

RIVM rapport 711701039/2004

**Risicogrenzen voor MTBE (Methyl *tertiair*-
Butyl Ether) in bodem, sediment, grondwater,
oppervlaktewater, drinkwater en voor
drinkwaterbereiding**

F.A. Swartjes, A.J. Baars, R.H.L.J. Fleuren,
P.F. Otte

Dit onderzoek werd verricht in opdracht en ten laste van Directoraat Generaal Milieubeheer (DGM), Directie Landelijke Milieukwaliteit en Verkeer (LMV).

Contact: Dr. F.A. Swartjes; RIVM/Laboratorium voor Ecologische Risicobeoordeling,
Postbus 3720 BA Bilthoven, telefoon: 030 - 274 91 11; email: fa.swartjes@rivm.nl

Rapport in het kort

Risicogrenzen voor MTBE (Methyl *tertiar*- Butyl Ether) in bodem, sediment, grondwater, oppervlaktewater, drinkwater en voor drinkwaterbereiding.

Recentelijk is politieke commotie ontstaan ten gevolge van de mogelijke schadelijke gezondheidseffecten van Methyl *tertiar*-Butyl Ether (MTBE). Dit was reden voor het ministerie van VROM om het RIVM te verzoeken risicogrenzen voor MTBE in bodem, sediment, grondwater, oppervlaktewater, drinkwater en ten behoeve van drinkwaterbereiding af te leiden. Bij de afleiding van deze risicogrenzen werd afgestemd met de “Risk Assessment Report” van de EU (EU-RAR) uit 2002. Vanwege gebrek aan terrestrische data en de dominantie van de relatief onzekere inhalatieve blootstellingsroute voor de mens is de betrouwbaarheid van de risicogrenzen in het algemeen “beperkt”.

Trefwoorden: MTBE, Methyl *tertiar*-Butyl Ether, bodemverontreiniging, streefwaarden, interventiewaarden

Abstract

Risk limits for MTBE (Methyl *tertiary*-Butyl Ether) in soil, sediment, groundwater, surface water, drinking water and for drinking water preparation

Recently, possible unacceptable harmful effects from Methyl *tertiary*-Butyl Ether (MTBE) to humans raised political consternation. For this reason the Dutch Ministry of Housing, Spatial Planning and the Environment (“VROM”) ordered the RIVM to derive solid risk limits for soil, sediment, groundwater, surface water, drinking water and for drinking water preparation. When deriving this risk limits co-ordination with “Risk Assessment Report” from the EU (EU-RAR) from 2002 took place. In general the accuracy of the risk limits is “restricted”, because of lack of data on terrestrial organisms and the dominance of the relatively uncertain inhalation exposure pathway to humans.

Keywords: MTBE, Methyl *tertiary*-Butyl Ether, soil contamination, Target Values, Intervention Values

Voorwoord

Aangezien er politieke commotie is ontstaan over het voorkomen en de risico's van MTBE heeft de opdrachtgever (het Directoraat Generaal Milieubeheer (DGM), Directie Landelijke Milieukwaliteit en Verkeer (LMV)) aangegeven te hechten aan een breed draagvlak voor de in deze rapportage afgeleide risicogrenzen. Om deze reden is een concept van deze rapportage aan een drietal gremia voorgelegd met het verzoek tot commentaar, te weten:

- De OZBG-humaan (OnderZoeksBegeleidingsGroep gericht op humane risico's). Deze groep bestaat uit deskundigen uit diverse geledingen (overheid, adviesbureaus, onderzoeksbureaus, industrie).
- De Wetenschappelijke Klankbordgroep INS (Internationale Normstelling) gericht op ecologische risico's. Deze groep bestaat eveneens uit deskundigen uit diverse geledingen (overheid, adviesbureaus, onderzoeksbureaus, industrie).
- De werkgroep BONS (BeleidsOndersteuningNormStelling). Deze werkgroep beweegt zich op het raakvlak tussen inhoud en beleidsimplementatie. In deze werkgroep zijn deelnemers van de diverse overheden vertegenwoordigd (Ministeries van VROM en LNV, InterProvinciaalOverleg, Vereniging Nederlandse Gemeenten, Unie van Waterschappen, RIZA, Alterra en RIVM).

In Bijlage 1 zijn de brieven met de adviesaanvragen weergegeven.

Het commentaar van de drie gremia is door de auteurs met dank aanvaard en verwerkt in de voorliggende eindrapportage.

Inhoud

SAMENVATTING	7
SUMMARY.....	9
1. INLEIDING.....	11
1.1 <i>Achtergrond.....</i>	<i>11</i>
1.2 <i>Doelstelling.....</i>	<i>11</i>
1.3 <i>Stofbeschrijving.....</i>	<i>12</i>
1.4 <i>Procedure afleiding voorstel voor herziene risicogrenzen.....</i>	<i>13</i>
2. VOORSTEL VOOR INTERVENTIEWAARDEN (1995)	14
2.1 <i>Selectie fysisch-chemische input parameters</i>	<i>14</i>
2.2 <i>Humaan-toxicologische risicogrens.....</i>	<i>14</i>
2.3 <i>Ecotoxicologische risicogrens</i>	<i>15</i>
2.4 <i>Uiteindelijke voorstellen</i>	<i>15</i>
3. SELECTIE FYSISCH-CHEMISCHE INPUT PARAMETERS.....	17
3.1 <i>Molecuulgewicht (M).....</i>	<i>17</i>
3.2 <i>Wateroplosbaarheid (S)</i>	<i>17</i>
3.3 <i>Dampdruk (Vp)</i>	<i>18</i>
3.4 <i>Henry constante</i>	<i>18</i>
3.5 <i>Octanol-water partiticoëfficiënt (Kow).....</i>	<i>18</i>
3.6 <i>Organisch koolstof genormaliseerde bodem-water partiticoëfficiënt (Koc).....</i>	<i>19</i>
3.7 <i>Permeatiecoëfficiënt PE-waterleiding.....</i>	<i>20</i>
3.8 <i>BioConcentratieFactor plantopname.....</i>	<i>20</i>
3.9 <i>Resumé</i>	<i>20</i>

4. AFLEIDING HERZIENE HUMAAN-TOXICOLOGISCHE RISICOGRENZEN .. 22

4.1	<i>Acceptabele blootstelling</i>	22
4.1.1	Introductie	22
4.1.2	Eerdere evaluaties	22
4.1.3	Resultaten.....	23
4.2	<i>Humaan-toxicologische risicogrens bodem</i>	23
4.2.1	Blootstellingsroutes.....	25
4.2.2	Onzekerheid	26
4.3	<i>Humaan-toxicologische risicogrens grondwater</i>	26
4.4	<i>Humaan-toxicologische risicogrens drinkwater en drinkwaterbereiding</i>	26
4.4.1	Drinkwaterbereiding	26
4.4.2	Drinkwater	27
4.5	<i>Resumé</i>	28

5. AFLEIDING HERZIENE ECOLOGISCHE RISICOGRENZEN 29

5.1	<i>Effectdata</i>	29
5.2	<i>Bepaling ecologische risicogrenzen</i>	33
5.2.1	Oppervlaktewater	33
5.2.2	Grondwater.....	34
5.2.3	Bodem/ sediment.....	35
5.2.4	Resumé.....	37

6. BETROUWBAARHEID EN INTEGRATIE RISICOGRENZEN 38

6.1	<i>Betrouwbaarheidsscores</i>	38
6.2	<i>Vergelijk met internationaal gehanteerde risicogrenzen</i>	39
6.3	<i>Integratie</i>	40

LITERATUUR 44

<i>Geraadpleegde databases, datasets en secundaire bronnen</i>	48
--	----

BIJLAGE 1 BRIEVEN MET DE ADVIESAANVRAAG..... 49

B1.1	<i>Adviesaanvraag werkgroep BONS</i>	49
B1.2	<i>Adviesaanvraag OnderzoeksBegeleidingsgroep humaan</i>	50
B1.3	<i>Adviesaanvraag wetenschappelijk klankbord INS</i>	51

BIJLAGE 2: GEVONDEN FYSISCH-CHEMISCHE DATA VOOR MTBE	52
BIJLAGE 3: BASISGEGEVENS VOOR ONDERBOUWING HUMAAN- TOXICOLOGISCHE CRITERIA	55
B3.1 Toxicology	55
B3.2 Evaluation	65
B3.3 Evaluations by other organisations	67
B3.4 Resume.....	68
<i>References as cited in the key references</i>	<i>68</i>
BIJLAGE 4: CSOIL OUTPUT	73
BIJLAGE 5: RESULTATEN PROBABILISTISCHE BEREKENINGEN	76

Samenvatting

Recentelijk is politieke commotie ontstaan over de schadelijke gezondheidseffecten van Methyl *tertiair*-Butyl Ether (MTBE), welke sinds 1984 in Nederland geproduceerd wordt en sinds 1988 op grote schaal wordt toegepast als benzine-additief. Dit was reden voor het Directoraat Generaal Milieubeheer (DGM), Directie Locale Milieukwaliteit en Verkeer (LMV) een project te starten, met als doel een aantal geconstateerde knelpunten rondom MTBE op te lossen. Eén van deze knelpunten is het ontbreken van degelijk inzicht in de risico's voor de volksgezondheid en het milieu en, hieraan gekoppeld, goed onderbouwde en formeel vastgestelde normen. Ter oplossing van dit knelpunt geldt de volgende doelstelling van het door het RIVM uitgevoerde onderzoek: *Het afleiden van goed onderbouwde risicogrenzen voor MTBE in bodem, sediment, grondwater, oppervlaktewater, drinkwater en voor drinkwaterbereiding.*

Bij de afleiding van deze risicogrenzen is aangesloten bij de in 2002 in het kader van de Europese Unie opgestelde "Risk Assessment Report" (EU-RAR) over MTBE.

De betrouwbaarheid van de berekende risicogrenzen voor bodem/ sediment zijn als "laag" en voor grond- en oppervlaktewater als "gemiddeld" aan te merken. In de volgende tabel zijn de humaan-toxicologische criteria (belangrijke parameters bij de afleiding van de risicogrenzen) en de voorgestelde risicogrenzen voor MTBE samengevat.

Humaan-toxicologische criteria

	Waarde	Eenheid
Max. Toelaatbaar Risico voor blootstelling (MTR _{humaan})	0,3	mg/kg _{BW} /dag
Toelaatbare Concentratie Lucht (TCL)	2,6	mg/m ³

Voortzetting tabel (*Voorgestelde risicogrenzen*): Z.O.Z.

Voorgestelde risicogrenzen

Compartment	Type risicogrens	Waarden			Eenheid
		Humaan	Eco	Risicogrens	
Bodem/ sediment	Voorstel voor streefwaarde ¹	-	0,024	0,024	mg/kg _{DW}
	Voorstel voor interventiewaarde ¹	221	43,6	44	mg/kg _{DW}

Oppervlaktewater	Voorstel voor streefwaarde ²	-	26	26³	µg/l
	Max. Toelaatbare Concentratie ²		2600	2600	µg/l
	Equivalent van interventiewaarde ²		47500	47500	µg/l
Grondwater	Voorstel voor streefwaarde	-	26	26³	µg/l
	Voorstel voor interventiewaarde	9420	47500	9400	µg/l
Drinkwater	Indicatoren-Signaleringswaarde voor drinkwater ⁴	1	-	1	µg/l
	Risicogrens voor drinkwaterbereiding, Geur ⁵	15	-	15	µg/l
	Risicogrens voor drinkwaterbereiding, Smaak ⁵	40	-	40	µg/l
	Risicogrens voor drinkwaterbereiding, Gezondheidsrisico's ⁵	9420	-	9400	µg/l

¹: Deze waarde is geldig voor een standaard bodem met een organisch stofgehalte (OSG) van 10%. Binnen de range van 2 en 30% organische stof dient deze risicogrens te worden gecorrigeerd door vermenigvuldiging met de factor: (werkelijke OSG / 10).

