveelheid (AID_{sw} , in l/gebeurtenis) wordt globaal geschat tussen de 50 tot 100 ml water per

gebeurtenis (I/gebeurtenis). In SediSoil is de defaultwaarde van de hoeveelheid ingestie oppervlaktewater per gebeurtenis 50 ml.

$$DI_{sw} = (tf_{se} * AID_{sw} * fa * C_{sw}) / W \quad (20)$$

2.4.3 Ingestie zwevend slib

De ingestie van zwevend slib (DI_{sm} , in mg/kg/d) treedt gelijktijdig op met ingestie van oppervlaktewater, doordat in het oppervlaktewater gesuspendeerde deeltjes voorkomen. Om deze reden zal blootstelling aan een contaminant via ingestie van oppervlaktewater en ingestie van zwevend slib altijd gelijktijdig plaatsvinden. De kwantificering van deze route is gebaseerd op de hoeveelheid ingestie van oppervlaktewater, het zwevend slibgehalte van het oppervlaktewater (P_c , een constante van $30 \cdot 10^{-6}$ kg/l) en het gehalte van de contaminant in/aan het zwevend slib (C_{sm} , in mg/kg_{dw}):

$$DI_{sm} = (tf_{se} * AID_{sw} * fa * P_c * C_{sm}) / W \quad (21)$$

2.4.4 Dermale opname via waterbodem

Dermale opname van contaminanten is verondersteld alleen mogelijk te zijn voor apolaire organische contaminanten. Wanneer de huid in contact komt met dit type contaminanten, dan vindt er via de huid opname plaats. De opname treedt vooral op bij recreatie aan de oevers van een waterlichaam. Het formulairium voor deze blootstellingsroute is gelijk aan die in het CSOIL-formulairium voor landbodems (*Van den Berg, 1991, 1994 en 1995*).

De kwantificering van blootstelling ten gevolge van dermale opname via waterbodem (DA_{se} , in mg/kg/dag) is afhankelijk van het blootgestelde oppervlak aan de waterbodem ($A_{exp_{se}}$, in m² en is voor kinderen gesteld op 0.28 m² en voor volwassenen op 0.95 m² (mondelinge mededeling P. Otte (2009)), de bedekkingsgraad, welke aangeeft hoeveel waterbodem er gemiddeld contact maakt met het blootgestelde oppervlak (DAE , 3,75 voor volwassenen 0,51 voor kinderen, in kg/m²), de matrixfactor (f_m , constante waarde van 0.15 (-)) die de mate waarin gronddeeltjes contact maken met de huid weergeeft. Verder is voor de opname van contaminanten het volgende van belang: de absorptiesnelheid van de huid (DAR , in l/h, waar voor volwassenen is deze op 0.005 en voor kinderen op 0.01 l/h gesteld), de duur van de blootstelling (tb_{se} , in h/d, met een constante waarde van 8), de tijdfractie, de relatieve absorptiefactor en het gewicht van de blootgestelde persoon:

$$DA_{se} = (tf_{se} * A_{exp_{se}} * f_m * DAE * DAR * tb_{se} * fa * C_{se}) / W \quad (22)$$

2.4.5 Dermale opname via oppervlaktewater

Dermaal contact met het oppervlaktewater treedt op tijdens zwemmen. Voor de dermale opname via oppervlaktewater (DA_{sw} , in mg/kg/d) wordt uitgegaan van de concentratie in het oppervlaktewater (C_{sw}). Aangenomen wordt dat tijdens de duur van het zwemmen (tb_{sw} , in h/d en voor volwassenen gesteld op 1 en voor kinderen op 2) het hele lichaam aan de waterfase wordt blootgesteld (A_{tot} , voor kinderen is dit 0.456 m² en voor volwassenen 1,448 m² (mondelinge mededeling P. Otte (2009)), waarbij er een contaminant-afhankelijke dermale absorptie snelheid wordt gehanteerd (DAR_w , in (mg/m²)/(mg/l)/h). Zie bijlage D voor meer informatie over de parameterkeuze. Deze blootstelling vindt plaats voor een bepaalde tijdfractie en met een bepaalde absorptiefactor en wordt verdisconteerd naar lichaamsgewicht.

$$DA_{sw} = (tf_{se} * A_{tot} * DAR_w * tb_{sw} * fa * C_{sw}) / W \quad (23)$$

De dermale absorptiesnelheid van een contaminant wordt bepaald volgens:

$$DAR_w = 5000 * (0.038 + 0.153 * K_{ow}) / (5000 + (0.038 + 0.153 * K_{ow})) * \exp(-0.016 * M) / 1.5 \quad (24)$$

Bovenstaande formule is een samenstelling van de dermale absorptiesnelheidsformule afgeleid door Fiserova-Bergerova en Pierce (1989) en de maximering van de absorptiesnelheid door Brown en Rossi (1989). M is de molmassa van de contaminant.

2.5 Indirecte blootstelling

De indirecte blootstelling aan contaminanten door consumptie van vis (FI, in mg/kg/d) is evenredig met de hoeveelheid visconsumptie (Q_{fi} , in kg_{fw}/d) en het gehalte van de contaminanten in vis (C_{fi} , mg/kg_{fw}). Waarbij ook de fractie van de visconsumptie dat uit verontreinigde vis bestaat (FV_{fi} , (-)) van belang is. Verder wordt bij deze berekening ook weer de relatieve absorptiefactor en het lichaamsgewicht meegenomen. Een belangrijke aanname bij de berekening is de hoeveelheid visconsumptie. De visconsumptie is voor vette vis voorvolwassenen vastgesteld op 5 gram per dag (Bouwmeester et al., 2007) en voor kinderen op 1,5 gram per dag (Weijs en Wijnen, 2003). Voor de consumptie van niet-vette vis zijn geen gegevens bekend, hierom zijn de inname hoeveelheden gelijk gesteld aan die van vette vis consumptie (expert meeting, 2010). In bijlage E is een overzicht gegeven van de verschillende literatuurgegevens met betrekking tot visconsumptie.

$$FI = (Q_{fi} * FV_{fi} * fa * C_{fi}) / W \quad (25)$$

2.6 TEQ

Voor PCBs, furanen en dioxines is bioaccumulatie en doorvergiftiging de belangrijkste blootstellingsroute. De visconsumptie-route is daarom voor deze stofgroep belangrijk om mee te nemen. De toxiciteit van PCB's met dioxine-achtige werking, dioxines en furanen wordt uitgedrukt in TEQ. Dit is het toxiciteitsequivalent van de meest toxische dioxine (2,3,7,8,-TCDD). Voor PCB's, dioxines en furanen zijn factoren (TEF's) beschikbaar om de TEQ uit te rekenen. Voor de desbetreffende stoffen zijn deze omrekeningsfactoren in Sedisoil ingebouwd. Als er echter geen dioxines gemeten zijn, kan PCB 153 als indicator gebruikt worden om te komen tot een TEQ waarde voor humane blootstelling. Voor blootstelling aan PCB's, dioxines en furanen, kan dit voor vette vis berekend worden volgens³:

$$TEQ \text{ (ng/kg)} = 0.076 * \text{concentratie PCB 153 in vette vis (}\mu\text{g/kg)} + 20.06 \quad (26)$$

En voor niet-vette vis:

$$TEQ \text{ (ng/kg)} = 0.469 * \text{concentratie PCB 153 in niet-vette vis (}\mu\text{g/kg)} + 1.31 \quad (27)$$

De berekende of ingevoerde TEQ-waarden worden getoetst aan het MTR-humaan voor dioxineachtige stoffen.

2.7 Kwik

Kwik kent twee vormen: anorganisch kwik en organisch kwik. In sediment en water komt kwik voornamelijk voor als anorganisch kwik, maar in organismen komt kwik vooral voor als organisch kwik. De BCF geeft als dus een transformatie van anorganisch kwik in water naar organisch kwik in vis. Vervolgens wordt de concentratie kwik in vis getoetst aan het MTR-

³ Beide TEQ relaties zijn afgeleid door IMARES (Kotterman en Glorius, 2010; zie bijlage K).

humaan voor organisch kwik: 10^{-4} mg/kg/dag. Dit laatste is in Sedisoil niet zichtbaar, omdat alleen MTRs gepresenteerd worden van stoffen die ingevoerd zijn.

2.8 Totale blootstelling

De totale dagelijkse blootstelling wordt voor volwassenen (TAD_{se} , in mg/kg/d) en kinderen (TCH_{se} , in mg/kg/d) berekend door de blootstelling via de verschillende routes op te tellen:

$$TAD_{se} = DI_{sea} + DI_{swa} + DI_{sma} + DA_{sea} + DA_{swa} + FI_a \quad (28)$$

$$TCH_{se} = DI_{sec} + DI_{swc} + DI_{smc} + DA_{sec} + DA_{swc} + FI_c \quad (29)$$

De onderscripts a en c refereren aan de berekeningen voor volwassenen (adult) en kinderen (child), respectievelijk.

Voor de levenslang gemiddelde blootstelling aan waterbodems wordt het gewogen gemiddelde van de blootstelling als kind (periode van 6 jaar) en volwassene (periode van 64 jaar) aangehouden (in mg/kg/d):

$$DOSIS = (6 * TCH_{se} + 64 * TAD_{se})/70 \quad (30)$$

2.9 Risicobeoordeling

Het risico voor humane blootstelling is afhankelijk van het gebruik van de waterbodem: het maakt bijvoorbeeld voor de hoeveelheid opname van contaminanten uit of een waterbodem onderdeel is van een waterlichaam dat intensief gebruikt wordt voor recreatie of dat er nauwelijks recreatie plaats heeft. In SediSoil zijn een aantal standaard scenario's opgenomen voor een beoordeling van het humane risico van de waterbodem (§2.9.1). Of de hoeveelheid opgenomen daadwerkelijk een risico vormt, wordt in een laatste berekeningsstap in SediSoil getoetst aan de MTR's van de contaminanten in de waterbodem (§2.9.2).

2.9.1 Tijdfracties

Voor locaties die bestemd zijn als zwemwater wordt in de standaard situatie uitgegaan van 30 gebeurtenissen per jaar, die neerkomt op een jaargemiddelde tijdfractie van 0,082 per dag (BKH, 1991). Voor water waar waarschijnlijk nooit (of vrijwel nooit) gezwommen wordt (kanalen, grote havens), wordt geen directe blootstelling vanuit de waterbodem verondersteld, waarbij de tijdsfractie op 0 gesteld wordt.

2.9.2 Blootstellingsscenario's in SediSoil

In analogie met blootstelling aan landbodems (Bockting et al., 1994), is er een aantal scenario's uitgewerkt voor blootstelling aan waterbodems. De opgenomen scenario's binnen SediSoil zijn de volgende:

1. Visconsumptie van vette vis
2. Visconsumptie van overige vis
3. Recreatie
4. Recreatie in combinatie met consumptie van vette vis
5. Recreatie in combinatie met consumptie van overige vis
6. Vrij te kiezen scenario

Bovenstaande scenario's zijn voor recreatie ongewijzigd ten opzichte van het RIVM-rapport (Bockting e.a., 1996). De gegevens voor visconsumptie zijn afkomstig uit een rapport van Weijs en Wijnen (2003), waarin de consumptie van sportvisser van eigen vangst is onderzocht.

Tabel 2.2 Karakteristieken voor de blootstellingsscenario's 1 t/m 6.

SCENARIO	TIJDFRACTIE (aantal gebeurtenissen per jaar)	VISCONSUMPTIE (g/dag) en BIJDRAGE AAN TOTALE VISCONSUMPTIE
1	0	5 voor volwassenen, 1,5 voor kinderen.
2	0	5 voor volwassenen, 1.5 voor kinderen
3	0.082 (30/365)	0
4	0.082 (30/365)	5 voor volwassenen, 1,5 voor kinderen
5	0,082 (30/365)	5 voor volwassenen, 1.5 voor kinderen
6	Vrije keuze	Vrije keuze

2.10 Toetsing

De uitkomst van de levenslanggemiddelde blootstelling moet getoetst worden aan het Maximaal Toelaatbaar Risico (MTR, Vermeire, 1991; Van den Berg et al, 1994; Janssen et al, 1995, bijlage I) om inzicht te krijgen in hoeverre de verontreiniging van de waterbodembodem een ontoelaatbaar risico voor de humane gezondheid is:

$$\text{RISICO} = \text{DOSIS/MTR} \quad (31)$$

Wanneer het RISICO groter is dan 1, dan is er sprake van een ontoelaatbaar humaan risico van de waterbodembodem. Een waarde kleiner dan 1 levert geen overschrijding van het humaan toelaatbaar risico van de waterbodembodem.

2.11 Combinatie toxiciteit

Tijdens de risicotoetsing houdt SediSoil rekening met eventuele combinatie toxiciteit van verschillende stoffen, zoals cadmium, kwik en lood, chloorfenolen, drins en ftalaten. Wanneer er meerdere stoffen worden doorgerekend die bijdragen aan combinatie toxiciteit, dan worden de risico's van de individuele stoffen opgeteld. Vervolgens wordt het risico van de combinatie toxiciteit per stofgroep in de uitvoer van SediSoil getoond.

