



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

## **Opties voor 'doelstellingen voor herstel' voor grond bij Chemie-Pack Moerdijk**

RIVM briefrapport 607093001/2012  
A. Wintersen et al.



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

## **Opties voor 'doelstellingen voor herstel' voor grond bij Chemie-Pack Moerdijk**

RIVM Briefrapport 607093001/2012  
A.M. Wintersen et al.

## Colofon

© RIVM 2012

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

Arjen Wintersen  
Paul Janssen  
Eric Verbruggen  
Johannes Lijzen

Contact:  
Arjen Wintersen  
LER  
[arjen.wintersen@rivm.nl](mailto:arjen.wintersen@rivm.nl)

Dit onderzoek werd verricht in opdracht van de gemeente Moerdijk en de Provincie Noord-Brabant, in het kader van de Bodemsanering bij Chemie-Pack, Moerdijk.

## Rapport in het kort

### **Opties voor 'doelstellingen voor herstel' voor grond bij Chemie-Pack Moerdijk**

Op de terreinen rond het voormalige Chemie-Pack in Moerdijk zijn na de brand in januari 2011 stoffen in grond gemeten waarvoor geen beleidsmatige of wettelijke normen zijn vastgesteld. Het RIVM is gevraagd te inventariseren welke gegevens voor deze stoffen beschikbaar zijn. Met deze gegevens kunnen zogenaamde 'doelstellingen voor herstel' worden afgeleid. Deze doelstellingen worden gebruikt om vast te stellen hoeveel grond er gesaneerd dient te worden en welke mate van restverontreiniging eventueel aanvaardbaar is. Dit is in opdracht van de Provincie Noord-Brabant en de gemeente Moerdijk gedaan.

### **Eerst risicogrenzen bepaald**

Normen voor bodem zijn over het algemeen gebaseerd op gegevens over ecologische en humane risico's (risicogrenzen). Voor enkele stoffen waren zowel ecologische als humane risicogrenzen beschikbaar. Voor de andere stoffen, op één na, zijn alleen gegevens gevonden over de risico's voor de mens. Voor vier van deze stoffen zijn daarna de ecologische risicogrenzen afgeleid, om ook voor deze stoffen (mogelijke) 'doelstellingen voor herstel' te kunnen bepalen.

### **Scenario's voor doelstellingen voor herstel**

Vervolgens heeft het RIVM de mogelijkheden voor de doelstellingen voor herstel verkend. Hiertoe zijn drie scenario's uitgewerkt, die variëren van een volledige verwijdering van de verontreiniging tot een sanering tot een niveau waarin de bodem nog geschikt is voor het huidige gebruik (bedrijven en industrie).

Nieuwe verontreinigingen dienen ingevolge artikel 13 van de Wet Bodembescherming zo veel mogelijk ongedaan te worden gemaakt. Er zijn echter hoge kosten mee gemoeid om de omvangrijke verontreiniging bij Moerdijk ongedaan te maken. Het RIVM doet geen uitspraak over de (kosten) technische haalbaarheid van de mogelijke saneringdoelstellingen voor herstel. De keuze hiervoor wordt door de bevoegde overheid gemaakt op basis van de gewenste ambitie en de nog te bepalen haalbaarheid.

### **Trefwoorden:**

bodemsanering, incident, Chemie-Pack, Moerdijk, doelstellingen voor herstel



## Inhoud

<b>1</b>	<b>Achtergrond en doelstelling—7</b>
<b>2</b>	<b>Risicogrenzen: bouwstenen voor normen—9</b>
<b>3</b>	<b>Risicogrenzen en stofgegevens—11</b>
3.1	Samenvatting resultaten—11
3.2	Fysisch-chemische informatie—12
3.3	Voorlopige humane risicogrenzen—13
3.4	Rapportagegrenzen—14
<b>4</b>	<b>Interpretatie beschikbare gegevens—17</b>
4.1	Gespecificeerde verbindingen—17
4.2	Overige verbindingen—19
<b>5</b>	<b>Conclusies en aanbevelingen—21</b>
5.1	Actuele risico's van gemeten niet-genormeerde stoffen in grond—21
5.2	Opties voor doelstellingen voor herstel—21
5.3	Bodemtypecorrectie—23
5.4	Voorbehoud en aanbevelingen—24
<b>Literatuur—25</b>	
<b>Bijlage 1. Niet-genormeerde stoffen in grond 1e en 2e tranche—27</b>	
<b>Bijlage 2. Afleiding voorlopige waarden MTR 1<sup>e</sup> tranche—29</b>	
<b>Bijlage 3. Afleiding humane risicogrenzen 2<sup>e</sup> tranche—33</b>	
<b>Bijlage 4. Azokleurstoffen en aromatische amines—41</b>	
<b>Bijlage 5. Afleiding additionele ecologische risicogrenzen —43</b>	



## 1 Achtergrond en doelstelling

Op 5 januari 2011 heeft bij het bedrijf Chemie-Pack aan de Vlasweg 4 in Moerdijk een grote brand gewoed. Als gevolg van deze brand en de bluswerkzaamheden zijn grote hoeveelheden chemicaliën en verontreinigd bluswater verspreid op en in de bodem in de omgeving van het bedrijf, het oppervlaktewater en het grondwater.

Inmiddels zijn op en rond het terrein metingen in grond en grondwater uitgevoerd. Tot de stoffen die worden aangetroffen, behoren ook stoffen die niet-genormeerd zijn.

In dit rapport worden de resultaten gepresenteerd van de brede gegevensinventarisatie ('Quick scan') voor de niet-genormeerde stoffen in grond uit de eerste tranche van metingen (Bureau Milieumetingen, 2011a) en worden de opties geschetst voor het vaststellen van doelstellingen voor herstel voor grond. Voor een viertal niet-genormeerde stoffen die in latere onderzoeken zijn aangetroffen (Bureau Milieumetingen 2011b en 2011d) zijn aanvullend op de Quick scan ecologische risicogrenzen bepaald.

Gekozen is om de term 'doelstellingen voor herstel' te gebruiken om zo verschil te maken met de saneringsdoelstellingen zoals die voor historische gevallen worden afgeleid. Als gevolg van de brand bij Chemie-Pack is een omvangrijke nieuwe bodemverontreiniging ontstaan die redelijkerwijs ongedaan moet worden gemaakt. Technisch gezien zal er nog steeds een sanering uitgevoerd moeten worden, waardoor ook 'saneren' en 'terugsaneerwaarde' in deze rapportage worden gebruikt.

In de grond nabij Chemie-Pack zijn nog meer stoffen aangetroffen dan de stoffen die in dit rapport worden beschouwd (Bureau Milieumetingen, 2011b en 2011d). De resultaten uit deze inventarisatie zijn uitsluitend geschikt om de risico's van de stoffen te beoordelen waarvoor doelstellingen voor herstel zijn uitgewerkt.

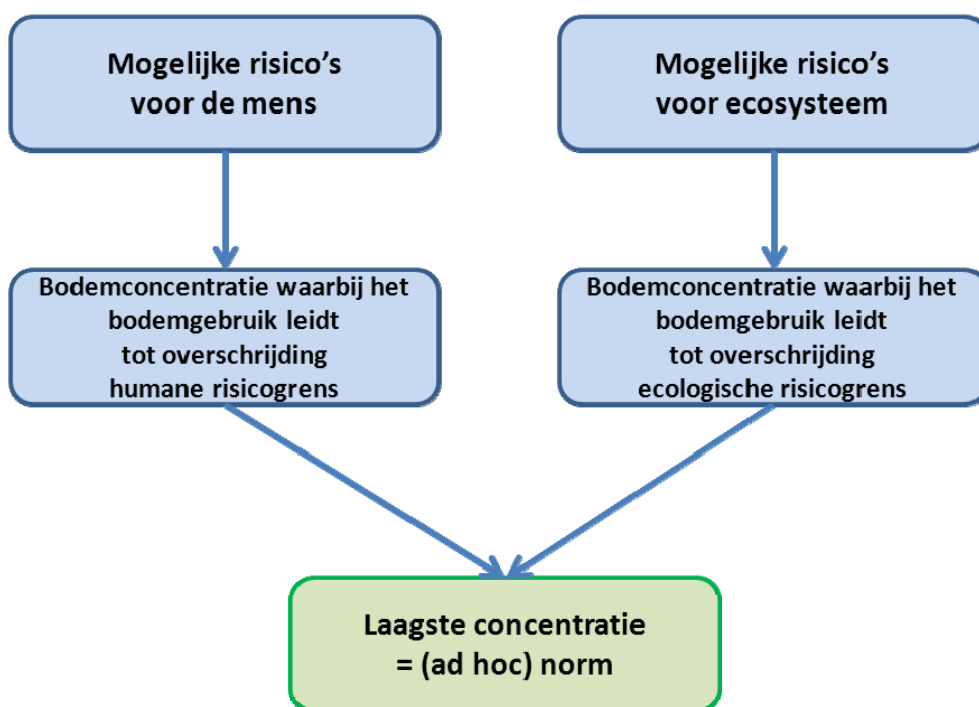
De risico's waarvan in dit rapport sprake is, hebben allen betrekking op de risico's als gevolg van een langjarige blootstelling. De informatie in dit rapport is niet geschikt om de risico's van kortdurende blootstelling aan restverontreinigingen in de omgeving van Chemie-Pack te beoordelen.





## 2 Risicogrenzen: bouwstenen voor normen

De meeste bodemnormen zijn gebaseerd op risico's. Het gaat dan om risico's voor de volksgezondheid bij levenslang gebruik van de bodem en de risico's voor het ecosysteem. Voorafgaand aan de wettelijke vaststelling van bodemnormen worden risicogrenzen afgeleid op basis van de beleidsmatige doelstelling en de wetenschappelijke informatie over stofeigenschappen en toxiciteit. De risicogrenzen vormen de basis voor (ad-hoc) normen (Figuur 2.1).



Figuur 2.1: Afleiden van Interventiewaarde op basis van risicogrenzen (naar: 'Ken uw bodemkwaliteit', AgentschapNL, 2007). Voor verklaring van de afkortingen, zie Hoofdstuk 3.

Het Nederlandse bodembeleid kent verschillende bodemnormen met verschillende toepassingskaders. In de context van deze notitie zijn het Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau (MTR), de Maximale Waarden (voor hergebruik van grond en bagger) en de Interventiewaarden voor grond relevant. Het MTR is een risicogrens die wordt gebruikt in het algemene milieukwaliteitsbeleid en is gehanteerd voor het preventief beleid rond bodem en grondwater.

De Maximale Waarden voor grond en bagger zijn functiespecifieke normen die in het bodembeheer worden gebruikt om te bepalen of de kwaliteit van toe te passen grond of bagger voldoet aan de eis van 'duurzame geschiktheid voor het gebruik'. De Maximale Waarden worden bovendien generiek gebruikt als terug-saneerwaarden voor verontreinigingen van vóór 1987.

De Interventiewaarden worden voor bestaande verontreinigingen van vóór 1987 gebruikt om vast te stellen of een verdere risicobeoordeling ('spoedbepaling') noodzakelijk is. Bij concentraties onder de Interventiewaarde is voor het meeste

bodemgebruik geen sprake van risico's voor de volksgezondheid, en is er geen sprake van onaanvaardbare ecologische risico's.

In deze rapportage worden voor een aantal niet-genormeerde stoffen ad-hoc Interventiewaarden gepresenteerd. Deze ad-hoc waarden zijn bedoeld als referentie. Het vaststellen van ad-hoc Interventiewaarden kan niet worden beschouwd als een voorstel voor doelstellingen voor herstel. Hoofdstuk 5 geeft een beschouwing van de opties voor het kiezen van doelstellingen voor herstel.

Nieuwe verontreinigingen dienen ingevolge artikel 13 van de Wet Bodembescherming (Wbb) zoveel als redelijkerwijs mogelijk ongedaan te worden gemaakt. Er bestaan geen generieke doelstellingen voor herstel. Het bevoegd gezag Wbb kan in specifieke gevallen voor nieuwe verontreinigingen doelstellingen voor herstel vaststellen.

Om voor de niet-genormeerde stoffen in deze casus doelstellingen voor herstel te kunnen bepalen is het nodig dat de humane en ecologische risicogrenzen voor de betreffende stoffen bekend zijn. In deze inventarisatie worden de beschikbare risicogrenzen gepresenteerd en/of de stofgegevens die nodig zijn voor de afleiding van voorlopige risicogrenzen. Deze risicogrenzen vormen de bouwstenen voor de doelstellingen voor herstel. Voor de volgende scenario's worden in Hoofdstuk 5 doelstellingen voor herstel uitgewerkt:

1. De rapportagegrens van de niet-genormeerde stoffen in grond;
2. Het wegnemen van ecologische risico's door sanering tot het concentratieniveau dat in preventieve beleidskaders wordt gehanteerd (bouwstoffen, Grootschalige Bodemtoepassingen en vanuit Grondwaterrichtlijn/KRW);
3. Blijvende geschiktheid voor het bodemgebruik volgens de systematiek van Maximale Waarden (ecologische en humaan) zoals gehanteerd in het beleid voor hergebruik van grond en bagger, inclusief gebruik voor de winning/bereiding van drinkwater.

### 3 Risicogrenzen en stofgegevens

#### 3.1 Samenvatting resultaten

De meetresultaten van niet-genormeerde stoffen in grond zijn opgenomen in Bijlage 1 (Bureau Milieumetingen, 2011a & 2011b). Aanvullend op deze stoffen, heeft het RIVM geadviseerd om, in verband met de aanwezigheid van azo-kleurstoffen, metingen te verrichten naar aromatische amines (Bijlage 4). Inmiddels zijn metingen uitgevoerd naar een selectie van de stoffen uit Bijlage 4. Er zijn geen aromatische amines in grond aangetroffen boven de van toepassing zijnde rapportagegrens.

Tabel 3.1 toont de reeds beschikbare risicogrenzen, aangevuld met de nieuw berekende humane risicogrenzen voor deze stoffen in grond (zie Bijlage 2). Daarnaast bevat de tabel de nieuw afgeleide ecologische risicogrenzen. De laatste kolom van Tabel 3.1 bevat de ad-hoc Interventiewaarde voor de stoffen waarvoor deze afgeleid kon worden.

Reeds beschikbare risicogrenzen zijn afkomstig uit technisch-wetenschappelijke RIVM-rapporten. De nieuw afgeleide risicogrenzen worden onderbouwd in Bijlage 5.

Tabel 3.1: Risicogrenzen niet-genormeerde stoffen in grond (samenvatting).

Stofnaam	CAS nummer	SRC <sub>humanaan</sub> [mg/kg dw]	SRC <sub>eco</sub> [mg/kg dw]	MTR <sub>eco</sub> [mg/kg dw]	Ad-hoc IW
<b>Som aromaten C8-C10<sup>7</sup></b>		59 <sup>1</sup>	56 <sup>2</sup>	2,0 <sup>2</sup>	<b>56</b>
1,3,5-trimethylbenzeen	108-67-8				
Alfamethylstyreen	98-83-9				
Propylbenzeen	103-65-1				
Indaan	496-11-7				
<b>C9 aromaten</b>					
<b>C10 aromaten</b>					
<b>Som aromaten C10-C12<sup>7</sup></b>					
<b>Methylnaftalenen</b>		317 <sup>1</sup>	68 <sup>2</sup>	2,4 <sup>2</sup>	<b>68</b>
Aceton	67-64-1	-	-	-	-
Nonylfenol	25154-52-3	6,15e3 <sup>3</sup>	-	0.105 <sup>4</sup>	<b>1,05</b>
Benzaldehyde	100-52-7	240 <sup>3</sup> (/21 <sup>5</sup> )	-	-	-
Ferroceen	102-54-5	1,82e4 <sup>3</sup>	-	-	-
Bis(t-butyl) cyclohexadieen-dion	719-22-2	-	-	-	-
Tri(t-butyl)fenol	732-26-3	502 <sup>3</sup>	-	-	-
2-ethylhexanol	104-76-7	2,24e3 <sup>3,7</sup>	8,14 <sup>6</sup>	0,045 <sup>6</sup>	<b>8,14</b>
2-ethylhexaanzuur	149-57-5	1,98e4 <sup>3,7</sup>	106 <sup>6</sup>	3,27 <sup>6</sup>	<b>106</b>
N,N-dimethyldodecylamine	112-18-5	1,32e3 <sup>3</sup>	106 <sup>6</sup>	0,98 <sup>6</sup>	<b>106</b>
Dimethylformamide	68-12-2	126,9 <sup>3</sup>	742 <sup>6</sup>	0,287 <sup>6</sup>	<b>126,9</b>

- Geen gegevens beschikbaar

<sup>1</sup> Lijzen et al. (2001)

<sup>2</sup> Verbruggen et al. (2004)

<sup>3</sup> In het kader van deze rapportage berekende waarde

<sup>4</sup> Van Vlaardingen et al. (2003)

<sup>5</sup> Waarde ter bescherming van grondwater (formeel geen SRC)

<sup>6</sup> Zie bijlage afleiding nieuwe ecologische risicogrenzen

<sup>7</sup> Toetsen volgens Toxic Unit benadering (Lijzen et al. 2001) (in geval van minerale olie over alle fracties)

Betekenis risicogrenzen in Tabel 3.1:

*SRC<sub>humaaan</sub> - Serious Risk Concentration for humans*

In het Nederlands: Humaan Toxicologische Ernstige bodemverontreinigingsconcentratie. Deze risicogrens wordt verkregen door de bodemconcentratie te berekenen met behulp van het blootstellingsmodel CSOIL 2000 (hierna CSOIL genoemd, zie ook Brand et al. 2007), waarbij de blootstelling gelijk is aan het MTR<sub>humaaan</sub> (Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau, uitgedrukt in mg/kg lichaamsgewicht/dag), uitgaande van het bodemgebruik 'Wonen met tuin'. Het SRC<sub>humaaan</sub> is de humane component die wordt gebruikt voor de afleiding van interventiewaarden.

*SRC<sub>eco</sub> - Serious Risk Concentration for the ecosystem*

Concentratie waarbij 50% van de soorten uit de testpopulatie effecten ondervindt. Ook: HC50, hazardous concentration for 50% of the species. Het SRC<sub>eco</sub> is de ecologische component die wordt gebruikt voor de afleiding van Interventiewaarden.

*MTR<sub>eco</sub>*

Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau voor ecosystemen. Gelijkgesteld aan de HC5, het 5% effectniveau. Beleidsmatig wordt verondersteld dat bij de concentraties gelijk of lager dan het HC5-niveau, het ecosysteem niet wezenlijk wordt aangetast.