²: Deze waarde geldt zowel voor opgeloste concentratie als totaalconcentratie in oppervlaktewater

³: Beleidsmatig zou overwogen kunnen worden de geurdrempel, 15 µg/l, als voorstel voor de streefwaarde te hanteren

⁴: In geval van overschrijding van deze waarde in het drinkwater hoeft geen sprake te zijn van onacceptabele risico's voor de volksgezondheid, maar is nader onderzoek nodig (Waterleidingsbesluit)

⁵: Het hanteren van een risicogrens voor drinkwaterbereiding op basis van gezondheidsrisico's, smaak, of geur is een beleidsmatige keuze.

Summary

Recently, political consternation was raised due to possible unacceptable harmful effects to humans from Methyl *tertiary*-Butyl Ether (MTBE), which is produced and used as gasoline additive in the Netherlands on a broad scale since 1988. For this reason the Dutch Ministry of Housing, Spatial Planning and the Environment (“VROM”) initiated a project to tackle some MTBE related bottlenecks. Part of these bottlenecks was the limited understanding of the risks to human health and the environment and, as a consequence, the lack of well-founded and formalized quality standards. To solve this problem RIVM performed a research project with the following aim:

The derivation of well-founded risk limits for soil, sediment, groundwater, surface water, drinking water and for drinking water preparation.

When deriving this risk limits co-ordination with the “Risk Assessment Report” from the EU (EU-RAR) from 2002 took place.

The accuracy of the risk limits for soil is “low” and for groundwater and surface water “average”. In the following table the human toxicological criteria (important parameters for the derivation of the risk limits) and the proposed risk limits for MTBE have been summarised.

Human toxicological criteria

	Value	Dimension
Max. Permissible Risk for exposure (MPR _{human})	0.3	mg/kg _{BW} /day
Permissible Concentration Air (TCA)	2.6	mg/m ³

Continuation of table (*Proposed risk limits*): P.T.O.

Proposed risk limits

Compartment	Type risk limit	Values			Dimension
		Human	Eco	<u>Risk limit</u>	
Soil/ sediment	Proposal for Target Value ¹	-	0.024	0.024	mg/kg _{DW}
	Proposal for Intervention Value ¹	221	43.6	44	mg/kg _{DW}

Surface water	Proposal for Target Value ²	-	26	26³	µg/l
	Max. Permissible Concentration ²	-	2600	2600	µg/l
	Equivalent of Intervention Value ²		47500	47500	µg/l
Groundwater	Proposal for Target Value	-	26	26³	µg/l
	Proposal for Intervention Value	9420	47500	9400	µg/l
Drinking water	Indicator Signal Value for drinking water ⁴	1	-	1	µg/l
	Risk limit for drinking water preparation, Odour ⁵	15	-	15	µg/l
	Risk limit for drinking water preparation, Taste ⁵	40	-	40	µg/l
	Risk limit for drinking water preparation, Health risks ⁵	9420	-	9400	µg/l

¹: This value is valid for a standard soil with a organic matter content (OMC) of 10%. Within the range of 2 en 30% organic matter this risk limit should be multiplied by a factor of: (actual OMC / 10).

²: This value is valid for the concentration in solution and for the total concentration in surface water.

³: As a political decision the odour threshold, 15 µg/l, could be selected as equivalent of the Target Value

⁴: Exceeding of this value in drinking water does not automatically imply unacceptable human risks, but triggers the need for further investigation (Dutch Drinking Water Guideline; "Waterleidingsbesluit")

⁵: The selection of a risk limit for drinking water preparation based on human risks, taste or odour concerns a political decision.

1. Inleiding

1.1 Achtergrond

Sinds 1984 wordt Methyl *tertiar*-Butyl Ether (ook wel Methyl *tert*-Butyl Ether; MTBE) in Nederland geproduceerd en (sinds 1988 op grote schaal) toegevoegd aan benzine als antiklop middel. Met deze toepassing werd lood als antiklop middel in benzine vervangen, waarmee beoogd werd de milieubelasting met lood te verminderen.

In 1995 werden door het RIVM voorstellen voor interventiewaarden voor MTBE voor bodem en grondwater gerapporteerd (*Kreule et al., 1995*). Aangezien deze waarden een beperkte betrouwbaarheid hadden en streefwaarden voor MTBE ontbraken, werden deze voorstellen niet geformaliseerd tot interventiewaarden. Wel werden deze waarden tot zogenaamde “Indicatieve niveaus voor ernstige bodemverontreiniging” opgenomen in de circulaire streef- en interventiewaarden (*Min. van VROM, 2000*). Indicatieve niveaus voor ernstige bodemverontreiniging hebben een grotere mate van onzekerheid dan interventiewaarden. De status van de indicatieve niveaus is daarom niet gelijk aan de status van de interventiewaarden. Over- of onderschrijding van de indicatieve niveaus heeft derhalve niet direct de consequenties voor wat betreft het nemen van een beslissing over de ernst van de verontreiniging door het bevoegd gezag. Volgens de circulaire (*Min. van VROM, 2000*) dient het bevoegd gezag naast de indicatieve niveaus tevens andere overwegingen te betrekken bij de beslissing of er sprake is van ernstige bodemverontreiniging. Als voorbeelden voor aanvullende criteria worden genoemd: i) nagaan of er op basis van de aanwezigheid van andere stoffen sprake is van ernstige bodemverontreiniging en saneringsurgentie, ii) een ad hoc bepaling van actuele (locatie-specifieke) risico's en iii) het (laten) uitvoeren van aanvullend onderzoek naar de risico's van de stof.

In 2000 classificeerde de US-EPA (*United States-Environmental Protection Agency*) MTBE als “mogelijk kankerverwekkend”. In 2001 verscheen hierover een artikel in de Volkskrant en werden vervolgens Kamervragen gesteld over de risico's van MTBE voor de volksgezondheid.

1.2 Doelstelling

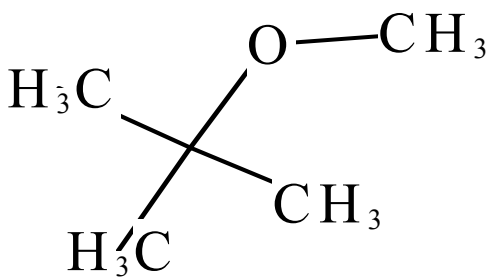
De commotie rondom het “mogelijk kankerverwekkend” zijn van MTBE was reden voor het Directoraat Generaal Milieubeheer (DGM), Directie Landelijke Milieukwaliteit en Verkeer (LMV) een project te starten, met als doel een aantal geconstateerde knelpunten rondom MTBE op te lossen. Een van deze knelpunten is het ontbreken van degelijk inzicht in de risico's voor de volksgezondheid en het milieu en, hieraan gekoppeld, goed onderbouwde en formeel vastgestelde normen. Ter oplossing van dit knelpunt geldt de volgende doelstelling van het door het RIVM uitgevoerde onderzoek:

Het afleiden van goed onderbouwde risicogrenzen voor MTBE in bodem, grondwater, oppervlaktewater, drinkwater en voor drinkwaterbereiding.

Deze risicogrenzen dienen te worden vergeleken met internationaal gehanteerde normen. Tevens is inhoudelijke toetsing nodig in de OZBG-humaan¹ en de Wetenschappelijke Klankbordgroep INS² en zullen de beleidsmatige implicaties worden besproken in de werkgroep BONS³.

1.3 Stofbeschrijving

MTBE (IUPAC naam Propane, 2-methoxy-2-methyl-; CAS nummer 1634-04-4; EINECS nummer 216-653-1; empirische formule C₅H₁₂O) wordt in grote hoeveelheden gefabriceerd, door chemische reactie van methanol en isobutyleen. Op kamertemperatuur is MTBE een vluchtige, brandbare en kleurloze vloeistof, die makkelijk in water oplosbaar is. MTBE wordt niet sterk geretardeerd en breekt niet gemakkelijk af in de bodem (*Environmental Agency, 2000*). In grondwater, onder anaerobische omstandigheden, is de afbraak als uitermate gering te classificeren (*Chisala et al., 2004*). In Figuur 1.1 is de structuurformule van MTBE weergegeven.



001634-04-4 Propane, 2-methoxy-2-methyl-

Figuur 1.1: Structuurformule van MTBE.

De stof vindt vrijwel alleen toepassing als additief voor autobenzine. De stof maakt deel uit van de zogenaamde oxygenaten, omdat het het zuurstofgehalte van benzine verhoogt. De toevoeging van deze oxygenaten resulteert in een schonere verbranding in de motor, met minder schadelijke uitstoot via de uitlaatpijp (met name koolmonoxide, maar ook ozonvormende stoffen) tot gevolg.

¹ OZBG-humaan staat voor OnderZoeksBegeleidingsGroep gericht op humane risico's. Deze groep bestaat uit deskundigen uit diverse geledingen (overheid, adviesbureaus, onderzoeksbureaus, industrie).

² De Wetenschappelijke Klankbordgroep INS (Internationale Normstelling) is gericht op ecologische risico's. Deze groep bestaat eveneens uit deskundigen uit diverse geledingen (overheid, adviesbureaus, onderzoeksbureaus, industrie).

³ Werkgroep BONS staat voor werkgroep Beleid Onderzoek NormStelling en richt zich op het raakvlak tussen inhoud en beleidsimplementatie. In deze werkgroep zijn deelnemers van de diverse overheden vertegenwoordigd (Ministeries van VROM en LNV, Inter Provinciaal Overleg, Vereniging Nederlandse Gemeenten, Unie van waterschappen, RIZA, Alterra en RIVM).

Anderzijds kan de emissie van andere schadelijke stoffen toenemen (bijvoorbeeld formaldehyde en acetaldehyde).

MTBE wordt gebruikt, omdat het ten opzichte van de andere oxygenaten goed mengbaar is en relatief goedkoop kan worden geproduceerd (<http://www.epa.gov/mtbe/gas.htm>).

De totale productie van MTBE is sinds het midden van de tachtiger jaren (tenminste in de Verenigde Staten) dramatisch toegenomen. Mede door de goede oplosbaarheid en geringe afbreekbaarheid werd MTBE de laatste jaren aangetroffen in Nederland in grondwater, oppervlaktewater en drinkwater (*Morgenstern et al., 2002; Prins, 2002*).

1.4 Procedure afleiding voorstel voor herziene risicogrenzen

Sinds de afleiding van de voorstellen voor de interventiewaarden voor MTBE in 1995 vonden twee belangrijke ontwikkelingen plaats:

- In de periode 1998-2001 werden de interventiewaarden eerste tranche stoffen geëvalueerd en gereviseerd (*Lijzen et al., 2001*). Als gevolg van deze evaluatie is de methodiek voor de afleiding van de interventiewaarden geactualiseerd en zijn voorstellen gedaan voor herziening van veel interventiewaarden. De herziene methodiek en onderbouwing van de afleiding van de humaan-toxicologische risicogrenzen en de interventiewaarden, alsmede de selectie van fysisch-chemische parameters zijn beschreven in diverse RIVM rapporten (*Lijzen et al., 2001; Otte et al., 2001; Rikken et al., 2001*).
- In 2002 is in EU-kader voor MTBE een "Risk Assessment" van MTBE uitgevoerd conform Regulation 397/1. In het hieruit resulterende "Risk Assessment Report" (RAR) zijn onder meer geselecteerde waarden voor diverse fysisch-chemische parameters gedefinieerd.

Met beide ontwikkelingen wordt in sterke mate rekening gehouden bij de afleiding van de risicogrenzen voor MTBE in deze rapportage.

2. Voorstel voor interventiewaarden (1995)

In 1995 werden in het kader van de derde tranche interventiewaarden onder andere voorstellen gerapporteerd voor interventiewaarden voor MTBE (*Kreule et al., 1995*). In deze fase werd gebruik gemaakt van de procedure uit 1991 (*Van den Berg en Roels, 1991*).

2.1 Selectie fysisch-chemische input parameters

De toendertijd geselecteerde waarden voor de belangrijkste fysisch-chemische input parameters zijn weergegeven in Tabel 2.1.