3 Literatuurlijst

- Baars, A.J., R.M.C. Theelen, P.J.C.M. Janssen, J.M. Hesse, M.E. van Apeldoorn, M.C.M. Meijerink, L. Verdam en M.J. Zeilmaker (2001): "Re-evaluation of human-toxicological maximum permissible risk levels", RIVM rapport 711701-025
- Berg, van den, R. en J.M. Roels (1991): "Beoordeling van risico's voor mens en milieu bij blootstelling aan bodemverontreiniging. Integratie van deelaspecten", RIVM-rapport 725201007.
- Berg, van der, R. (1991/1994/1995): "Blootstelling van de mens aan bodemverontreiniging. Een kwalitatieve en kwantitatieve analyse, leidend tot voorstellen voor humaan toxicologische C-toetsingswaarden (beperkt herziene versie)", RIVM-rapport 725201006 april 1991/herzieningen 1994/1995.
- BKH (1991): "Risico's van verontreinigde waterbodems voor de mens. Deel 1: recreanten; Deel 2: werknemers betrokken bij baggerwerkzaamheden; Deel 3: Consumenten van gecontamineerde vis en weekdieren. Adviesbureau BKH, Delft
- Bleijenberg, M., F. Swartjes, M. van Elswijk, C. van de Guchte en P. Otte (1999): "Model ter berekening van humane blootstelling ten gevolge van verontreinigde waterbodems", RIZA werkdocument.
- BMM (1993): "Een toetsing voor het inschatten van gezondheidsrisico's bij waterbodemverontreiniging. Bureau Medisch Milieukundigen, Dieren.
- Bockting, G.J.M., J.G.M. Koolenbrander en F.A. Swartjes (1996): "SediSoil: Model ter berekening van humane blootstelling ten gevolge van verontreinigde waterbodems", RIVM-rapport 715810011.
- Bouwmeester, H., A. de Mul en M.J. Zeilmaker (2007): "Risicobeoordeling inzake aanwezigheid van dioxines en dioxineachtige PCB's in paling", onbekend.
- Brown, S.L. en J.E. Rossi (1989): "A simple method for estimating dermal absorption of chemicals in water", in *Chemosphere* 19, 1989-2001.
- Chiou, C.T. (1985) in *Environmental Science Technology* 19:57-62.
- DBW/RIZA (1989): "Kansen voor Waterorganismen", nota nr. 89.016a, Lelystad.
- Ellgehausen, H., Guth, J.A. en Esser, H.O. (1986) in *Journal of Ecotoxicology and Environmental Safety* 4:134-157.
- Elswijk, van, M., P.F. Otte, M. Blijenberg, F.A. Swartjes en C. van de Guchte (2001): "Risico's van blootstelling van de mens aan verontreinigde waterbodems", Riza-werkdocument 2001.120x
- Elswijk, van, M., P.J.C.M. Janssen, J.P.A. Lijzen, P.F. Otte, E.H.F.M. Straetmans, E.M. J. Verbruggen en M.A. Beek (2004): "Analyse van het blootstellingsmodel SEDISOIL", Royal Haskoning en RIVM in opdracht van RIZA.
- Fiserova-Bergerova, V. en J. Th. Pierce (1989): "Biological monitoring V: Dermal absorption", in *Applied Industrial Hygiene* (4), 14-21.
- Heijna-Merkus E. en M. Hof (1993): "Harmonization of model parameters", RIVM-rapport 679102022.
- Hoogenboom, L.A.P., M.J.J. Kotterman, M. Hoek-van Nieuwenhuizen, M.K. van der Lee en W.A. Traag (2007): "Onderzoek naar dioxines, dioxine-achtige PCB's en indicator-PCB's in paling uit de Nederlandse binnenwateren", RIKILT rapport 2007.003.
- Janssen, P.J.C.M., M.E. van Apeldoorn, J.E.M. Van Koten-Vermeulen en W.C. Mennes (1995): "Human-toxicological criteria for serious soil contamination: Compounds evaluated in 1993&1994", RIVM-rapport 715810009.
- Janssen, R.P.T., P.J. Pretorius, W.G.J.M Peijnenburg en M.A.G.T. van den Hoop (1996a): "Determination of field-based partition coefficients for heavy metals in Dutch soils and

- the relationships of these coefficients with soil characteristics", RIVM, Bilthoven. RIVM report 719101023.
- Janssen, P.J.C.M., F.A. Swartjes, M.A.G.T. van de Hoop, W.J.G.M. Peijnenburg (1996b): "Evaluatie van het evenwichtspartitieconcept voor zware metalen in bodems en sedimenten", RIVM rapport 719101027.
- Karickhoff, S.W. (1981): "Semi-empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments and soils", *Chemosphere* 10: 833-846.
- Kenaga, E. and Goring, C.A.I. (1980) in *Aquatic Technology*, Eaton, J.R., Parrish, P.R., and Hendricks, A.C. (Eds.) American Society for Testing and Materials, Philadelphia, pp. 78-115.
- Kotterman, M. en S. Glorius (2010): "Achtergrondinformatie van IMARES voor het Sedisoil programma ten aanzien van: PAKs, relatie fractie vet vs. fractie droge stof in niet-vette vis (overige vis) en relatie PCB153 en totaal TEQ" IMARES memo, grotendeels opgenomen als bijlage K.
- Kotterman, M en M. Van den Heuvel-Greve, 2010. Update BCF's in Sedisoil. IMARES-rapport C142/10
- Lu, P.Y., and Metcalf, R.L. (1975) in *Environmental Health Perspectives* 10:296-284.
- Oliver, B.G. and Niimi, A. (1983) in *Journal of Environmental Science Technology* 17:287-291.
- Mackay, D. (1982) in *Environmental Science Technology* 16, 274-278.
- Neely, W.B., Branson, and D.R., Blau, G.E. (1974), *Environmental Science Technology* 8:1113-1115.
- Noort, P. van, (2010): "Verbeterde schatting van log K_{oc} , log BCF en log K_{ow} waarden voor SEDISOIL stoffen", Deltares rapport 1202337-004-BGS-0021, Utrecht.
- Otte, P.F., M. Bleijenberg, M. van Elswijk, C. van de Guchte en F.A. Swartjes (2000): "Berekening van humane risicogrenzen voor waterbodems", Discussienota, RIZA-werkdocument 2000.084x.
- Otte, P.F., J.P.A. Lijzen, J.G. Otte, F.A. Swartjes en C.W. Versluijs (2001): "Evaluation and revision of the CSOIL parameter set", RIVM rapport 711701021.
- Potting S.M.C. (1989): "De consumptie van vis door sportvissers. Hoofdinspectie van de volksgezondheid voor de levensmiddelen en de keuring van waren", sector volksgezondheid en milieu, GGD Amsterdam.
- Rusch, B.M., C.A. Schmidt, L.A. Osté, M. Tonkes, J. Lourens, F. van den Ende en J.L. Maas (2008): "Richtlijn Nader Onderzoek Sanering Waterbodems", AKWA, Waterdienst.
- Veith, G.D., DeFoe, D.L. en Bergstedt, B.V. (1979) in *Journal of Fishery Research Board Canada*, 36:1040-1048.
- VROM, Min. van (1993a): "Protocol voor het Oriënterend Onderzoek", ISBN 9012080827. Sdu Uitgeverij, Den Haag.
- VROM, Min. van (1993b): "Protocol voor het Nader Onderzoek", ISBN 9012080835. Sdu Uitgeverij, Den Haag.
- VROM, Min. Van (1994a): "Circulaire interventiewaarden bodemsanering, d.d. 9 mei 1994", Kenmerk DBO/07494013.
- VROM, Min. van (1994b): "Circulaire tweede fase inwerkingtreding saneringsregeling Wet bodembescherming, d.d. 22 december 1994", Kenmerk DBO/16d94001.
- VROM, Min. van (1995): "Urgentie van bodemsanering. De Handleiding", ISBN 9012082218. Sdu Uitgeverij, Den Haag.
- Vrom, min. Van (2000): "Circulaire streefwaarden en interventiewaarden bodemsanering; Bijlage C: Gegevens voor bepaling saneringsurgentie en saneringstijdstip", 39-44.
- Weijs P.J.M., Wijnen J.H. van (2003). *Visconsumptie en blootstelling aan dioxinen en PCB's van sportvissers (2003)*. Rapport Hogeschool van Amsterdam.

WVC (1988): "Wat eet Nederland. Resultaten van de voedselconsumptiepeiling 1987-1988",
Ministerie van WVC Rijswijk.
WVC (1993): "Zo eet Nederland. Resultaten van de voedselconsumptiepeiling 1992",
Ministerie van WVC Rijswijk.

A Formularium SediSoil

Afkomstig van Bleijenberg et al. (1999).

A.1 Verdeling over de fasen

$$C_{sw} = \frac{SD_{se} * C_{se}}{SD_{se} * Kd_{se} + VW_{se}} \quad \text{en} \quad C_{sm} = \frac{C_{sw} * (SD_{sm} * Kd_{sm} + VW_{sm})}{SD_{sm}}$$

$$C_{sw} > C_{wo} \rightarrow C_{sw} = C_{wo}$$

C_{sw}	concentratie oppervlaktewater (mg/l)
SD_{se}	volumieke massa droge waterbodem (1.3 kg/l)
C_{se}	totaalgehalte waterbodem (mg/kg _{dw})
Kd_{se}	verdelingscoëfficiënt waterbodem-oppervlaktewater (l/kg)
VW_{se}	volumefractie water in waterbodem (0.4)
C_{sm}	totaalgehalte zwevend slib (mg/kg _{dw})
SD_{sm}	volumieke massa zwevend slib (1.3 kg/l)
Kd_{sm}	verdelingscoëfficiënt zwevend slib-oppervlaktewater (l/kg)
VW_{sm}	volumefractie water in waterbodem (0.4)
C_{wo}	wateroplosbaarheid (mg/l)

Voor metalen wordt verondersteld dat:

Kd_{se} gelijk is aan de Kd voor de landbodem;

$$Kd_{sm} = f * Kd_{se} \quad f = 1,5$$

Voor organische verbindingen wordt verondersteld dat de Kd 's op dezelfde wijze te berekenen zijn als voor de landbodem, dus als functie van de Koc en het organische koolstofgehalte:

$$Kd_{se} = K_{oc} * foc_{se} \quad foc_{se} = 0.058$$

$$Kd_{sm} = K_{oc} * foc_{sm} \quad foc_{sm} = 0.116$$

Voor hydrofobe organische verbindingen wordt de Koc berekend uit de octanol-water verdelingscoëfficiënt volgens Karickhoff (1981):

$$K_{oc} = 0.411 * K_{ow};$$

Voor dissociërende organische verbindingen geldt:

$$Kd_{se} = Kd_{se} * f_{nd} \quad \text{waarbij} \quad f_{nd} = \frac{1}{1 + 10^{pH-pKa}}$$

K_{oc}	verdelingscoëfficiënt bodem-oppervlaktewater (l/kg)
foc_{se}	fractie organisch koolstof waterbodem (0.058)
foc_{sm}	fractie organisch koolstof zwevend slib (0.116)

K_{ow}	verdelingscoëfficiënt octanol-water (l/kg)
f_{nd}	fractie niet gedissocieerde stof (-)
pH	zuurgraad (8)
pK_a	zuurdissociatieconstante (-)

A.2 Opname door vis

De concentratie in vis wordt met behulp van een constante BioConcentratieFactor (BCF) berekend uit de concentratie in het oppervlaktewater, uitgaande van evenwicht, met de formule:

$$C_{fi} = BCF_{fi} * C_{sw}$$

BCF_{fi} BioConcentratieFactor vis-oppervlaktewater (versgewicht) (mg/kg_{fw})/(mg/l)

Voor metalen geldt:

$$BCF_{fi} = BCF_{fi,dw} * fdw_{fi}$$

$BCF_{fi,dw}$ BioConcentratieFactor vis-oppervlaktewater (drooggewicht) (mg/kg_{dw})/(mg/l)
 fdw_{fi} drooggewichtfractie vis (0.1)

Voor organische verbindingen geldt:

$$BCF_{fi} = BCF_{fi,fat} * Ff_{fi}$$

$BCF_{fi,fat}$ is de BioConcentratieFactor vis-oppervlaktewater (vetbasis) (mg/kg_{fat})/(mg/l)

De basisdata in Sedisoil bevatten de $BCF_{fi,fat}$. Voor stoffen zonder BCF in de basisdata wordt de empirische relatie van Veith et al (1979) wordt gebruikt om een log BCF_{fi} te berekenen op grond van de log K_{ow} waarde:

$$\log BCF_{fi} = 0,85 * \log K_{ow} - 0,70 \quad (17)$$

Voor stoffen met een log K_{ow} groter dan 6 wordt een parabolische relatie gebruikt:

$$\log BCF_{fi} = -0,20 * \log K_{ow}^2 + 2,74 * \log K_{ow} - 4,72 \quad (18)$$

De gebruikte K_{ow} waarden zijn afgeleid uit de LOGPSTAR waarden uit de MEDCHEM (1996) database.