*Ad-hoc Interventiewaarde*

De interventiewaarde heeft een signaalwaarde in het beleid voor bodemsanering (Wbb, historische verontreinigingen, van voor 1987). Bij overschrijdingen van deze concentratie is mogelijk sprake van onaanvaardbare risico's voor de mens en/of het ecosysteem en spreekt men van een geval van ernstige bodemverontreiniging.

Voor niet-genormeerde stoffen kunnen volgens de methodiek van de afleiding van Interventiewaarden – indien daartoe voldoende gegevens voor de betreffende stof beschikbaar zijn - zogenoemde ad-hoc Interventiewaarden worden bepaald. Met de term 'ad-hoc' wordt aangeduid dat de norm voor specifieke gevallen wordt afgeleid en een minder zware onderbouwing heeft.

### **3.2 Fysisch-chemische informatie**

Voor de stoffen waarvoor geen risicogrenzen beschikbaar waren, zijn de meest relevante fysisch chemische parameters verzameld (Tabel 3.2). In combinatie met humaan-toxicologische eindpunten voor deze stoffen (Tabel 3.3) kunnen daarmee met het humane blootstellingsmodel CSOIL risicogrenzen voor grond worden afgeleid.

Tabel 3.2. Fysisch-chemische parameters niet-genormeerde stoffen grond.

Stofnaam	CAS nummer	M [g]	logKow	logKoc	Vp [Pa]	H [Pa m <sup>3</sup> /mol]	S [mg/l]
Nonylfenol	25154-52-3	220,34	4,48 <sup>1</sup>	4,43 <sup>2</sup>	0,3 <sup>1</sup>	11,02 <sup>1</sup>	6 <sup>1</sup>
Benzaldehyde	100-52-7	106,13	1,48 <sup>3</sup>	1,28 <sup>2</sup>	169 <sup>3</sup>	2,71 <sup>3</sup>	6950 <sup>3</sup>
Ferroceen	102-54-5	186,04	1,78 2,66 3,28 <sup>4</sup>	3,15 <sup>4</sup>	0,18 <sup>2</sup>	-	< 0,1 <sup>4</sup>
Bis(t-butyl) cyclohexadien- dion	719-22-2	220,31	4,42 <sup>3</sup>		31 <sup>3</sup>	0,00161 <sup>3</sup>	5,8 <sup>2</sup>
Tri(t-butyl)fenol	732-26-3	262,44	6,06 <sup>3</sup>	4,64 <sup>2</sup>	0,0881 <sup>3</sup>	0,978	35 <sup>3</sup>
2-ethylhexanol <sup>5</sup>	104-76-7	130,23	2,81	1,59	30	4,3	900
2-ethylhexaanzuur <sup>5</sup>	149-57-5	144,21	2,64	2,08 <sup>6</sup>	4	0,41	1400
N,N-dimethyldodecylamine <sup>5</sup>	112-18-5	213,41	5,84	4,06	1,2	25,6	10
Dimethylformamide <sup>5</sup>	68-12-2	73,09	-1,01	0,491	3,5	0,0075	1000

- niet beschikbaar

<sup>1</sup> European Chemicals Bureau (2002)

<sup>2</sup> Berekende waarde EPISUITE, US EPA (2011)

<sup>3</sup> Experimentele waarde EPISUITE, US EPA (2011)

<sup>4</sup> [www.chemicalbook.com](http://www.chemicalbook.com), 2011 (MSDS)

<sup>5</sup> Gegevens voor deze stof overgenomen uit Bijlage 5

<sup>6</sup> Gemiddelde van de waarden

Toelichting parameters uit Tabel 2:

M: molecuulmassa

logKow: Kow, octanol/water partiticoëfficiënt

logKoc: Koc, bodemadsorptie coëfficiënt op basis van organisch koolstof

Vp: dampspanning zuivere stof

H: henry's coëfficiënt

S: oplosbaarheid

### 3.3 Voorlopige humane risicogrenzen

Voor de stoffen waarvoor geen risicogrenzen beschikbaar waren, zijn voor zover mogelijk voorlopige waarden van het MTR<sub>humanaan</sub> en TCL (Toelaatbare Concentratie Lucht) afgeleid.

Bijlagen 2 en 3 bevatten deze afleiding. In Tabel 3.3 worden de resultaten samengevat.

Tabel 3.3: Humaan-toxicologische eindpunten niet-genormeerde stoffen in grond.

Stofnaam	CAS nummer	MTR <sub>humanaan</sub> [mg/kg lg/dag]	TCL <sub>voorlopig</sub> [mg/m <sup>3</sup> ]
Nonylfenol	25154-52-3	0,050	0,0175
Benzaldehyde	100-52-7	0,50	0,10
Ferroceen	102-54-5	0,030	0,12
Tri(t-butyl)fenol	732-26-3	0,015	0,050
2-ethylhexanol <sup>1</sup>	104-76-7	0,50	2,2
2-ethylhexaanzuur <sup>1</sup>	149-57-5	0,50	2,2
N,N-dimethyldodecylamine	112-18-5	0,10	0,14
Dimethylformamide	68-12-2	6,0e-2	0,12

<sup>1</sup> beoordelen als som

In Tabel 3.1 staan de uiteindelijke risicogrenzen en/of ad-hoc Interventiewaarden, zoals berekend met de gegevens uit de Tabellen 3.2 en 3.3.

Betekenis van de begrippen uit Tabel 3.3:

$MTR_{\text{humaan}}$

Maximaan Toelaatbaar Risico humaan. Chronische blootstellingsdosis waarboven effecten als gevolg van orale blootstelling niet kunnen worden uitgesloten. Voor de stoffen waarvoor nog geen  $MTR_{\text{humaan}}$  beschikbaar was, is deze afgeleid (zie Bijlage 2). In die gevallen spreken we van een 'voorlopig MTR'

$TCL_{\text{humaan}}$

Idem als  $MTR_{\text{humaan}}$ , waarbij het gaat om een kritische concentratie in lucht (dosis inhalatoire blootstelling), waarboven effecten niet kunnen worden uitgesloten bij levenslange blootstelling.

### 3.4 Rapportagegrenzen

Tabel 3.4 geeft voor alle gemeten stoffen de rapportagegrenzen weer. Voor sanering is het van belang om te weten tot welke concentratie de aanwezigheid van stoffen zijn vast te stellen. Daartoe is toegelicht wat wordt verstaan onder de begrippen bepalingsgrens, detectiegrens en rapportagegrens.

De detectiegrens is de laagste concentratie waarbij de aanwezigheid van een stof kan worden aangetoond, maar niet in kwantitatieve zin. De rapportagegrens is de laagste (of hoogste) concentratie waarbij de aanwezigheid van een stof kwantitatief kan worden bepaald.

In het vervolg van dit rapport wordt uitsluitend nog gebruik gemaakt van het begrip 'rapportagegrens', dat wordt verondersteld synoniem te zijn voor het begrip 'bepalingsgrens'.

Tabel 3.4. Rapportagegrenzen gemeten stoffen in grond (Perebolte, 2011)

Stof	CAS	Rapportagegrens [mg/kg]
<b>C8 – C10 aromaten</b>		
<b>C9-aromaten</b>		1
<b>C10-aromaten</b>		1
<b>1,3,5-trimethylbenzeen (C9)</b>	108-67-8	0,1*
<b>Alfamethylstyreen (C9)</b>	98-83-9	0,1*
<b>Isopropylbenzeen (C9) (Cumeen)</b>	98-82-8	0,1
<b>propylbenzeen (C9)</b>	103-65-1	0,1*
<b>Indaan (C9)</b>	496-11-7	0,1*
<b>C10 – C12 aromaten</b>		
<b>Methylnaftalenen</b>		0,1*
<b>Nonylfenolen</b>	25154-52-3	0,1*
<b>Tri(t-butyl)fenol of isomeer</b>	732-26-3	0,1*
<b>Benzaldehyde</b>	100-52-7	0,1*
<b>Ferroceen</b>	102-54-5	0,1*
<b>Bis(t-butyl)-cyclohexadieen-dion</b>	719-22-2	0,1*
<b>Tri(t-butyl)fenol</b>	732-26-3	0,1*
<b>2-ethylhexanol</b>	104-76-7	0,1*
<b>2-ethylhexaanzuur</b>	149-57-5	0,1*

Stof	CAS	Rapportagegrens [mg/kg]
ethylhexanal	123-05-7	0,1*
N,N-dimethyldodecylamine	112-18-5	0,1*
Dimethylformamide	68-12-2	0,1*
Aceton	67-64-1	0,1*

\* Betreft de laagste waarde uit een bandbreedte van rapportagegrenzen aangeleverd door Bureau Milieumetingen. Geadviseerd wordt om deze grenzen te vervangen door stofspectifieke rapportagegrenzen.





## 4 Interpretatie beschikbare gegevens

### 4.1 Gespecificeerde verbindingen

Voor niet-genormeerde stoffen uit de eerste tranche waren, met uitzondering van bis-(t-butyl)cyclohexadien-dion, humane risicogrenzen beschikbaar, of konden deze berekend worden. Voor de stoffen die vallen binnen de stofgroep van 'C8-C10 aromatische minerale oliefractie' en voor nonylfenol zijn tevens ecologische risicogrenzen beschikbaar. Daarmee is het voor deze stoffen mogelijk om een ad-hoc interventiewaarde te bepalen. Voor een viertal aanvullende stoffen uit de tweede tranche zijn ecologische risicogrenzen afgeleid en zijn voorlopige humane risicogrenzen afgeleid. Daarmee is het ook voor deze stoffen mogelijk om ad-hoc Interventiewaarden af te leiden.

Voor de overige stoffen waarvoor humane risicogrenswaarden beschikbaar zijn, wordt alleen een indicatie verkregen van de bodemconcentraties waarbij onaanvaardbare humane risico's zijn te verwachten; er kan geen ad-hoc interventiewaarde worden afgeleid.

Hierna worden per stof(groep) de gevonden gegevens kort besproken:

#### *C8-C10 aromatische fractie, C10-C12 aromatische fractie*

De ad-hoc interventiewaarde wordt vastgesteld als de laagste van de  $SRC_{\text{humaan}}$  en de  $SRC_{\text{eco}}$  en bedraagt voor de stoffen in de fractie C8-C10 55 mg/kg ds en voor de stoffen in de fractie C10-C12 68 mg/kg ds.

Tabel 3.1 geeft aan welke van de aangetroffen niet-genormeerde stoffen tot deze stofgroepen worden gerekend. Concentratie-additie wordt verondersteld voor deze stoffen, zodat aan de ad-hoc Interventiewaarde getoetst wordt door gebruik te maken van de 'Toxic Unit' methode (Lijzen et al. 2001).

#### *Nonylfenol*

Nonylfenol en 4-nonylfenol zijn in vele opzichten vergelijkbare stoffen. Bij de gegevensverzameling is uitgegaan van nonylfenol. Nonylfenol was in 2002 onderwerp van een uitgebreide Europese risicobeoordeling (European Chemicals Bureau, 2002). Het desbetreffende document bevat veel informatie over deze stof. In de EU RAR is wel een  $MTR_{\text{eco}}$ , maar geen  $SRC_{\text{eco}}$  berekend. Daarmee ontbreekt de juiste ecologische risicogrenswaarde voor de afleiding van een ad-hoc Interventiewaarde. Om voor nonylfenol een ad-hoc Interventiewaarde te kunnen afleiden, wordt in deze rapportage gekozen om het  $MTR_{\text{eco}}$  te vermenigvuldigen met een veiligheidsfactor van  $10^1$  om tot een  $SRC_{\text{eco}}$  te komen (en met een factor 5 om tot een waarde voor de Nederlandse standaardbodem (10% OS) te komen). Het  $SRC_{\text{eco}}$  bedraagt dan 1,5 mg/kg ds. Dat is ook de ad-hoc Interventiewaarde.

Tenslotte wordt opgemerkt dat nonylfenolen zijn opgenomen in Annex XVII van de REACH verordening, op grond van humaan toxicologische gronden. Dit betekent dat er voor deze stoffen op de gebieden van productie en toepassing wettelijke beperkingen gelden.

<sup>1</sup> In de ecotoxicologie geldt als vuistregel dat het verschil tussen acute en chronische toxiciteit een factor 10 in de blootstellingsconcentratie bedraagt.

### *Benzaldehyde*

Voor benzaldehyde is een voorlopig  $MTR_{\text{humaaan}}$  bepaald (Bijlage 2). Het daaruit berekende  $SRC_{\text{humaaan}}$  bedraagt 240 mg/kg. Voor Benzaldehyde is geen ecologische risicogrenzen beschikbaar.

De relatief lage waarde voor de logKoc (Tabel 3.2) betekent dat de kans bestaat op uitloging naar grondwater. Met CSOIL kan een veilige waarde worden afgeleid voor grondwater (uitgaande van het gebruik van de eis van geschiktheid van grondwater als drinkwater). Deze bedraagt voor benzaldehyde 15,7 mg/l. Door middel van evenwichtspartitie kan uit deze waarden een waarde voor nalevering uit grond worden berekend: 21 mg/kg.

### *Ferroceen*

Voor ferroceen is een voorlopig  $MTR_{\text{humaaan}}$  bepaald (Bijlage 2). De daaruit berekende  $SRC_{\text{humaaan}}$  bedraagt 18.000 mg/kg. Vanwege de specifieke stofeigenschappen van ferroceen (structuur, niet oplosbaar) kan worden aangenomen dat de betrouwbaarheid van de modelberekeningen beperkt is. Voor ferroceen zijn geen ecologische risicogrenzen beschikbaar. Deze stof valt niet binnen de selectie<sup>2</sup> van stoffen waarvoor aanvullende risicogrenzen zijn afgeleid.

### *Bis(t-butyl)cyclohexadieen-dion*

Voor deze stof zijn geen risicogrenzen beschikbaar. Deze stof valt niet binnen de selectie van stoffen waarvoor aanvullende risicogrenzen zijn afgeleid.

### *Tri(t-butyl)fenol*

Voor tri(t-butyl)fenol is een voorlopig  $MTR_{\text{humaaan}}$  bepaald (Bijlage 2). Het daaruit berekende  $SRC_{\text{humaaan}}$  bedraagt 502 mg/kg. Voor deze stof zijn geen ecologische risicogrenzen beschikbaar. Deze stof valt niet binnen de selectie van stoffen waarvoor aanvullende risicogrenzen zijn afgeleid.

### *2-ethylhexanol* \*<sup>2</sup>

Voor 2-ethylhexanol zijn nieuwe ecologische risicogrenzen afgeleid. De humane toxiciteit van deze stof is gering, en dus is het  $SRC_{\text{eco}}$  bepalend voor de ad-hoc Interventiewaarde: 8,4 mg/kg.

### *2-ethylhexaanzuur* \*<sup>2</sup>

Deze verbinding is nauw verwant aan 2-ethylhexanol. Ook voor deze stof is het  $SRC_{\text{eco}}$  bepalend voor de ad-hoc Interventiewaarde: 106 mg/kg.

### *N,N-dimethyldodecylamine* \*<sup>2</sup>

Voor deze stof zijn een voorlopige MTR-waarde (Bijlage 3) en nieuwe ecologische risicogrenzen (Bijlage 5) afgeleid. Het  $SRC_{\text{eco}}$  in bodem bedraagt 106 mg/kg en is daarmee bepalend voor de ad-hoc Interventiewaarde.

### *Dimethylformamide* \*<sup>2</sup>

Voor deze verbinding zijn in 1996 door het RIVM voorlopige humane risicogrenzen (oraal en inhalatoir) vastgesteld. In het kader van dit rapport zijn nieuwe grenzen afgeleid (Tabel 3.3). De daaruit berekende humane risicogrenzen

<sup>2</sup> Op basis van de resultaten uit de Quick scan heeft de opdrachtgever een viertal aanvullende stoffen geselecteerd waarvoor mogelijke doelstellen voor herstel dienen te worden afgeleid. Deze stoffen zijn gemarkeerd met een asteriks (\*). De geselecteerde stoffen komen op meerdere plekken voor in gehalten ruim boven de detectiegrens en zijn mogelijk maatgevend in het vaststellen van de saneringscontouren.

in bodem ( $SRC_{\text{humaan}}$ ) bedraagt 126,9 mg/kg. Het bepaalde  $SRC_{\text{eco}}$  ligt hoger en dus is de ad-hoc Interventiewaarde gelijk aan het  $SRC_{\text{humaan}}$ .

#### 4.2 Overige verbindingen

In de lijst van niet-genormeerde verbindingen bevonden zich enkele groepen van verbindingen:

- Steroïdachtige verbindingen;
- Aanverwante verbindingen van ethylhexanol;
- Onbekende vluchtige verbinding;
- Onbekende niet-vluchtige verbinding;
- Alifatische koolwaterstoffen;
- Onbekende aromatische verbinding.

Over de steroïdachtige verbindingen is correspondentie geweest met de Provincie Noord-Brabant. Deze nadere specificatie geeft geen aanleiding om te verwachten dat de betreffende stoffen onaanvaardbare risico's veroorzaken - voor de mens en het ecosysteem - in de aangetroffen hoeveelheden (10 mg/kg, Bureau Milieumetingen 2011a & 2011b).

Voor de overige onbekende verbindingen valt ook niet te verwachten dat bij de aangetroffen gehalten er sprake zal zijn van onaanvaardbare humane risico's, met uitzondering van de groep 'alifatische koolwaterstoffen' (64 mg/kg, Bureau Milieumetingen 2011a & 2011b). Het is aan te bevelen om bij het analyserende lab na te vragen of er meer bekend is over de samenstelling van deze groepen van verbindingen. Mogelijkerwijze kan de groep 'alifatische koolwaterstoffen' bijvoorbeeld worden ingedeeld in één van de minerale oliefracties waarvoor risicogrenzen beschikbaar zijn.

Een uitzondering moet worden gemaakt voor de stof of stoffen gerapporteerd als 'aanverwante verbindingen van ethylhexanol'. Hiervoor wordt een aangetroffen bodemconcentratie tot 1200 mg/kg opgegeven. Het zou nuttig zijn de exacte structuur van deze stoffen te kennen om zodoende te kunnen inschatten hoe hun toxiciteit zich verhoudt tot die van ethylhexanol.

Tijdens het opstellen van dit rapport is duidelijk geworden dat het aantreffen van ethylhexanol, ethylhexaanzuur en aanverwante verbindingen mogelijk wordt verklaard door de aanwezigheid van grote hoeveelheden 1-ethylhexylnitrat ten tijde van het incident. De toxiciteit van 1-ethylhexylnitrat is zeer waarschijnlijk groter dan die van ethylhexanol en aanverwante verbindingen. De stof is echter niet stabiel in aquatisch milieu. Een uitspraak over de risico's van deze stof is daarom pas mogelijk wanneer duidelijk is óf de stof daadwerkelijk aanwezig is in grond en grondwater en in hoeverre de stof al is omgezet.