Tabel 2.1: *De in 1995 geselecteerde waarden voor de belangrijkste fysisch-chemische input parameters voor MTBE, resulterend in voorstellen voor interventiewaarden (Kreule et al., 1995)*

Input parameter	Waarde	Eenheid
Wateroplosbaarheid (S)	328	mol/m ³
Log Kow	8,7	l/kg
Log Koc	13,4	l/kg
Dampspanning (Vp)	17618	Pa
Henry-constante	2,28. 10 ⁻²	-

Een belangrijk verschil met de huidige procedure is dat de Koc, een gevoelige parameter voor de berekening van de risicogrenzen, werd berekend met behulp van de contaminant-generieke formules van Karickhoff (*Karickhoff, 1981*). Hierbij wordt een lineair verband tussen Koc en Kow verondersteld, respectievelijk de Koc berekend als functie van de oplosbaarheid en het smeltpunt. Gesteld wordt dat indien uit gevoeligheidsanalyse blijkt dat de Koc “zeer gevoelig” is voor het eindresultaat een nadere inspanning wordt verricht om een beter onderbouwde Koc te bepalen.

2.2 Humaan-toxicologische risicogrens

De afleiding van de acceptabele blootstelling, een belangrijke parameter bij de berekening van de humaan-toxicologische risicogrens, is beschreven in *Janssen et al., 1995*. Dit resulteerde in een zogenaamde TDI (Toelaatbare Dagelijkse Inname) van 0,9 mg/kg_{BW}/dag⁴ en een TCL (Toelaatbare

⁴ mg/kg_{BW}dag: mg MTBE per kg lichaamsgewicht (*body weight*) per dag

Concentratie Lucht) van $0,5 \text{ mg/m}^3$. Voor beide waarden werd gebruik gemaakt van een extrapolatiefactor (destijds veiligheidsfactor genoemd) van 1000.

De berekening van de blootstelling voor het standaardscenario en de afleiding van de humaan-toxicologische risicogrens voor onder andere MTBE werd beschreven in *Kreule et al. (1995)*. Voor de berekende blootstelling bleken “blootstelling via inademing dampen binnenshuis” (81%) en “blootstelling via consumptie van voedingsgewassen” (18%) de belangrijkste blootstellingsroutes.

De berekende humaan-toxicologische risicogrens, waarbij de blootstelling gelijk is aan de TDI was $423 \text{ mg/kg}_{\text{BW}}$. Bij deze waarde werd echter de TCL in de binnenlucht met een factor 5 overschreden. In een dergelijke situatie werd de humaan-toxicologische risicogrens zodanig berekend dat de concentratie in de binnenlucht precies gelijk is aan de TCL. Op deze wijze werd een humaan-toxicologische risicogrens berekend van $83,3 \text{ mg/kg}_{\text{DW}}$. De betrouwbaarheid werd als “gemiddeld” gemarkeerd.

2.3 Ecotoxicologische risicogrens

De afleiding van de ecologische risicogrens voor onder andere MTBE werd beschreven in *Crommentuijn et al. (1995)*, volgens de procedure beschreven in *Crommentuijn et al. (1994)*. Literatuuronderzoek leverde geen toxiciteitsgegevens op voor biologische en enzymatische processen in de bodem, noch voor terrestrische organismen. Er werd gebruik gemaakt van toxiciteitsgegevens voor aquatische organismen (19 gegevens voor zoetwater- en een voor zoutwater-organismen). Met behulp van de partiticoëfficiënt werd een risicogrens berekend voor terrestrische bodems (standaard bodem met 10% organische stof en 25% lutum) van $125 \text{ mg/kg}_{\text{DW}}^5$. Dit zogenaamde evenwichtspartitieconcept, waarbij er vanuit gegaan wordt dat alleen dat gedeelte in het poriewater van de bodem bijdraagt aan een vergelijkbaar effect zoals optreedt in oppervlaktewater, resulteert in een relatief onnauwkeurige ecotoxicologische risicogrens in de bodem. Om deze reden werd de betrouwbaarheid van de waarde van $125 \text{ mg/kg}_{\text{DW}}$ voor de ecotoxicologische risicogrens als “laag” aangemerkt.

2.4 Uiteindelijke voorstellen

Evenals in de huidige procedure werd de laagste van beide risicogrenzen als voorstel voor interventiewaarde gedaan. Daarom werd de humaan-toxicologische risicogrens van $83 \text{ mg/kg}_{\text{DW}}$ (en niet de hogere ecotoxicologische risicogrens van $125 \text{ mg/kg}_{\text{DW}}$) het voorstel voor interventiewaarde voor bodem.

⁵ mg/kg_{DW} : mg MTBE per kg bodem op drooggewichtsbasis (*dry weight*)

De interventiewaarde voor grondwater werd toendertijd gedefinieerd als de concentratie in grondwater die in evenwicht is met de interventiewaarde voor bodem, uitgaande van een verdunning van contaminanten gedurende transport naar het grondwater met een factor 10. Ook hierbij speelt de Koc een centrale rol. Op deze wijze werd een voorstel voor een interventiewaarde voor grondwater van 9180 µg/l berekend.

3. Selectie fysisch-chemische input parameters

Voor de selectie van fysisch-chemische parameterwaarden voor de vaststelling van de risicogrenzen wordt de volgende procedure gevolgd:

- De fysisch-chemische parameters worden geëvalueerd volgens de methodiek die is toegepast voor de evaluatie interventiewaarden (*Otte et al., 2001*).
- De aldus verkregen set wordt vergeleken met de set van de EU-RAR.
- Indien er geen significante verschillen tussen beide sets zijn wordt de voorkeur gegeven aan de waarde uit de EU-RAR. Indien er wel significante verschillen tussen beide sets zijn, wordt nagegaan of er voldoende inhoudelijke argumenten zijn om van de EU-RAR af te wijken.

De evaluatie van stoffeigenschappen is gebaseerd op de gegevens uit direct toegankelijke databases, handboeken, Safety Data Sheets, Product Information Sheets etc. Het betreft hier vaak zogenaamde secundaire bronnen. In de meeste gevallen wordt de primaire bron genoemd. Soms wordt daarbij een korte omschrijving gegeven van de gebruikte methodiek en of het gaat om een experimentele waarde of een berekende. De primaire bronnen zijn in het algemeen niet opnieuw geëvalueerd. Het komt vaak voor dat de verschillende databases verwijzen naar dezelfde primaire bron. Zoveel mogelijk is getracht duplicaties (het meerdere malen opnemen van dezelfde bron) te vermijden. Door de wijze van refereren kan men duplicatie echter niet volledig uitsluiten. Indien er voldoende *experimentele* gegevens beschikbaar waren, en dit is bij MTBE vaak het geval, zijn op basis van QSARS *berekende* waarden niet geselecteerd. De aldus verzamelde data worden omgerekend naar standaardtemperatuur en standaardtemperatuur. De geselecteerde waarde wordt tenslotte bepaald door het geometrisch gemiddelde te nemen van de gevonden data.

3.1 Molecuulgewicht (*M*)

Het molecuulgewicht van MTBE is 88,15 g/mol (onder andere HSDB; Lide (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 79th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 1998-1999, p. 3-275).

3.2 Wateroplosbaarheid (*S*)

MTBE is goed oplosbaar in water. Wel zijn er aanwijzingen dat MTBE in een mengsel van alifatische en aromatische koolwaterstoffen een lagere oplosbaarheid heeft dan de oplosbaarheid van het pure product. De oplosbaarheid wordt gecorrigeerd voor de standaard bodemtemperatuur (10°C) op basis van de Henry-constante (*Waitz et al., 1996 en Otte et al., 2001*).

Bijlage 2 geeft de gevonden data voor de wateroplosbaarheid. Op basis van deze data wordt een wateroplosbaarheid van 32400 mg/l, het geometrisch gemiddelde van 17 gegevens, vastgesteld.

De EU-RAR geeft een waarde voor de wateroplosbaarheid van 42 g/l bij 20°C. Omgerekend naar de standaard bodemtemperatuur (10°C) is dit 34900 mg/l. Deze is van dezelfde orde grootte als de hierboven geselecteerde waarde. Daarom wordt voor de berekening van de risicogrenzen de waarde uit de EU-RAR van 34900 mg/l gehanteerd.

3.3 Dampdruk (V_p)

Bijlage 2 geeft de gevonden data voor de dampdruk. Deze worden gecorrigeerd naar standaard bodemtemperatuur met gebruik van de Clausius-Clapeyron vergelijking (*Chang, 1977*). De dataset vertoont weinig spreiding. De 10- en 90- percentielwaarden zijn respectievelijk 17500 en 17900 Pa. Op basis van deze data wordt een dampdruk van 17680 Pa bij 10°C, het geometrisch gemiddelde van 23 gegevens, vastgesteld.

In de EU-RAR wordt een waarde voor de dampdruk van 270 hPa bij 20°C geselecteerd en een waarde van 330 hPa bij 25°C. Omgerekend naar de standaard bodemtemperatuur (10°C) is dit respectievelijk 17667 en 17653 Pa (gemiddeld 17600 Pa). Deze is van dezelfde orde grootte als de hierboven geselecteerde waarde. Daarom wordt voor de berekening van de risicogrenzen de gemiddelde waarde uit de EU-RAR van 17600 Pa gehanteerd.

3.4 Henry constante

De Henry constante K_H is de ratio tussen dampdruk en oplosbaarheid ($V_p/(S \cdot R \cdot T)$). Deze wordt standaard berekend (model CSOIL 2000), op basis van de oplosbaarheid en de dampdruk. Op basis van de geselecteerde waarden voor dampdruk en deze parameters wordt een Henry constante van $1,89 \cdot 10^{-2}$ berekend.

Deze waarde is nagenoeg gelijk aan de waarde uit de EU-RAR van $1,86 \cdot 10^{-2}$. Daarom wordt voor de berekening van de risicogrenzen de waarde uit de EU-RAR van $1,86 \cdot 10^{-2}$ gehanteerd.

3.5 Octanol-water partiticoëfficiënt (K_{ow})

De octanol-water partiticoëfficiënt is een parameter die de mate van lipofiliteit (vetminnendheid), of anders gezegd de mate van hydrofobie (waterafstotendheid), beschrijft. Het is de ratio tussen de concentratie van de stof in de n-octanol fase en de waterfase, in een twee-fase systeem. Waarden uit verschillende experimenten kunnen vele orden van grootte verschillen. De octanol-water coëfficiënt wordt vaak uitgedrukt als de logaritme van de K_{ow} ($\log K_{ow}$).

Bijlage 2 geeft de gevonden data voor de K_{ow} . In de onderzochte datasets lagen de $\log K_{ow}$ -waarden tussen 0,94 en 1,43. Hierbij zijn een aantal waarden berekend via verschillende K_{ow} -relaties op basis van bijvoorbeeld molecuultopologie. Er werden vier *gemeten* $\log K_{ow}$ -waarden

aangetroffen. Deze data werden ook gerapporteerd in de EU-RAR. In deze EU-RAR werd de waarde geselecteerd van de onder GLP condities bepaalde log Kow van 1,06 (*Huels, 1989*). Gezien de grote overeenkomsten en het feit dat deels uit dezelfde datasets werd geput kan worden aangesloten bij de EU-RAR.

3.6 Organisch koolstof genormaliseerde bodem-water partiticoëfficiënt (Koc)

De verdeling van een stof over de verschillende bodemfasen bepaalt in belangrijke mate het gedrag van een stof in de bodem. Alhoewel het adsorptiegedrag van MTBE complex is, wordt aangesloten bij de overige organische stoffen. Hiervoor geldt dat de adsorptie van een organische stof aan de vaste bodemfase grotendeels plaatsvindt aan het organisch stof in de bodem. Daarom wordt de bodem-water partiticoëfficiënt (K_p , dit is de ratio van een stof in de vaste bodemfase en het poriewater) bepaald op basis van de op organisch koolstofgehalte genormaliseerde bodem-water partiticoëfficiënt, de Koc:

$$K_{\text{bodem-water}} = K_{\text{oc}} * f_{\text{oc}} \quad [\text{Vgl. 3.1}]$$

waarbij

f_{oc} is de fractie organisch koolstof in de bodem.