A.3 Ingestie waterbodem

Blootstelling via ingestie van waterbodem wordt berekend met de formule:

$$DI_{se} = \frac{tf_{se} * AID_{se} * fa * C_{se}}{W}$$

tf_{se} aantal gebeurtenissen per jaar (n/365d)
 $AID_{se,a}$ inname hoeveelheid waterbodem/keer (volw) $0.35 \cdot 10^{-3}$ kg_{dw}/gebeurtenis
 $AID_{se,c}$ inname hoeveelheid waterbodem/keer (kind) $1 \cdot 10^{-3}$ kg_{dw}/gebeurtenis

fa	relatieve absorptiefactor (1.0)
W_a	lichaamsgewicht volwassene (70kg)
W_c	lichaamsgewicht kind (15 kg)

A.4 Ingestie van oppervlaktewater

Blootstelling via ingestie van oppervlaktewater vindt plaats tijdens zwemmen en wordt berekend met de formule:

$$DI_{sw} = \frac{tf_{se} * AID_{sw} * fa * C_{sw}}{W}$$

AID_{sw} inname hoeveelheid oppervlaktewater/gebeurtenis ($50 \cdot 10^{-3}$ l/keer)

A.5 Ingestie zwevend slib

Blootstelling via ingestie van zwevend slib vindt plaats tijdens de ingestie van oppervlaktewater en wordt berekend met de formule:

$$DI_{sm} = \frac{tf_{se} * AID_{sw} * Pc * fa * C_{sm}}{W}$$

Pc zwevend slibgehalte oppervlaktewater ($30 \cdot 10^{-6}$ kg/l)

A.6 Dermale opname via waterbodem

Voor organische verbindingen wordt de blootstelling via dermale opname berekend via de formule:

$$DA_{se} = \frac{tf_{se} * A_{exp_{se}} * fm * DAE * DAR * tb_{se} * fa * C_{se}}{W}$$

$A_{exp_{se,a}}$	blootgesteld oppervlak (volw.) (0.95 m^2)
$A_{exp_{se,c}}$	blootgesteld oppervlak (kind) (0.28 m^2)
fm	matrixfactor (0.15)
DAE_a	bedekkingsgraad (volw.) ($3.75 \text{ mg grond/cm}^2$)
DAE_c	bedekkingsgraad (kind) ($0.51 \text{ mg grond/cm}^2$)
DAR_a	absorptiesnelheid (volw.) (0.005 l/h)
DAR_c	absorptiesnelheid (kind) (0.01 l/h)
tb_{se}	duur blootstelling (8 h)

A.7 Dermale opname via oppervlaktewater

Voor organische verbindingen kan blootstelling via dermale opname via het oppervlaktewater plaats vinden tijdens het zwemmen en wordt berekend via de formule:

$$DA_{sw} = \frac{tf_{se} * A_{tot} * tbsw * DAR_w * fa * C_{sw}}{W}$$

$A_{tot,a}$ lichaamsoppervlak (volw.) (1.448 m^2)

$A_{tot,c}$	lichaamsoppervlak (kind) (0.456 m ²)
$tbsw_a$	tijdsduur zwemmen (volw.) (1 h/d)
$tbsw_c$	tijdsduur zwemmen (kind) (2 h/d)
DAR_w	dermale absorptiesnelheid vanuit water (mg/m ²)/(mg/l)/h

$$DAR_{sw} = \frac{(5000 * (0.038 + 0.153 * K_{ow})) * \exp(-0.016 * M)}{(5000 + (0.038 + 0.153 * K_{ow})) * 1.5}$$

M	molmassa (g/mol)
-----	------------------

A.8 Indirecte blootstelling

Indirecte blootstelling kan plaatsvinden via visconsumptie en wordt berekend met de formule:

$$FI = \frac{Q_{fi} * FV_{fi} * fa * C_{fi}}{W}$$

Q_{fi}	visconsumptie (kg _{fw} /d)
FV_{fi}	fractie verontreinigde vis (-)

A.9 Totale blootstelling

De totale blootstelling voor kinderen (TCH_{se}) en volwassenen (TAD_{se}) wordt berekend door sommatie van de blootstelling via de separate routes met de formule:

$$TCH_{se} = DI_{se} + DI_{sw} + DI_{sm} + DA_{se} + DA_{sw} + FI$$

$$TAD_{se} = DI_{se} + DI_{sw} + DI_{sm} + DA_{se} + DA_{sw} + FI$$

Onder de aanname dat de mens 6 jaar kind en 64 jaar volwassene is, wordt de levenslanggemiddelde blootstelling berekend met de formule:

$$DOSIS = \frac{6 * TCH + 64 * TAD}{70}$$

B Parameters en verdeling over de vaste fase

Uit Bockting et al. (1996)

Parameter	Eenheid	Beschrijving	CSOIL	Standaard waterbodern	SEDISOIL
SD_{se}	kg/l	Volumieke massa van droge bodern	1.5	-	1.5
VW_{se}	-	Volumefractie water	Water: 0.2 Lucht: 0.2	-	0.4
foc_{se}	-	Fractie organisch koolstof	0.058	0.058	0.058
foc_{sw}	-	Fractie organisch koolstof, zwevend slib	-	-	0.116
pH	-	Zuurgraad bodern	6	8	8

C Inname zwevend stof en waterbodem

Uit Bockting et al. (1996)

Parameter	Eenheid	Beschrijving	BKH (1991)	BMM (1993)	CSOIL (1994) (landbodem)	Linders (1990) (landbodem)	SEDI SOIL
AID _{sec}	mg/gebeurtenis	Ingestie waterbodem, kind	200-1000	190-300	420	200	1000
AID _{sea}	mg/gebeurtenis	Ingestie waterbodem, volwassene	-	-	350	-	350
AID _{sw}	cm ³ /gebeurtenis	Ingestie oppervlakte water	50	50-100	-	50	50
Pc	mg/l	Zwevend slibgehalte oppervlakte water	30-300	30-300	-	-	50

D Parameters en dermale opname

Overgenomen uit Bockting et al. (1996) en gedeeltelijk uit Van Elswijk et al. (2001)

Parameter	Eenheid	Beschrijving	CSOIL (1994)	Elswijk et al. (2001)	SEDISOIL
fm	-	Matrixfactor	0.15	-	0.15
A_{expc}	m^2	Blootgesteld oppervlakte, kind	0.17	0.28	0.28
A_{expa}	M^2	Blootgesteld oppervlakte, volwassene	0.28	0.95	0.95
DAE_c	mg/cm^2	Bedekkingsgraad huid, kind	0.51	-	0.51
DAE_a	mg/cm^2	Bedekkingsgraad huid, volwassene	3.75	-	3.75
DAR_c	l/h	Absorptiesnelheid, kind	0.01	-	0.01
DAR_a	l/h	Absorptiesnelheid, volwassene	0.005	-	0.005
A_{totc}	m^2	Lichaamsoppervlakte, kind	0.95	0.456	0.456
A_{totc}	m^2	Lichaamsoppervlakte, kind	1.8	1.448	1.448

E Visconsumptie

Groep	Eenheid	WVC, 1988	WVC, 1993	Heijna- Merkus, 1993	Fiore, 1989	Weijs en Wijnen, 2003	Hoogenboom et al., 2001	Bouw- mees- ter et al., 2007	Lepper , 2005
Gemiddelde Nederlandse consument, kind	g _{fw} /dag	2.4	3	3	-	-	-		-
Gemiddelde Nederlandse consument, volwassene	g _{fw} /dag	8.6	7.8	11	-	-	9.6 (gemiddeld) 12.4 (1x/week vis) 47 (2x/week vis)		-
Paling consumptie, kind	g _{fw} /dag	-	-	-	-	1.5	-		-
Paling consumptie, volwassene	g _{fw} /dag	-	-	-	-	5 (sportvi ss.)	0.13 (gemiddeld) 0.3 (1x/week vis) 0.7 (2x/week vis)		-
Gemiddelde Amerikaanse sportvisser	g _{fw} /dag	-	-	-	26.1	-	-		-
Gemiddelde Amerikaanse sportvisser, eigen vangst	g _{fw} /dag	-	-	-	12.3	-	-		-
Visconsumpti e Europese consument									115

F Vetgehalte vis

Deels overgenomen uit Bockting et al. (1996)

Soort	MacKay (1988)	BKH (1991)	MWTC (2006)	SEDISOIL
Vis (algemeen)	4.5	-	-	5
Makreel en haringachtigen	-	10	-	-
Aal en palingachtigen	-	20	15	15
Overige vissoorten en producten	-	5	-	-

G Tijdfractionen en Tijdsduren

Uit Bockting et al. (1996)

Parameter	Eenheid	Beschrijving	BKH (1991)	BMM (1994)	Voorstel	
					Zwemwater	Geen zwemactiviteit
tf_{se}	-	Tijdfractione aanwezigheid bij waterbodem	0.086 (30 dagen)	-	0.082 (30 dagen)	0
tf_{se}	h/d	Duur blootstelling aan waterbodem	1	4 - 8	8	8
tb_{swc}	h/d	Duur blootstelling oppervlakte water, kind	-	2 - 4	2	2
tb_{swa}	h/d	Duur blootstelling oppervlakte water, volwassene	-	-	1	1

H Bronnen metalen

In deze tabel staan de veranderingen in de eigenschappen van metalen die in SediSoil zijn doorgevoerd sinds de start van het model.

Stof	Wateroplosbaarheid (mg/dm ³)	Kd _{sed} (l/kg)	MTR (mg/kg/d)
antimoon	2.30E+04 ¹	2467 ¹	9.00E-04 ³
arseen	3.47E+04 ¹	6667 ²	1.00E-03 ⁴
barium	5.48E+04 ¹	900 ¹	2.00E-02 ³
beryllium	1.49E+05 ¹	567 ¹	5.00E-04 ⁵
cadmium	1.23E+05 ¹	86667 ²	5.00E-04 ⁴
chrom (III)	8.67E+04 ¹	193333 ²	5.00E-03 ³
kobalt	3.00E+03 ²	3900 ¹	1.40E-03 ³
koper	4.21E+05 ¹	33333 ²	1.40E-01 ³
kwik (totaal)	6.00E-02 ¹	113333 ²	2.00E-03 ⁴
lood	9.58E+03 ¹	426667 ²	3.60E-03 ³
molybdeen	7.66E+04 ¹	747 ¹	1.00E-02 ³
nikkel	4.22E+05 ¹	5333 ²	5.00E-02 ³
selenium	2.06E+03 ¹	393 ¹	5.00E-03 ⁵
telluur	3.00E+03 ²	300 ¹	2.00E-03 ⁵
thallium	2.65E+04 ¹	1000 ¹	2.00E-04 ⁵
tin	3.00E+03 ²	371500 ¹	2.00E+00 ³
vanadium	3.00E+03 ²	3667 ¹	2.00E-03 ⁵
zilver	7.05E+04 ¹	130 ¹	5.00E-03 ³
zink	3.44E+05 ¹	73333 ²	5.00E-01 ⁴

Verklaring superscripts:

Superscript	Bron
1	Van Elswijk et al., 2004
2	Otte et al., 2001
3	Vanaf start SediSoil
4	Baars, 2001
5	MTR CIW

I MTR waarden

NAAM Stof	MTR SediSoil	MTR 1996	MTR 2000	MTR 2001	Bbk 2007
	(mg/kg/d)	(mg/kg/d)	(mg/kg/d)	(mg/kg/d)	(mg/kg/d)
antimoon	9,00E-04	8,60E-04	9,00E-04		
arseen	1,00E-03	2,10E-03	2,10E-03	1,00E-03	
barium	2,00E-02	2,00E-02	2,00E-02	2,00E-02	
beryllium	5,00E-04		5,00E-04		
cadmium	5,00E-04	1,00E-03	1,00E-03	5,00E-04	
chrom (III)	5,00E-03	5,00E-03	5,00E-03	5,00E-03	
kobalt	1,40E-03	1,40E-03	1,40E-03	1,40E-03	
koper	1,40E-01	1,40E-01	1,40E-01	1,40E-01	
kwik (totaal)	2,00E-03	6,10E-04	6,00E-04	2,00E-03	
kwik (organisch)	1,00E-04				
lood	3,60E-03	3,60E-03	3,60E-03	3,60E-03	
molybdeen	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02	
nikkel	5,00E-02	5,00E-02	5,00E-02	5,00E-02	
selenium	5,00E-03		5,00E-03		
telluur	2,00E-03		2,00E-03		
thallium	2,00E-04		2,00E-04		
tin	2,00E+00	2,00E+00	2,00E+00		
vanadium	2,00E-03		2,00E-03		
zilver	5,00E-03	5,00E-03	5,00E-03		
zink	5,00E-01	1,00E+00	1,00E+00	5,00E-01	
som aromatische oplosmiddelen (i)	1,70E-01		1,70E-01		
benzeen	3,30E-03	4,30E-03	4,30E-03	3,30E-03	
1,2-dihydroxybenzeen (catechol)	4,00E-02	4,00E-02	4,00E-02	4,00E-02	
dodecylbenzeen (i)	5,00E-03		5,00E-03		
ethylbenzeen	1,00E-01	1,36E-01	1,36E-01	1,00E-01	
fenol	4,00E-02	6,00E-02	6,00E-02	4,00E-02	
1,4-dihydroxybenzeen (hydrochinon)	2,50E-02	2,50E-02	2,50E-02	2,50E-02	
2-chlooraniline	9,00E-04		9,00E-04		
o-cresol	5,00E-02	5,00E-02	5,00E-02	5,00E-02	
m-cresol	5,00E-02	5,00E-02	5,00E-02	5,00E-02	
p-cresol	5,00E-02	5,00E-02	5,00E-02	5,00E-02	
1,2-xyleen	1,50E-01	1,00E-02	1,00E-02	1,50E-01	
1,3-xyleen	1,50E-01	1,00E-02	1,00E-02	1,50E-01	
1,4-xyleen	1,50E-01	1,00E-02	1,00E-02	1,50E-01	
1,3-dihydroxybenzeen (recorcinol)	2,00E-02	2,00E-02	2,00E-02	2,00E-02	
tolueen	2,23E-01	4,30E-01	4,30E-01	2,23E-01	
antraceen	4,00E-02	5,00E-02	5,00E-02	4,00E-02	
benzo(a)antraceen	5,00E-03	2,00E-02	2,00E-02	5,00E-03	
benzo(a)pyreen	5,00E-04	2,00E-03	2,00E-03	5,00E-04	
benzo(g,h,i)peryleen	3,00E-02	2,00E-02	2,00E-02	3,00E-02	
benzo(k)fluorantheen	5,00E-03	2,00E-02	2,00E-02	5,00E-03	
chryseen	5,00E-02	2,00E-03	2,00E-03	5,00E-02	