Bijlage 3 bevat een inventarisatie gericht op de humaan-toxicologische eigenschappen van de stoffen uit de tweede tranche van metingen, voor zover die in het bestek van de Quick scan werden gevonden.



## 5 Conclusies en aanbevelingen

### 5.1 Actuele risico's van gemeten niet-genormeerde stoffen in grond

In dit rapport worden de beschikbare en afgeleide gegevens voor niet-genormeerde stoffen in grond bij Moerdijk gepresenteerd. Voor de meeste stoffen zijn humane risicogrenzen beschikbaar of afgeleid. Voor een vijftal stoffen én de stoffen uit de 'C8-C10 aromatische fractie' is een ad-hoc interventiewaarde afgeleid.

Er kan niet worden uitgesloten dat er zich nog andere stoffen bevinden in de grond van het terrein. De variatie in de aangetroffen stoffen tussen de twee tranches van metingen geeft wel een indicatie dat bij nadere metingen mogelijk nog meer stoffen worden aangetroffen. Over één specifieke groep van stoffen is al tijdens de Quick scan contact geweest met de Provincie Noord-Brabant. Het is bekend dat tijdens het incident bij Chemie-Pack azo-kleurstoffen opgeslagen lagen. Tot de afbraakproducten van deze kleurstoffen behoren aromatische amines die veelal bij zeer lage concentraties kankerverwekkend worden verondersteld. In Bijlage 4 is een lijst van deze aromatische amines opgenomen die mogelijk bruikbaar kunnen zijn bij de planning van verdere metingen.

### 5.2 Opties voor doelstellingen voor herstel

Doel van deze rapportage is de mogelijke doelstellingen voor herstel voor grond te verkennen, op basis van beschikbare risicogrenzen en kwaliteitscriteria (detectiegrenzen, achtergrondwaarden) en hun betekenis binnen het vigerende bodem- en grondwaterbeleid.

Nieuwe verontreinigingen dienen ingevolge artikel 13 van de Wet Bodembescherming zoveel als redelijkerwijs mogelijk ongedaan te worden gemaakt. Er wordt in deze rapportage geen uitspraak gedaan over (kosten)technische haalbaarheid van de mogelijke doelstellingen voor herstel. Omdat de omvang van de verontreiniging die is ontstaan groot is, zijn er hoge kosten gemoeid met het ongedaan maken van de verontreiniging. De gemeente Moerdijk en de provincie Noord-Brabant hebben het RIVM daarom gevraagd naast de ad-Hoc interventiewaarden ook mogelijke doelstellingen voor herstel af te leiden zodat op basis van een afweging van de kosten en de risicoreductie een keuze gemaakt kan worden voor de saneringsdoelstelling. De keuze van de doelstelling of herstelwaarde wordt door de bevoegde overheid gemaakt op basis van de gewenste ambitie en de nog te bepalen haalbaarheid. Er worden drie scenario's gericht op het terugsaneren onderscheiden:

1. De rapportagegrens van de niet-genormeerde stoffen in grond;
2. Het wegnemen van ecologische risico's door sanering tot het concentratieniveau dat in preventieve beleidskaders wordt gehanteerd (bouwstoffen, Grootschalige Bodemtoepassingen en vanuit Grondwaterrichtlijn/KRW);
3. Blijvende geschiktheid voor het bodemgebruik volgens de systematiek van Maximale Waarden (ecologische en humaan) zoals gehanteerd in het beleid voor hergebruik van grond en bagger, inclusief gebruik voor de winning/bereiding van drinkwater.

In Tabel 5.1 aan het einde van dit hoofdstuk zijn de relevante waarden samengevat.

#### Ad. 1. Rapportagrenzen

Op basis van zorgplicht art. 13 van de Wbb bestaat er een herstelplicht voor zogenaamde nieuwe gevallen van bodemverontreiniging. Op basis hiervan is bij een ontstane verontreiniging een ieder 'verplicht alle maatregelen te nemen die redelijkerwijs van hem kunnen worden gevegd...(om) de verontreiniging of de aantasting en de directe gevolgen daarvan te beperken en zoveel mogelijk ongedaan te maken'. Indien 'redelijkerwijs' mogelijk, moet dus alle verontreiniging worden weggenomen. Dit kan worden vertaald in het wegnemen van de verontreiniging tot de rapportagegrens.

#### Ad. 2. Het wegnemen van ecologische risico's door sanering tot het concentratieniveau dat in preventieve beleidskaders wordt gehanteerd.

Het wegnemen van het ecologische risico van deze stof betekent dat de concentraties in grond onder het Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau voor het ecosysteem gebracht moeten worden. Hiermee wordt aangesloten bij het gebruik van het MTR<sub>eco</sub> in het preventieve bodembeleid. Doordat het MTR algemene bescherming beoogt, in alle mogelijke gevallen, is het beschermingsniveau per definitie bekend indien er teruggesaneerd wordt naar deze waarde. Wordt in de praktijk teruggesaneerd naar een risiconiveau op- of onder het MTR, betekent dit dat het bodemecosysteem noch structureel, noch functioneel wordt aangetast als gevolg van die specifieke stof.

In de afleiding van de MTR spelen twee methodieken een rol, gebruik van veiligheidsfactoren (als de gegevens niet afdoende zijn voor statistische extrapolatie) en statistische extrapolatie.

Wanneer tot beneden deze gehalten gesaneerd wordt, worden veelal ook de humane blootstellingsrisico's voorkomen en wordt aan de drinkwaternorm voldaan.

#### Ad. 3. Blijvende geschiktheid voor het bodemgebruik volgens de systematiek van Maximale Waarden, inclusief bescherming grondwater als drinkwater.

In Hoofdstuk 2 is de afleiding van de bodemkwaliteitscriteria voor het bodembeheer beschreven. Deze bodemkwaliteitscriteria zijn opgenomen in de Regeling bodemkwaliteit (Staatscourant, 2011) en staan voor een blijvende geschiktheid voor het gebruik. Het toekomstig gebruik van de locatie kan worden ingedeeld bij 'ander groen, infrastructuur en industrie'. Dit bodemgebruik valt binnen de 'klasse industrie'.

Het hanteren van deze benadering moet gezien worden als het minimale scenario. Bij het toekomstig gebruik moeten de resterende stoffen in de bodem geen risico's opleveren voor het gebruik en worden er geen effecten verwacht die het gebruik schaden. Mocht ooit het gebruik veranderen naar woongebied of natuur of landbouwgebied, dan zijn wel extra maatregelen nodig om de kwaliteit weer in overeenstemming te brengen met het gebruik.

De kwaliteit van het grondwater moet hiermee in evenwicht zijn om herverontreiniging te kunnen voorkomen. Daarnaast moet strategisch gebruik van het grondwater als drinkwater mogelijk zijn. De landelijke Maximale Waarden voor de klasse 'industrie' bedragen hooguit de Interventiewaarde. Deze lijn wordt ook in dit rapport gevolgd.

De Maximale Waarden zijn afkomstig uit het beleid voor bodembeheer en worden gebruikt om de geschiktheid van grond en bagger voor hergebruik te toetsen. Omdat de Maximale Waarden niet expliciet beschermend zijn voor grondwater, is voor de meer mobiele verbindingen<sup>3</sup> een toetsing op

<sup>3</sup> Een verbinding wordt al mobiel beschouwd indien de fractie in het poriewater > 1%. (E.M. Dirven van Breemen et al., 2007).

drinkwaterveiligheid opgenomen. Gegeven de bodemfunctie ter plekke, is de Maximale Waarde 'Industrie' het meest van toepassing op het gebied.

Tabel 5.1. Mogelijke ambitieniveaus terug-saneerwaarden grond.

Niveau	Opmerking	Benodigde gegevens
<b>Rapportagegrens</b>	Algeheel ongedaan maken	Rapportagegrens
<b>Bescherming ecosysteem</b>	Sluit aan bij preventieve kaders bodembeleid	MTR <sub>eco</sub>
<b>Maximale waarde 'Industrie', inclusief bescherming grondwater als drinkwater</b>	In overeenstemming met bodemfunctie ter plekke	SRCh <sub>humaaan</sub> SRC <sub>eco</sub> MTR <sub>humaaan</sub> /TDI

Tabel 5.2 geeft voor de gemeten niet-genormeerde stoffen de waarden bij de niveaus uit Tabel 5.1.

Tabel 5.2. Doelstellingen voor herstel per niveau in mg/kg

Stof	Rapportagegrens	MTR <sub>eco</sub>	MW Industrie
<b>C9-aromaten</b>	1	2,0 <sup>1</sup>	56 <sup>1</sup>
<b>1,3,5-trimethylbenzeen (C9)</b>	0,1*	2,0 <sup>1</sup>	56 <sup>1</sup>
<b>Alfamethylstyreen (C9)</b>	0,1*	2,0*	56 <sup>1</sup>
<b>Isopropylbenzeen (C9)</b>	0,1	2,0 <sup>1</sup>	56 <sup>1</sup>
<b>propylbenzeen (C9)</b>	0,1*	2,0 <sup>1</sup>	56 <sup>1</sup>
<b>Indaan (C9)</b>	0,1*	2,0 <sup>1</sup>	56 <sup>1</sup>
<b>C10-aromaten</b>	1	2,0 <sup>1</sup>	56 <sup>1</sup>
<b>Methylnaftalenen (C11)</b>	0,1*	2,4 <sup>1</sup>	68 <sup>1</sup>
<b>Nonylfenolen</b>	0,1*	0,105	1,05
<b>Benzaldehyde</b>	0,1*	-	-
<b>Ferroceen</b>	0,1*	-	-
<b>Bis(t-butyl)-cyclohexadien-dion</b>	0,1*	-	-
<b>Tri(t-butyl)fenol</b>	0,1*	-	-
<b>2-ethylhexanol</b>	0,1*	0,045	8,14
<b>2-ethylhexaanzuur</b>	0,1*	3,27	106
<b>ethylhexanal</b>	0,1*	-	-
<b>N,N-dimethyldodecylamine</b>	0,1*	0,98	106
<b>Dimethylformamide</b>	0,1*	0,287	127 <sup>2</sup>
<b>Aceton</b>	0,1*	-	-

- waarde niet beschikbaar

\* Betreft de laagste waarde uit een bandbreedte van rapportagegrenzen voor additioneel gemeten stoffen. Geadviseerd wordt om stofs specifieke rapportagegrenzen te hanteren.

<sup>1</sup> Minerale olie als groep beoordelen volgens 'Toxic Unit' benadering.

<sup>2</sup> De Maximale Waarden Industrie zijn beleidsmatig begrensd tot de Interventiewaarde, in dit geval is dat de waarde van het SRC<sub>humaaan</sub> (zie ook Tabel 3.1)

### 5.3 Bodemtypecorrectie

De ecologische risicogrenzen die zijn gepresenteerd in dit rapport zijn geldig voor de Nederlandse 'standaardbodem' met een organisch stofgehalte van 10% en 25% lutum. Bij toepassing van deze risicogrenzen in specifieke situaties dient een correctie plaats te vinden voor het actuele organisch stofgehalte. Meer details over deze bodemtypecorrectie zijn terug te vinden in de Regeling bodemkwaliteit.

De doelstelling voor herstel voor dimethylformamide voor het niveau 'Maximale Waarde Industrie' is bepaald door de humane risicogrenzen. Strikt genomen hoeft



op deze waarde geen bodemtypecorrectie te worden toegepast. Aanbevolen wordt echter om de bodemtypecorrectie op alle doelstellingen voor herstel toe te passen. Dit is consistent met de praktijk van het Nederlandse bodembeleid waarin de bodemtypecorrectie op normwaarden wordt toegepast, ongeacht de aard van de onderliggende risicogrenzen.

#### **5.4 Voorbehoud en aanbevelingen**

In de grond nabij Chemie-Pack zijn nog meer stoffen aangetroffen dan de stoffen die in dit rapport worden beschouwd (Bureau Milieumetingen, 2011b). De resultaten uit deze inventarisatie zijn uitsluitend geschikt om de risico's van de stoffen te beoordelen waarvoor doelstellingen voor herstel zijn uitgewerkt. De risico's waarvan in dit rapport sprake is, hebben allen betrekking op de risico's als gevolg van een langjarige blootstelling. De informatie in dit rapport is niet geschikt om de risico's van kortdurende blootstelling aan restverontreinigingen in de omgeving van Chemie-Pack te beoordelen.

Voor het scenario 'Algeheel ongedaan maken' (van de verontreinigingen) geldt de rapportagegrens als uitgangspunt. De rapportagegrenzen in dit rapport bestaan grotendeels uit de laagste waarde van een generieke bandbreedte voor niet-genormeerde stoffen (aangeleverd door Bureau Milieumetingen). Indien voor het hoogste ambitieniveau wordt gekozen, dan bevelen wij aan om van stofspecifieke rapportagegrenzen uit te gaan en om een aanvullende inspanning te verrichten teneinde een goed beeld te verkrijgen van de te behalen analyseresoluties.

Indien in de omgeving van het voormalige Chemie-Pack in betekenende mate aanvullende nieuwe verontreinigingen met niet-genormeerde stoffen in grond worden aangetroffen, dan adviseren wij om voor deze stoffen eveneens (mogelijke) doelstellingen voor herstel te bepalen.

## Literatuur

Brand E., P.F. Otte, J.P.A. Lijzen (2007) CSOIL 2000: an exposure model for human risk assessment of soil contamination. A model description. RIVM Report 711701054/2007. RIVM Bilthoven.

Bureau Milieumetingen, Provincie Brabant (2011a) Inspectie van de bodem middels bodemonderzoek op en rondom de locatie van Chemie-Pack, Vlasweg 4 Moerdijk. Rapport 2011-00042B-H, 16 april 2011.

Bureau Milieumetingen (2011b) Inspectie van de bodem middels bodemonderzoek op de locatie van Martens en Van Oord, n.a.v. de brand bij Chemie-Pack te Moerdijk. Rapport 2011-0118-B-H, 11 juli 2011.

Bureau Milieumetingen (2011d) Inspectie van de bodem middels bodemonderzoek ter plaatse van het openbaar gebied, n.a.v. de brand bij Chemie-Pack te Moerdijk. Rapport 2011-0137-B-H, 11 juli 2011

Dirven –van Breemen E.M., J.P.A. Lijzen, P.F. Otte, P.L.A. van Vlaardingen, J. Spijker, E.M.J. Verbruggen, F.A. Swartjes, J.E. Groenenberg, M. Rutgers (2007) Landelijke referentiewaarden ter onderbouwing van maximale waarden in het bodembeleid. RIVM Rapport 711701053. RIVM Bilthoven.

European Chemicals Bureau (2002) European Union Risk Assessment Report 4-NONYLPHENOL (BRANCHED) AND NONYLPHENOL. Office for official publications of the European Communities L – 2985 Luxembourg.

Perebolte, H. (2011) Persoonlijke mededeling, d.d. 22 september 2011.

Staatscourant (2011) Regeling van de Staatssecretaris van Infrastructuur en Milieu, van 29 november 2011, nr. IENM/BSK-2011/161440 tot wijziging van de Regeling bodemkwaliteit (actualisering verwijzingen normdocumenten en technische aanpassingen), Staatscourant Jaargang 2011 Nr. 22100 (Betreft laatste wijziging, oorspronkelijke Regeling d.d. 13 december 2007).

Verbruggen E.M.J. (2004) Environmental Risk Limits for Mineral Oil (Total Petroleum Hydrocarbons). RIVM Report 601501021/2004. RIVM, Bilthoven.

Vlaardingen P.L.A. van, L.R.M. de Poorter, R.H.L.J. Fleuren, P.J.C.M. Janssen, C.J.A.M. Posthuma-Doodeman, E.M.J. Verbuggen, J.H. Vos (2007) Environmental risk limits for twelve substances, prioritised on the basis of indicative risk limits. RIVM Report 601782003/2007. RIVM Bilthoven.

Vlaardingen P.L.A. van, Posthumus R., Traas T.P. (2003) Environmental Risk Limits for Alkylphenols and Alkylphenol ethoxylates. RIVM Report 601501019/2003. RIVM, Bilthoven.

[www.chemicalbook.com](http://www.chemicalbook.com) (2011) Datablad ferroceen.  
[http://www.chemicalbook.com/ProductMSDSDetailCB1414721\\_EN.htm](http://www.chemicalbook.com/ProductMSDSDetailCB1414721_EN.htm)



## Bijlage 1. Niet-genormeerde stoffen in grond 1e en 2e tranche

Stof	CAS	1e Tranche		Cmax [mg/kg ds]	2e Tranche		Cmax [mg/kg ds]
		n boringen	n metingen		n boringen 2	n metingen 2	
<b>C9-aromaten</b>		3	3	0,4	3	3	21
<b>1,3,5-trimethylbenzeen (C9)</b>	108-67-8	1	1	0,58	8	11	3,9
<b>Isopropylbenzeen (C9)</b>	98-82-8	0	0	0	1	1	19
<b>propylbenzeen (C9)</b>	103-65-1	1	1	0,17	3	5	3,1
<b>Indaan (C9)</b>	496-11-7	2	2	0,5	5	7	18
<b>Alfamethylstyreen</b>	98-83-9	0	0	0	1	1	0,36
<b>C10-aromaten</b>		1	1	0,15	0	0	0
<b>Methylnaftalenen (C11)</b>		0	0	0	1	1	1
<b>Nonylfenolen</b>	25154-52-3	1	1	0,6	0	0	0
<b>Tri(t-butyl)fenol of isomer</b>	732-26-3	2	2	0,4	0	0	0
<b>Benzaldehyde</b>	100-52-7	1	1	0,4	0	0	0
<b>Ferroceen</b>	102-54-5	1	1	1,1	1	2	1,5
<b>Bis(t-butyl)-cyclohexadieen-dion</b>	719-22-2	1	1	0,2	3	4	2
<b>Tri(t-butyl)fenol</b>	732-26-3	0	0	0	3	3	5
<b>2-ethylhexanol</b>	104-76-7	0	0	0	6	8	8
<b>2-ethylhexaanzuur</b>	149-57-5	0	0	0	5	6	2,5
<b>Ethylhexanal</b>	123-05-7	0	0	0	1	1	35
<b>N,N-dimethyldodecylamine</b>	112-18-5	0	0	0	4	4	9
<b>Dimethylformamide</b>	68-12-2	0	0	0	5	6	0,3
<b>Aceton</b>	67-64-1	0	0	0	1	1	0,2



## Bijlage 2. Afleiding voorlopige waarden MTR 1<sup>e</sup> tranche

**Auteur:** Paul Janssen

### **Nonylfenolen**

In de RAR (EU 2002) voor 4-nonylphenol (vertakt en onvertakt) worden conclusies getrokken op basis van gegevens van de stof zelf en deels die van nauw verwante alkylfenolen. Nonylphenol en verwante alkylfenolen hebben oestrogene werking (aangetoond in vitro en voor nonylphenol zelf ook in vivo). De orale absorptie van nonylphenol wordt laag ingeschat (10%). De onverdunde stof is sterk irriterend voor huid en ogen (lagere concentraties niet onderzocht). Uit een orale multigeneratiestudie met nonylphenol in de rat komt een LOAEL van 15 mg/kg lg/dag met als kritisch effect degeneratie en dilatatie van niertubuli. De NOAEL voor afwijkingen wijzend op een oestrogene werking bedroeg 15 mg/kg lg/dag in deze studie. De LOAEL voor testeseffecten in de rat was 100 mg/kg lg/dag (90-dagenstudie). Inhalatoire gegevens van langere duur ontbreken. Op basis van negatieve genotoxiciteit wordt geen carcinogeen risico verwacht voor nonylphenol.