De bepaling van Koc-waarden is omslachtig. Daarom wordt vaak gebruik gemaakt van berekende Koc-waarden. De rekenmethoden zijn over het algemeen gebaseerd op Kow/Koc-relaties (bijvoorbeeld *Sabljić et al., 1995*) of op zogenaamde eerste order *molecular connectivity indices* (1-MCI) (bijvoorbeeld *Bahnick en Doucette, 1988; Meijlan et al., 1992*).

Voor MTBE worden berekende Koc-waarden gerapporteerd. Bijlage 2 geeft deze data voor de Koc. De minimum en maximum Koc-waarden zijn respectievelijk 0,72 en 1,57. Dit duidt op een hoge mobiliteit (en een lage adsorptie) van MTBE.

Een frequent aan gerefereerde waarde is de log Koc van *Zogorsky (1997)* van 1,05. *Zogorski* blijkt zich echter op dezelfde bron te baseren als in de EU-RAR gebeurt, namelijk *Howard et al., (1990)*. In deze oorspronkelijke bron wordt de log Koc van 1,05 afgeleid op basis van regressie van wateroplosbaarheid met de Koc (*Lyman et al., 1982*).

De Koc kan vastgesteld worden analoog aan de methodiek die gehanteerd is bij de evaluatie interventiewaarden (*Otte et al., 2001*). Echter, door het ontbreken van experimentele Koc's, wordt deze dan uitsluitend bepaald door slechts één Kow/Koc relatie van *Sabljić et al. (1995)*. Dit resulteert in een log Koc van 1,57 gebaseerd op de relatie die geldt voor 'non-hydrophobics' (log Koc = 1,02 + 0,52log Kow). Deze relatie heeft een onzekerheidsmarge ($\pm 2\sigma$ range) van 1 log

eenheid, reden om ook de andere log Koc-waarde bij de evaluatie te betrekken. Dit is analoog aan de werkwijze van het EU-RAR.

De gemiddelde waarde van 9 gevonden log Koc's is 1,03. Deze waarde is nagenoeg gelijk aan de waarde uit de EU-RAR van 1,05. Daarom wordt voor de berekening van de risicogrenzen de waarde uit de EU-RAR van 1,05 gehanteerd.

3.7 Permeatiecoëfficiënt PE-waterleiding

De berekening van de “langdurig gemiddelde” concentratie in drinkwaterleidingen is gebaseerd op de permeatie door LPDE (Low Density *PolyEthyleen*). Hiervoor wordt een model van het KIWA gebruikt (*Vonk, 1985*), waarbij de permeatiecoëfficiënt de centrale parameter is. Voor MTBE is er geen permeatiecoëfficiënt voor LDPE gevonden. In dat geval wordt modelmatig gerekend met een permeatiecoëfficiënt (kental) van $10^{-7} \text{ m}^2/\text{d}$. De gekozen waarde voor de permeatiecoëfficiënt wordt licht conservatief (veilig) beschouwd.

Overigens is er de laatste jaren een ontwikkeling gekomen in het gebruik van een “impermeabele” kunststofbuis, waardoor de onderzoeksactiviteiten op dit gebied een andere doelstelling kregen (*mondelinge mededeling M.A. Meerkerk, KIWA*). Dit zal in de toekomst consequenties hebben voor de blootstelling via drinkwaterleidingen.

3.8 BioConcentratieFactor plantopname.

De BCF (BioConcentratieFactor) voor wortel en bladgewassen wordt berekend met CSOIL volgens *Rikken et al. (2001)*, analoog aan de methode van *Trapp en Matthies (1995)*. Dit is derhalve geen specifieke input parameter, maar wordt berekend als functie van de andere input parameters.

3.9 Resumé

In Tabel 3.1 zijn de in deze studie gehanteerde fysisch-chemische input parameters samengevat. Tevens zijn de waarden opgenomen zoals gehanteerd bij de afleiding van de voorstellen voor interventiewaarden in 1995.

Tabel 3.1: Herziene fysisch-chemische input parameters voor MTBE en de waarden, zoals gehanteerd bij de afleiding van de voorstellen voor interventiewaarden in 1995.

Parameter	Herziene waarde	Waarde 1995	Eenheid
Molecuul gewicht (M)	88,15	88,2	g/mol
Water oplosbaarheid (S)	34900	28930	mg/l (10°C)
Dampdruk (Vp)	17600	17618	Pa (10°C)
Octanol-water partiticoëfficiënt (log Kow)	1,06	0,95	-
Organisch koolstof genormaliseerde bodem-water partiticoëfficiënt (log Koc)	1,05	1,13	l/kg
Permeatiecoëfficiënt (Dpe)	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$	m ² /d
Henry constante (K _H)	$1,89 \cdot 10^{-2}$	$2,28 \cdot 10^{-2}$	(-)

4. Afleiding herziene humaan-toxicologische risicogrenzen

4.1 Acceptabele blootstelling

4.1.1 Introductie

Als criterium voor de acceptabele blootstelling van de mens aan bodemverontreiniging wordt het Maximaal Toelaatbaar Risico (MTR_{humaan}) gehanteerd, uitgedrukt in $\text{mg}/\text{kg}_{\text{BW}}/\text{dag}$. Het MTR_{humaan} is gedefinieerd als de innamehoeveelheid, waarbij een mens bij levenslange blootstelling met grote waarschijnlijkheid geen nadelige gevolgen voor de gezondheid ondervindt. Bij overschrijding van MTR_{humaan} kan sprake zijn van nadelige gezondheidseffecten. Voor vluchtige stoffen als MTBE wordt tevens een TCL (Toelaatbare Concentratie Lucht) uitgedrukt in mg/m^3 afgeleid. Na omrekening in een toelaatbare inhalatieve blootstelling wordt deze als toetscriterium voor de berekende inhalatieve blootstelling gebruikt.

4.1.2 Eerdere evaluaties

Ten behoeve van de interventiewaarden werd MTBE in 1994 geëvalueerd (*Janssen et al., 1995*). Hieruit volgde een TDI (Toelaatbare Dagelijkse Inname) als basis voor de MTR_{humaan} van $900 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{BW}}/\text{dag}$ en een TCL van $500 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Deze TDI was gebaseerd op een 90 dagen durende studie met ratten, welke oraal bloot werden gesteld aan MTBE met 0, 100, 300, 900 and 1,200 $\text{mg}/\text{kg}_{\text{BW}}/\text{dag}$ (*Robinson et al., 1990*). Een afname van het lichaamsgewicht werd geconstateerd en vergaande (reversibele) anaesthesia werd geconstateerd bij de hoogste dosering; de NOAEL was $900 \text{mg}/\text{kg}_{\text{BW}}/\text{dag}$.

De TCL was gebaseerd op een 90 dagen inhalatie studie met ratten blootgesteld aan MTBE van 0, 2880, 14400 and 28800 mg/m^3 gedurende 6 uur/dag, 5 dagen/week (*Dodd en Kintigh, 1989*). Bij de gemiddelde en de hoge dosis werden lichte groeiremmingen, verminderd hersengewicht en een toename van het lever-, nieren- en het adrenalgewicht geconstateerd. Specifieke neurotoxische effecten werden niet waargenomen. De NOAEL (aangepast voor wat betreft blootstellingsduur) in deze studie was $515 \text{mg}/\text{m}^3$.

Zowel de TDI als de TCL werden afgeleid met onzekerheidsfactoren van 10×10 voor inter- and intraspecies extrapolatie. Bovendien werd een extra onzekerheidsfactor van 10 toegepast voor beperkte duur van de studie en gebreken in de database.

Een ad-hoc herevaluatie werd uitgevoerd in 1997 (herziene TCL gebaseerd op nieuwe data; *RIVM, 1997*) en in 2002 (herziene TDI als basis voor de richtlijn voor drinkwater; *RIVM, 2002*).

In 1997 werd een TCL van $2,6 \text{mg}/\text{m}^3$ afgeleid gebaseerd op de NOAELs van $1440 \text{mg}/\text{m}^3$ (6 uur/dag, 5 dagen/week) in twee chronische inhalatie studies met ratten en muizen (*Chun et al., 1992; Burleigh-Flayer et al., 1992*). Deze NOAEL is equivalent met een voor wat

betreft blootstellingsduur aangepaste NOAEL van 260 mg/m³. Met een onzekerheidsfactor van 100 (10 voor inter- and 10 voor intraspeciesverschillen) resulteerde dit in een TCL van 2,6 mg/m³. In 2002 werd een herziene TDI gebaseerd op het concept van European risk assessment; er werd geconcludeerd dat de 90 dagen studie welke hierboven werd geciteerd (*Robinson et al., 1990*) in feite lichte nier- en levertoxiciteit aangaf bij 900 mg/kg_{BW}/dag, met een NOAEL van 300 mg/kg_{BW}/dag. RIVM heeft deze conclusie overgenomen en leidde, met gebruikmaking van dezelfde onzekerheidsfactoren als in de evaluatie van 1995, een TDI af van 300 µg/kg_{BW}/dag.

4.1.3 Resultaten

De hier gerapporteerde herziene humaan-toxicologische criteria zijn gebaseerd op de volgende evaluaties: *US-EPA (1993)*, *Health Council of the Netherlands (GR, 1994)*, *ATSDR (1996)*, *IPCS (1998)*, *IARC (1999)*, *ECB (2002)*, *ECETOC (2003)*. De herziening van de humaan-toxicologische evaluatie is in detail opgenomen in Bijlage 3. Het resultaat is weergegeven in Tabel 4.1.

Tabel 4.1: *Samenvatting van de humaan-toxicologische criteria.*

MTR _{humaan} (= TDI)	TCL	Achtergrondblootstelling	Geurdrempel
0,3 mg/kg _{BW} /dag	2,6 mg/m ³	0,004 – 0,005 mg/kg _{BW} /dag	0,19 mg/m ³

TCL Toelaatbare Concentratie Lucht

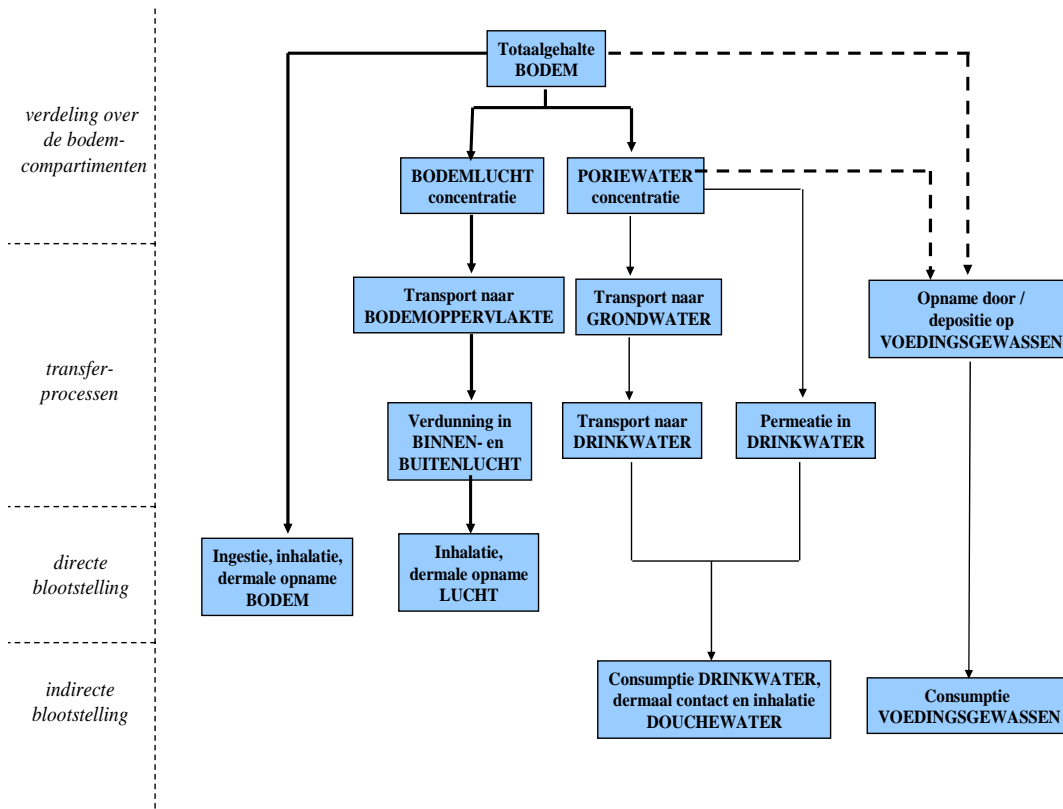
MTR_{humaan} Maximaal Toelaatbaar Risico voor blootstelling

TDI Toelaatbare Dagelijkse Inname

Background exposure: the mean of the reasonable *worst case* exposure scenarios as estimated by *ECB (2002)*.