NAAM Stof	MTR SediSoil	MTR 1996	MTR 2000	MTR 2001	Bbk 2007
fenanthreen	4,00E-02	2,00E-02	2,00E-02	4,00E-02	
fluorantheen	5,00E-02	2,00E-02	2,00E-02	5,00E-02	
indeno(1,2,3-c,d)pyreen	5,00E-03	2,00E-02	2,00E-02	5,00E-03	
naftaleen	4,00E-02	5,00E-02	5,00E-02	4,00E-02	
1,1,1-trichloorethaan	8,00E-02	8,00E-02	8,00E-02		
1,1,2-trichloorethaan	4,00E-03		4,00E-03		
1,1-dichloorethaan	8,00E-02	8,00E-02	8,00E-02		
1,1-dichlooretheen	3,00E-03		3,00E-03		
1,2-dichloorethaan	1,40E-02	1,40E-02	1,40E-02	1,40E-02	
cis-1,2-dichlooretheen	6,00E-03	6,00E-03	1,60E-02	6,00E-03	
trans-1,2-dichlooretheen	1,70E-02	1,70E-02	1,60E-02	1,70E-02	
1,2-dichloorpropaan	5,00E-02		5,00E-02		
1,3-dichloorpropaan	7,00E-02		7,00E-02		
dichloormethaan	6,00E-02	6,00E-02	6,00E-02	6,00E-02	
tetrachlooretheen (Per)	1,60E-02	1,60E-02	1,60E-02	1,60E-02	
tetrachloormethaan (Tetra)	4,00E-03	4,00E-03	4,00E-03	4,00E-03	
trichlooretheen (Tri)	5,00E-02	5,40E-01	5,40E-01	5,00E-02	
trichloormethaan (chloroform)	3,00E-02	3,00E-02	3,00E-02	3,00E-02	
chlooretheen	6,00E-04	3,50E-03	3,50E-03	6,00E-04	
chloorbenzeen	2,00E-01	3,00E-01	3,00E-01	2,00E-01	
1,2-dichloorbenzeen	4,30E-01	1,90E-01	1,90E-01	4,30E-01	
1,4-dichloorbenzeen	1,00E-01	1,90E-01	1,90E-01	1,00E-01	
1,2,3-trichloorbenzeen	8,00E-03	5,00E-04	5,00E-04	8,00E-03	
1,2,4-trichloorbenzeen	8,00E-03	5,00E-04	5,00E-04	8,00E-03	
1,3,5-trichloorbenzeen	8,00E-03	5,00E-04	5,00E-04	8,00E-03	
1,2,3,4-tetrachloorbenzeen	5,00E-04	5,00E-04	5,00E-04		
1,2,3,5-tetrachloorbenzeen	5,00E-04	5,00E-04	5,00E-04		
1,2,4,5-tetrachloorbenzeen	5,00E-04	5,00E-04	5,00E-04		
pentachloorbenzeen	5,00E-04	5,00E-04	5,00E-04		
hexachloorbenzeen	1,60E-04	5,00E-04	5,00E-04	1,60E-04	
2-chloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
3-chloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
4-chloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
2,3-dichloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
2,4-dichloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
2,5-dichloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
2,6-dichloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
3,4-dichloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
3,5-dichloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
2,3,4-trichloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
2,3,5-trichloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
2,3,6-trichloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
2,4,5-trichloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
2,4,6-trichloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
3,4,5-trichloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
2,3,4,5-tetrachloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
2,3,4,6-tetrachloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	

NAAM Stof	MTR SediSoil	MTR 1996	MTR 2000	MTR 2001	Bbk 2007
2,3,5,6-tetrachloorfenol	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	3,00E-03	
pentachloorfenol	3,00E-03	3,00E-02	3,00E-02	3,00E-03	
4-chloor-2-methylfenol (i)	2,00E-02		2,00E-02		
4-chloor-3-methylfenol (i)	3,00E-01		3,00E-01		
1-chloornaftaleen	8,00E-02	5,00E-04	5,00E-04	8,00E-02	
2-chloornaftaleen	8,00E-02	5,00E-04	5,00E-04	8,00E-02	
2,4,4'-trichloorbifenyl (PCB 28)	9,00E-05	9,00E-05	9,00E-05	1,00E-05	9,00E-05
2,2',5,5'-tetrachloorbifenyl (PCB 52)	9,00E-05	9,00E-05	9,00E-05	1,00E-05	9,00E-05
2,2',4,5,5'-pentachloorbifenyl (PCB 101)	9,00E-05	9,00E-05	9,00E-05	1,00E-05	9,00E-05
2,3',4,4',5-pentachloorbifenyl (PCB 118)	9,00E-05	9,00E-05	9,00E-05	1,00E-05	9,00E-05
2,2',3,4,4',5'-hexachloorbifenyl (PCB 138)	9,00E-05	9,00E-05	9,00E-05	1,00E-05	9,00E-05
2,2',4,4',5,5'-hexachloorbifenyl (PCB 153)	9,00E-05	9,00E-05	9,00E-05	1,00E-05	9,00E-05
2,2',3,4,4',5,5'-heptachloorbifenyl (PCB 180)	9,00E-05	9,00E-05	9,00E-05	1,00E-05	9,00E-05
som 2,4'- en 4,4'-DDD	5,00E-04		2,00E-02	5,00E-04	
som 2,4'- en 4,4'-DDE	5,00E-04	2,00E-02	2,00E-02	5,00E-04	
som 2,4'- en 4,4'-DDT	5,00E-04	2,00E-02	2,00E-02	5,00E-04	
aldrin	1,00E-04	1,00E-04	1,00E-04	1,00E-04	
dieldrin	1,00E-04	1,00E-04	1,00E-04	1,00E-04	
endrin	2,00E-04	1,00E-04	1,00E-04	2,00E-04	
isodrin					
alfa-hexachloorcyclohexaan	1,00E-03	1,00E-03	4,00E-03	1,00E-03	
beta-hexachloorcyclohexaan	2,00E-05	2,00E-05	4,00E-03	2,00E-05	
gamma-hexachloorcyclohexaan (lindaan)	4,00E-05	1,00E-03	4,00E-03	4,00E-05	
atrazine	5,00E-03	5,00E-03	5,00E-03	5,00E-03	
methylazinfos (i)	5,00E-03	5,00E-03	5,00E-03		
carbaryl	3,00E-03	1,00E-02	1,00E-02	3,00E-03	
carbofuran	2,00E-03	1,00E-02	1,00E-02	2,00E-03	
chloordaan	5,00E-04	5,00E-04	5,00E-04		
endosulfan	6,00E-03		6,00E-03		
heptachloor	3,00E-04	1,00E-04	3,00E-04		
heptachloorepoxide	4,00E-04	1,00E-04	4,00E-04		
maneb	5,00E-02	5,00E-02	2,00E-02	5,00E-02	
2-methyl-4-chloorfenoxiazijnzuur (MCPA)	1,50E-03		1,50E-03		
bis(tri-n-butyltin)oxide	4,00E-04	3,00E-04	4,00E-04		
trifenylnin	4,00E-04	5,00E-04	4,00E-04		
trifenylninhydroxide	4,00E-04	5,00E-04	4,00E-04		
benzylbutylftalaat	5,00E-01	2,50E-02	2,50E-02	5,00E-01	
bis(2-ethylhexyl)ftalaat	4,00E-03	2,50E-02	2,50E-02	4,00E-03	
dibutylftalaat (DBP)	5,20E-02		2,50E-02	5,20E-02	
diethylftalaat (DEP)	2,00E-01		2,50E-02	2,00E-01	
dihexylftalaat (DHP)	4,00E-03		2,50E-02	4,00E-03	
di-isodecylftalaat (DIDP)	4,00E-03		2,50E-02	4,00E-03	
dimethylftalaat (DMP)	4,00E-03		2,50E-02	4,00E-03	
N-butylacetaat (i)	2,00E-01	2,00E-01	2,00E-01		
N-butanol (i)	1,25E-01	1,25E-01	1,25E-01		
acrylonitril	1,00E-04	1,00E-04	1,00E-04		

NAAM Stof	MTR SediSoil	MTR 1996	MTR 2000	MTR 2001	Bbk 2007
cyclohexanon	4,60E+00	4,60E+00	4,60E+00	4,60E+00	
diethyleenglycol (i)	4,00E-01	4,00E-01	4,00E-01		
ethylacetaat (i)	9,00E-01		9,00E-01		
glycol (i)	4,00E-01	4,00E-01	4,00E-01		
methanal (i)	1,50E-01	1,50E-01	1,50E-01		
2-propanol (i)	1,00E+00		1,00E+00		
methanol (i)	5,00E-01	5,00E-01	5,00E-01		
2-butanon (i)	1,90E-01	1,90E-01	1,90E-01		
methyl-tertiair-butylether (MTBE) (i)	9,00E-01	9,00E-01	9,00E-01		
pyridine	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	
styreen	1,20E-01	7,70E-02	7,70E-02	1,20E-01	
tetrahydrofuraan	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02	
tetrahydrothiofeen	1,80E-01	1,80E-01	3,50E-03	1,80E-01	
tribroommethaan	2,00E-02		2,00E-02		
1,2,4-trichloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
1,3,6,8-tetrachloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
1-chloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
2,3,7,8-tetrachloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
2,7-dichloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
2,8-dichloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
2-chloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
1,2,3,4,6,7,8-heptachloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
1,2,3,4,7,8-hexachloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09			4,00E-09	2,00E-09
1,2,3,6,7,8-hexachloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
1,2,3,7,8,9-hexachloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09			4,00E-09	2,00E-09
1,2,3,4,6,7,8,9-octachloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
1,2,3,7,8-pentachloordibenzo-p-dioxine	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
2,3,3',4,4'-pentachloorbifenyyl (PCB 105)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
2,3',4,4',5-pentachloorbifenyyl (PCB 118)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
3,3',4,4',5-pentachloorbifenyyl (PCB 126)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
2,3,3',4,4',5-hexachloorbifenyyl (PCB 156)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
2,3,3',4,4',5'-hexachloorbifenyyl (PCB 157)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
3,3',4,4',5,5'-hexachloorbifenyyl (PCB 169)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
3,3',4,4'-tetrachloorbifenyyl (PCB 77)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
1,2,3,4,6,7,8,9-octadibenzofuraan (PCDF 135)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
1,2,3,4,6,7,8-heptachloordibenzofuraan (PCDF 131)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
1,2,3,4,7,8,9-heptachloordibenzofuraan (PCDF 134)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
1,2,3,4,7,8-hexachloordibenzofuraan (PCDF 118)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
1,2,3,6,7,8-hexachloordibenzofuraan (PCDF 121)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
1,2,3,7,8,9-hexachloordibenzofuraan (PCDF 124)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09

NAAM Stof	MTR SediSoil	MTR 1996	MTR 2000	MTR 2001	Bbk 2007
1,2,3,7,8-pentachloordibenzofuraan (PCDF 94)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
2,3,4,6,7,8-hexachloordibenzofuraan (PCDF 130)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
2,3,4,7,8-pentachloordibenzofuraan (PCDF 112)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09
2,3,7,8-tetrachloordibenzofuraan (PCDF 83)	1,00E-09	1,00E-08	1,00E-08	4,00E-09	2,00E-09

1 = Bockting et al., 1996.

2 = Ministerie van VROM, 2000.

3 = Baars et al., 2001.

4 = Besluit 2007: onderling besloten tussen RWS-Waterdienst en RIVM

J Parameters in SEDISOIL

Onderstaande stofgegevens en parameterwaarden komen uit de SEDISOIL-versie 01-09-2010.