### **Afleiding voorlopige MTR voor nonylfenolen:**

Overall bedraagt de LOAEL voor nonylphenol 15 mg/kg lg/dag (geen overall NOAEL) (conclusie in overeenstemming met de EU-RAR). Het kritische effect was degeneratie en/of dilatatie van niertubuli zoals waargenomen in een drie-generatiestudie in de rat. Het effect vertoonde geen eenduidige dosis-reponsrelatie en werd ook niet gevonden in de 90-dagenstudie. In kwalitatieve zin wordt het effect als niet-ernstig beoordeeld (komt ook spontaan voor in onbehandelde ratten van de gebruikte stam). In het licht hiervan wordt voor extrapolatie naar een NOAEL een beperkte factor van 3 gebruikt. Voor afleiding van een voorlopige MTR op basis van de geschatte NOAEL van 5 mg/kg lg/dag kunnen standaard assessment factoren gebruikt worden van 10 voor extrapolatie van proefdier naar mens en 10 voor extrapolatie naar gevoelige groepen in de humane populatie. Het resultaat is een voorlopige orale MTR van **0.05 mg/kg lg/dag**. Door route-to-route omrekening is een inhalatoire waarde te schatten. Dit levert op een concentratie van **0,0175 mg/m<sup>3</sup>**. Daarbij is aangenomen dat de orale absorptie slechts 10% bedraagt en de inhalatoire 100% (absorptie conform RAR).<sup>4</sup>

### **Referenties**

EU (2002) [http://ecb.jrc.ec.europa.eu/DOCUMENTS/Existing-Chemicals/RISK\\_ASSESSMENT/REPORT/4-nonylphenol\\_nonylphenolreport017.pdf](http://ecb.jrc.ec.europa.eu/DOCUMENTS/Existing-Chemicals/RISK_ASSESSMENT/REPORT/4-nonylphenol_nonylphenolreport017.pdf)

(DVFA) Danish Veterinary and Food Administration (2000)  
<http://www2.mst.dk/udgiv/Publications/1999/87-7909-566-6/pdf/87-7909-565-8.PDF>

### **Benzylaldehyde**

Deze stof komt voor als smaakstof in levensmiddelen. Voor de stof geldt een groeps-ADI van 0-5 mg/kg lg/dag (samen met benzoëzuur en benzoaatzouten) (JECFA). Deze waarde kan aangehouden worden als voorlopige orale MTR (**0.5 mg/kg lg/dag**). Een bestaande

<sup>4</sup> Ademvolume 20 m<sup>3</sup>/dag, lichaamsgewicht 70 kg.

inhalatoire grenswaarde voor algemene bevolking ontbreekt. Net als andere aldehyden werkt benzaldehyde sterk irriterend op de luchtwegen. Dit maakt dat route-to-route omrekening vanuit de orale waarde niet mogelijk is. Voor benzaldehyde is een arbeidstoxicologische norm bekend van 4 mg/m<sup>3</sup> (afkomstig uit Finland). Vanuit deze waarde kan een voorlopige inhalatoire grenswaarde voor de algemene bevolking geschat worden van **0,1 mg/m<sup>3</sup>** (gedeeld door een factor van 40).

#### Referenties

<http://www.inchem.org/documents/jecfa/jecmono/v44aje03.htm>

[http://www.inchem.org/documents/jecfa/jeceval/jec\\_192.htm](http://www.inchem.org/documents/jecfa/jeceval/jec_192.htm)

<http://www.ser.nl/nl/grenswaarden/benzaldehyde.aspx>

#### Ferroceen

Er is een beoordeling door de Gezondheidsraad (2002) t.b.v. een arbeidstoxicologische norm. De overall LOAEL was 3.0 mg/m<sup>3</sup> uit een 90-dagen inhalatiestudie in ratten met lesies in neusepitheel als het kritische effect (6 uur/dag blootstelling, 5 dagen/week). Systemische effecten traden niet op in deze studie. Slechts zeer beperkte orale data zijn beschikbaar. Na orale toediening aan honden gedurende 90 dagen werd ernstige hemosiderose met ijzerophoping in de lever waargenomen. Dit werd gezien vanaf 30 mg/kg lg/dag (geen NOAEL). Op basis van de subchronische LOAEL voor levereffecten in de hond kan een voorlopige orale MTR worden afgeleid van **0.03 mg/kg lg/dag**. Gebruikte assessmentfactoren: 10 voor gebruik van LOAEL i.p.v. NOAEL en beperkte studieduur, 10 voor extrapolatie van proefdier naar mens en 10 voor bescherming van gevoelige groepen in populatie. Voor inhalatie kan een voorlopige MTR van **0.12 mg/m<sup>3</sup>** geschat worden. Gebruikte assessmentfactoren: 10 voor extrapolatie naar NOAEL, 2.5 voor interspecies extrapolatie (conform REACH-aanbeveling) en 10 voor bescherming van gevoelige groepen in populatie.

#### Referenties

<http://www.gezondheidsraad.nl/nl/adviezen/health-based-reassessment-administrative-occupational-exposure-limits-dicylopentadienyl-iro>

#### Bis-(t-butyl)-cyclohexadien-dion

Slechts in HSDB entry te vinden. Echter geen humane of proefdierdata aanwezig in deze file. Conclusie: toxicologische informatie om een humane norm af te leiden ontbreekt.

#### Referenties

<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/f?./temp/~1BJ3kX:1>

#### Tri(t-butyl)-fenol

Voor 2,4,6-tri-(t-butyl)fenol is een US-EPA HPVC beoordeling beschikbaar. Daarin wordt een chronische orale rattenstudie gerapporteerd. Geen inhalatiedata beschikbaar. Ook milieubeoordeling door Environment Canada.

US-EPA geeft een chronische orale NOAEL van 30 ppm in voer voor een rattenstudie uit 1991 (effecten op lever en waarschijnlijk secundair daaraan op bloedbeeld). Deze NOAEL komt overeen met 1.5 mg/kg lg/dag. Met een assessmentfactor van 100 (10 voor extrapolatie van proefdier naar mens en 10 voor bescherming van gevoelige groepen in

populatie) resulteert een voorlopige orale MTR van 0.015 mg/kg lg/dag. Een voorlopige inhalatoire MTR kan indien nodig<sup>5</sup> geschat worden op basis van de orale waarde. Gezien het specifieke effect op de lever is dit waarschijnlijk een conservatieve (stricte) benadering. Route-to-route omrekening resulteert in een voorlopige inhalatoire MTR van 50 µg/m<sup>3</sup> (afgerond).

### **Referenties**

<http://iaspub.epa.gov/opthpv/quicksearch.display?pChem=100221>

[http://www.ec.gc.ca/substances/ese/eng/challenge/batch2/batch2\\_732-26-3.cfm](http://www.ec.gc.ca/substances/ese/eng/challenge/batch2/batch2_732-26-3.cfm)

<sup>5</sup> Uit de Canadese beoordeling: 'A vapour pressure of 0.03 Pa (i.e., moderate to low volatility) and a low Henry's Law constant of 0.7-0.98 Pa·m<sup>3</sup>/mol indicate that this substance is not likely to remain in air (0%).'





## Bijlage 3. Afleiding humane risicogrenzen 2<sup>e</sup> tranche

**Auteur:** Paul Janssen

### **Dimethylformamide**

Voor deze stof heeft het RIVM in 1996 voorlopige humane ad-hoc-MTRs voorgesteld. De daarbij gebruikte brondocumenten waren US-EPA (1990) en WHO (1991). De door de US-EPA afgeleide inhalatoire Reference Concentration van 30 µg/m<sup>3</sup> werd destijds overgenomen als voorlopige inhalatoire MTR. Een voorlopige orale MTR werd verkregen door de inhalatoire om te rekenen (route-to-route extrapolatie). In verdere beoordelingen door de Gezondheidsraad (1995), OECD (2001) en CERI (2007) staan deels nieuwe gegevens. De carcinogeniteit en genotoxiciteit van dimethylformamide zijn recent beoordeeld door de Gezondheidsraad (2011). Van de stof is een REACH registratiedossier beschikbaar met daarin een beoordeling van zowel de orale als inhalatoire toxiciteit inclusief voorstellen voor grenswaarden voor arbeidsblootstelling (niet voor de algemene bevolking) (ECHA 2011)

Het primaire doelorgaan bij herhaalde toediening is de lever. OECD (2001) vermeldt dat voor de inhalatoire route na chronische toediening aan muizen bij de laagste testconcentratie van 80 mg/m<sup>3</sup> (toediening 6 uur/dag, 5 dagen/week gedurende 18 maanden) nog een levereffect optrad (hypertrofie, celnecrose, pigmentophoping in Kupfercellen). In de rat was er geen effect bij deze concentratie na chronische inhalatoire blootstelling. In een recentere chronische inhalatiestudie in rat en muis (Senoh et al. 2004) waren duidelijke levereffecten aanwezig bij concentraties vanaf 609 mg/m<sup>3</sup> (6 uur/dag, 5 dagen/week) (lagere concentraties niet getest). US-EPA (1990) concludeerde dat er bij de mens in arbeidssituaties nog minimale levereffecten werden gerapporteerd bij gemiddeld 22 mg/m<sup>3</sup> (blootstellingduur van 1 tot 15 jaar). Voor de orale route geeft OECD (2001) een semichronische NOAEL voor levereffecten in de rat (90 dagen, toediening in het voer) van 200 ppm (12 mg/kg lg/dag) (geen chronische studie beschikbaar).

In oraal reproductie-onderzoek in de muis met toediening via drinkwater bleek de stof de reproductieprestatie aan te tasten bij doseringen die ook meer algemene toxiciteit veroorzaakten. De LOAEL voor toxische effecten uit deze studies is 219 mg/kg lg/dag. Dit niveau was de NOAEL voor reproductietoxiciteit. In diverse studies naar ontwikkelingseffecten (toediening gedurende dracht) in rat, muis en konijn werden foetotoxiciteit en teratogeniteit waargenomen. Na inhalatoire blootstelling van konijnen was 150 mg/m<sup>3</sup> de NOAEL voor deze effecten. Bij orale toediening was de NOAEL 44.1 mg/kg lg/dag.

Voor wat betreft de mogelijke carcinogeniteit waren de resultaten in een studie in rat en muis negatief (Malley et al. 1994 zoals geciteerd in Gezondheidsraad 2011) maar waren in een recentere studie in andere ratten- en muizenstammen verhoogde incidenties levertumoren waarneembaar. De beschikbare genotoxiciteitsdata wijzen op afwezigheid van genotoxische potentie door de stof (Gezondheidsraad 2011).

Het kritische effect voor dimethylformamide is op de lever. De basis voor de eerdere voorlopige inhalatoire MTR (RIVM 1996) was de LOAEL van 22 mg/m<sup>3</sup> voor levereffecten bij blootgestelde werknemers. Omgerekend naar continue blootstelling (24 uur/dag, 7 dagen per week) kwam dit niveau overeen met 7.9 mg/m<sup>3</sup>. Gezien de minimale aard van het effect en de overall dataset is de destijds gebruikte assessment factor van 300 factor erg hoog. Gebruik van de chronische inhalatiestudies met dieren als basis voor de inhalatoire MTR ligt voor de hand (deze studies waren niet opgenomen in de RIVM-beoordeling uit 1996). De overall LOAEL voor levereffecten uit deze studies is 80 mg/m<sup>3</sup> (studie in de muis, toediening 6 uur/dag, 5 dagen/week). Omgerekend naar continue blootstelling komt dit overeen met 15 mg/m<sup>3</sup>. Voor afleiding van een inhalatoire MTR worden de volgende assessment factoren gebruikt: 5 voor gebruik van LOAEL i.p.v. NOAEL, 2.5 voor extrapolatie van proefdier naar mens (conform REACH aanbeveling), 10 voor bescherming van gevoelige groepen in populatie. Aldus resulteert een inhalatoire MTR van 120 µg/m<sup>3</sup>. Voor de orale route is een studie in de rat met een semichronische NOAEL van 12 mg/kg lg/dag beschikbaar. Voor afleiding van een orale MTR worden de volgende assessment factoren gebruikt: 2 voor extrapolatie van subchronisch naar chronisch (conform REACH aanbeveling), 10 voor extrapolatie van proefdier naar mens (conform REACH aanbeveling), 10 voor bescherming van gevoelige groepen in populatie. Aldus resulteert een orale MTR van 60 µg/kg lg/dag.

**Conclusie:**

Orale MTR (TDI): 60 µg/kg lg/dag  
Inhalatoire (TCA): 120 µg/m<sup>3</sup>

**Referenties:**

CERI (2007) Hazard Assessment Report N,N-dimethylformamide. Chemicals Evaluation and Research Institute, Japan.

[http://www.cerij.or.jp/ceri\\_en/hazard\\_assessment\\_report/pdf/en\\_68\\_12\\_2.pdf](http://www.cerij.or.jp/ceri_en/hazard_assessment_report/pdf/en_68_12_2.pdf)

(Geraadpleegd op 20-07-2011)

ECHA (2011) REACH Dossier N,N-dimethylformamide. Information of Registered Substances: 68-12-2. <http://apps.echa.europa.eu/registered/registered-sub.aspx>

Gezondheidsraad (1995) Health based recommended occupational exposure limit – Formamide and dimethylformamide. Gezondheidsraad rapport nr. 1995/08/WGD.

Gezondheidsraad (2011) N,N-dimethylformamide - Evaluation of the carcinogenicity and genotoxicity. <http://www.gezondheidsraad.nl/sites/default/files/201103OSH.pdf>

(Geraadpleegd op 20-07-2011)

OECD (2001) SIDS – Dimethylformamide CAS N°: 68-12-2.

<http://www.inchem.org/documents/sids/sids/DIMETHYLFORM.pdf> (Geraadpleegd op 20-07-2011)

RIVM (1996) Bodemverontreiniging met dimethylformamide, voorlopige evaluatie humane toxicologie. Interne notitie van J. van Engelen & P. Janssen aan J. Kliest d.d. 17 juni 1996.

Senoh H et al. (2004) Carcinogenicity and chronic toxicity after inhalation exposure of rats and mice to N,N-dimethylformamide. J Occup Health 2004; 46(6): 429-439.

US-EPA (1990) IRIS-file voor N,N-dimethylformamide.

<http://www.epa.gov/iris/subst/0511.htm> (Geraadpleegd op 20-07-2011)

WHO (1991) Environmental Health Criteria 114 – Dimethylformamide.

### **2-Ethylhexanol (CAS 104-76-7)**

Voor deze stof zijn beoordelingen beschikbaar door JECFA (1998), AE (2003) en NSF (2008). Verder is er ook een REACH-dossier waarin voorstellen voor grenswaarden voor de algemene bevolking gedaan worden (ECHA 2011). De JECFA beoordeelde de orale toxiciteit van de stof voor gebruik als smaakstof in voedingsmiddelen. Voor deze beoordeling was een uitgebreid toxicologisch dossier beschikbaar, inclusief chronische dierexperimenten in rat en muis en onderzoek naar het effect op de ontwikkeling. De beoordeling door NSF (2008) was ook gericht op de orale route (gebruikte gegevens dezelfde als JECFA). Van deze beoordeling is echter alleen een korte samenvatting beschikbaar. De beoordeling door AE (2003) (Alberta Environment) had als doel het afleiden van een inhalatoire grenswaarde voor deze Canadese deelstaat.

2-Ethylhexanol wordt goed opgenomen in het maagdkanaal (voor inhalatie geen gegevens). Na opname in het lichaam wordt de stof omgezet tot 2-ethylhexaanzuur. Bij hoge doses vindt vervolgens vooral omzetting naar het glucuronide van dit zuur plaats. Bij lage doses is de voornaamste omzettingroute oxidatie van het zuur tot 2-hydroxy-2-ethylhexaanzuur en vervolgens tot 2-ethylhexaandioëzuur. De uitscheiding vindt voornamelijk plaats via urine (80%).

In oraal toxiciteitsonderzoek komt geen duidelijk doelorgaan naar voren. In de chronische studies in rat en muis was groeivertraging het kritische effect. JECFA (1998) komt tot een overall NOAEL van 50 mg/kg lg/dag (chronisch rat). Beperkte studies naar ontwikkelingseffecten lieten teratogene effecten zien bij hoge tot zeer hoge doseringen (1500 of 1600 mg/kg lg/dag) (JECFA 1998).

Voor de inhalatoire route zijn de gegevens beperkt. Bij eenmalige blootstelling aan 1209 mg/m<sup>3</sup> gedurende 6 uur traden depressie van het centrale zenuwstelsel, irritatie van ogen, neus en luchtwegen op in ratten, muizen en cavia's (AE 2003). In een 90-dagen inhalatiestudie met testconcentraties van 80, 212 en 639 mg/m<sup>3</sup> (blootstelling 6 uur/dag, 5 dagen/week) werden geen lokale of systemische effecten waargenomen (AE 2003, Klimisch et al. 1998). Een beperkte studie naar ontwikkelingstoxiciteit liet geen effect zien na blootstelling aan 850 mg/m<sup>3</sup> gedurende 7 uur per dag over de dracht (JECFA 1998).