4.2 *Humaan-toxicologische risicogrens bodem*

De humaan-toxicologische risicogrens is onderdeel van de interventiewaarde voor bodem. De waarde wordt berekend met het model CSOIL 2000, zie Figuur 4.1.



Figuur 4.1: Schema van het blootstellingmodel CSOIL.

In analogie met zowel de procedure voor de berekening van de humaan-toxicologische risicogrens in 1995, als de herziene procedure zoals gerapporteerd in 2001, is de hier afgeleide humaan-toxicologische risicogrens gebaseerd op het scenario “wonen met tuin”, het zogenaamde standaardscenario. De humaan-toxicologische risicogrens wordt berekend voor een zogenaamde standaardbodem, met een organisch stofgehalte van 10% en een lutumgehalte van 25%. De humaan-toxicologische risicogrens wordt afgeleid op basis van een vergelijk van de berekende orale en inhalatieve blootstelling te vergelijken met de toelaatbare orale en inhalatieve blootstelling. De humaan-toxicologische risicogrens is hierbij gedefinieerd als het totaalgehalte in de bodem, waarbij de som van de verhouding tussen berekende en toelaatbare orale en inhalatieve blootstelling gelijk is aan 1,0:

$$\frac{\text{Orale BSberekend}}{\text{Orale MTR}_{\text{humaan}}} + \frac{\text{Inhalatieve BSberekend}}{\text{Inhalatieve MTR}_{\text{humaan}}} = 1,0 \quad [\text{Vgl. 4.1}]$$

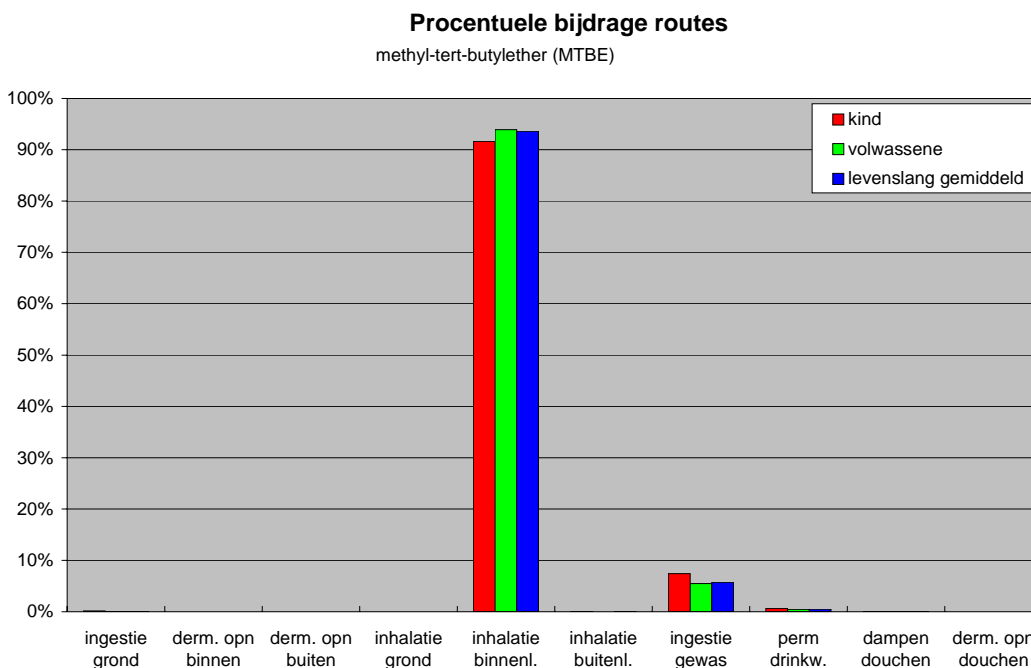
waarbij

Orale BSberekend	= berekende orale blootstelling (mg/kg _{BW} /dag)
Inhalatieve BSberekend	= berekende inhalatieve blootstelling (mg/kg _{BW} /dag)
Orale MTR _{humanaan}	= Maximaal Toelaatbaar Risico voor orale blootstelling (mg/kg _{BW} /dag)
Inhalatieve MTR _{humanaan}	= Maximaal Toelaatbaar Risico voor inhalatieve blootstelling (mg/kg _{BW} /dag) (afgeleid van TCL)

Hieruit volgt een waarde van 221 mg/kg_{DW} voor de humaan-toxicologische risicogrens. De resultaten, inclusief invoer- en uitvoergegevens, zijn in detail gegeven in Bijlage 4.

4.2.1 Blootstellingsroutes

Figuur 4.2 geeft een overzicht van de bijdrage van de diverse blootstellingsroutes aan de totale blootstelling, voor kinderen, volwassenen en levenslang-gemiddeld. Hieruit blijkt dat de inhalatie van binnenlucht de dominante blootstellingsroute is. Deze route draagt voor 94% bij aan de totale blootstelling. De bijdrage via consumptie van voedingsgewassen geteeld in eigen tuin aan de totale blootstelling is beperkt tot 6%. Door de hoge vluchtigheid van MTBE verdampt de opgenomen stof weer grotendeels uit het blad. Opslag vindt dan ook grotendeels plaats in de wortel. De bijdrage van de andere blootstellingsroutes, bijvoorbeeld door ingestie van bodem (0,04%) of via drinkwater na permeatie door de waterleiding (0,5%), speelt geen rol van betekenis.



Figuur 4.2: Bijdrage van de diverse blootstellingsroutes aan de totale blootstelling, voor kinderen, volwassenen en levenslang-gemiddeld.

4.2.2 Onzekerheid

De onzekerheid van de berekende humaan-toxicologische risicogrens wordt veroorzaakt door de onzekerheden van het gebruikte modelconcept en de onzekerheid van de invoergegevens. De bijdrage aan de onzekerheid (of spreiding) veroorzaakt door de fysisch-chemische parameters is nagegaan door een probabilistisch Monte-Carlo modelberekening, waarbij een realistische verdeling is toegepast voor S, Vp, log Kow, log Koc en de permeatiecoëfficiënt. Uit deze berekening blijkt dat de log Koc van alle fysisch-chemische parameters het meeste bijdraagt aan de onzekerheid van de berekende humaan-toxicologische risicogrens. De onzekerheid (of spreiding) veroorzaakt door modelconcept en blootstellingsparameters is niet beschouwd. In het algemeen is echter bekend dat verschillende modellen een grote variatie in berekende blootstelling via de inhalatie van binnenlucht geven (*Swartjes, 2002*).

In Bijlage 5 zijn de statistische verdelingen van de fysisch-chemische parameters, alsmede de resultaten van de probabilistische modelberekening weergegeven. De 10- en 90-percentielen van de humaan-toxicologische risicogrens zijn respectievelijk 130 en 348 mg/kg. Uit ervaring met soortgelijke berekeningen met andere vluchtige stoffen blijkt dat de spreiding van de SRC humaan vergelijkbaar is met die van andere vluchtige verbindingen (bijvoorbeeld BTEX).

4.3 *Humaan-toxicologische risicogrens grondwater*

De humaan-toxicologisch onderbouwde risicogrens voor grondwater is afgeleid als de concentratie in grondwater die in evenwicht is met de interventiewaarde voor bodem. Hieruit volgt een waarde van 244000 µg/l. Daarnaast wordt nagegaan wat de maximale concentratie in het grondwater mag zijn als het water direct als drinkwater geconsumeerd zou worden. Deze waarde, 9420 µg/l (zie par. 4.1.1), is lager dan de hierboven genoemde risicogrens en geldt derhalve als de humaan-toxicologisch onderbouwde risicogrens voor grondwater als basis voor de interventiewaarde.

4.4 *Humaan-toxicologische risicogrens drinkwater en drinkwaterbereiding*

4.4.1 Drinkwaterbereiding

Als water (oppervlaktewater of grondwater) gebruikt wordt voor de bereiding van drinkwater wordt ervan uitgegaan dat de levenslang gemiddelde blootstelling aan contaminanten het MTR_{humaan} niet mag worden overschreden. Hiertoe is de maximaal toelaatbare concentratie in het grond- of oppervlaktewater bepaald, waarbij de volgende uitgangspunten van toepassing zijn:

- Het betreffende grond- of oppervlaktewater wordt direct (zonder zuivering) gebruikt als drinkwater.

- Er wordt aangenomen dat een volwassene 2 liter water per dag en een kind 1 liter water per dag drinkt, gedurende respectievelijk 64 en 6 jaar.

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

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

[Vgl. 4.2]

waarbij

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

Hieruit volgt een waarde voor de humaan-toxicologische risicogrens voor drinkwaterbereiding van 9420 $\mu\text{g/l}$.

Deze maximaal toelaatbare concentratie in het grond- of oppervlaktewater moet worden beschouwd als de kwaliteit waaraan water (oppervlaktewater of grondwater) moet voldoen om tot bereiding van drinkwater over te kunnen gaan.

Aangezien MTBE opgelost in grondwater een onaangename geur en smaak ten gevolge heeft, kan de geur- en smaakdrempel als criterium voor toelaatbare concentratie in grondwater worden gehanteerd voor grondwater bedoeld voor de bereiding van drinkwater. In de EU-RAR wordt een geurdrempel van 15 $\mu\text{g/l}$ (range 2,5 – 90) en een smaakdrempel van 40 $\mu\text{g/l}$ (range 2,5 – 680) gehanteerd. Het eventueel hanteren van de geur- of smaakdrempel als criterium voor toelaatbare concentratie in grondwater is ter verantwoording van het beleid.

4.4.2 Drinkwater

In het Waterleidingsbesluit (Staatsblad 2001) zijn zogenaamde Indicatoren-Signaleringswaarden opgenomen voor diverse contaminant-groepen. Alhoewel MTBE in geen van de genoemde groepen in te delen is, is het redelijk te veronderstellen dat de Indicatoren-Signaleringswaarde voor MTBE gelijk is aan die van de overige organische contaminanten, namelijk 1 $\mu\text{g/l}$. De betekenis van deze waarde is in het Waterleidingsbesluit omschreven als kwaliteitseisen bedoeld voor het signaleren van mogelijke verontreinigingen, waarbij in geval van overschrijding geen sprake hoeft te zijn van risico's voor de volksgezondheid, maar er nader onderzoek nodig is. In *Morgenstern et*

al. (2002) wordt, onder het motto van voorzorgprincipe, deze waarde van 1 µg/l aanbevolen als risicogrenzen in drinkwater.

Voor toetsing van drinkwater hanteert de WHO (*World Health Organisation*) een andere procedure. Hierbij wordt er van uitgegaan dat er naast inname via drinkwater tevens blootstelling aan de betreffende verbindingen plaatsvindt via andere bronnen, ter grootte van 90% van het MTR_{humaan} . Bovendien worden bij de toetsing van drinkwater traditioneel iets andere consumptiehoeveelheden drinkwater verondersteld. Resumerend liggen de resulterende drinkwaternormen globaal een factor 10 lager dan de maximaal toelaatbare concentratie in het grond- of oppervlaktewater.

In ieder geval zal voor drinkwater rekening moeten worden gehouden met de geur- en smaakdrempel. Echter liggen deze waarden (15, respectievelijk 40 µg/l) ruim boven de voorgestelde grens van 1 µg/l.