SNAAM	Afkort	M	S	log Kow	log Koc	pKa	FAG	BCFfi_dw	BCFfi_f	Kdsed	TEF
			(mg/dm ³)							(l/kg)	
antimoon	Sb	121,8	2,30E+04							2467	
arsen	As	74,9	3,47E+04					50		6667	
barium	Ba	137,3	5,48E+04							900	
beryllium	Be	9,0	1,49E+05							567	
cadmium	Cd	112,4	1,23E+05					100		86667	
chrom (III)	Cr	52,0	8,67E+04					200		193333	
kobalt	Co	58,9	3,00E+03							3900	
koper	Cu	63,5	4,21E+05					1000		33333	
kwik (totaal)	Hg	200,6	6,00E-02					1000		113333	
lood	Pb	207,2	9,58E+03				0,60	5000		426667	
molybdeen	Mo	95,9	7,66E+04							747	
nikkel	Ni	58,7	4,22E+05					200		5333	
selenium	Se	79,0	2,06E+03							393	
telluur	Te	127,6	3,00E+03							300	
thallium	Tl	204,4	2,65E+04							1000	
tin	Sn	118,7	3,00E+03							371500	
vanadium	V	50,9	3,00E+03							3667	
zilver	Ag	107,9	7,05E+04							130	
zink	Zn	65,4	3,44E+05					10000		73333	
som aromatische oplosmiddelen (i)	sarmtsolmdl	120,9	4,72E+01	3,80							
benzeen	Ben	78,1	1,79E+03	2,12	1,63				1,86E+02		
1,2-dihydroxybenzeen (catechol)	12DHOxBen	110,1	4,61E+05	0,92	0,77	9,45			2,09E+01		
dodecylbenzeen (i)	dodcBen	246,4	1,02E-03	8,57	7,11				3,16E+07		
ethylbenzeen	C2yBen	106,2	1,69E+02	3,23	2,57				2,00E+03		
fenol	Fol	94,1	8,28E+04	1,60	1,16	9,99			8,71E+01		
1,4-dihydroxybenzeen (hydrochinon)	14DHOxBen	110,1	7,20E+04	0,59	0,55	10,90			1,17E+01		
2-chlooraniline	2ClAn	127,6	8,16E+03	2,13	1,85	2,66			2,51E+02		
o-cresol	ocresl	108,1	2,59E+04	2,02	1,56	10,30			1,95E+02		
m-cresol	mcresl	108,1	2,27E+04	2,03	1,56	10,10			2,14E+02		
p-cresol	pcresl	108,1	2,15E+04	2,02	1,55	10,30			2,04E+02		
1,2-xyleen	12xyln	106,2	1,78E+02	3,07	2,47				1,41E+03		
1,3-xyleen	13xyln	106,2	1,61E+02	3,10	2,47				1,45E+03		
1,4-xyleen	14xyln	106,2	1,62E+02	3,17	2,52				1,70E+03		
1,3-dihydroxybenzeen (recorcinol)	13DHOxBen	110,1	7,17E+05	0,80	0,60	9,32			1,78E+01		
tolueen	Tol	92,1	5,26E+02	2,69	2,10				6,31E+02		
antraceen	Ant	178,2	4,34E-02	4,46	4,07				0,00E+00		
benzo(a)antraceen	BaA	228,3	9,40E-03	5,79	5,46				0,00E+00		
benzo(a)pyreen	BaP	252,3	1,62E-03	5,97	5,82				0,00E+00		
benzo(g,h,i)peryleen	BghiPe	276,3	2,60E-04	6,73	6,47				0,00E+00		
benzo(k)fluorantheen	BkF	252,3	8,00E-04	6,02	5,75				0,00E+00		
chryseen	Chr	228,3	2,00E-03	5,78	5,47				0,00E+00		
fenanthreen	Fen	178,2	1,15E+00	4,40	4,05				0,00E+00		
fluorantheen	Flu	202,3	2,60E-01	4,97	4,61				0,00E+00		
indeno(1,2,3-c,d)pyreen	InP	276,3	1,90E-04	6,73	6,47				0,00E+00		
naftaleen	Naf	128,2	3,10E+01	3,30	2,85				0,00E+00		
1,1,1-trichloorethaan	111TCIC2a	133,4	1,29E+03	2,44	1,82						
1,1,2-trichloorethaan	112TCIC2a	133,4	4,59E+03	2,09	1,62				1,70E+02		
1,1-dichloorethaan	11DCIC2a	99,0	5,04E+03	1,83	1,31				8,51E+01		
1,1-dichlooretheen	11DCIC2e	96,9	2,42E+03	2,02	1,41				1,32E+02		
1,2-dichloorethaan	12DCIC2a	99,0	8,60E+03	1,69	1,26				6,76E+01		
cis-1,2-dichlooretheen	c12DCIC2e	96,9	6,41E+03	1,78	1,29				8,91E+01		
trans-1,2-dichlooretheen	t12DCIC2e	96,9	4,52E+03	1,98	1,38				1,35E+02		
1,2-dichloorpropaan	12DCIC3a	113,0	2,80E+03	2,25	1,71				2,14E+02		
1,3-dichloorpropaan	13DCIC3a	113,0	2,75E+03	1,91	1,54				9,33E+01		
dichloormethaan	DCIC1a	84,9	1,30E+04	1,42	0,97				3,89E+01		
tetrachlooretheen (Per)	T4CIC2e	165,8	2,06E+02	3,18	2,43				2,14E+03		
tetrachloormethaan (Tetra)	T4CIC1a	153,8	7,93E+02	2,76	2,04				7,41E+02		
trichlooretheen (Tri)	TCIC2e	131,4	1,28E+03	2,62	1,91				5,89E+02		
trichloormethaan (chloroform)	TCIC1a	119,4	7,95E+03	2,10	1,48				1,86E+02		
chlooretheen	CIC2e	62,5	8,80E+03	1,45	0,94				3,55E+01		
chloorbenzeen	CIBen	112,6	4,98E+02	2,81	2,23				9,55E+02		
1,2-dichloorbenzeen	12DCIBen	147,0	1,56E+02	3,24	2,66				2,82E+03		
1,4-dichloorbenzeen	14DCIBen	147,0	8,13E+01	3,36	2,73				3,55E+03		
1,2,3-trichloorbenzeen	123TCIBen	181,4	1,80E+01	3,89	3,24				1,35E+04		
1,2,4-trichloorbenzeen	124TCIBen	181,4	4,90E+01	3,95	3,24				1,48E+04		
1,3,5-trichloorbenzeen	135TCIBen	181,4	6,01E+00	4,00	3,27				1,66E+04		
1,2,3,4-tetrachloorbenzeen	1234T4CIBen	215,9	5,92E+00	4,38	3,68				4,37E+04		

SNAAM	Afkort	M	S	log Kow	log Koc	pKa	FAG	BCFfi_dw	BCFfi_f	Kdsed	TEF
1,2,3,5-tetrachloorbenzeen	1235T4ClBen	215,9	5,10E+00	4,45	3,71				5,01E+04		
1,2,4,5-tetrachloorbenzeen	1245T4ClBen	215,9	5,95E-01	4,48	3,67				4,68E+04		
pentachloorbenzeen	PeClBen	250,3	8,31E-01	4,89	4,14				1,51E+05		
hexachloorbenzeen	HCB	284,8	6,20E-03	5,42	4,61				5,37E+05		
2-chloorfenol	2ClFol	128,6	1,13E+04	2,14	1,65	8,56			2,69E+02		
3-chloorfenol	3ClFol	128,6	2,60E+04	2,41	1,91	9,12			6,46E+02		
4-chloorfenol	4ClFol	128,6	2,40E+04	2,57	1,90	9,41			1,07E+03		
2,3-dichloorfenol	23DCIFol	163,0	3,60E+03	2,85	2,33	7,70			1,48E+03		
2,4-dichloorfenol	24DCIFol	163,0	4,50E+03	2,99	2,38	7,89			2,09E+03		
2,5-dichloorfenol	25DCIFol	163,0	2,00E+03	2,99	2,38	7,51			2,09E+03		
2,6-dichloorfenol	26DCIFol	163,0	1,90E+03	2,72	2,24	6,79			9,55E+02		
3,4-dichloorfenol	34DCIFol	163,0	9,26E+03	3,31	2,65	8,63			5,89E+03		
3,5-dichloorfenol	35DCIFol	163,0	5,38E+03	3,34	2,66	8,18			6,31E+03		
2,3,4-trichloorfenol	234TCIFol	197,4	9,75E+01	3,46	3,02	7,01			1,82E+04		
2,3,5-trichloorfenol	235TCIFol	197,4	9,01E+01	3,58	3,02	6,79			1,82E+04		
2,3,6-trichloorfenol	236TCIFol	197,4	4,50E+02	3,77	2,79	5,80			7,24E+03		
2,4,5-trichloorfenol	245TCIFol	197,4	1,20E+03	3,72	3,02	7,40			1,82E+04		
2,4,6-trichloorfenol	246TCIFol	197,4	8,00E+02	3,70	2,78	6,23			1,15E+04		
3,4,5-trichloorfenol	345TCIFol	197,4	6,45E+01	4,01	3,24	7,84			4,47E+04		
2,3,4,5-tetrachloorfenol	2345T4ClFol	231,9	2,87E+01	4,21	3,68	6,35			1,41E+05		
2,3,4,6-tetrachloorfenol	2346T4ClFol	231,9	2,30E+01	4,45	3,45	5,22			5,75E+04		
2,3,5,6-tetrachloorfenol	2356T4ClFol	231,9	5,49E+01	3,88	3,45	5,14			5,75E+04		
pentachloorfenol	PeClFol	266,3	1,40E+01	5,13	4,02	4,70			3,98E+05		
4-chloor-2-methylfenol (i)	4Cl2C1yFol	142,6	4,00E+03	2,85	2,27	9,71			1,45E+03		
4-chloor-3-methylfenol (i)	4Cl3C1yFol	142,6	3,83E+03	2,75	2,23	9,55			1,23E+03		
1-chloornaftaleen	1ClNaf	162,6	1,74E+01	4,02	3,47				2,19E+04		
2-chloornaftaleen	2ClNaf	162,6	1,17E+01	3,97	3,45				2,00E+04		
2,4,4'-trichloorbifenyyl (PCB 28)	PCB28	257,5	2,70E-01	5,58	4,94				8,71E+05		
2,2',5,5'-tetrachloorbifenyyl (PCB 52)	PCB52	292,0	1,53E-02	6,03	5,30				2,82E+06		
2,2',4,5,5'-pentachloorbifenyyl (PCB 101)	PCB101	326,4	1,54E-02	6,43	5,70				7,41E+06		
2,3',4,4',5-pentachloorbifenyyl (PCB 118)	PCB118	326,4	1,34E-02	6,51	5,86				8,51E+06		
2,2',3,4,4',5'-hexachloorbifenyyl (PCB 138)	PCB138	360,9	1,50E-03	6,82	6,11				1,95E+07		
2,2',4,4',5,5'-hexachloorbifenyyl (PCB 153)	PCB153	360,9	9,50E-04	6,82	6,11				1,95E+07		
2,2',3,4,4',5,5'-heptachloorbifenyyl (PCB 180)	PCB180	395,3	3,85E-03	7,22	6,51				3,16E+07		
som 2,4'- en 4,4'-DDD	sDDD	320,0	6,23E-02	5,75	5,08				1,02E+06		
som 2,4'- en 4,4'-DDE	sDDE	318,0	4,09E-02	5,75	5,08				1,02E+06		
som 2,4'- en 4,4'-DDT	sDDT	354,5	6,48E-03	6,19	5,51				3,02E+06		
aldrin	aldn	364,9	1,70E-02	6,50	5,82				1,05E+06		
dieldrin	dieldn	380,9	1,95E-01	5,40	4,84				1,35E+05		
endrin	endn	380,9	2,50E-01	5,38	4,84				1,35E+05		
isodrin	isodn				5,82				1,05E+06		
alfa-hexachloorcyclohexaan	aHCH	290,8	2,00E+00	3,70	3,39				6,31E+03		
beta-hexachloorcyclohexaan	bHCH	290,8	2,40E-01	3,61	3,36				5,25E+03		
gamma-hexachloorcyclohexaan (lindaan)	cHCH	290,8	7,30E+00	3,62	3,37				5,37E+03		
atrazine	atzne	215,7	3,47E+01	2,28	2,45				1,45E+02		
methylazinfos (i)	C1yazfs	317,3	2,09E+01	2,75	3,18						
carbaryl	cbrl	201,2	1,10E+02	2,36	2,70				9,12E+02		
carbofuran	cbfrn	221,3	3,76E+02	2,32	1,64						
chlooraan	ClDn	409,8	5,60E-02	6,00	5,33						
endosulfan	endsfn	406,9	3,25E-01	4,43	4,05				2,51E+04		
heptachloor	HpCl	373,3	1,80E-01	5,27	4,61						
heptachloorepoxide	HpClePO	389,3	2,00E-01	5,50	4,84						
maneb	manb	265,3	6,00E+00	0,62	8,00						
2-methyl-4-chloorfenoxiazijnzuur (MCPA)	MCPA	200,6	6,30E+02	3,25	1,78	3,13					
bis(tri-n-butyltin)oxide	bisTnC4ySnO	596,1	1,95E+01	4,05							
trifenyyltin	TFySn	350,0	4,90E+00	3,28	4,34						
trifenyyltinhydroxide	TFySnOH	367,0	4,00E-01	3,53		5,20					
benzylbutylftalaat	benzC4yFt	312,4	2,69E+00	4,60	4,47				1,66E+04		
bis(2-ethylhexyl)ftalaat	DEHP	390,6	2,70E-01	7,60	7,89				3,16E+07		
dibutylftalaat (DBP)	DC4yFt	278,3	1,12E+01	4,53	4,41				1,45E+04		
diethylftalaat (DEP)	DC2yFt	222,2	1,08E+03	2,47	2,69				1,91E+02		
dihexylftalaat (DHP)	DC6yFt	334,5	5,00E-02	6,82	6,15				1,10E+06		
di-isodecylftalaat (DIDP)		446,7	2,80E-01	10,36	9,63				3,16E+07		
dimethylftalaat (DMP)	DC1yFt	194,2	4,00E+03	1,45	1,80				2,19E+01		
N-butylacetaat (i)	NC4yactt	116,2	8,40E+03	1,94	1,61				5,62E+01		
N-butanol (i)	NC4ol	74,1	6,32E+04	0,75	0,49	16,10			5,75E+00		
acrylonitril	acIntl	53,1	7,45E+04	0,25	0,94						
cyclohexanon	cycC6on	98,1	2,50E+04	0,82	0,86	11,30			6,17E+00		
diethyleenglycol (i)	DC2yegcl	106,1	1,00E+06	-1,47	3,33						