Genotoxiciteitsonderzoek liet afwezigheid van genotoxische potentie zien (JECFA 1998; AE 2003, NSF 2008)

JECFA (1998) leidde een ADI af van 0.5 mg/kg lg/dag op basis een chronische NOAEL van 50 mg/kg lg/dag. Deze waarde kan gebruikt worden als orale MTR. De ADI zoals afgeleid door JECFA (1998) wordt verkozen boven de voorgestelde hogere orale grenswaarde in het REACH-dossier op basis van een subchronische orale NOAEL. Voor de inhalatoire route kan op basis van een subchronische NOAEL van 639 mg/m<sup>3</sup> een inhalatoire MTR worden afgeleid. Omgerekend naar continue expositie komt de NOAEL overeen met 114

mg/m<sup>3</sup>. De volgende assessment factoren worden gebruikt: 2 voor extrapolatie van subchronisch naar chronisch (conform REACH aanbeveling), 2.5 voor extrapolatie van proefdier naar mens (conform REACH aanbeveling), 10 voor bescherming van gevoelige groepen in populatie. Aldus resulteert een inhalatoire MTR van 2200 µg/m<sup>3</sup> (afgeronde waarde). Deze waarde komt overeen met het voorstel in het REACH-dossier. Beneden wordt ook ethylhexaanzuur beoordeeld. Gezien de omzetting van ethylhexanol naar ethylhexaanzuur in het lichaam dient de toxicologie van beide verbindingen bij voorkeur geïntegreerd beoordeeld te worden bij gelijktijdig voorkomen (zoals in het huidige geval). De MTRs voor 2-ethylhexanol worden daarom toegepast voor de som van 2-ethylhexanol en 2-ethylhexaanzuur.

#### Conclusie:

Orale MTR (TDI): 500 µg/kg lg/dag (som 2-ethylhexanol + 2-ethylhexaanzuur)

Inhalatoire MTR (TCL): 2200 µg/m<sup>3</sup> (som 2-ethylhexanol + 2-ethylhexaanzuur)

#### Referenties:

JECFA (1998) 2-Ethyl-1-hexanol.

<http://www.inchem.org/documents/jecfa/jecmono/v32je04.htm>

AE (2003) Assessment report on 2-ethylhexanol for developing ambient air quality objectives <http://environment.gov.ab.ca/info/library/6675.pdf>

ECHA (2011) REACH Dossier 2-ethylhexanol. Information of Registered Substances: 104-76-7. <http://apps.echa.europa.eu/registered/registered-sub.aspx>

Klimisch H-J, K Deckardt, C Gemhardt, B. Hildebrand (1998) Subchronic Inhalation Toxicity Study of 2-Ethylhexanol Vapour in Rats. *Food and Chemical Toxicology* **36**, 165-168

NSF (2008) Summary of evaluation as included in ITER-database. TERA (Toxicology Excellence for Risk Assessment). 2011 International Toxicity Estimates for Risk (ITER) Database. 2-Ethylhexanol (CAS 104-76-7) Online, Cincinnati, Ohio. Available at: [www.tera.org/iter](http://www.tera.org/iter) (Last accessed 22-08-2011).

#### Ethylhexaanzuur (CAS 149-57-5)

Deze stof wordt gebruikt als smaakstof in voedingsmiddelen. De stof is beoordeeld voor deze toepassing door EFSA (2008) als groep samen met ethylhexanal en ethylhexylacetaat. De inhalatoire toxiciteit is beoordeeld door Environment Canada en Health Canada (EC/HC 010). Van de stof is een REACH registratiedossier beschikbaar met daarin een beoordeling van zowel de orale als inhalatoire toxiciteit, inclusief voorstellen voor grenswaarden voor de algemene bevolking (ECHA 2011)

EFSA (2008) gebruikt in haar evaluatie voor ethylhexaanzuur, ethylhexanal en ethylhexylacetaat onder andere gegevens voor ethylhexanol en leidt een overall NOAEL af van 50 mg/kg lg /dag afkomstig uit een chronische studie met ethylhexanol. EFSA vermeldt voor ethylhexaanzuur subchronische NOAELs in rat en muis van 61-205 mg/kg lg/dag. Gezien de omzetting van ethylhexanol naar ethylhexaanzuur in het lichaam dient de toxicologie van beide verbindingen bij voorkeur geïntegreerd beoordeeld te worden bij gelijktijdig voorkomen (zoals in het huidige geval). Daarom ligt toepassing van de ADI

van 0.5 mg/kg lg/dag zoals afgeleid voor ethylhexanol ook voor ethylhexaanzuur voor de hand. Dit betekent een orale MTR van 0.5 mg/kg lg/dag voor de som van ethylhexanol en ethylhexaanzuur gebaseerd op een chronische NOAEL voort ethylhexanol. Aan deze waarde wordt de voorkeur gegeven boven die uit het REACH-dossier voor ethylhexaanzuur (gebaseerd op semichronische NOAELs voor ethylhexaanzuur, exacte afleiding niet gerapporteerd).

Voor de inhalatoire route zijn geen studies met herhaalde toediening beschikbaar met 2-ethylhexaanzuur (EC/HC (2010)). Deze review vermeldt wel een subchronische studie met ethylhexanol met een NOAEL van 639 mg/m<sup>3</sup> (boven genoemd voor ethylhexanol). Op basis van deze NOAEL werd voor ethylhexanol een inhalatoire MTR voorgesteld van 2200 µg/m<sup>3</sup> (zie boven). Gezien de verwevenheid van het metabole lot in het lichaam van 2-ethylhexanol en 2-ethylhexaanzuur is deze inhalatoire MTR ook bruikbaar voor 2-ethylhexylhexaanzuur (som-MTR). Vergeleken met ethylhexanol wordt de potentie voor lokale effecten in de luchtwegen hoger ingeschat voor 2-ethylhexaanzuur. Voor azijnzuur wordt irritatie gezien vanaf 150 mg/m<sup>3</sup> (SCOEL 1993). Voor 2-ethylhexaanzuur is naar verwachting de potentie voor inductie van lokale effecten kleiner als voor azijnzuur. Bij 2200 µg/m<sup>3</sup> zal een risico voor lokale effecten zich naar verwachting niet voordoen voor 2-ethylhexaanzuur. Aan de waarde van 2200 µg/m<sup>3</sup> wordt de voorkeur gegeven boven die uit het REACH-dossier (gebaseerd op orale semichronische NOAELs voor ethylhexaanzuur, afleiding niet gerapporteerd).

#### Conclusie:

Orale MTR (TDI): 500 µg/kg lg/dag (som 2-ethylhexanol + 2-ethylhexaanzuur)  
 Inhalatoire MTR (TCL): 2200 µg/m<sup>3</sup> (som 2-ethylhexanol + 2-ethylhexaanzuur)

#### Referenties:

ECHA (2011) REACH Dossier 2-ethylhexanoic acid. Information of Registered Substances: 68-12-2. <http://apps.echa.europa.eu/registered/registered-sub.aspx>

EFSA (2008) Flavouring Group Evaluation 41: 2-Ethylhexyl derivatives from chemical group 2. Opinion of the Scientific Panel on Food Additives, Flavourings, Processing Aids and Materials in Contact with Food (AFC) (Question No EFSA-Q-2003-147) Adopted on 3 April 2008 [http://data.ellispub.com/pdf/EN/2009/EFSA/afc\\_ej929\\_fge04\\_op\\_en,0.pdf](http://data.ellispub.com/pdf/EN/2009/EFSA/afc_ej929_fge04_op_en,0.pdf)

EC/HC (2010) Hexanoic acid, 2-ethyl- Chemical Abstracts Service Registry Number 149-57-5, Environment Canada, Health Canada October 2010. <http://www.ec.gc.ca/ees-ees/default.asp?lang=En&n=1D5253CB-1>

#### Dimethyldodecylamine (CAS 112-18-5)

De beschikbare toxicologische gegevens voor deze stof zijn zeer beperkt, zo wijst de beoordeling door OECD (SIDS 2002) alsmede het beschikbare REACH-dossier (ECHA 2011) uit. Slechts een orale 28 dagen studie met een screening voor reproductie is beschikbaar. Daaruit komt een orale NOAEL van 50 mg/kg lg/dag (7 dagen/week toediening). Beperkte gegevens wijzen op afwezigheid van genotoxische potentie. De stof is basisch in water en is enigszins vluchtig maar is aanwezig in ionvorm in water zodat weinig vervluchtiging te verwachten is uit water. Inhalatiedata ontbreken. Als gevolg van het basische karakter werkt de stof sterk irriterend bij contact met slijmvliezen. In dit

opzicht lijkt de stof op andere tertiaire aminen. Voor trimethylamine deed zich bij 25 mg/m<sup>3</sup> in de rat nog een effect op de luchtwegen voor bij subchronische toediening (US-EPA 2008). Voor triethylamine was de potentie voor een dergelijk effect in de rat aanzienlijk minder met afwezigheid van een effect bij rond 1000 mg/m<sup>3</sup> bij subchronische blootstelling (US-EPA 1991). Bij de mens echter veroorzaakte deze stof bij kortdurende blootstelling al oogeffecten (wazig zien) bij concentraties vanaf 6.5 mg/m<sup>3</sup> (NOAEL 3.0 mg/m<sup>3</sup>) en irritatie van ogen, neus en keel vanaf 42 mg/m<sup>3</sup> (SCOEL 1999). Op basis van de basische eigenschappen in water zou op basis van een vergelijkbare pKa voor trimethyl- en triethylamine en dimethyldodecylamine, ook de irriterende potentie vergelijkbaar moeten zijn. Omgerekend naar dimethyldodecylamine op basis van molecuulmassa komt de NOAEL van 3.0 mg/m<sup>3</sup> voor triethylamine overeen met ongeveer 6 mg/m<sup>3</sup>.

De toxicologische gegevens zijn te beperkt voor volwaardige MTR. In het REACH-dossier worden geen grenswaarden afgeleid. Voor de orale route kan een voorlopige indicatieve MTR worden afgeleid op basis van de NOAEL van 50 mg/kg lg/dag. De volgende assessment factoren worden gebruikt: 6 voor extrapolatie van subacuut naar chronisch (conform REACH aanbeveling), 10 voor extrapolatie van proefdier naar mens en 10 voor bescherming van gevoelige groepen in de populatie. Aldus resulteert een orale MTR van 0.1 mg/kg lg/dag (afgeronde waarde). Voor de inhalatoire route kan op basis van route-to-route extrapolatie een waarde van 140 µg/m<sup>3</sup> afgeleid worden (extrapolatie van NOAEL van 50 mg/kg lg/dag naar 21 mg/m<sup>3</sup> in de rat, vervolgens assessment factoren conform REACH van 2.5 en 10 voor resp. inter- en intraspeciesverschillen, 6 voor gebruik subacute NOAEL). Deze voorlopige indicatieve waarde is afgeleid op basis van de systemisch toxische werking. Gezien de bekende irriterende werking door dimethyldodecylamine zijn lokale effecten op de luchtwegen mogelijk. De data voor trimethyl- en triethylamine op dit punt suggereren bij 140 µg/m<sup>3</sup> afwezigheid van een risico voor lokale effecten bij chronische blootstelling. De betrouwbaarheid van de voorlopige indicatieve MTRs voor dimethyldodecylamine is beperkt.

#### **Conclusie:**

Voorlopige orale MTR (TDI): 100 µg/kg lg/dag

Voorlopige inhalatoire MTR (TCL): 140 µg/m<sup>3</sup>

#### **Referenties:**

ECHA (2011) REACH Dossier dodecyldimethylamine. Information of Registered Substances: 112-18-5. <http://apps.echa.europa.eu/registered/registered-sub.aspx>

SCOEL (1999) Recommendation from the Scientific Committee on Occupational Exposure Limits for Triethylamine SCOEL/SUM/55 September 1999. European Commission Employment, Social Affairs and Inclusion.

SIDS (2002) N,N-Dimethyldodecylamine. OECD  
<http://www.inchem.org/documents/sids/sids/112185.pdf>

US-EPA (2010) Screening-Level Hazard Characterization: Fatty Nitrogen Derived Amines Category.  
[http://www.epa.gov/chemrtk/hpvis/hazchar/Category\\_FND%20Amines\\_September\\_2010.pdf](http://www.epa.gov/chemrtk/hpvis/hazchar/Category_FND%20Amines_September_2010.pdf)

US-EPA (1991) Iris-file for Triethylamine. <http://www.epa.gov/iris/subst/0520.htm>

US-EPA (2008) Acute Exposure Guideline Levels (AEGLs) for Trimethylamine  
(Cas Reg. No. 75-50-3) – Interim.  
[http://www.epa.gov/opptintr/aegl/pubs/trimethylamine\\_interim\\_ornl\\_jun\\_2008c.pdf](http://www.epa.gov/opptintr/aegl/pubs/trimethylamine_interim_ornl_jun_2008c.pdf)





## Bijlage 4. Azo-kleurstoffen en aromatische amines

Azo-kleurstoffen werden voorheen o.a. gebruikt om textiel en schoenen te kleuren. Sinds 1998 is gebruik verboden. Uit azo-kleurstoffen worden in het milieu en in de mens aromatische amines afgesplitst. Deze amines zijn verantwoordelijk voor de carcinogene werking.

Bijlage I, behorende bij artikel 1, onderdeel a, van het Warenwetbesluit Azo-kleurstoffen Verbodslĳst van aromatische amines die vrij kunnen komen uit azo-kleurstoffen en die als kankerverwekkend geclassificeerd zijn of als zodanig beschouwd worden.

AROMATISCH AMINE	AFKORTING	CAS NR.
4-aminoazobenzeen		60-09-3
o-amino-azotolueen	O-A	92-67-1
4-aminodifenył		92-67-1
2-amino-4-nitrotolueen	2-A-4-N	99-55-8
o-anisidine 2-methoxyaniline		90-04-0
benzidine	B	92-87-5
p-chlooraniline		106-47-8
4-chloor-o-toluidine	C	95-69-2
p-cresidine		120-71-8
2,4-diaminoanisol		615-05-4
4,4'-diaminodifenyłmethaan		101-77-9
3,3'-dichloorbenzidine	Dcb	91-94-1
3,3'-dimethoxybenzidine	D	119-90-4
3,3'-dimethylbenzidine	T	119-93-7
3,3'-dimethyl-4,4'-diaminodifenyłmethaan		838-88-0
4,4'-methyleen-bis-(2-chlooraniline)		101-14-4
2-naftylamine	N	91-59-8
4,4'-oxydianiline		101-80-4
4,4'-thiodianiline		139-65-1
2,4-tolueendiamine	2,4-T	95-80-7
o-toluidine	o-T	95-53-4
2,4,5-trimethylaniline		137-17-7

Het RIVM heeft diverse risicobeoordelingen uitgevoerd voor azo-kleurstoffen in consumentenproducten. Bovenstaande aromatische amines worden beschouwd als benzidine-analoog. Benzidine is een bewezen humaan carcinogeen (blaaskankerveroorzaker). Voor benzidine is een VSD beschikbaar van 0.3 ng/persoon/dag (= 0.005 ng/kg lg/dag). Als MTR betekent dit 0.5 ng/kg lg/dag. De potentie van het amine tov benzidine wordt geschat op basis van proefdierdata. Aldus resulteert een MTR voor het desbetreffende aromatische amine.



## Bijlage 5. Afleiding additionele ecologische risicogrenzen voor 2-ethylhexanol, 2-ethylhexaanzuur, N,N-dimethyl dodecylamine en dimethylformamide

Auteurs:

R van Herwijnen  
L van Leeuwen  
CTA Moermond  
CE Smit  
EMJ Verbruggen

## Contents

<b>1</b>	<b>Introduction 45</b>	
1.1	Aim of the report	45
1.2	Methods	45
<b>2</b>	<b>Derivation of environmental risk limits for 2-ethylhexanol 47</b>	
2.1	Substance identification, physicochemical properties, fate and human toxicology	47
2.2	Secondary poisoning	48
2.3	Toxicity data and derivation of ERLs for water	48
2.4	Toxicity data and derivation of ERLs for soil	49
<b>3</b>	<b>Derivation of environmental risk limits for 2-ethylhexanoic acid 50</b>	
3.1	Substance identification, physico-chemical properties, fate and human toxicology	50
3.2	Secondary poisoning	51
3.3	Toxicity data and derivation of ERLs for water	51
3.4	Toxicity data and derivation of ERLs for soil	52
<b>4</b>	<b>Derivation of environmental risk limits for N,N-dimethyl dodecylamine 53</b>	
4.1	Substance identification, physico-chemical properties, fate and human toxicology	53
4.2	Secondary poisoning	54
4.3	Toxicity data and derivation of ERLs for water	54
4.4	Toxicity data and derivation of ERLs for soil	55
<b>5</b>	<b>Derivation of environmental risk limits for Dimethylformamide 57</b>	
5.1	Substance identification, physico-chemical properties, fate and human toxicology	57
5.2	Secondary poisoning	58
5.3	Toxicity data and derivation of ERLs for water	58
5.4	Toxicity data and derivation of ERLs for soil	61
	<b>References 62</b>	

# 1 Introduction

## 1.1 Aim of the report

In this report ecotoxicological environmental risk limits (ERLs) for soil are derived for 2-ethylhexanol, 2-ethylhexanoic acid, N,N-dimethyl dodecylamine and dimethylformamide in request of the Laboratory for Ecological Risk Assessment of RIVM. The ERLs will be used to derive intervention values.

The following ERLs are considered:

- Maximum Permissible Concentration for direct ecotoxicity ( $MPC_{eco}$ ) – concentration in an environmental compartment at which no effect to be rated as negative is to be expected for ecosystems;
- Serious Risk Concentration for direct ecotoxicity ( $SRC_{eco}$ ) – concentration at which serious negative effects in an ecosystem may occur.

It should be noted that secondary poisoning and human exposure via food are taken into account if ERLs in water and soil are derived within the framework of INS<sup>6</sup> for implementing the general national policy on substances. However, for the specific use of ERLs for derivation of intervention values, soil ERLs are only derived for direct ecotoxicity. Secondary poisoning and human consumption of meat, milk, and crops grown on arable fields are not taken into consideration.

It should be noted that ERLs are scientifically derived values, based on (eco)toxicological, fate and physicochemical data and do not have an official status.

## 1.2 Methods

### 1.2.1 Data collection

A literature search was performed in SCOPUS (July 2011). Results from this search were complemented with references found in US EPA's ECOTOX database (<http://cfpub.epa.gov/ecotox/>), the REACH dossiers of the compounds (ECHA, 2011) and UNEP/OECD SIDS assessment reports (<http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/OECD/SIDS/sidspub.html>).