4.5 *Resumé*

In Tabel 4.2 zijn de humaan-toxicologische risicogrenzen samengevat

Tabel 4.2: *Samenvatting van de humaan-toxicologische risicogrenzen*

Compartiment	Type risicogrens	Waarde	Eenheid
Bodem	Interventiewaarde	221	mg/kg _{DW}
Grondwater	Interventiewaarde	9420	µg/l
Drinkwater	Norm voor drinkwater	1	µg/l
	Norm voor Drinkwaterbereiding	9420*	µg/l

* Eventueel te hanteren (beleidsmatige beslissing): geurdrempel: 15 µg/l of smaakdrempel: 40 µg/l

5. Afleiding herziene ecologische risicogrenzen

Ecologische risicogrenzen spelen een rol voor de compartimenten oppervlaktewater, bodem (streef- en interventiewaarde) en grondwater (eveneens streef- en interventiewaarde).

De afleiding van herziene ecologische risicogrenzen in deze rapportage is gebaseerd op de EU-RAR voor MTBE (*European Communities, 2002*). De omrekening van de Europese PNEC-waarden naar de Nederlandse situatie, zoals beschreven in dit hoofdstuk, geschiedt volgens de methode zoals beschreven in *Janssen et al. (2004)*.

Er is ook gezocht naar informatie bij de EPA (Environmental Protection Agency), maar voor milieu werd weinig informatie aangetroffen. Voor de afleiding van ecologische risicogrenzen is de EU-RAR als enige bron gebruikt worden voor de fysisch-chemische en toxiciteitdata, alsmede voor de zogenaamde Maximaal Toelaatbare Risico's ($MTR_{eco,s}$). Deze MTR_{eco} is gedefinieerd als de concentratie in een specifiek milieucompartiment, waarbij sprake is van 5% effecten op het ecosysteem (oftewel 95% bescherming).

De fysisch-chemische stoffeigenschaften van MTBE zijn vermeld in Tabel 3.1 (Hoofdstuk 3)

5.1 Effectdata

In de EU-RAR zijn alleen acute en chronische data voor waterorganismen beschikbaar. In Tabel 5.1 staan alle ecologische toxiciteitdata weergegeven die gebruikt zijn voor het afleiden van de ecologische risicogrenzen in deze rapportage. Tabel 5.2 geeft de toxiciteitdata weer uit de EU-RAR, die niet gebruikt zijn bij het afleiden van de ecologische risicogrenzen. In de daarbij behorende legenda staat vermeld waarom deze data niet zijn gebruikt. De originele referenties van de desbetreffende studies zijn terug te vinden in de EU-RAR.

Tabel 5.1: Beschikbare toxiciteitsdata uit de EU-RAR die zijn gebruikt om de ecologische risicogrenzen af te leiden (laagste waarde per soort).

Trofisch niveau	Soort	Eindpunt	Parameter	Duur (d)	Concentratie (mg/l)
Acute data, zoetwater					
<i>Invertebraten</i>					
Crustacea	<i>Daphnia magna</i>	EC50	Immobiliteit?	2	472
Crustacea	<i>Ceriodaphnia dubio</i>	LC50	Sterfte	2	340
Rotifera	<i>Brachionus calyciflorus</i>	EC50	Immobiliteit?	2	960
Mollusca	<i>Physa gyrina</i>	EC50	Immobiliteit?	4	559
Insecta	<i>Hexagenia limbata</i>	EC50	Immobiliteit?	4	581
Insecta	<i>Chironomus tentans*</i>	EC50	Onbekend	2	1742
Crustacea	<i>Hyalella azteca*</i>	EC50	Onbekend	4	473
<i>Vissen</i>					
Pisces	<i>Pimephales promelas</i>	LC50	Sterfte	4	672
Pisces	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	LC50	Sterfte	4	887
Pisces	<i>Lepomis macrochirus</i>	LC50	Sterfte	4	1054
<i>Algen</i>					
Algae	<i>Selenastrum capricornutum</i>	E _r C50	Groeisnelheid	4	184

Tabel 5.1 (vervolg): Beschikbare toxiciteitsdata uit de EU-RAR die zijn gebruikt om de ecologische risicogrenzen af te leiden (laagste waarde per soort).

Acute data, zoutwater					
<i>Invertebraten</i>					
Crustacea	<i>Mysidopsis bahia</i>	EC50	Immobiliteit?	4	187
Crustacea	<i>Neomysis mercedis</i>	LC50	Sterfte	4	236
Crustacea	<i>Callinectes sapidus</i>	EC50	Immobiliteit?	4	306
Crustacea	<i>Palaemonetes pugio</i>	EC50	Immobiliteit?	4	166
Crustacea	<i>Rhepoxynius abronius</i>	EC50	Immobiliteit?	4	294
Mollusca	<i>Crassostrea virginica</i>	EC50	Immobiliteit?	4	150
<i>Vissen</i>					
Pisces	<i>Menidia beryllina</i>	LC50	Sterfte	4	574
Pisces	<i>Gasterosteus aculeatus</i>	LC50	Sterfte	4	929
Pisces	<i>Cyprinodon variegatus</i>	LC50	Sterfte	4	1358
Chronische data, zoetwater					
<i>Invertebraten</i>					
Crustacea	<i>Daphnia magna</i>	NOEC	Onbekend	21	51
Bacteria	<i>Pseudomonas putida</i>	EC10	Inhibitie van celvermeerdering	0,75	710
<i>Vissen</i>					
Pisces	<i>Pimephales promelas</i>	NOEC	Onbekend	7	234
Chronische data, zoutwater					
<i>Invertebraten</i>					
Crustacea	<i>Mysidopsis bahia</i>	NOEC	Onbekend	28	26

*: sediment organismen, maar test uitgevoerd in water.

Tabel 5.2: Toxiciteitsdata uit de EU-RAR, die niet gebruikt zijn voor het afleiden van de ecologische risicogrenzen.

Trophisch niveau	Soort	Eindpunt	Parameter	Duur (d)	Concentratie (mg/l)
Acute data, zoetwater					
<i>Algen</i>					
Algae	<i>Selenastrum subspicatus</i> ¹	E _b C50, E _r C50	Biomassa, groeisnelheid	3	>800
Algae	<i>Selenastrum capricornutum</i> ^{2,3}	IC50 IC25 IC20	Celdichtheid	4	491 134 103
<i>Vertebraten</i>					
Amfibie	<i>Rana temporaria</i> ⁴	LC50	Sterfte	onbekend	2,5 · 10 ³
Chronische data, zoetwater					
<i>Invertebraten</i>					
Crustacea	<i>Mysidopsis bahia</i> ²	IC25	Onbekend	28	32
Bacteria	<i>Pseudomonas putida</i> ⁵	EC10	Inhibitie van zuurstofverbruik	0,19-0,21	>1480
<i>Vissen</i>					
Pisces	<i>Pimephales promelas</i> ²	IC20 IC25	Eitjes en larven/broedsel	31 31	279 308

- 1: Geen vaste EC50-waarde bepaald.
- 2: Alleen EC50- en LC50-waarden zijn gebruikt om het geometrisch gemiddelde van de acute toxiciteitdata te bepalen.
- 3: De IC50-waarde is niet gebruikt, omdat er voor *Selenastrum capricornutum* ook al een EC50-waarde is voor groeisnelheid en deze betrouwbaarder wordt geacht dan de IC50 voor celdichtheid.
- 4: Volgens de EU-RAR kon het resultaat van deze studie niet gevalideerd worden.
- 5: Limit test.

5.2 Bepaling ecologische risicogrenzen

5.2.1 Oppervlaktewater

Omdat er geen significante verschillen zijn gevonden tussen zoetwater- en zoutwatereffectdata (tweezijdige t-test, $p=0,05$), kan er een overall $PNEC_{\text{water}}$ afgeleid worden op basis van de gecombineerde datasets van zoet- en zoutwatereffectdata.

Aangenomen wordt dat de MTR_{eco} (Maximaal Toelaatbaar Risico voor ecosystemen) gelijk is aan de $PNEC_{\text{water}}$ (*Predicted No Effect Concentration* voor waterorganismen). In de EU-RAR wordt een $PNEC_{\text{water}}$ genoemd van 2,6 mg/l, gebaseerd op een NOEC (No Observed Effect Concentration) voor *Mysidopsis bahia* met een assessment factor van 10. De factor 10 is gebruikt, omdat er chronische data beschikbaar zijn voor 3 taxonomische groepen en de NOEC voor *Mysidopsis bahia* is hiervan de laagste (conform het Technical Guidance Document, TGD, ECB, 2003). Dit is een $PNEC_{\text{water, opgelost}}$ (Predicted No Effect Concentration voor waterorganismen ten gevolge van opgeloste contaminanten), waarbij de effecten ten gevolge van zwevend slib buiten beschouwing worden gelaten. Hieruit is een $MTR_{\text{eco; water, opgelost}}$ (Maximaal Toegestane Risico in water, ten gevolge van opgeloste contaminanten) af te leiden. Deze waarde kan omgerekend worden naar een $MTR_{\text{eco; water, totaal}}$ (dus inclusief contaminanten gebonden aan zwevend slib) door middel van de volgende formules:

$$MTR_{\text{eco; water, totaal}} = MTR_{\text{water, opgelost}} * (1 + K_{\text{ppm}} * 0,001 * 0,03) \quad [\text{Vgl. 5.1}]$$

waarbij: 0,001 = conversieconstante (kg/g)
 0,03 = zwevend slib-gehalte in de Nederlandse standaardsituatie (g/l)
 K_{ppm} = zwevend slib/water partiticoëfficiënt (l/kg)

De K_{ppm} wordt berekend op basis van de K_{oc} volgens:

$$K_{\text{ppm}} = F_{\text{oc}} * K_{\text{oc}} \quad [\text{Vgl. 5.2}]$$

waarbij: F_{oc} = fractie organisch koolstof van zwevend slib (0,1172 g OC/g zwevend slib_{DW} voor de NL situatie)
 K_{oc} = organisch koolstof/water partiticoëfficiënt (11,2 l/kg, zie Tabel 3.1)

De volgens Vgl. 5.2 berekende K_{ppm} is 1,31 l/kg. Dit heeft als resultaat dat de $MTR_{\text{eco; water, totaal}}$ 2600 µg/l is, volgens Vgl. 5.1. Aangezien deze waarde gelijk is aan de waarde van de $MTR_{\text{eco; water, opgelost}}$ blijkt dat de effecten ten gevolge van het zwevend slib verwaarloosbaar zijn (de bijdrage van de effecten ten gevolge van het zwevend slib is slechts 0,004%).

De Nederlandse streefwaarde is gebaseerd op het zogenaamde Verwaarloosbaar Risico (VR). Het VR is per definitie een factor 100 lager dan het MTR_{eco} . Daarom is de streefwaarde een factor 100 lager dan de $MTR_{eco; water}$, dus zowel voor $MTR_{eco; water, opgelost}$ als voor $MTR_{eco; water, totaal}$ is de streefwaarde 26 $\mu\text{g/l}$.

De ecologische risicogrens als onderdeel van de interventiewaarde is gedefinieerd als de concentratie waarbij de potentieel aangetaste fractie van soorten of microbiële en enzymatische processen 50% bedraagt. Omdat deze ecologische risicogrens (interventiewaarde) niet wordt gegeven in de EU-RAR, moet deze berekend worden. Hierbij wordt het geometrisch gemiddelde van de chronische data berekend, indien er minimaal vier gegevens over minimaal vier taxonomische groepen beschikbaar zijn. Aangezien dit voor MTBE niet het geval is, wordt het geometrische gemiddelde van de acute data, gedeeld door 10, vergeleken met het geometrisch gemiddelde van de chronische data. De laagste waarde bepaalt de ecologische risicogrens als basis voor de interventiewaarde (*Janssen et al., 2004*).

Omdat er geen significante verschillen zijn gevonden tussen zoetwater- en zoutwatereffectdata (tweezijdige t-test, $p=0,05$), werden deze data gecombineerd en werd het geometrisch gemiddelde van de acute dataset, bestaande uit EC50- en LC50-waarden, en van de chronische dataset, bestaande uit NOEC- en EC10-waarden, berekend (zie Tabel 5.1).