SNAAM	Afkort	M	S	log Kow	log Koc	pKa	FAG	BCFfi_dw	BCFfi_f	Kdsed	TEF
ethylacetaat (i)	C2yactt	88,1	8,00E+04	0,79	0,66				4,79E+00		
glycol (i)	glycl	62,1	1,00E+06	-1,38	-1,07	15,10			6,03E-02		
methanal (i)	C1al	30,0	4,00E+05	-0,51	-0,42	13,30			3,31E-01		
2-propanol (i)	2C3ol	60,1	1,02E+06	0,15	-0,03	17,10			1,51E+00		
methanol (i)	C1ol	32,0	1,07E+06	-0,66	-0,76	15,30			3,31E-01		
2-butanon (i)	2C4on	72,1	2,23E+05	0,39	0,37	14,70			2,09E+00		
methyl-tertiair-butylether (MTBE) (i)	C1yttC4yEtr	88,1	5,10E+04	1,26	0,96	-3,70			1,17E+01		
pyridine	pyrdne	79,1	1,00E+06	0,29	0,40	5,23			2,45E+00		
styreen	styrn	104,2	3,10E+02	2,89	2,38				1,12E+03		
tetrahydrofuraan	T4Hfrn	72,1	1,00E+06	0,44	0,36				2,88E+00		
tetrahydrothiofeen	T4Htofn	88,2	3,73E+03	1,79	1,40						
tribroommethaan	TBrC1a	252,7	3,10E+03	2,67	2,10				9,77E+02		
1,2,4-trichloordibenzo-p-dioxine		287,5	8,41E-03	5,77	5,10				1,07E+06		1,00
1,3,6,8-tetrachloordibenzo-p-dioxine		322,0	3,20E-04	6,22	5,54				3,24E+06		1,00
1-chloordibenzo-p-dioxine		218,6	4,17E-01	4,87	4,22				1,23E+05		1,00
2,3,7,8-tetrachloordibenzo-p-dioxine	PCDD48	322,0	2,00E-04	6,22	5,54				3,24E+06		1,00
2,7-dichloordibenzo-p-dioxine		253,1	3,75E-03	5,32	4,66				3,63E+05		1,00
2,8-dichloordibenzo-p-dioxine		253,1	1,67E-02	5,32	4,66				3,63E+05		1,00
2-chloordibenzo-p-dioxine		218,6	3,19E-01	4,87	4,22				1,23E+05		1,00
1,2,3,4,6,7,8-heptachloordibenzo-p-dioxine	PCDD73	425,3	2,40E-06	7,57	6,87				3,16E+07		0,01
1,2,3,4,7,8-hexachloordibenzo-p-dioxine	PCDD66	390,9	4,40E-06	7,12	6,43				2,88E+07		0,10
1,2,3,6,7,8-hexachloordibenzo-p-dioxine	PCDD67	390,9	2,65E-05	7,12	6,43				2,88E+07		0,10
1,2,3,7,8,9-hexachloordibenzo-p-dioxine	PCDD70	390,9	2,65E-05	7,12	6,43				2,88E+07		0,10
1,2,3,4,6,7,8,9-octachloordibenzo-p-dioxine	PCDD75	459,8	4,00E-07	8,02	7,32				3,16E+07		0,0003
1,2,3,7,8-pentachloordibenzo-p-dioxine	PCDD54	356,4	1,53E-04	6,67	5,99				9,55E+06		1,00
2,3,3',4,4'-pentachloorbifenyl (PCB 105)	PCB105	326,4	3,40E-03	6,51	5,86				8,51E+06		0,00003
2,3',4,4',5-pentachloorbifenyl (PCB 118)	PCB118	326,4	1,34E-02	6,51	5,86				8,51E+06		0,00003
3,3',4,4',5-pentachloorbifenyl (PCB 126)	PCB126	326,4	7,00E-03	6,62	6,02				1,00E+07		0,10
2,3,3',4,4',5-hexachloorbifenyl (PCB 156)	PCB156	360,9	5,33E-03	6,89	6,25				2,09E+07		0,00003
2,3,3',4,4',5'-hexachloorbifenyl (PCB 157)	PCB157	360,9	1,22E-03	6,89	6,25				2,09E+07		0,00003
3,3',4,4',5,5'-hexachloorbifenyl (PCB 169)	PCB169	360,9	5,10E-04	6,98	6,41				2,40E+07		0,03
3,3',4,4'-tetrachloorbifenyl (PCB 77)	PCB77	292,0	5,69E-04	6,26	5,64				4,17E+06		0,0001
1,2,3,4,6,7,8,9-octadibenzofuraan (PCDF 135)	PCDF135	443,8	1,16E-06	8,00	7,30				3,16E+07		0,0003
1,2,3,4,6,7,8-heptachloordibenzofuraan (PCDF 131)	PCDF131	409,3	1,35E-06	7,55	6,85				3,16E+07		0,01
1,2,3,4,7,8,9-heptachloordibenzofuraan (PCDF 134)	PCDF134	409,3	3,59E-05	7,55	6,85				3,16E+07		0,01
1,2,3,4,7,8-hexachloordibenzofuraan (PCDF 118)	PCDF118	374,9	8,25E-06	7,09	6,40				2,69E+07		0,10
1,2,3,6,7,8-hexachloordibenzofuraan (PCDF 121)	PCDF121	374,9	1,77E-05	7,09	6,40				2,69E+07		0,10
1,2,3,7,8,9-hexachloordibenzofuraan (PCDF 124)	PCDF124	374,9	1,14E-04	7,09	6,40				2,69E+07		0,10
1,2,3,7,8-pentachloordibenzofuraan (PCDF 94)	PCDF94	340,4	8,73E-04	6,64	5,96				8,91E+06		0,03
2,3,4,6,7,8-hexachloordibenzofuraan (PCDF 130)	PCDF130	374,9	5,89E-05	7,92	6,42						0,10
2,3,4,7,8-pentachloordibenzofuraan (PCDF 112)	PCDF112	340,4	2,35E-04	6,92	5,65						0,30
2,3,7,8-tetrachloordibenzofuraan (PCDF 83)	PCDF83	306,0	6,92E-04	6,53	5,39						0,10

K Achtergrondinformatie van IMARES t.a.v.:

- PAKs
- Relatie fractie vet vs. fractie droge stof in niet-vette vis (overige vis)
- Relatie PCB153 en totaal TEQ (dioxines, furanen en DL-PCB's) in vis

Auteurs: Kotterman, M. en S. Glorius

Datum: november 2010

PAKs

PAKs in vis wordt nu nog meegenomen in Sedisoil. Concentraties van PAKs in visweefsel zijn echter over het algemeen erg laag tot niet detecteerbaar door metabolische transformatie (biotransformatie) van PAKs naar polair water oplosbare metabolieten, die sneller uitgescheiden kunnen worden (Oost et al., 1994). Biotransformatie van PAKs vindt plaats in veel verschillende aquatische organismen maar is het meest effectief in de lever van vis waar oxidatieve metabolisme plaatsvindt door vooral cytochroom P-450 van het Mixed Functie Oxidase (MFO) systeem (Oost et al., 1994). Dit wordt bevestigd door een studie van Livingstone die, vergeleken met invertebraten, hogere BaP biotransformatiesnelheden vond in vissen (Livingstone, 1998). De activiteit van cytochroom P-450 en MFO systeem in *Mullus barbatus* (Rode mul) is ongeveer 12 keer, en voor *Macropipus tuberculatus* (krab soort) ongeveer 2 keer zo hoog in vergelijking met de activiteit in *Mytilus galloprovincialis* (Zuid-Europese zeemossel) (Porte and Albaiges, 1994). De omzetting van PAK (fluoranteen) in de galblaas van *Solea solea* (tong) werd door Hillenweck en anderen succesvol geïdentificeerd waarbij hydroxylatie en glucuronisatie geïdentificeerd werd als de dominante metabolische processen (Hillenweck et al., 2008). Gerapporteerde halveringstijden van PAK verbindingen voor regenboogforel variëren van 1 dag voor Acenaftyleen tot 9 dagen voor fenantreen (Meador et al., 1995).

Metingen

Metingen van PAK's in vis en sediment zijn schaars. (Oost et al., 1994) hebben een mengsel van 5 PAK's gemeten in twee plassen in West-Nederland in sediment en in spiervet in voorn. Zijn komen tot de volgende metingen: som 5-rings-PAK's (benzo(b)fluorantheen, benzo(k)fluorantheen, benzo(a)pyreen, benzo(ah)antraceen) in vis is: 250 µg/kg vet gemeten. Bij een vetpercentage van 1% is dat 2,5 µg/kg verse vis.

Als voor deze PAK's individueel 1 µg/kg vet wordt ingevoerd in SEDISOIL levert de route visconsumptie een blootstellingsniveau op van $1,5 \cdot 10^{-5}$ x MTR voor benzo(k)fluorantheen en $1,5 \cdot 10^{-4}$ x MTR voor benzo(a)pyreen. De twee plassen hebben geen sterk verontreinigde waterbodemplaan (som 5-rings-PAK's in sediment is: 1,4 mg/kg droog sediment, terwijl de interventiewaarde van de som 10 PAK's 40 mg/kg is).

Er is een andere Nederlandse dataset in aal bekend. Deze is gerapporteerd door Vd.Lee et al. (2009) en overgenomen in tabel 1 (was tabel 7 in het oorspronkelijke rapport). Chryseen, benzo[b]fluorantheen, benzo[k]fluorantheen, benzo[a]pyreen, indeno[123cd]pyreen en dibenzo[ah]antraceen zijn ook gemeten, maar konden niet worden gedetecteerd.

De tabel lijkt op verdachte locaties (Amer, Eijsden, Biesbosch) wel een iets hogere waarde te geven, dan voor onverdachte locaties (IJsselmeer, Markermeer), maar ander locaties aan de Maas, Lobith en de IJssel geven ook zeer lage concentraties. Als de metingen worden uitgedrukt in Benzo(a)pyreen-equivalenten (BaPEQ) liggen de concentraties dicht bij elkaar.

Tabel K.1 Gehaltes van PAK's en som benzo(a)pyreen equivalenten in ng per gram product.

Tabel 7: Gehaltes van PAK's en som benzo(a)pyreen equivalenten in ng per gram product.

Monster nummer Rikilt IMARES	Vangstgebied 2007 Lokatie	acenaftyleen [ng/g]	acenaftteen [ng/g]	fenanthreen [ng/g]	fluorantheen [ng/g]	pyreen [ng/g]	benz[<i>a</i>]anthraceen [ng/g]	[ng BAPEQ/g product] [lb]	[ng BAPEQ/g product] [ub]	
199771	2007/0517	Amer HD61 - HD63	2.36	5.83	2.77	2.96	1.36	0.39	0.10	0.33
199769	2007/0484	Dordtsche Biesbosch tnv Koekplaat	0.34	0.86	1.34	1.48	0.31	<0.10	0.02	0.26
199766	2007/0460	Gooimeer	<0.10	1.00	1.26	0.43	<0.10	<0.10	0.01	0.25
199763	2007/0424	IJssel, Deventer	0.10	0.40	0.91	0.38	<0.10	<0.10	0.01	0.25
199759	2007/0400	IJsselmeer, Medemblik	0.15	0.81	0.89	0.62	0.17	<0.10	0.01	0.25
199764	2007/0440	Jan van Riebeeckhaven, Amsterdam	0.57	12.52	3.34	4.66	2.33	0.15	0.09	0.32
199760	2007/0432	Ketelmeer, Zuidoostelijk van Keteloog	0.63	2.57	1.36	1.32	0.36	<0.10	0.02	0.26
199758	2007/0392	Lek, Culemborg	0.52	3.00	2.28	1.54	0.53	<0.10	0.03	0.27
199765	2007/0452	Loosdrechtse Plassen	0.18	5.46	2.50	5.02	1.77	<0.10	0.06	0.30
199767	2007/0468	Maas, boven Roermond	<0.10	<0.25	0.39	<0.10	<0.10	<0.10	0.00	0.24
199768	2007/0476	Maas, t.h.v. Maasbommel	<0.10	<0.25	0.76	0.17	<0.10	<0.10	0.00	0.24
199761	2007/0408	Maas, Eijsden	0.77	2.18	1.53	0.98	0.28	<0.10	0.02	0.26
199762	2007/0416	Markermeer, Edam	<0.10	0.60	1.69	1.17	0.23	<0.10	0.01	0.26
199757	2007/0384	Markermeer, Lelystad	0.17	3.03	0.78	0.87	0.18	<0.10	0.01	0.26
199770	2007/0492	Prinses Margrietkanaal, Suawoude	<0.10	0.90	1.41	1.29	-0.71	<0.10	0.02	0.27
199752	2007/0344	Rijn, Lobith	<0.10	<0.25	0.33	0.16	<0.10	<0.10	0.00	0.24
199754	2007/0360	Sneeker Meer	0.19	1.60	1.32	1.19	0.48	<0.10	0.02	0.26
199772	2007/0533	Volkerak	0.40	2.11	2.83	1.41	0.59	<0.10	0.02	0.26
199753	2007/0352	Waal, Tiel	0.85	9.20	3.53	1.93	0.68	0.16	0.06	0.29
199756	2007/0376	Zwarte Meer, Zwartsluis	<0.10	1.73	1.24	1.06	0.26	<0.10	0.01	0.26

Berekening van de hoogst gemeten PAK-waarden in vis in SEDISOIL geeft resultaten zoals in de tabel K.2 gepresenteerd. Acenaftyleen, acenaftteen en pyreen zitten niet in SEDISOIL.

Tabel K.2 uitkomsten van SEDISOIL bij invoer van de hoogste gemeten concentraties in aal.