Where data in the REACH dossier originated from public literature, the original paper was evaluated. Studies in the REACH dossier of which the original paper was not available were only considered reliable (Ri2) when enough data was given in the REACH summary to evaluate the plausibility of the endpoints. Where possible, additional information was retrieved from the OECD SIDS assessment reports in case the same studies have been evaluated. When not enough data was presented in the REACH summary the study has been assigned Ri4.

In the aggregated data table only one effect value per species is presented. When for a species several effect data are available, the geometric mean of multiple values for the same endpoint is calculated where possible. Subsequently, when several endpoints are

<sup>6</sup> (Inter)nationale Normstelling Stoffen: International and national environmental quality standards for substances in the Netherlands.

available for one species, the lowest of these endpoints (per species) or the most relevant for the population level is reported in the aggregated data table.

### 1.2.2 Methodology for derivation of environmental risk limits

The methodology for data selection and ERL derivation is described in Van Vlaardingen and Verbruggen (2007). Methods are in accordance with the methodology for derivation of risk limits and quality standard as used under European legislation (REACH and Water Framework Directive).

If no (or not enough) soil ecotoxicity data are available, first an ERL for ecotoxicity in water is derived, using aquatic toxicity data. After that, this water-ERL is recalculated into a soil ERL using equilibrium partitioning. The following formulas have been used (see section 3.7 in Van Vlaardingen and Verbruggen, 2007):

$$K_{p_{soil}} = F_{oc_{soil}} \times K_{oc}$$

$$K_{soil-water} = F_{air_{soil}} \times K_{air-water} + F_{water_{soil}} + F_{solid_{soil}} \times \frac{K_{p_{soil}}}{1000} \times RHO_{solid}$$

$$K_{air-water} = \frac{H}{R \times TEMP}$$

$$MPC_{soil,TGD,EqP,ww} = \frac{K_{soil-water}}{RHO_{soil}} \times MPC_{eco,water} \times 1000$$

$$MPC_{soil,TGD,EqP,dw} = \frac{RHO_{soil}}{F_{solid_{soil}} \times RHO_{solid}} \times MPC_{soil,TGD,EqP,ww}$$

$$MPC_{Dutch\ standard\ soil,EqP,dw} = \frac{F_{oc_{Dutch\ standard\ soil}}}{F_{oc_{soil,TGD}}} \times MPC_{soil,TGDEqP,dw}$$

The following default values have been used:

Symbol	Description of variable	Unit	Value
$F_{air_{soil}}$	fraction air in soil	$m^3.m^{-3}$	0.2
$F_{oc_{Dutch\ standard\ soil}}$	fraction organic carbon in Dutch standard soil	$kg.kg^{-1}$	0.0588
$F_{oc_{soil}}$	weight fraction of organic carbon in soil	$kg.kg^{-1}$	
$F_{oc_{soil,TGD}}$	weight fraction of organic carbon in soil as defined in the TGD	$kg.kg^{-1}$	0.02
$F_{solid_{soil}}$	fraction solids in soil	$m^3.m^{-3}$	0.6
$F_{water_{soil}}$	fraction water in compartment soil	$m^3.m^{-3}$	0.2
$H$	Henry's law constant	$Pa.m^3.mol^{-1}$	
$K_{air-water}$	air-water partition coefficient	$m^3.m^{-3}$	
$K_{p_{soil}}$	solids-water partition coefficient in soil	$m^3.kg^{-1}$	
$K_{soil-water}$	total soil-water partition coefficient	$m^3.m^{-3}$	
$K_{oc}$	partition coefficient between organic carbon and water	$L.kg^{-1}$	
$K_{p_{soil}}$	partition coefficient solid-water in soil	$L.kg^{-1}$	
$R$	gas constant	$Pa.m^3.mol^{-1}.K^{-1}$	8.314
$RHO_{soil}$	bulk density of wet soil	$kg_{ww}.m^{-3}$	1700
$RHO_{solid}$	density of the solid phase	$kg_{solid}.m_{solid}^{-3}$	2500
$TEMP$	environmental temperature	K	285

## 2 Derivation of environmental risk limits for 2-ethylhexanol

### 2.1 Substance identification, physicochemical properties, fate and human toxicology

#### 2.1.1 Identity

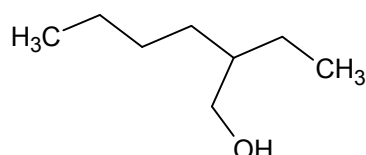


Figure 1. Structural formula of 2-ethylhexanol.

Table 1. Identification of 2-ethylhexanol.

Parameter	Name or number
Chemical name	2-ethylhexanol
Common/trivial/other name	2-ethylhexan-1-ol; isooctanol
CAS number	104-76-7
EC number	203-234-3
Molecular formula:	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O

#### 2.1.2 Physicochemical properties

Table 2. Physicochemical properties of 2-ethylhexanol.

Parameter	Unit	Value	Remark	Source
Molecular weight	[g.mol <sup>-1</sup> ]	130.23		ECHA (2011)
Water solubility	[mg.L <sup>-1</sup> ]	900	pH 5.8; 20 °C	ECHA (2011)
log K <sub>OW</sub>	[-]	2.73	Calculated	ECHA (2011)
		2.9	Measured; pH 7; 25 °C	ECHA (2011)
		<b>2.81</b>	Calculated ClogP	Biobyte (2006)
		2.73	Calculated EPIWIN	US EPA (2009)
K <sub>OC</sub>	[L.kg <sup>-1</sup> ]	39	QSAR for alcohols	Van Vlaardingen and Verbruggen (2007)
Vapour pressure	[Pa]	30		ECHA (2011)
Melting point	[°C]	-89		ECHA (2011)
Boiling point	[°C]	184		ECHA (2011)
Henry's law constant	[Pa.m <sup>3</sup> .mol <sup>-1</sup> ]	4.3	Calculated	Van Vlaardingen and Verbruggen (2007)

In case of multiple values, values in **bold** are used in the derivation of the MPC and SRC

The compound is ready biodegradable.

#### 2.1.3 Bioconcentration and biomagnification

In the REACH dossier, a BCF of 25.33 L.kg<sup>-1</sup> is reported, calculated using log BCF = 0.77 log K<sub>OW</sub> - 0.70 + **correction** (ECHA, 2011). The background of this QSAR is not clear, experimental data are not available.



### 2.1.4 Human toxicological threshold limits and carcinogenicity

The substance is not classified as a carcinogen. The risk phrases are Xn; R20; R36/37/38 (ESIS, 2011)

The oral DNEL is  $1.1 \text{ mg.kg}_{\text{bw}}^{-1}.\text{day}^{-1}$  for long-term exposure (ECHA, 2011).

## 2.2 Secondary poisoning

Since the  $\log K_{ow} < 3$  the risk of toxicity of 2-ethylhexanol through secondary poisoning is not considered relevant.

## 2.3 Toxicity data and derivation of ERLs for water

Because no terrestrial toxicity data are available, first ERLs for water need to be derived. These values can then be recalculated into ERLs for soil.

An overview of the selected freshwater toxicity data for 2-ethylhexanol is given in Table 3 and marine toxicity data are shown in Table 4.

Table 3. 2-ethylhexanol: selected freshwater toxicity data for ERL derivation.

<b>Chronic Taxonomic group</b>	<b>NOEC/EC<sub>10</sub> (mg.L<sup>-1</sup>)</b>	<b>Acute Taxonomic group</b>	<b>L(E)C<sub>50</sub> (mg.L<sup>-1</sup>)</b>
<b>Algae</b>		<b>Algae</b>	
<i>Chlorella emersonii</i>	10	<i>Chlorella emersonii</i>	48.3
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	<b>5.3</b>	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	<b>16.6</b>
		<b>Crustacea</b>	
		<i>Daphnia magna</i>	84 <sup>a</sup>
		<b>Insecta</b>	
		<i>Chironomus plumosus</i>	34
		<b>Pisces</b>	
		<i>Leuciscus idus</i>	17.1
		<i>Pimephales promelas</i>	28.2
		<i>Oncorhynchus mykiss</i>	34 <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Geometric mean of 71 and 100 mg.L<sup>-1</sup>.

<sup>b</sup> Geometric mean of 32 and 37 mg.L<sup>-1</sup>.

Table 4. 2-ethylhexanol: selected marine toxicity data for ERL derivation.

<b>Chronic Taxonomic group</b>	<b>NOEC/EC<sub>10</sub> (mg.L<sup>-1</sup>)</b>	<b>Acute Taxonomic group</b>	<b>L(E)C<sub>50</sub> (mg.L<sup>-1</sup>)</b>
		<b>Crustacea</b>	
		<i>Artemia salina</i>	19

### 2.3.1 Treatment of fresh- and saltwater toxicity data

In principle, salt- and freshwater toxicity data can be combined unless there is reason not to do so. In this case, the data can be combined.

### 2.3.2 Derivation of $MPC_{eco, water}$

Acute toxicity data are available for bacteria, algae, crustaceans, insects and fish. This means that the base-set is present. Chronic data for MPC derivation is only available for algae. Chronic data for algae can only be used for derivation of risk limits when chronic data for either *Daphnia* or fish are present as well. Because this is not the case, an assessment factor of 1000 has to be used on the lowest acute data point ( $16.6 \text{ mg.L}^{-1}$  for *Scenedesmus subspicatus*). This results in an  $MPC_{eco, water}$  of  $16.6/1000 = 0.0166 \text{ mg.L}^{-1}$

In the REACH dossier (ECHA, 2011), a PNEC water of  $0.017 \text{ mg.L}^{-1}$  is derived, which agrees with our value.

### 2.3.3 Derivation of $SRC_{eco, aquatic}$

The geometric mean value of all acute data is  $30.3 \text{ mg.L}^{-1}$  and for all chronic data  $7.3 \text{ mg.L}^{-1}$ . No chronic data for fish and *Daphnia* are present and the geometric mean for chronic data is higher than the geometric mean of acute data divided by 10. Thus the  $SRC_{eco, aquatic}$  is  $30.3 / 10 = 3.03 \text{ mg.L}^{-1}$ .

## 2.4 Toxicity data and derivation of ERLs for soil

No terrestrial data are available for 2-ethylhexanol. Because of this, the  $MPC_{eco, soil}$  and  $SRC_{eco, soil}$  need to be calculated using the equilibrium partitioning equations as described in paragraph 2.2.

### 2.4.1 Derivation of $MPC_{eco, soil}$

Using the  $MPC_{eco, water}$  of  $0.0166 \text{ mg.L}^{-1}$ , an  $MPC_{eco, soil}$  of  $0.015 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  for TGD standard soil can be calculated. This equals an  $MPC_{eco, soil}$  of  $0.045 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  for Dutch standard soil.

In the REACH dossier (ECHA, 2011), a PNEC soil of  $0.047 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  is derived (for TGD standard soil), which is three times higher than the value derived here.

### 2.4.2 Derivation of $SRC_{eco, soil}$

Using the  $SRC_{eco, aquatic}$  of  $3.03 \text{ mg.L}^{-1}$ , an  $SRC_{eco, soil}$  of  $2.77 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  for TGD standard soil can be calculated. This equals an  $MPC_{eco, soil}$  of  $8.14 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  for Dutch standard soil.

### 3 Derivation of environmental risk limits for 2-ethylhexanoic acid

#### 3.1 Substance identification, physico-chemical properties, fate and human toxicology

##### 3.1.1 Identity

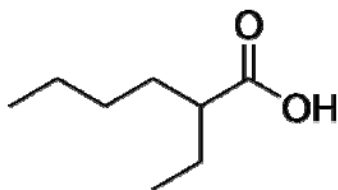


Figure 2. Structural formula of 2-ethylhexanoic acid.

Table 5. Identification of 2-ethylhexanoic acid.

Parameter	Name or number
Chemical name	2-ethylhexanoic acid
Common/trivial/other name	2-ethylhexanoic acid
CAS number	149-57-5
EC number	205-743-6
Molecular formula:	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>

##### 3.1.2 Physico-chemical properties

Table 6. Physico-chemical properties of 2-ethylhexanoic acid.

Parameter	Unit	Value	Remark	Source
Molecular weight	[g.mol <sup>-1</sup> ]	144.21		ECHA (2011)
Water solubility	[mg.L <sup>-1</sup> ]	1400	20 °C	ECHA (2011)
log K <sub>OW</sub>	[-]	1.75	Calculated	ECHA (2011)
		2.7	Measured; pH 4.7;	ECHA (2011)
K <sub>OC</sub>	[L.kg <sup>-1</sup> ]	2.76	Calculated ClogP	Biobyte (2006)
		<b>2.64</b>	MlogP	Biobyte (2006)
		2.73	Calculated EPIWIN	US EPA (2009)
		101.69 –	Range measured	ECHA (2011)
		140.87	soil 5 In the REACH dossier is mentioned that only this soil gives reasonable results	
		6.52 – 413.93	Range measured	ECHA (2011)
		soil 1		
-50.54 –	Range measured	ECHA (2011)		
101.23	soil 4 as given in the REACH dossier			
79.4	QSAR organic acids	Van Vlaardingen and Verbruggen (2007)		
<b>119.7</b>	Geometric mean for min and max of soil 5 above			

Parameter	Unit	Value	Remark	Source
Vapour pressure	[Pa]	4		ECHA (2011)
Melting point	[°C]	-57		ECHA (2011)
Boiling point	[°C]	226-229		ECHA (2011)
pKa		4.76	25 °C	
Henry's law constant	[Pa.m <sup>3</sup> .mol <sup>-1</sup> ]	0.41	Calculated	

In case of multiple values, values in **bold** are used in the derivation of the MPC and SRC

The compound is ready biodegradable. Under environmental conditions the compound occurs as an anion.

### 3.1.3 Bioconcentration and biomagnification

No data available.

### 3.1.4 Human toxicological threshold limits and carcinogenicity

The substance is not classified as a carcinogen. The risk phrases are Xn; R63 due to the possible risk of harm to the unborn child (ESIS, 2011).

The oral DNEL is 2.5 mg.kg<sub>bw</sub><sup>-1</sup>.day<sup>-1</sup> for long-term exposure (ECHA, 2011).

## 3.2 Secondary poisoning

Since the log Kow is < 3, the risk of, toxicity of 2-ethylhexanoic acid through secondary poisoning is not considered relevant.

## 3.3 Toxicity data and derivation of ERLs for water

Because no terrestrial toxicity data are available, first ERLs for water need to be derived. These values can then be recalculated into ERLs for soil.

An overview of the selected freshwater toxicity data for 2-ethylhexanoic is given in Table 7

Table 7. 2-ethylhexanoic acid: selected freshwater toxicity data for ERL derivation.

Chronic Taxonomic group	NOEC/EC <sub>10</sub> (mg.L <sup>-1</sup> )	Acute Taxonomic group	L(E)C <sub>50</sub> (mg.L <sup>-1</sup> )
<b>Algae</b> <i>Scenedesmus subspicatus</i>	27.9 <sup>a</sup>	<b>Algae</b> <i>Scenedesmus subspicatus</i>	<b>44.4<sup>a</sup></b>
<b>Crustacea</b> <i>Daphnia magna</i>	25	<b>Crustacea</b> <i>Daphnia magna</i>	95.1 <sup>b</sup>
		<b>Pisces</b> <i>Lepomis gibbosus</i>	270
<b>Amphibia</b> <i>Xenopus</i>	<b>22</b>	<i>Leuciscus idus</i>	367

<sup>a</sup> Most relevant endpoint (growth rate) and exposure time (96 h)

<sup>b</sup> Geometric mean of 85.4 and 106 mg.L<sup>-1</sup>

Because the compound is an acid, pH effects cannot be ruled out at concentrations around or above  $100 \text{ mg.L}^{-1}$ . This means that the fish toxicity data may have been influenced by pH. Despite of this, the values from the REACH dossier are taken over because fish are not the most sensitive species. If there would have been an effect of pH on the fish, the endp[oints for fish would have been higher.

### 3.3.1 Derivation of $\text{MPC}_{\text{eco, water}}$

Because of the R63 classification, an MPC for human consumption of fishery products should also be determined to derive a final  $\text{MPC}_{\text{water}}$  for all protection goals. However, in this report only values for direct ecotoxicity are derived since the ERLs for water as derived in this report will only be used to calculate risk limits for soil.

Acute toxicity data are available for algae, *Daphnia* and fish. This means the base set is available. Chronic toxicity data are available for algae, *Daphnia* and amphibians, but not for fish. The chronic endpoint of the amphibian is considered unsuitable as replacement for a chronic value of fish because the animals tested were in a very young stadium, still eating plants, and therefore not comparable to fish with respect to life form and feeding strategy. The chronic endpoints are also very close to each other which indicates that the mode of action could be polar-narcosis. Because only two trophic levels are represented in the chronic dataset, an assessment factor of 50 is used on the lowest chronic value ( $22 \text{ mg.L}^{-1}$  for *Xenopus*). This results in an  $\text{MPC}_{\text{eco, water}}$  of  $22 / 50 = 0.44 \text{ mg.L}^{-1}$

In the REACH dossier (ECHA, 2011), a PNEC water of  $0.36 \text{ mg.L}^{-1}$  is derived. This PNEC is however based on read-across which is not applied in our ERL derivation.

### 3.3.2 Derivation of $\text{SRC}_{\text{eco, aquatic}}$

The geometric mean value of all acute data is  $143 \text{ mg.L}^{-1}$  and for all chronic data  $24.8 \text{ mg.L}^{-1}$ . No chronic data for fish are present and the geometric mean for chronic data is higher than the geometric mean of acute data divided by 10. Thus the  $\text{SRC}_{\text{eco, aquatic}}$  is  $143 / 10 = 14.3 \text{ mg.L}^{-1}$ .

## 3.4 Toxicity data and derivation of ERLs for soil

There are no soil toxicity data for 2-ethylhexanoic acid. Because of this, the  $\text{MPC}_{\text{eco, soil}}$  and  $\text{SRC}_{\text{eco, soil}}$  need to be calculated using the equilibrium partitioning equations as described in paragraph 2.2.

### 3.4.1 Derivation of $\text{MPC}_{\text{eco, soil}}$

Using the  $\text{MPC}_{\text{eco, water}}$  of  $0.44 \text{ mg.L}^{-1}$ , an  $\text{MPC}_{\text{eco, soil}}$  of  $1.11 \text{ mg.kg}_{\text{dwt}}^{-1}$  for TGD standard soil can be calculated. This equals an  $\text{MPC}_{\text{eco, soil}}$  of  $3.27 \text{ mg.kg}_{\text{dwt}}^{-1}$  for Dutch standard soil.