Het geometrisch gemiddelde van de acute toxiciteitsdata was 475,0 mg/l en van de chronische toxiciteitsdata 121,8 mg/l. Het geometrisch gemiddelde van de acute toxiciteitdata, gedeeld door 10 is 47,5 $\mu\text{g/l}$ en is derhalve lager dan het geometrisch gemiddelde van de chronische data (121,8 mg/l). Op basis hiervan is de ecologische risicogrens (ernstig risico) als basis voor de interventiewaarde voor oppervlaktewater vastgesteld op 47500 $\mu\text{g/l}$.

5.2.2 Grondwater

Voor grondwater worden dezelfde risicogrenzen als voor oppervlaktewater gehanteerd. Hierbij wordt aangenomen dat organismen die in grondwater leven vergelijkbare effecten ten gevolge van de blootstelling aan verontreiniging vertonen, als de organismen die in oppervlaktewater leven. Daarom gelden als ecologische risicogrenzen in grondwater eveneens de waarden van 2600 $\mu\text{g/l}$ voor de MTR_{eco} en een waarde van 26 $\mu\text{g/l}$ voor de streefwaarde. De ecologische risicogrens als basis voor de interventiewaarde voor grondwater is eveneens gelijk aan de ecologische risicogrens voor oppervlaktewater (zie paragraaf 5.1.1) en is vastgesteld op 47500 $\mu\text{g/l}$.

5.2.3 Bodem/ sediment

Aangezien sommige sedimenten gedurende bepaalde fases van het jaar bodem zijn, bijvoorbeeld in de uiterwaarden, wordt de risicogrens voor sediment gelijk gesteld aan die voor bodem (*Min. van VROM, 2000*).

Aangenomen wordt dat de MTR_{eco} (Maximaal Toelaatbaar Risico voor ecosystemen) gelijk is aan de $PNEC_{bodem}$ (*Predicted No Effect Concentration* voor bodemorganismen. In de EU-RAR zijn geen toxiciteitdata voor de bodem (terrestrische effectdata) en sediment opgenomen. Daarom worden de $PNEC_{bodem}$ en $PNEC_{sediment}$ berekend volgens equilibriumpartitie. Deze theorie gaat uit van een evenwicht tussen de hoeveelheid stof (MTBE in dit geval) in het poriewater en in bodem (sediment) en een gelijke gevoeligheid voor MTBE voor bodem- (sediment-) en waterorganismen. Verder wordt de blootstelling verondersteld onafhankelijk te zijn van de manier van eten of habitat. Op basis van toxiciteitsdata van waterorganismen kan dan een schatting gemaakt worden van de risico's voor bodemorganismen (sedimentorganismen).

De $PNEC_{bodem/sediment}$ wordt als volgt berekend:

$$PNEC_{bodem/sediment} = (K_{bodem-water} * PNEC_{water} * 1000) / RHO_{bodem} \quad [Vgl. 5.3]$$

waarbij:

$$\begin{aligned} K_{bodem-water} &= \text{bodem/water partitie coëfficiënt (m}^3/\text{m}^3) \\ PNEC_{water} &= 2,6 \text{ mg/l (zie Hfdst. 4.3.1)} \\ 1000 &= \text{conversiefactor van liters naar m}^3 \text{ (l/m}^3) \\ RHO_{bodem} &= \text{bulkdichtheid van natte bodem (1700 kg/m}^3_{\text{wwt}}) \end{aligned}$$

Volgens de EU-RAR levert dit een $PNEC_{bodem}$ op van 0,730 mg/kg_{ww}, gebaseerd op een $K_{bodem-water}$ van 0,477 m³/m³ en een $PNEC_{sediment}$ van 2,05 mg/kg_{ww}, gebaseerd op een $K_{sediment-water}$ van 1,03 m³/m³ en een $RHO_{sediment}$ van 1300 kg/m³_{ww}.

Omrekening naar drooggewicht en Nederlands standaard bodem

Er dient een omrekening plaats te vinden van nat- naar drooggewicht en voor het gangbare organische stofgehalte in de Nederlandse bodem. Dit gebeurt als volgt.

Volgens de huidige TGD (Technical Guidance Document) bestaat natte bodem op volumebasis voor 20% uit water (dichtheid 1 kg/l), 20% uit lucht en 60% uit vaste deeltjes (dichtheid 2,5 kg/l). Op basis hiervan is de dichtheid van natte bodem $(0,2 * 1) + (0,2 * 0) + (0,6 * 2,5) = 1,7$ kg/l en de dichtheid van droge bodem $(0,6 * 2,5) = 1,5$ kg/l natte bodem. De ratio natte versus droge bodem is derhalve $1,7/1,5 = 1,13$.

Een extra factor van 2,9 ($F_{oc, \text{Nederland}}: F_{oc, \text{Europa}} = 0,059/0,02$) moet toegepast worden om de Europese standaard bodem om te rekenen naar de Nederlandse standaard bodem. Op basis hiervan is de Nederlandse $MTR_{\text{eco}; \text{bodem}}$:

$$MTR_{\text{eco}; \text{bodem}} = PNEC_{\text{bodem}} * 1,13 * 2,9 = 0,730 * 1,13 * 2,9 = 2,40 \text{ mg/kg}_{\text{DW}} \text{ [Vgl. 5.4]}$$

In dit getal zit ook de hoeveelheid MTBE, die zich in het poriewater van de bodem bevindt en is daarom te vergelijken met de concentratie van een veldmonster na soxhlet-extractie.

De streefwaarde is gebaseerd op het zogenaamde Verwaarloosbaar Risico (VR). Het VR is per definitie een factor 100 lager dan het MTR_{eco} . Daarom is de streefwaarde voor de bodem een factor 100 lager dan de $MTR_{\text{eco}; \text{bodem}}$ en is daarom $0,024 \text{ mg/kg}_{\text{DW}}$. De streefwaarde en MTR_{eco} voor bodem geldt ook voor sediment.

De ecologische risicogrens als onderdeel van de interventiewaarde is gedefinieerd als de concentratie waarbij de potentieel aangetaste fractie van soorten of microbiële en enzymatische processen 50% bedraagt. Omdat er in de EU-RAR geen toxiciteitsdata voor bodem genoemd worden, wordt de ecologische risicogrens als basis van de interventiewaarde voor bodem vastgesteld op basis van de ecologische risicogrens voor grondwater, met behulp van evenwichtspartitie. Dit gebeurt als volgt:

$$RG_{\text{bodem}} = (K_{\text{bodem-water}} * RG_{\text{water}} * 1000) / RHO_{\text{bodem}} \quad \text{[Vgl. 5.5]}$$

waarbij:

RG_{bodem}	= risicogrens bodem (mg/kg_{DW})
$K_{\text{bodem-water}}$	= bodem/water partitie coëfficiënt ($0,477 \text{ m}^3/\text{m}^3$)
RG_{water}	= $47,5 \text{ mg/l}$ (zie Hfdst. 4.3.3.2)
1000	= conversiefactor van liters naar m^3 (l/m^3)
RHO_{bodem}	= bulkdichtheid van natte bodem ($1700 \text{ kg}/\text{m}^3_{\text{WW}}$)

Dit resulteert in een ecologische risicogrens voor bodem van $13,3 \text{ mg/kg}_{\text{WW}}$. Omrekening naar drooggewicht bodem geschiedt op dezelfde manier als voor de $MTR_{\text{eco}; \text{bodem}}$ (zie Hfdst. 4.3.3):

$$RG_{\text{bodemDW}} = RG_{\text{bodemWW}} * 1,13 * 2,9 = 13,3 * 1,13 * 2,9 = 43,6 \text{ mg/kg}_{\text{DW}} \text{ [Vgl. 5.6]}$$

Deze waarde geldt ook voor sediment.

5.2.4 Resumé

In Tabel 5.3 zijn de hierboven afgeleide ecologische risicogrenzen samengevat.

Tabel 5.3: *Resumé ecologische risicogrenzen voor MTBE*

Compartment	Type risicogrens	Waarde	Eenheid
Bodem	Streefwaarde	0,024	mg/kg _{DW}
	MPC	2,40	mg/kg _{DW}
	Interventiewaarde	43,6	mg/kg _{DW}

Grondwater	Streefwaarde	26	µg/l
	Interventiewaarde	47500	µg/l
Oppervlaktewater	Streefwaarde	26	µg/l
	Max. Toelaatbare Concentratie	2600	µg/l
	Interventiewaarde	47500	µg/l

6. Betrouwbaarheid en integratie risicogrenzen

6.1 Betrouwbaarheidsscores

De afleiding van risicogrenzen verloopt in een aantal stappen. Bij elke stap worden keuzen gemaakt voor te volgen procedures, modelconcepten en input parameters. Elke keuze impliceert een zekere onzekerheid die de uiteindelijke betrouwbaarheid van de risicogrenzen bepaalt. De betrouwbaarheid (of onzekerheid) wordt in het algemeen bepaald door:

- kennislacunes in data, modelconcepten, et cetera.;
- de beoordeling van potentiële risico's op basis van veelal locatie-specifieke meetgegevens.

De betrouwbaarheid van de afgeleide risicogrenzen voor bodem, grondwater en oppervlaktewater is gescoord analoog aan de wijze welke bij de evaluatie interventiewaarden werd gevolgd (*Lijzen et al., 2001*). Hierbij krijgen de ecologische en humane risicogrenzen een relatieve betrouwbaarheidsscore: hoog, gemiddeld of laag.

De betrouwbaarheid van de MTR_{humaan} en TCL voor MTBE is "hoog" op grond van het grote aantal, met name recente, studies, en de diverse internationale beoordelingen die allemaal tot nagenoeg gelijklopende resultaten komen. De betrouwbaarheid van de fysisch-chemische data van MTBE is als volgt:

- Oplosbaarheid (S) : "hoog"
- Dampdruk (Vp) : "hoog"
- Kow : "hoog"
- Koc : "hoog".

Deze inschatting is gebaseerd op de range waarin de verschillende parameters liggen conform de benadering van *Jager, Rikken en van de Poel (1997)* en *Lijzen et al. (2001)*.

Ook de Monte Carlo-analyse, waarbij de geschatte spreiding van de fysisch-chemische parameters probabilistisch wordt doorgerekend in de uiteindelijke humane risicogrenzen wijst in die richting. Het relatieve verschil tussen de 10- en 90-percentielen voor MTBE zijn bijvoorbeeld vergelijkbaar met die van toluen. Voor MTBE respectievelijk 130 en 348 mg/kg_{DW} en voor toluen respectievelijk 12,2 en 90 mg/kg_{DW} (*Lijzen et al., 2002*).

De belangrijkste blootstellingsroute is de inhalatie van binnenlucht. De blootstellingsberekening krijgt daardoor een betrouwbaarheidsscore "gemiddeld" toegekend.

Resumerend leidt dit voor de humane risicogrenzen voor bodem tot de volgende score:

- Fysisch-chemische data: "hoog"
- CSOIL model concept: "gemiddeld"
- Humane blootstelling: "gemiddeld"
- MTR_{humaan} en TCL: "hoog"

Hieruit volgt een totaalscore "gemiddeld".

Overigens wil het feit dat de humane risicogrens een betrouwbaarheidsscore van “gemiddeld” toegekend krijgt niet zeggen dat toetsing aan deze risicogrens niet veilig zou zijn. De praktijk van de laatste 10 jaar heeft uitgewezen dat het blootstellingsmodel met betrekking tot de blootstellingsroute “inhalatie binnenlucht” conservatief genoemd mag worden. Dat betekent dat de afgeleide humane risicogrens, ondanks enige onzekerheid, een veilige grens is.

De ecologische betrouwbaarheidsscore wordt bepaald door het aantal taxonomische groepen waarvoor effectdata beschikbaar zijn voor terrestrische en aquatische organismen of processen. De betrouwbaarheid neemt uiteraard toe indien er effectdata voor meer taxonomische groepen beschikbaar zijn. De betrouwbaarheid van de ecologische risicogrens voor bodem wordt minder als uitgegaan wordt van aquatische effectdata, omdat dan gebruik gemaakt wordt van het relatief onzekere evenwichts-partitieconcept.