CONCENTRATIES IN DE MILIEUCOMPARTIMENTEN

Contaminant	C-vis [mg/kg [prod.basis]
benzo(a)antracene	3,90E-04
benzo(a)pyreen-eq.	3,30E-04
fenanthreen	3,53E-03
fluorantheen	5,02E-03

BEOORDELING LEVENSLANG GEMIDDELDE BLOOTSTELLING EN ONAANVAARDBAAR RISICO

Contaminant	blootstelling [(mg/kg l.g.)/d]	blootstelling /MTR	onaanvaardbaar risico
benzo(a)antracene	2,88E-08	5,76E-06	NEE
benzo(a)pyreen-eq.	2,44E-08	4,88E-05	NEE
fenanthreen	2,61E-07	6,52E-06	NEE
fluorantheen	3,71E-07	7,42E-06	NEE
Additiviteit risico: Polycyclische koolwaterstoffen (PAK)	aromatische 6,85E-05	6,85E-05	NEE

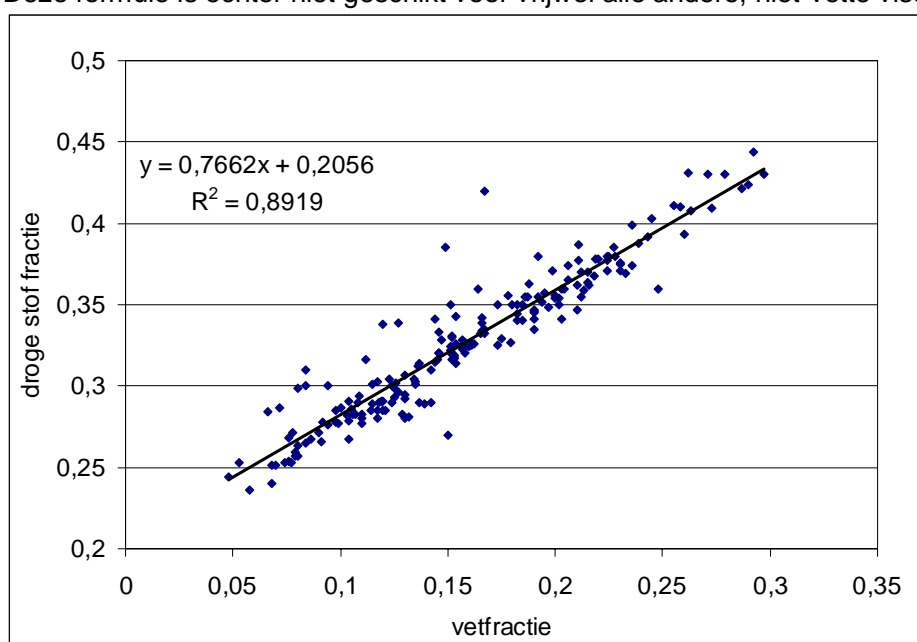
Conclusie

De blootstelling voor deze stoffen (zie tabel 2) is zodanig laag dat het gerechtvaardigd is om accumulatie van PAKs in vis in de Nederlandse wateren te verwaarlozen. De BCF wordt op 0 gezet.

Relatie fractie vet vs. fractie droge stof in niet-vette vis (overige vis)

In SediSoil wordt onderscheid gemaakt tussen vette vis (aal) en niet-vette vis (overige vis). Op basis van de MWTL-gegevens voor aal wordt voor vette vis uitgegaan van: $fffi = 0,2$ & $fdwfi = 0,77 \times fffi + 0,21$ ($fffi$ = vetfractie vis; $fdwfi$ = drooggewichtsfractie vis).

Deze formule is echter niet geschikt voor vrijwel alle andere, niet-vette vissoorten.



Figuur K.1 relatie tussen droge stof en vet voor aal in de Rijkswateren.

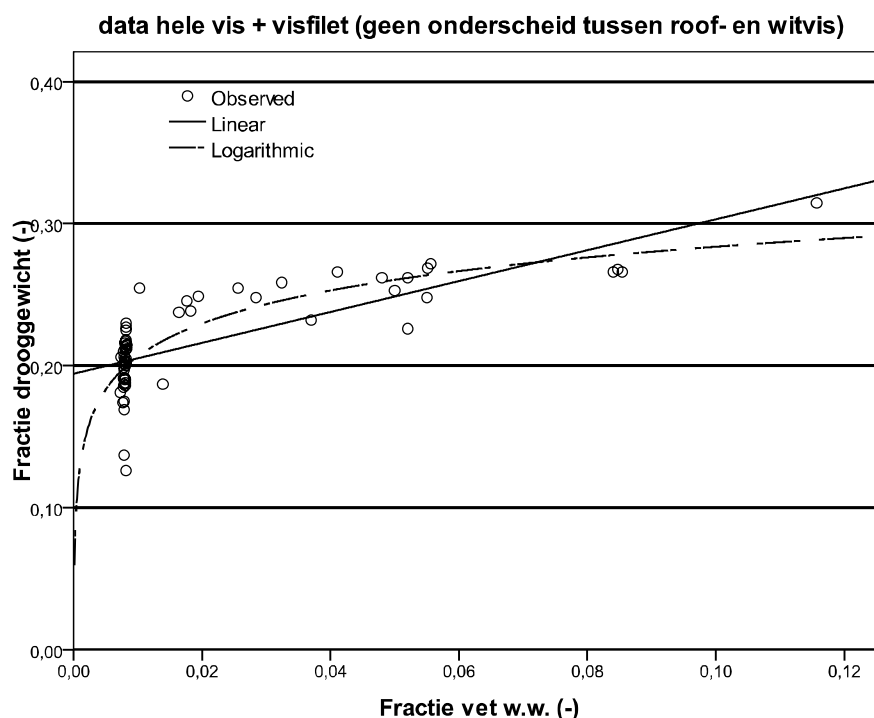
Om de relatie tussen vet en drooggewicht in niet-vette vis vast te stellen is data gebruikt uit verschillende studies (Gonzalez et al., 2006, Livingstone, 1998, Romvari et al., 2002, Staeb et al., 1996). De hoeveelheid bruikbare data is helaas erg gering; in veel studies is óf het vetgewicht óf het drooggewicht niet bepaald. Het vetgehalte is soms in filet en soms in de hele vis bepaald. Daarnaast zijn er verschillende vetbepalingen; een totaalvet bepaling die zowel de triglyceriden (opslag vet) als de fosfolipiden (structurele vetten, celmembranen) kwantificeert, en een vrije-vet bepaling die alleen de triglyceriden kwantificeert. Bij niet-vette vis is de concentratie triglyceriden erg laag (0.1-1%), wat correlaties leggen erg moeilijk maakt. Het aandeel fosfolipiden is standaard ongeveer 0.6 % in een vis, daarom zijn de vrije-vet gehalten omgerekend naar totaalvet gehalten om meer vergelijkbare data te verkrijgen. Vanwege het beperkte aantal goed vergelijkbare datapunten is gebruik gemaakt van het vetgehalte van zowel de gehele vis als visfilet en uitgezet tegenover het drooggewicht. Tevens is er onderscheid gemaakt in witvis en roofvis, zie tabel K.3 voor de onderverdeling.

Tabel K.3 Onderverdeling vissen.

Roofvis	Witvis
baars	brasem
snoekbaars	blankvoorn
snoek	karper
pos	zeelt
roofblei	rietvoorn
regenboog forel	kolblei
blauwneus	alver
siberische steur	
regenboog forel	

De relatie tussen vet en drooggewicht is over het algemeen matig. De beschikbare data zijn op vele manieren tegen elkaar uitgezet; met of zonder onderscheid tussen witvis en roofvis, voor alleen filet-waarden, alleen hele vis-waarden of gecombineerd. De relaties zijn zowel lineair als logaritmisch opgelost. De beste relatie tussen vet en drooggewicht wordt verkregen wanneer data van zowel de hele vis als visfilet gebruikt wordt, zie figuur K.2.

Relatie vet vs drooggewicht niet vette vis



Figuur K.2 Relatie fractie vet - drooggewicht zonder onderscheid tussen roof- en witvis (data hele vis + filet).

De hogere gehalten vet (8,4 – 8,5 en 11,6%) zijn van gehele vissen (dus inclusief vette levers), deze vissen zijn toch opgenomen omdat er weinig data beschikbaar is van enkel visfilet zijn en omdat niet hard te maken is dat de waarden van deze twee benaderingen tot verschillende uitkomsten leiden. Hoewel de relatie iets beter wordt wanneer onderscheid gemaakt wordt tussen roof- en witvis preferen wij de vissen als groep te nemen. Een opsplitsing tussen roof- en witvis maakt de beoordeling complexer en niet veel nauwkeuriger (zie bijlage 2).

Een R^2 van 0,66 (welke hoog significant is $P < 0,001$) wordt verkregen wanneer de relatie beschreven wordt door de volgende logaritmische vergelijking:

$$\text{Drooggewichtsfractie} = 0,034 \cdot \ln(\text{vetfractie} \cdot w / w) + 0,361$$

Tabel K.4 Samenvatting lineair + logaritmisch model – datapunten = 59.

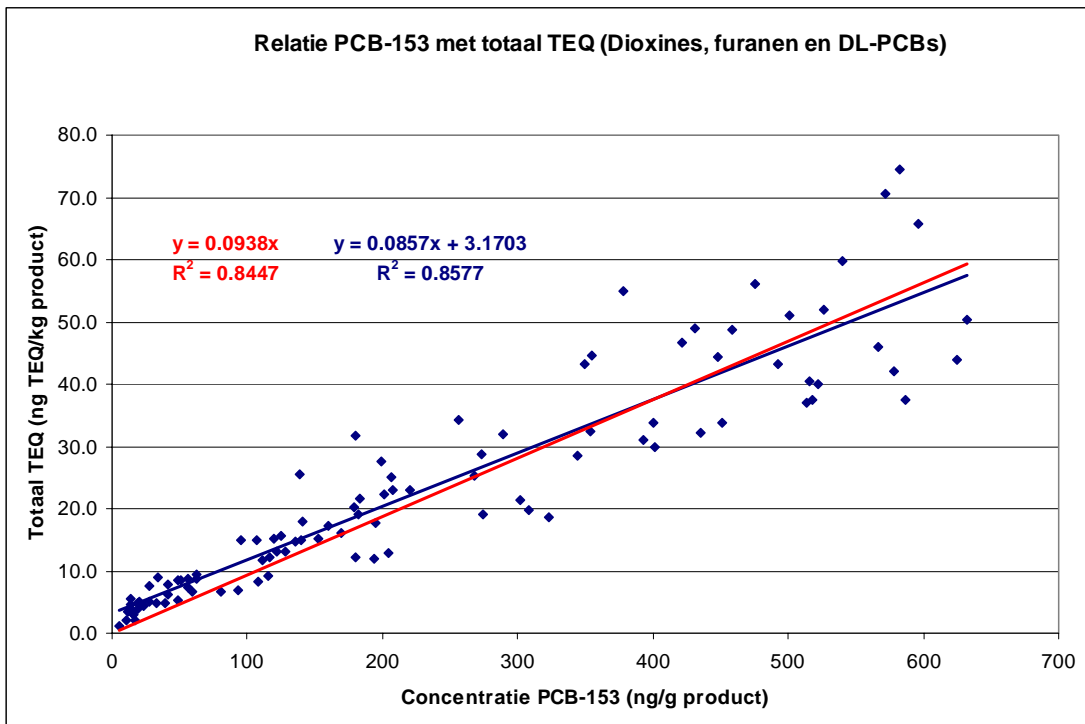
Equation	Model Summary					Parameter Estimates	
	R Square	F	df1	df2	Sig.	Constant	b1
Linear	,579	78,392	1	57	,000	,194	1,087
Logarithmic	,657	109,319	1	57	,000	,361	,034

The independent variable is Fractie vet (-)

Relatie PCB153 en totaal TEQ (dioxines, furanen en DL-PCB's) in vette vis

Voor Nederlandse aal is er een relatie beschikbaar tussen PCB-153 en het totaal-TEQ-gehalte, nl.: $0,0926 \text{ PCB-153vis} - 1,69$ (Hoogenboom et al, 2007). Deze relatie is herberekend, gebruikmakend van aanvullende data van de aalmonitoring uit Monitoringprogramma Sportvisserij (2006 t/m 2009). Daarbij is alleen aal groter dan 30 cm gebruikt en worden alen, afkomstig van specifiek dioxine-vervuilde gebieden, niet meegenomen in de berekening.

Opvallend was dat de correlatie bij gehalten van PCB-153 boven de 700 ng/g product minder sterk werd; de TEQ stijgt dan minder dan de PCB-153 gehalten suggereren. De grafiek is daarom gelimiteerd tot PCB-153 gehalte van 700 ng/g product (wat al bijzonder hoog is). Ook is duidelijk dat bij zeer lage PCB153 gehalten er alen zijn die een relatief hoog TEQ gehalte hebben. Wanneer de trendlijn door het punt 0,0 wordt geforceerd neemt de R^2 iets af van 0,86 tot 0,84, zie figuur K.2.



Figuur K.3 relatie PCB-153 en totaal TEQ in aal met lengteklasse > 30 cm.

Wanneer PCB gehalten > 700 ng/g ook meegenomen worden en de relatie exponentieel weergegeven wordt kan nog een sterkere relatie vastgesteld worden, zie figuur K.3. In dat geval wordt een R^2 verkregen van 0,93. In bijlage 3 wordt de data weergegeven die gebruikt is om de grafiek op te stellen.