In the REACH dossier (ECHA, 2011), a  $\text{PNEC}_{\text{soil}}$  of  $1.06 \text{ mg.kg}_{\text{dwt}}^{-1}$  is derived for TGD standard soil. This value is comparable to the value derived in this report, just like the values for the  $\text{MPC}_{\text{eco, water}}$ .

### 3.4.2 Derivation of $\text{SRC}_{\text{eco, soil}}$

Using the  $\text{SRC}_{\text{eco, aquatic}}$  of  $14.3 \text{ mg.L}^{-1}$ , an  $\text{SRC}_{\text{eco, soil}}$  of  $36.1 \text{ mg.kg}_{\text{dwt}}^{-1}$  for TGD standard soil can be calculated. This equals an  $\text{SRC}_{\text{eco, soil}}$  of  $106 \text{ mg.kg}_{\text{dwt}}^{-1}$  for Dutch standard soil.

## 4 Derivation of environmental risk limits for N,N-dimethyl dodecylamine

### 4.1 Substance identification, physico-chemical properties, fate and human toxicology

#### 4.1.1 Identity

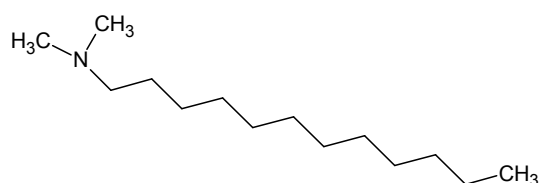


Figure 3. Structural formula of N,N-dimethyl dodecylamine.

Table 8. Identification of N,N-dimethyl dodecylamine.

Parameter	Name or number
Chemical name	N,N-dimethyl dodecylamine
Common/trivial/other name	Dodecyldimethylamine, Lauryldimethylamine, DDAO
CAS number	112-18-5
EC number	203-943-8
Molecular formula:	C <sub>14</sub> H <sub>31</sub> N

#### 4.1.2 Physico-chemical properties

Table 9. Physico-chemical properties of N,N-dimethyl dodecylamine.

Parameter	Unit	Value	Remark	Source
Molecular weight	[g.mol <sup>-1</sup> ]	213.41		
Water solubility	[mg.L <sup>-1</sup> ]	0.125-16.7	Read across	ECHA (2011)
log K <sub>OW</sub>	[-]	8.5	QSAR calculation	ECHA (2011)
		<b>10</b>	experimental EEC A.6	(OECD, 2001)
		>6.91	Read across	ECHA (2011)
		2.4	Read across	ECHA (2011)
		3.3	QSAR calculation	ECHA (2011)
		5.5	Calculated	ECHA (2011)
K <sub>OC</sub>	[L.kg <sup>-1</sup> ]	5.47	Calculated	(OECD, 2001)
		<b>11400</b>	QSAR nonhydrophobics	Van Vlaardingen and Verbruggen (2007)
				(OECD, 2001)
Vapour pressure	[Pa]	1.2	20°C, extrapolated from exp. values for higher temperatures	(OECD, 2001)
Melting point	[°C]	-11		ECHA (2011)
Boiling point	[°C]	237		ECHA (2011)
Henry's law constant	[Pa.m <sup>3</sup> .mol <sup>-1</sup> ]	25.6	calculated	Van Vlaardingen and Verbruggen (2007)

In case of multiple values, values in **bold** are used in the derivation of the MPC and SRC

The compound is ready biodegradable.

#### 4.1.3 *Bioconcentration and biomagnification*

No experimental information on bioconcentration and biomagnification is available. The estimated log Kow of 5.84 L/kg indicates a potential for both.

#### 4.1.4 *Human toxicological threshold limits and carcinogenicity*

The substance is not classified as a carcinogen. The risk phrases are N; C; R22; R34; R50 (ESIS, 2011).

No oral DNEL is derived in the REACH dossier (ECHA, 2011). The NOAEL for reproduction and repeated-dose toxicity is 50 mg.kg<sub>bw</sub><sup>-1</sup>.day<sup>-1</sup>.

## 4.2 **Secondary poisoning**

Since the log Kow is  $\geq 3$ , the risk of toxicity of N,N-dimethyl dodecylamine through secondary poisoning is considered relevant.

## 4.3 **Toxicity data and derivation of ERLs for water**

Sufficient soil toxicity data are available for derivation of the MPC<sub>eco, soil</sub>. However, aquatic toxicity data have been collected to allow for a comparison of ERLs derived via equilibrium partitioning.

Table 10. N,N-dimethyl dodecylamine: selected freshwater toxicity data for ERL derivation.

<b>Chronic Taxonomic group</b>	<b>NOEC/EC<sub>10</sub> (mg.L<sup>-1</sup>)</b>	<b>Acute Taxonomic group</b>	<b>L(E)C<sub>50</sub> (mg.L<sup>-1</sup>)</b>
<b>Algae</b>		<b>Algae</b>	
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	0.020	<i>Scenedesmus subspicatus</i>	0.042 <sup>a</sup>
<b>Crustacea</b>		<b>Crustacea</b>	
<i>Brachionus calyciflorus</i>	0.095	<i>Daphnia magna</i>	0.083
<i>Daphnia magna</i>	0.036	<b>Pisces</b>	
		<i>Danio rerio</i>	0.79
		<i>Oncorhynchus mykiss</i>	0.57

<sup>a</sup> Geometric mean of 0.014, 0.092 and 0.056 mg.L<sup>-1</sup>.

#### 4.3.1 *Derivation of MPC<sub>eco, water</sub>*

Acute toxicity data are available for algae, crustaceans and fish. This means the base set is available. Chronic toxicity data are available for algae and crustaceans. Because NOEC or EC10 values for algae and *Daphnia* are available, an assessment factor of 50 can be used on the lowest chronic value (0.020 mg.L<sup>-1</sup> for *Scenedesmus subspicatus*). This results in an MPC<sub>eco, water</sub> of 0.020 / 50 = 0.00040 mg.L<sup>-1</sup> = 0.40 µg.L<sup>-1</sup>.

In the OECD SIDS a similar PNEC has been derived (OECD, 2001).

#### 4.3.2 Derivation of $SRC_{eco, aquatic}$

The geometric mean value of all acute data is  $0.20 \text{ mg.L}^{-1}$  and for all chronic data  $0.041 \text{ mg.L}^{-1}$ . No chronic data for fish are present and the geometric mean for chronic data is higher than the geometric mean of acute data divided by 10. Thus the  $SRC_{eco, aquatic}$  is  $0.20 / 10 = 0.020 \text{ mg.L}^{-1}$ .

#### 4.4 Toxicity data and derivation of ERLs for soil

An overview of the selected soil toxicity data for N,N-dimethyl dodecylamine is given in Table 11.

Table 11. N,N-dimethyl dodecylamine: selected soil toxicity data for ERL derivation. Toxicity data are already recalculated into Dutch standard soil.

Chronic Taxonomic group	NOEC/EC10 ( $\text{mg.kg}_{dwt}^{-1}$ )	Acute Taxonomic group	L(E)C50 ( $\text{mg.kg}_{dwt}^{-1}$ )
<b>Macrophyta</b>		<b>Macrophyta</b>	
<i>Avena sativa</i>	1426 <sup>a</sup>	<i>Avena sativa</i>	3119 <sup>a</sup>
<i>Brassica napus</i>	98 <sup>a</sup>	<i>Brassica napus</i>	535 <sup>b</sup>
<i>Trifolium pratense</i>	192 <sup>c</sup>	<i>Trifolium pratense</i>	709 <sup>b</sup>
		<b>Annelida</b>	
		<i>Eisenia fetida</i>	> 1000

<sup>a</sup> Most sensitive endpoint: fresh weight

<sup>b</sup> Most sensitive endpoint: shoot height

<sup>c</sup> Most sensitive endpoint: emergence

#### 4.4.1 Derivation of the $MPC_{eco, soil}$

Toxicity data are available for a primary producer and a decomposer. Although the endpoint for the earthworm is an unbound value and cannot be used for derivation of an ERL, it indicates that ERLs based on data for terrestrial plant are likely to be sufficiently protective for earthworms. Therefore, the dataset can be considered to contain both terrestrial plants and annelids. The  $MPC_{eco, soil}$  is derived by dividing the NOEC for *Brassica napus* by an assessment factor of 100 and becomes  $98 / 100 = 0.98 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$ . This value is based on the characteristics of Dutch standard soil with 10% OM.

In the OECD SIDS (OECD, 2001), a  $PNEC_{soil}$  is derived of  $120 \text{ } \mu\text{g.kg}_{dwt}^{-1}$ . The difference is caused by the fact that in the OECD-SIDS the  $PNEC$  is not normalised to 10% OM and the  $PNEC$  is based on an EC50 value rather than an EC10 value.

##### Derivation through equilibrium partitioning

Derivation of an  $MPC_{eco, soil}$  from the  $MPC_{eco, water}$  through equilibrium partitioning is deemed not necessary because the dataset contains data for a producer and a decomposer. However, for comparison the  $MPC_{eco, soil}$  is also calculated from the  $MPC_{eco, water}$  of  $0.40 \text{ } \mu\text{g.L}^{-1}$  using equilibrium partitioning. In this calculation a  $K_{oc}$  of  $11400 \text{ L.kg}^{-1}$  and a Henry coefficient of  $25.6 \text{ Pa.m}^3.\text{mol}^{-1}$  have been used. The  $MPC_{eco, soil}$  calculated is  $0.09 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  for TGD standard soil can be calculated. This equals an  $MPC_{eco, soil}$  of  $0.27 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  for Dutch standard soil.

##### Selection of the $MPC_{eco, soil}$

The  $MPC_{eco, soil}$  calculated through equilibrium partitioning is lower than the  $MPC_{eco, soil}$  based on soil toxicity data. However, the use of equilibrium partitioning is not preferable for substances with surface active properties, because their behaviour cannot be fully



described by the parameters used. Furthermore, the Koc and Henry constant used are both calculated values with also reduces the reliability of the  $MPC_{eco, soil}$  derived through equilibrium partitioning. Considering these facts and the fact that equilibrium partitioning is not required because there is enough data which all is also considered reliable in the OECD-SIDS, the use of the  $MPC_{eco, soil}$  based on soil toxicity data is preferred. Therefore, the  $MPC_{eco, soil}$  is  $0.98 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$ . It should be noted that this value might not be protecting for effects on birds and mammals through secondary poisoning. However, this aspect is not taken into account in the present methodology for derivation of intervention values.

#### 4.4.2 *Derivation of $SRC_{eco, soil}$*

The geometric mean value of all acute data is  $1058 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  and of all chronic data  $299 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$ . There are more than two NOECs available, but these are not from different trophic levels. The geometric mean for all acute data divided by 10 is lower than the geometric mean of all chronic data. Thus, the  $SRC_{eco, soil}$  becomes the geometric mean of all acute data divided by 10, resulting in an  $SRC_{eco, soil}$  of  $1058 / 10 = 106 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$ .

Calculation of the  $SRC_{eco, soil}$  through equilibrium partitioning from the  $SRC_{eco, aquatic}$  would result in an  $MPC_{eco, soil}$  of  $13 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  for Dutch standard soil. Given the arguments above, this value is not selected as the final  $SRC_{eco, soil}$ .

The  $SRC_{eco, soil}$  is  $106 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$ .

## 5 Derivation of environmental risk limits for Dimethylformamide

### 5.1 Substance identification, physico-chemical properties, fate and human toxicology

#### 5.1.1 Identity

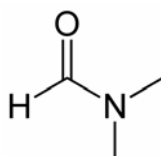


Figure 4. Structural formula of dimethylformamide.

Table 12. Identification of dimethylformamide.

Parameter	Name or number
Chemical name	N,N-dimethylformamide
Common/trivial/other name	Dimethylformamide, DMF
CAS number	68-12-2
EC number	200-679-5
Molecular formula:	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO

#### 5.1.2 Physico-chemical properties

Table 13. Physico-chemical properties of dimethylformamide.

Parameter	Unit	Value	Remark	Source
Molecular weight	[g.mol <sup>-1</sup> ]	73.09		ECHA (2011)
Water solubility	[g.L <sup>-1</sup> ]	1000	Completely miscible	ECHA (2011)
log K <sub>ow</sub>	[-]	-1.01	Calculated, experimental	ECHA (2011)
		-0.85	Experimental	(ECHA, 2011; OECD, 2003)
		-0.89	Handbook value	ECHA (2011)
		-1.04	Calculated ClogP	Biobyte (2006)
		<b>-1.01</b>	Experimental MlogP	Biobyte (2006)
		-0.93	Calculated EPIWIN	US EPA (2009)
K <sub>oc</sub>	[L.kg <sup>-1</sup> ]	<10; 2.4	Calculated	ECHA (2011)
		<b>3.1</b>	QSAR nonhydrophobics	Van Vlaardingen and Verbruggen (2007)
Vapour pressure	[hPa]	3.5-3.77		ECHA (2011)
		<b>3.5</b>		(OECD, 2003)
Melting point	[°C]	-60.5 – - 61.4	WoE	ECHA (2011)
Boiling point	[°C]	152-153	WoE	ECHA (2011)
Henry's law constant	[Pa.m <sup>3</sup> .mol <sup>-1</sup> ]	0.377	Calculated	ECHA (2011)
		<b>0.0075</b>	Calculated from experimental air- water equilibrium	(OECD, 2003)

Parameter	Unit	Value	Remark	Source
			constant (log Keq = - 5.52)	

In case of multiple values, values in **bold** are used in the derivation of the MPC and SRC

The compound is ready biodegradable. **OECD 302**

#### 5.1.3 *Bioconcentration and biomagnification*

A BCF of 0.3-1.2 L.kg<sup>-1</sup> in carp (*Cyprinus carpio*) with a lipid content of 2 to 6% is reported by NITE and used by OECD (2003).

#### 5.1.4 *Human toxicological threshold limits and carcinogenicity*

The substance is not classified as a carcinogen. The risk phrases are T; R20/21; R36; R61 (ESIS, 2011).

No oral DNEL is derived in the REACH dossier (ECHA, 2011). The dermal DN(M)EL for long-term exposure is 3.31 mg.kg<sub>bw</sub><sup>-1</sup>.day<sup>-1</sup>.

## 5.2 **Secondary poisoning**

Since the log Kow is < 3, the risk of, toxicity of dimethylformamide through secondary poisoning is considered not relevant.

## 5.3 **Toxicity data and derivation of ERLs for water**

An overview of the selected freshwater toxicity data for dimethylformamide is given in Table 14 and marine toxicity data are shown in Table 15. Unbound values (> or ≥ - values) are not used in risk limit derivation, but are presented in case no other data are available to demonstrate that a particular taxon or species has been studied.

Table 14. dimethylformamide: selected freshwater toxicity data for ERL derivation.

<b>Chronic Taxonomic group</b>	<b>NOEC/EC<sub>10</sub> (mg.L<sup>-1</sup>)</b>	<b>Acute Taxonomic group</b>	<b>L(E)C<sub>50</sub> (mg.L<sup>-1</sup>)</b>
<b>Algae</b>		<b>Protozoa</b>	
<i>Chlorella vulgaris</i>	1900	<i>Paramecium caudatum</i>	20500
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	2845	<i>Spirostomum ambiguum</i>	8186 <sup>a</sup>
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	≥ 1000	<b>Algae</b>	
		<i>Chlorella protothecoides</i>	<b>4200<sup>b</sup></b>
		<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	5600 <sup>b</sup>
		<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	5420
<b>Crustacea</b>		<b>Crustacea</b>	
<i>Daphnia magna</i>	1140 <sup>i</sup>	<i>Daphnia magna</i>	4500 <sup>d</sup>
		<b>Insecta</b>	
		<i>Paratanytarsus parthenogeneticus</i>	36200
		<b>Mollusca</b>	
		<i>Alexa hypnorum</i>	> 3680
<b>Pisces</b>		<b>Pisces</b>	
<i>Danio rerio</i>	2387 <sup>j</sup>	<i>Carassius auratus</i>	> 3680
<i>Pimephales promelas</i>	<b>5</b>	<i>Cyprinus carpio</i>	> 1000
<i>Salvalinus fontinalis</i>	43	<i>Ictalurus punctatus</i>	> 3680
		<i>Lepomis macrochirus</i>	6300 <sup>e</sup>
		<i>Oncorhynchus mykiss</i>	10523 <sup>f</sup>
		<i>Oryzias latipes</i>	> 10000 <sup>g</sup>
		<i>Pimephales promelas</i>	7030 <sup>h</sup>
<b>Amphibia</b>			
<i>Xenopus laevis</i>	≥ 44		

<sup>a</sup> 24 h test duration, most sensitive endpoint (deformations)

<sup>b</sup> Exposure duration 120 h

<sup>c</sup> Endpoint chlorophyll a content

<sup>d</sup> Most sensitive life stage (< 6 h)

<sup>e</sup> Exposure duration 7 days

<sup>f</sup> Geometric mean of 9800 and 11300 mg.L<sup>-1</sup>

<sup>g</sup> LC50 at relevant temperature (20 °C)

<sup>h</sup> Exposure duration 7 days under flow-through conditions

<sup>i</sup> Most sensitive endpoint and test duration, 28 d NOEC survival and reproduction

<sup>j</sup> Geometric mean of 1096 and 5200 mg.L<sup>-1</sup>

Table 15. dimethylformamide: selected marine toxicity data for ERL derivation.

<b>Chronic Taxonomic group</b>	<b>NOEC/EC<sub>10</sub> (mg.L<sup>-1</sup>)</b>	<b>Acute Taxonomic group</b>	<b>L(E)C<sub>50</sub> (mg.L<sup>-1</sup>)</b>
<b>Algae</b>		<b>Bacteria</b>	
<i>Teraselmis tetrathele</i>	5300	<i>Vibrio fischeri</i>	16207 <sup>a</sup>
<i>Dunaliella tetriolecta</i>	9100	<b>Algae</b>	
<i>Isochrysis galbana</i>	1300	<i>Teraselmis tetrathele</i>	12960
<i>Pavlova lutheri</i>	830	<i>Dunaliella tetriolecta</i>	14191
<i>Chaetoceros calcitrans</i>	10000	<i>Isochrysis galbana</i>	6725
<i>Skeletonema costatum</i>	5300	<i>Pavlova lutheri</i>	4541
<i>Prorocentrum minimum</i>	6600	<i>Chaetoceros calcitrans</i>	13951
<i>Eutreptiella sp.</i>	<b>470</b>	<i>Skeletonema costatum</i>	11896
<i>Heterosigma akashiwo</i>	1700	<i>Prorocentrum minimum</i>	12095
		<i>Eutreptiella sp.</i>	<b>3534</b>
		<i>Heterosigma akashiwo</i>	6504

<sup>a</sup>Geometric mean of 17500, 12900, 12300, 20133 and 20000 mg.L<sup>-1</sup>.