Tabel K.5 Samenvatting lineair model – datapunten = 106. Bijbehorende formule =

$$TEQ = 0,076 \cdot [PCB - 153] + 5,05$$

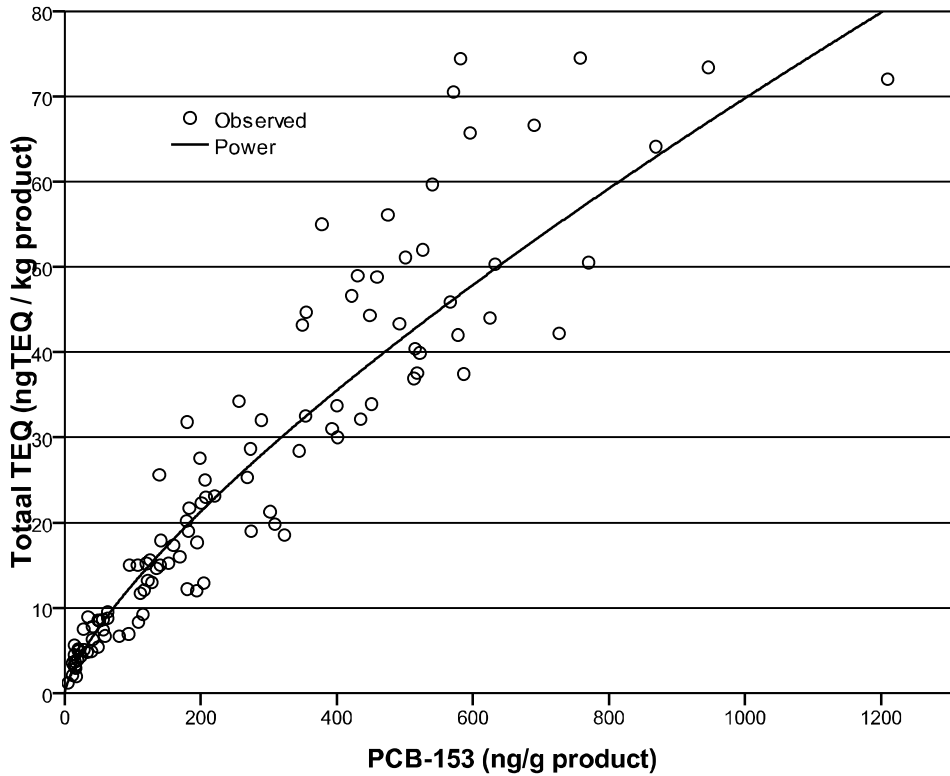
Model Summary and Parameter Estimates

Dependent Variable: Totaal-TEQ [ub] (ng TEQ/kg)

Equation	Model Summary					Parameter Estimates	
	R Square	F	df1	df2	Sig.	Constant	b1
Linear	,855	612,666	1	104	,000	5,050	,076

The independent variable is PCB-153 (ng/g).

Relatie PCB-153 net totaal TEQ (Dioxines, furanen en DL-PCBs)



Figuur K.4 relatie PCB-153 en totaal TEQ in aal met lengteklasse > 30 cm, relatie uitgedrukt met een machtsfunctie.

Met een kwadratische functie heeft de relatie tussen totaal teq en pcb-153 een hogere correlatie (R^2 van 0.93). SediSoil rekent met een 95% betrouwbaarheids interval om zo de verontreiniging door dioxines en dioxine-achtige stoffen niet te laag in te schatten, maar het blijkt niet mogelijk om dit voor een kwadratische functie af te leiden. Om deze reden wordt er voor gekozen om toch met de lineaire functie te rekenen in plaats van de kwadratisch functie.

Tabel K.6 Samenvatting kwadratisch model – datapunten = 106. Bijbehorende formule = $TEQ = 0,428 \cdot [PCB - 153]^{0,737}$

Model Summary and Parameter Estimates

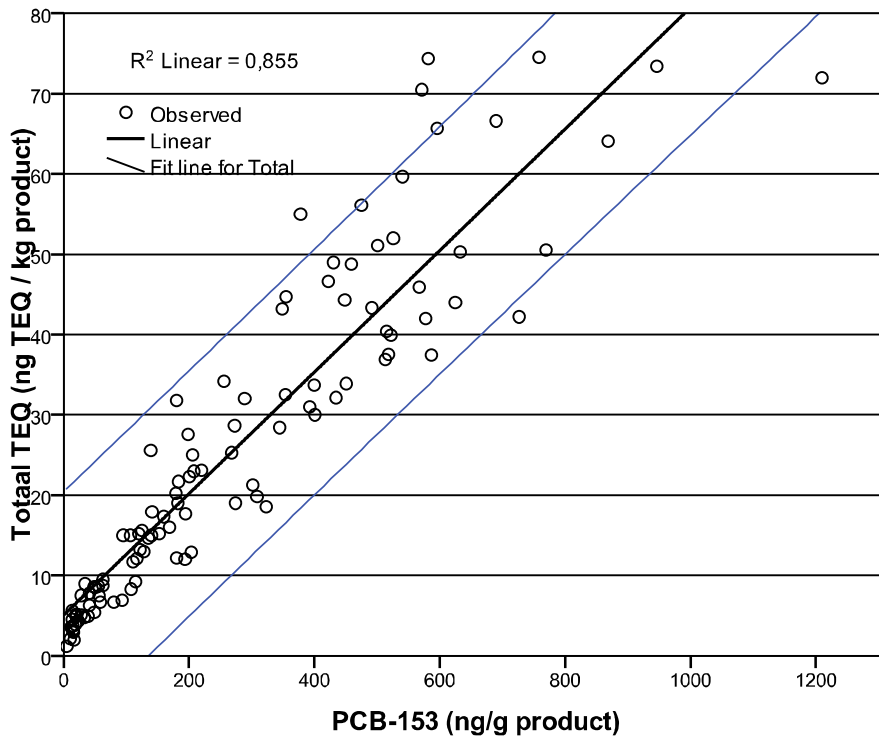
Dependent Variable: Totaal-TEQ [ub] (ng TEQ/kg)

Equatio n	Model Summary					Parameter Estimates	
	R Square	F	df1	df2	Sig.	Constant	b1
Power	,928	1330,973	1	104	,000	,428	,737

The independent variable is PCB-153 (ng/g).

Wanneer er rond de lineaire functie een 95% betrouwbaarheidsinterval wordt gezet, volgt de volgende grafiek en relatie:

Relatie PCB-153 met totaal TEQ (dioxines, furanen en DL-PCBs)



Figuur K.5 relatie PCB-153 en totaal TEQ in aal met lengteklasse > 30 cm, relatie uitgedrukt met een lineaire functie en een 95% betrouwbaarheidsinterval (in blauw).

Waarbij de bovenste betrouwbaarheidslijn wordt weergegeven als:

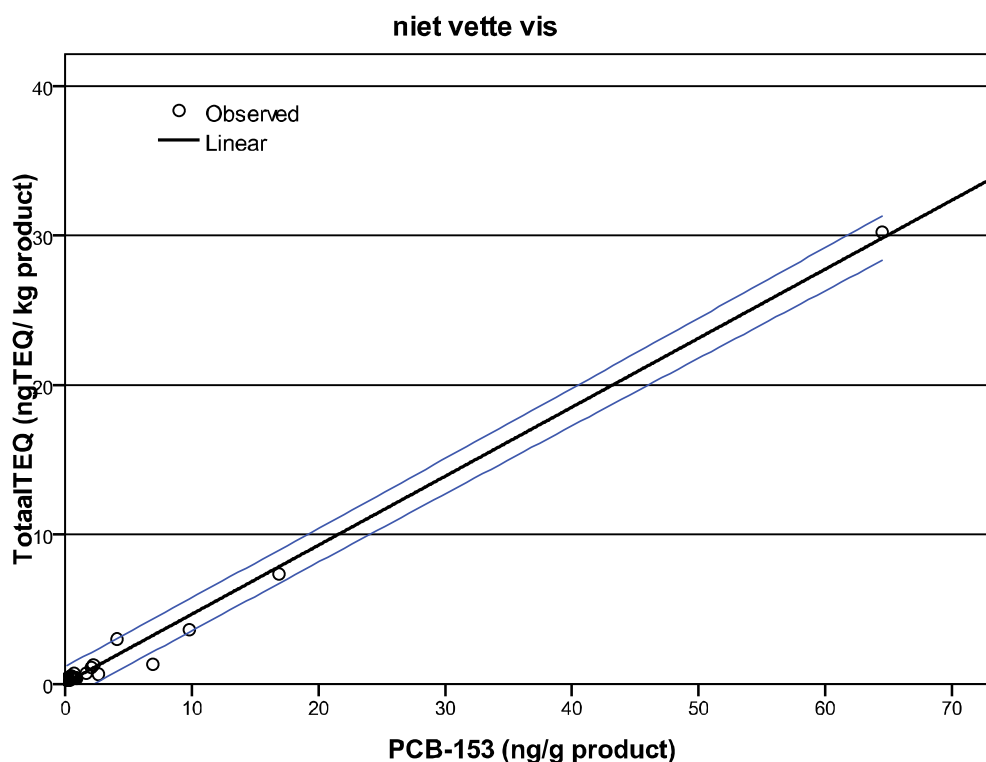
$$TEQ = 0,076 \cdot [PCB - 153] + 20,06$$

Relatie PCB153 en totaal TEQ (dioxines, furanen en DL-PCB's) in NIET-vette vis.

Tot nu toe heeft niemand een dergelijke relatie opgesteld voor een andere vis. Gegevens uit programma Monitoring NL (2005 t/m 2008) zijn gebruikt om relatie PCB-153 en totaal TEQ voor niet vette vis te bepalen. Haring, aal, zalm en makreel zijn als vette zeevis geclassificeerd en daarom niet meegenomen in de analyse. Omdat de hoeveelheid datapunten voor niet-vette zoetwatervis zo beperkt is, zijn de waarden voor niet-vette zeevis wel meegenomen in deze correlatie.

Waarde voor PCB-153 onder de detectielimiet zijn buiten beschouwing gelaten. De volgende vissoorten zijn in de analyse meegenomen: heek, kabeljauw, makreel, meerval, roodbaars, schar, schelvis, schol, snoekbaars, sprot, tarbot, tong, zeebaars en zeeduivel. Bijlage 4 geeft een overzicht van de data die gebruikt is om de relatie vast te stellen zoals gepresenteerd in onderstaand figuur.

Relatie PCB-153 met totaal TEQ (dioxines, furanen en DL-PCBs)



Figuur K.6 relatie PCB-153 en totaal TEQ in overige niet vette vis. Zwarte lijn is de lineaire trendlijn, de blauwe lijnen geven de grens aan waarbinnen 95% van de gemeten waarden valt.

De relatie voor de trendlijn is hoog significant $P < 0,001$ en sterk ($R^2 = 0,99$), zie tabel 8.

De vergelijking voor de trendlijn wordt weergegeven door de volgende vergelijking:

$$[TEQ] = 0,461 \cdot [PCB - 153] + 0,056$$

De vergelijking voor de (bovenste) blauwe lijn is:

$$[TEQ] = 0,469 \cdot [PCB - 153] + 1,310$$

[PCB-153] = ng / g product

[TEQ] = ng / kg product

Tabel 8: Samenvatting kwadratisch model – datapunten = 60.

Equation	Model Summary					Parameter Estimates	
	R Square	F	df1	df2	Sig.	Constant	b1
Linear	,992	3173,904	1	26	,000	,056	,461

The independent variable is PCB-153 (ng/g product).

Literatuur

- GONZÁLEZ, S., FLICK, G. J., O'KEEFE, S. F., DUNCAN, S. E., MCLEAN, E. & CRAIG, S. R. (2006) Composition of farmed and wild yellow perch (*Perca flavescens*). *Journal of Food Composition and Analysis*, 19, 720-726.
- HILLENWECK, A., CANLET, C., MAUFFRET, A., DEBRAUWER, L., CLAIREAUX, G. & CRAVEDI, J.-P. (2008) Characterization of biliary metabolites of fluoranthene in the common sole (*Solea solea*). *Environmental Toxicology and Chemistry*, 27, 2575-2581.
- LIVINGSTONE, D. R. (1998) The fate of organic xenobiotics in aquatic ecosystems: quantitative and qualitative differences in biotransformation by invertebrates and fish. *Comparative Biochemistry and Physiology - Part A: Molecular & Integrative Physiology*, 120, 43-49.
- MEADOR, J. P., STEIN, J. E., REICHERT, W. L. & VARANASI, U. (1995) Bioaccumulation of polycyclic aromatic hydrocarbons by marine organisms. *Reviews of environmental contamination and toxicology*, 143, 79-165.
- OOST, R. V. D., HEIDA, H., SATUMALAY, K., SCHOOTEN, F.-J. V., ARIESE, F. & VERMEULEN, N. P. E. (1994) Bioaccumulation, biotransformation and DNA binding of pahs in feral eel (*Anguilla anguilla*) exposed to polluted sediments: A field survey. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 13, 859-870.
- PORTE, C. & ALBAIGES, J. (1994) Bioaccumulation patterns of hydrocarbons and polychlorinated biphenyls in bivalves, crustaceans, and fishes. *Archives of Environmental Contamination and Toxicology*, 26, 273-281.
- ROMVÁRI, R., HANCZ, C., PETRĂȘI, Z., MOLNĂR, T. & HORN, P. (2002) Non-invasive measurement of fillet composition of four freshwater fish species by computer tomography. *Aquaculture International*, 10, 231-240.
- STAEB, J. A., TRAAS, T. P., STROOMBERG, G., VAN KESTEREN, J., LEONARDS, P., VAN HATTUM, B., BRINKMAN, U. A. T. & COFINO, W. P. (1996) Determination of organotin compounds in the foodweb of a shallow freshwater lake in the Netherlands. *Archives of Environmental Contamination and Toxicology*, 31, 319-328.