### 5.3.1 Treatment of fresh- and saltwater toxicity data

In principle, salt- and freshwater toxicity data can be combined unless there is reason not to do so. In this case, the data can be combined.

### 5.3.2 Derivation of MPC<sub>eco, water</sub>

Because of the R61 classification, an MPC for human consumption of fishery products should also be determined to derive a final MPC<sub>water</sub> for all protection goals. However, in this report only values for direct ecotoxicity are derived since the ERLs for water as derived in this report will only be used to calculate risk limits for soil.

Acute toxicity data are available for bacteria, protozoa, algae, crustaceans, insects and fish, and thus the base set is complete. Chronic toxicity data are available for algae, crustaceans, fish and amphibia.

The lowest valid chronic value is 5 mg.L<sup>-1</sup> for the fish *Pimephales promelas*. The MPC<sub>eco, water</sub> is derived using this value with an assessment factor of 10 and becomes 5 / 10 = 0.5 mg.L<sup>-1</sup>.

In the REACH dossier (ECHA, 2011), a PNEC of 30 mg.L<sup>-1</sup> is derived. The derivation of the PNEC in the REACH dossier is not specified, but it seems that the lowest values as given in Table 14, were not used for PNEC derivation in the REACH dossier. In the OECD SIDS a PNEC<sub>aqua</sub> of 22.8 mg.L<sup>-1</sup> was derived. In this case it seems that the original reference of Cardwell et al. 1978 was not evaluated itself and this data was therefore not included in the PNEC derivation.

### 5.3.3 Derivation of SRC<sub>eco, aquatic</sub>

The geometric mean value of all acute data is 8.74 x 10<sup>3</sup> mg.L<sup>-1</sup> and for all chronic data 1.29 x 10<sup>3</sup> mg.L<sup>-1</sup>.

Because chronic values for three trophic levels are available, the SRC<sub>eco, aquatic</sub> is the geometric mean of all chronic data. Thus, the SRC<sub>eco, aquatic</sub> is 1.29 x 10<sup>3</sup> mg.L<sup>-1</sup>. It should be noted that this values is highly influence by the large number of data for algae which are relatively insensitive for dimethylformamide compared to fish.

## 5.4 Toxicity data and derivation of ERLs for soil

No soil studies were reported in the REACH dossier (ECHA, 2011) and no relevant soil studies were found in public literature. Because of this, the  $MPC_{eco, soil}$  and  $SRC_{eco, soil}$  need to be calculated using the equilibrium partitioning equations as described in paragraph 2.2.

### 5.4.1 Derivation of $MPC_{eco, soil}$

Using the  $MPC_{eco, water}$  of  $0.5 \text{ mg.L}^{-1}$ , an  $MPC_{eco, soil}$  of  $0.098 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  for TGD standard soil can be calculated. This equals an  $MPC_{eco, soil}$  of  $0.287 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  for Dutch standard soil.

In the REACH dossier, a PNEC soil of  $16.235 \text{ mg/kg}_{dwt}$  is derived (ECHA, 2011). The difference is mainly caused by the difference PNEC for water derived in the REACH dossier. In the OECD-SIDS no PNEC for soil was derived because of the absence of ecotoxicological data for soil. Equilibrium partitioning was not applied.

### 5.4.2 Derivation of $SRC_{eco, soil}$

Using the  $SRC_{eco, aquatic}$  of  $1.29 \times 10^3 \text{ mg.L}^{-1}$ , an  $SRC_{eco, soil}$  of  $252 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  for TGD standard soil can be calculated. This equals an  $MPC_{eco, soil}$  of  $742 \text{ mg.kg}_{dwt}^{-1}$  for Dutch standard soil.

## References

### References used in the main text

- Biobyte. 2006. Bio-Loom for Windows (computer program). Version 1.5. Claremont, USA, Biobyte Corp.
- Cardwell RD, Foreman DG, Payne TR, Wilbur DJ. 1978. Acute and chronic toxicity of four organic chemicals to fish. Duluth, USA: United States Environmental Protection Agency. Report no. EPA-600/02 Contract 68-01-0711.
- ECHA. 2011. REACH dossiers. obtained through:  
[http://echa.europa.eu/chem\\_data\\_en.asp](http://echa.europa.eu/chem_data_en.asp).
- European Commission (Joint Research Centre). 2003. Technical Guidance Document in support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for new notified substances, Commission Regulation (EC) No 1488/94 on Risk Assessment for existing substances and Directive 98/9/EC of the European Parliament and of the Council concerning the placing of biocidal products on the market. Part II. Ispra, Italy: European Chemicals Bureau, Institute for Health and Consumer Protection. Report no. EUR 20418 EN/2.
- European Commission (Joint Research Centre). 2011. ESIS: European chemical Substances Information System. European Commission - Joint Research Centre.
- Lepper P. 2005. Manual on the methodological framework to derive environmental quality standards for priority substances in accordance with article 16 of the Water Framework Directive (2000/60/EC). Schmallenberg, Germany: Fraunhofer-Institute Molecular Biology and Applied Biology.
- OECD. 2001. Initial assessment profile N,N-dimethyldodecylamine for SIAM 11 Orlando, United States, 23-26 January 2001.  
<http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/OECD/SIDS/112185.pdf>.
- OECD. 2003. Initial assessment profile dimethylpormamide for SIAM 13 Bern, Switzerland, 6-9 November 2001. Last update 2003.  
<http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/OECD/SIDS/DIMETHYLFORM.pdf>.
- US EPA. 2009. EPI Suite (computer program). Version 4.0. Washington, DC, U.S. Environmental Protection Agency (EPA) Office of Pollution Prevention Toxics and Syracuse Research Company (SRC).
- Van Vlaardingen PLA, Verbruggen EMJ. 2007. Guidance for the derivation of environmental risk limits within the framework of "International and national environmental quality standards for substances in the Netherlands" (INS). Bilthoven, The Netherlands: RIVM. Report no. Report no: 601782001.

### References used in the toxicity data tables (see excel files)

- Adams WJ, Heidolph BB. 1985. Shot-cut chronic toxicity estimates using *Daphnia magna*. In: Cardwell RD, Purdy R, Bahner RC (Eds.) Aquatic Toxicology and Hazard Assessment: Seventh Symposium, ASTM STP 854. Philadelphia.
- Bachmann J. 2002. Entwicklung und Erprobung eines Teratogenitäts-Screening Testes mit Embryonen des Zebrafischlings *Danio rerio*. Fakultät für Forst-, Geo- und Hydrowissenschaften. Dresden, Technische Universität Dresden.
- Barera Y, Adams WJ. 1983. Resolving some practical questions about *Daphnia* acute toxicity tests. In: Bishop WE, Cardwell, R.D., Heidolph, B.B. (Ed.) Aquatic toxicology and hazard assessment: sixth symposium, ASTM STP 802.
- Berard A. 1996. Effect of organic four solvents on natural phytoplankton assemblages: consequences for ecotoxicological experiments on herbicides. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 57: 183-190.

- Bringmann G, Kühn R. 1977. Befunde der Schadwirkung wassergefährdender Stoffe gegen *Daphnia magna*. Zeitschrift für Wasser-Abwasser-Forschung. 10: 161-166.
- Bringmann G, Kühn R. 1978. Testing of substances for their toxicity threshold: model organisms *Microcystis (diplocystis) aeruginosa* and *Scenedesmus quadricauda*. Mitteilungen der Internationalen Vereinigung der Limnologie. 21: 275-284.
- Bringmann G, Kühn R. 1982. Ergebnisse der Schadwirkung wassergefährdender Stoffe gegen *Daphnia magna* in einem weiterentwickelten standardisierten Testverfahren. Zeitschrift für Wasser-Abwasser-Forschung. 15: 1-6.
- Brodeur JC, Woodburn KB, Klecka GM. 2005. Potentiation of the vitellogenic response to 17 $\alpha$ -ethynylestradiol by cortisol in the fathead minnow *Pimephales promelas*. Environmental toxicology and chemistry. 24: 1125-1132.
- Call DJ, Brooke LT, Ahmad N, Richter JE. 1983. Toxicity and metabolism studies with EPA priority pollutants and related chemicals in freshwater organisms. Superior, USA: University of Wisconsin-Superior.
- Cardwell RD, Foreman DG, Payne TR, Wilbur DJ. 1978. Acute and chronic toxicity of four organic chemicals to fish. Duluth, USA: United States Environmental Protection Agency. Report no. EPA-600/02 Contract 68-01-0711.
- Cook SM, Aker WG, Rasulev BF, Hwang HM, Leszczynski J, Jenkins JJ, Shockley V. 2010. Coosing safe dispersing media for C<sub>60</sub> fullerenes by using cytotoxicity tests on the bacterium *Escherichia coli*. Journal of hazardous materials. 176: 367-373.
- Curtis C, Lima A, Lozano SJ, Veith GD. 1982. Evaluation of a bacterial bioluminescence bioassay as a method for predicting acute toxicity of organic chemicals to fish. ASTM STP 766. Amer. Soc. Testing and Materials. 170-178.
- Dave G, Blanck H, Gustafson K. 1979. Biological effects of solvent extraction chemicals on aquatic organisms. J. Chem. Tech. Biotechnol. 29: 249-257.
- Dave G, Lidman U. 1978. Biological and toxicological effects of solvent extraction chemicals. Range finding acute toxicity in the rainbow trout (*Salmo gairdnerii* Rich.) and in the rat (*Rattus norvegicus* L.). Hydrometallurgy. 3: 201-216.
- Dawson DA. 1991. Additive incidence of developmental malformation for *Xenopus* embryos exposed to a mixture of ten aliphatic carboxylic acids. Teratology. 44: 531-546.
- Dawson DA, Schultz TW, Hunter RS. 1996. Developmental toxicity of carboxylic acids to *Xenopus* embryos: a quantitative structure-activity relationship and computer-automated structure evaluation. Teratogenesis, carcinogenesis, and mutagenesis. 16: 109-124.
- Devillers J, Chambon P, Zakarya D. 1987. A predictive structure-toxicity model with *Daphnia magna*. Chemosphere. 6: 1149-1163.
- El Jay A. 1996. Toxic effects of organic solvents on the growth of *Chlorella vulgaris* and *Selenastrum capricornutum*. Bull. Environ. Contam. Toxicol.: 191-198.
- Environment Canada. 2001. Priority substances list assessment report - N,N-dimethylformamide. Quebec, Canada: Environment Canada.
- Geiger DL, Northcott CE, Call DJ, Brooke LT. 1985. Acute toxicities of organic chemicals to fathead minnows (*Pimephales promelas*) Volume II, Superior, Wisconsin, USA, Center for Lake Superior Environmental Studies, University of Wisconsin-Superior.
- Groth G, Kronauer K, Freundt KJ. 1994. Effects of N,N-dimethylformamide and its degradation products in zebrafish embryos. 401-406.
- Hashimoto Y, Makita T, Ohnuma N, Noguchi T. 1972. Acute toxicity on dimethyl 4,4'-o-phenylene bis(3-thioallophanate), thiophanate-methyl fungicide. Toxicology and applied pharmacology. 22: 606-615.
- Hawkins WE, Fournie JW, Overstreet RM, Walker WW. 1988. Rhabdomyosarcoma in the Japanese medaka, *Oryzias latipes* (Temminck & Schlegel) and guppy, *Poecilia reticulata* Peters. Journal of fish diseases. 11: 259-266.



- Hughes JS, Vilkas AG. 1983. Toxicity of N,N-dimethylformamide used as a solvent in toxicity test with the green alga, *Selenastrum capricornutum*. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 31: 98-104.
- Jennings VLK, Rayner-Brandes MH, Bird DJ. 2001. Assessing chemical toxicity with the bioluminescent photobacterium (*Vibrio fischeri*): a comparison of three commercial systems. Wat. Res. 35: 3448-3456.
- Kaiser KLE, Palabrica VS. 1991. *Photobacterium phosphoreum* toxicity data index. Water Poll. Res. J. Canada. 26: 361-431.
- Krebs F. 1991. Bestimmung der biologischen Schadwirkung wassergefährdender Stoffe im Assimilations-Zehrungs-Test (A-Z-Test). Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen. 35: 161-170.
- Lammer E, Carr GJ, Wendler K, Rawlings JM, Belanger SE, Braunbeck T. 2009. Is the fish embryo toxicity test (FET) with the zebrafish (*Danio rerio*) a potential alternative for the fish acute toxicity test. Comparative biochemistry and physiology, Part C. 149: 196-209.
- LeBlanc GA, Surprenant DC. 1983. The acute and chronic toxicity of acetone, dimethyl formamide, and triethylene glycol to *Daphnia magna* (Straus). Arch. Environm. Contam. Toxicol. 12: 305-310.
- Ma J, Chen J. 2005. How to accurately assay the algal toxicity of pesticides with low water solubility. Environmental pollution. 136: 267-273.
- Mayer FLJ, Eilersieck MR. 1986. Manual of acute toxicity: interpretation and data base for 410 chemicals and 66 species of freshwater animals. Resource Publication 160, Washington, D.C., USA, United States Department of the Interior. Fish and Wildlife Service.
- Nalecz-Jawecki G, Sawicki J. 1999. Spirotox - A new tool for testing the toxicity of volatile compounds. Chemosphere. 38: 3211-3218.
- NITE. 2011. Chemical Risk Information Platform National Institute of Technology and Evaluation.
- OECD. 2001. Initial assessment profile N,N-dimethyldodecylamine for SIAM 11 Orlando, United States, 23-26 January 2001.  
<http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/OECD/SIDS/112185.pdf>.
- OECD. 2003. Initial assessment profile dimethylformamide for SIAM 13 Bern, Switzerland, 6-9 November 2001. Last update 2003.  
<http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/OECD/SIDS/DIMETHYLFORM.pdf>.
- Okumura Y, Koyama J, Takaku H, Satoh H. 2001. Influence of organic solvents on the growth of marine microalgae. Arch. Environm. Contam. Toxicol. 41: 123-128.
- Ortiz-Zarratoya M, Trant JM, Cajaraville MP. 2006. Effects of dibutylphthalate and ethynylestradiol on liver peroxisomes, reproduction, and development of zebrafish (*Danio rerio*). Environmental toxicology and chemistry. 25: 2394-2404.
- Phipps GL, Holcombe GW. 1985. A method for aquatic multiple species toxicant testing: Acute toxicity of 10 chemicals to 5 vertebrates and 2 invertebrates. Environ. Pollut. Ser. A, 38, 141-157.
- Poirier SH, Knuth ML, Anderson-Buchou CD, Brooke LT, Lima AR, Shubat PJ. 1986. Comparative toxicity of methanol and N,N-dimethylformamide to freshwater fish and invertebrates. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 37, 615-621.
- Portmann JE, Wilson KW. 1971. The toxicity of 140 substances to the brown shrimp and other marine animals. Shellfish information Leaflet. Ministry of Agriculture, Fisheries and Food.
- Price KS, Waggy GT, Conway RA. 1974. Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petrochemicals. J. Water Pollut. Control Fed., 46, 1, 63-77.
- Rahman SM, Majhi SK, Suzuki T, Matsukawa S, Strussmann CA, Takai R. 2008. Suitability of cryoprotectants and impregnation protocols for embryos of Japanese whiting *Sillago japonica*. Cryobiology. 57: 170-174.

- Rajini PS, Krishnakumari MK, Majumder SK. 1989. Cytotoxicity of certain organic solvents and organophosphorus insecticides to the ciliated protozoan *Paramecium caudatum*. *Microbios*. 59: 157-163.
- Schmid T, Gonzalez-Valerao J, Ruffli H, Dietrich DR. 2002. Determination of vitellogenin kinetics in male fathead minnows (*Pimephales promelas*). *Toxicology letters*. 131: 65-74.
- Schultz TW, Tichy M. 1993. Structure-toxicity relationships for unsaturated alcohols to *Tetrahymena pyriformis*: C<sub>5</sub> and C<sub>6</sub> analogs and primary propargylic alcohols. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 51.
- Schuytema GS, Nebeker AV, Griffis WL, Wilson KN. 1991. Teratogenesis, toxicity, and bioconcentration in frogs exposed to dieldrin. *Archives of Environmental Contamination and Toxicology*. 21: 332-350.
- Shubat PJ, Poirier SH, Knuth ML, Brooke LT. 1982. Acute toxicity of tetrachloroethylene and tetrachloroethylene with dimethylformamide to rainbow trout (*Salmo gairdneri*). *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 28, 7-10.
- Stratton GW. 1987. Toxic effects of organic solvents on the growth of blue-green algae. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.*; 38, 1012-1019.
- Stratton GW, Smith TM. 1988. Interaction of organic solvents with the green alga *Chlorella pyrenoidosa*. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 40, 736-742.
- Streufert JM, Jones JR. 1980. Toxicity and biological effects of phthalate esters on midgest (*Chironomus plumosus*). *Biological Sciences*. 33-40.
- Tonogai Y, Ogawa S, Ito Y, Iwaida M. 1982. Actual survey on TLM (median tolerance limit) values of environmental pollutants, especially on amines, nitriles, aromatic nitrogen compounds and artificial dyes. *J. Toxicol. Sci.* 7, 193-203.
- Tsuji S, Tonogai Y, Ito Y, Kanoh S. 1986. The influence of rearing temperatures on the toxicity of various environmental pollutants for killifish (*Oryzias latipes*). *J. Hyg. Chem. (Eisei Kagaku)*. 32: 46-53.
- Versteeg DJ, Stanton DT, Pence MA, Cowan C. 1997. Effects of surfactants on the rotifer, *Brachionus calyciflorus*, in a chronic toxicity test and in the development of QSARs. *Environmental toxicology and chemistry*. 16: 1051-1058.
- Yan X, Guoxing S, Yu D. 2002. Effect of N,N-dimethyl formamide used as organic solvent on two species of green algae *Chlorella*. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 68: 592-599.
- Ziegenfuss PS, Renaudette WJ, Adams WJ. 1986. Methodology for assessing the acute toxicity of chemicals sorbed to sediments: Testing the equilibrium partitioning theory. IN Poston TM, Purdy R (Eds.) *Aquatic toxicology and environmental fate: Ninth volume*, ASTM STP 921. Philadelphia, American Society for Testing and Materials.

Dit is een uitgave van:

**Rijksinstituut voor Volksgezondheid  
en Milieu**

Postbus 1 | 3720 BA Bilthoven  
[www.rivm.nl](http://www.rivm.nl)