Voor de ecologische risicogrenzen voor MTBE voor grond- en oppervlaktewater is de betrouwbaarheidsscore “gemiddeld”. Er is weliswaar een groot aantal aquatische effectdata, deze zijn echter voor wat betreft de chronische data slechts afkomstig uit drie taxonomische groepen (is minder dan vier). Voor de ecologische risicogrens voor bodem is volgens *Lijzen et al. (2001)* sprake van een betrouwbaarheidsscore “laag”, aangezien gebruik is gemaakt van het relatief onzekere evenwichts-partitieconcept, in combinatie met de beschikbaarheid van chronische toxiciteitsdata voor slechts drie taxonomische groepen.

Voor de risicogrenzen in drinkwater en voor drinkwaterbereiding staat geen standaardprocedure voor de bepaling van de mate van onzekerheid ter beschikking.

6.2 Vergelijk met internationaal gehanteerde risicogrenzen

De MTBE-problematiek is actueel in vele landen. Om deze reden, maar ook in het algemeen om de internationale inbedding te toetsen, is een vergelijking met internationaal gehanteerde risicogrenzen voor MTBE zinvol. Hierbij dient te worden opgemerkt dat het doel van risicogrenzen in de regel per land in meer of mindere mate verschilt.

In de Verenigde Staten worden voor bodemnormen, die dienen ter toetsing van de saneringsnoodzaak, zeer verschillende gehalten per staat gehanteerd. Deze risicogrenzen variëren van 0,50 mg/kg_{DW} in de staat New York tot 320 mg/kg_{DW} in de staat Arizona (*Cornelis en Provoost, 2001*). Voor grondwater is dit eveneens het geval. Deze risicogrenzen ter toetsing van de saneringsnoodzaak variëren van 0,18 µg/l in de staat Oregon tot 511 µg/l in de staat Idaho (*Cornelis en Provoost, 2001*).

In Vlaanderen wordt als toetscriterium van de saneringsnoodzaak van bodem een waarde van 9 mg/kg_{DW} gehanteerd (*Cornelis en Provoost, 2001*). Voor grondwater bestaan in Vlaanderen twee

risicogrenzen, namelijk 300 µg/l als humaan-toxicologische norm en 20-40 µg/l als geur- en smaakdrempel.

Hieruit in te concluderen dat de in deze rapportage weergegeven risicogrens voor bodem in de range ligt van de internationaal gehanteerde risicogrenzen. De in deze rapportage weergegeven risicogrens voor grondwater, met name het voorstel voor de interventiewaarde, is echter relatief hoog ten opzichte van de internationaal gehanteerde risicogrenzen. Dit is mede te verklaren uit de verschillende doelstelling van de risicogrenzen in verschillende landen. In diverse landen wordt als risicogrens in grondwater de veel lagere geur- of smaakdrempel gehanteerd, maar in de regel met minder vergaande consequenties (bijvoorbeeld signaalfunctie of *trigger*functie voor nader onderzoek) als in geval van overschrijding van de interventiewaarde (in principe saneringsnoodzaak).

6.3 Integratie

De integratie van risicogrenzen speelt alleen bij de interventiewaarden, aangezien hier risicogrenzen voor zowel de mens als voor het ecosysteem zijn afgeleid. De streefwaarde is alleen gebaseerd op ecologische risico's (*Min. van VROM, 1988*).

In analogie met het beleidsuitgangspunt wordt voor de uiteindelijke interventiewaarde in principe de laagste waarde gekozen, zodat op het bijbehorende risiconiveau beide beschermingsdoelen beschermd zijn (*Min. van VROM, 1988*). Hiervan wordt alleen afgeweken indien de hogere risicogrens een veel hogere betrouwbaarheid heeft. Dit is voor MTBE niet het geval. De afzonderlijke en geïntegreerde risicogrenzen zijn weergegeven in Tabel 6.1.

Tabel 6.1: Afzonderlijke en geïntegreerde risicogrenzen voor de interventiewaarden

Compartiment	Type risicogrens	Waarden			Eenheid
		Humaan	Eco	Risicogrens	
Bodem/ sediment	Voorstel voor interventiewaarde ¹	221	43,6	44	mg/kg _{DW}
Oppervlaktewater	Voorstel voor interventiewaarde ²		47500	47500	µg/l
Grondwater	Voorstel voor interventiewaarde	9420	47500	9400	µg/l

¹: Deze waarde is geldig voor een standaard bodem met een organisch stofgehalte (OSG) van 10%. Binnen de range van 2 en 30% organische stof dient deze risicogrens te worden gecorrigeerd door vermenigvuldiging met de factor: (werkelijke OSG / 10).

²: Deze waarde geldt zowel voor opgeloste concentratie als totaalconcentratie in oppervlaktewater

Volgens de werkgroep BONS (BeleidsOndersteuningNormStelling) kan er formeel geen sprake kan zijn van de term interventiewaarde, aangezien deze term van toepassing is op verontreinigingssituaties die vóór 1987 zijn ontstaan. De wijze waarop met de terminologie wordt omgegaan, tijdens de eventuele formalisatie van de risicogrenzen (inclusief voorstellen voor interventiewaarden), is ter verantwoording van het beleid.

7. Conclusies en aanbevelingen

Er zijn risicogrenzen afgeleid voor MTBE voor bodem, sediment, grondwater, oppervlaktewater, drinkwater en voor drinkwaterbereiding. Deze zijn in Tabel 7.1 samengevat, evenals de humaan-toxicologische criteria (belangrijke parameters bij de afleiding van de risicogrenzen). Voor de interventiewaarden, waarbij sprake is van twee risicogrenzen, een humaan-toxicologische en een ecologische, is de laagste waarde als de uiteindelijke risicogrens benoemd (**vet** weergegeven in Tabel 7.1).

De risicogrenzen voor bodem/ sediment zijn geldig voor een standaard bodem met een organisch stofgehalte (OSG) van 10%. Binnen de range van 2 en 30% organische stof dient deze risicogrens te worden gecorrigeerd door vermenigvuldiging met de factor: (werkelijke OSG / 10).

De betrouwbaarheid van de berekende risicogrenzen voor bodem/ sediment zijn als “laag” en voor grond- en oppervlaktewater als “gemiddeld” aan te merken.

Tabel 7.1: Samenvatting van de humaan-toxicologische criteria en risicogrenzen voor MTBE.

Humaan-toxicologische criteria

		Eenheid
Max. Toelaatbaar Risico voor blootstelling (MTR _{humaan})	0,3	mg/kg _{BW} /dag
Toelaatbare Concentratie Lucht (TCL)	2,6	mg/m ³

Voorgestelde risicogrenzen

Compartment	Type risicogrens	Waarden			Eenheid
		Humaan	Eco	Risicogrens	
Bodem/ sediment	Voorstel voor streefwaarde ¹	-	0,024	0,024	mg/kg _{DW}
	Voorstel voor interventiewaarde ¹	221	43,6	44	mg/kg _{DW}

Oppervlaktewater	Voorstel voor streefwaarde ²	-	26	26³	µg/l
	Max. Toelaatbare Concentratie ²		2600	2600	µg/l
	Equivalent van interventiewaarde ²		47500	47500	µg/l
Grondwater	Voorstel voor streefwaarde	-	26	26³	µg/l
	Voorstel voor interventiewaarde	9420	47500	9400	µg/l
Drinkwater	Indicatoren-Signaleringswaarde voor drinkwater ⁴	1	-	1	µg/l
	Risicogrens voor drinkwaterbereiding, Geur ⁵	15	-	15	µg/l
	Risicogrens voor drinkwaterbereiding, Smaak ⁵	40	-	40	µg/l
	Risicogrens voor drinkwaterbereiding, Gezondheidsrisico's ⁵	9420	-	9400	µg/l

¹: Deze waarde is geldig voor een standaard bodem met een organisch stofgehalte (OSG) van 10%. Binnen de range van 2 en 30% organische stof dient deze risicogrens te worden gecorrigeerd door vermenigvuldiging met de factor: (werkelijke OSG / 10).

²: Deze waarde geldt zowel voor opgeloste concentratie als totaalconcentratie in oppervlaktewater

³: Beleidsmatig zou overwogen kunnen worden de geurdrempel, 15 µg/l, als voorstel voor de streefwaarde te hanteren

⁴: In geval van overschrijding van deze waarde in het drinkwater hoeft geen sprake te zijn van onacceptabele risico's voor de volksgezondheid, maar is nader onderzoek nodig (Waterleidingsbesluit)

⁵: Het hanteren van een risicogrens voor drinkwaterbereiding op basis van gezondheidsrisico's, smaak, of geur is een beleidsmatige keuze.

Literatuur

ATSDR (1996).

Toxicological profile for methyl-t-butyl ether. US Dept. of Health & Human Services, Public Health Service, Agency for Toxic Substances and Disease Registry, Atlanta (GA), USA.

Bahnick, D.A., W.J. Doucette (1988).

Use of Molecular Connectivity Indices to Estimate Soil Sorption Coefficients for Organic Chemicals. *Chemosphere* 17: 1703-15.

Berg, R. van den, J.M. Roels (1991).

Beoordeling van risico's voor mens en milieu bij blootstelling aan bodemverontreiniging. Integratie van deelaspecten. RIVM rapport 725201007. RIVM, Bilthoven.

Burleigh-Flayer H.D., J.S. Chun, W.J. Kintigh (1992). Methyl-t-butyl ether: vapour inhalation oncogenicity study in CD-1 mice. Report of project 91N0013A, Union Carbide, Bushy Run Research Center, Export (PA), USA.

Chang, R.(1977). Physical chemistry with applications to biological systems; 2nd ed New York ; MacMilland.

Chisala, B.N., N.G. Tait, D.N. Lerner (2004).

Evaluating the risk of methyl tertiary-butyl ether (MTBE) to urban groundwater. *Hydrology: Science & Practice for the 21st Century, Vol. II*: 243-249.

Chun J.S., H.D. Burleigh-Flayer, W.J. Kintigh (1992). Methyl-t-butyl ether: vapour inhalation oncogenicity study in Fischer 344 rats. Report of project no. 91N0013B, Union Carbide, Bushy Run Research Center, Export (PA), USA.

Cornelis, C., J. Provoost (2001). Voorstel voor bodemsaneringsnormen voor MTBE. Vito 2001/IMS/R/060.

Crommentuijn, G.H., E.J. van der Plassche, J.H. Canton, J.H. (1994).

Guidance document on the derivation of ecotoxicological criteria for serious soil contamination in view of the intervention value for soil clean-up. RIVM-rapport 950011003. RIVM, Bilthoven.

Crommentuijn, G.H., R. Posthumus, D.F. Kalf (1995).

Ecotoxicological criteria for serious soil contamination in view of the intervention value for soil clean-up, second and third series of substances. RIVM-rapport 715810008. RIVM, Bilthoven.

Dodd D.E., W.J. Kintigh (1989). Methyl-t-Butyl ether: repeated (13-week) vapor inhalation study in rats with neurotoxicity evaluation. Report no. 52-507, Union Carbide, Bushy Run Research Center, Export (PA), USA.

ECB (2002).

European Union Risk Assessment Report t-butyl methyl ether. European Chemicals Bureau, 3rd Priority list, volume 19; Office for Official Publications of the EC, Luxembourg.

- ECB (2003).
Technical Guidance Document on Risk Assessment, Office for Official Publications of the EC, Luxembourg.
- ECETOC (2003).
Risk assessment report for existing substances: methyl-t-butyl ether. European Chemical Industry Ecology and Toxicology Centre, Special report no. 17, Brussels, Belgium.
- Environmental Agency (2000).
A review of the current MTBE usage and occurrence in groundwater in England and Wales. Environmental Agency R&D Project Report No. 97.
- European Communities (2002).
European Union Risk Assessment Report tert-butyl methyl ether, series: 3rd Priority list, Volume 19.
- GR (1994).
Health based recommended occupational exposure limit - methyl-t-butylether. Report no. 1994/23 of the Dutch Expert Committee on Occupational Standards. Health Council of The Netherlands (Gezondheidsraad), The Hague, The Netherlands.
- Howard, P.H., E.M. Michalenco, W.M. Meylan, D.K. Basu, J.A. Beauman, S.W. Sage, W.F. Jarvis, D.A. Gray (1990). Handbook of Environmental Fate and Exposure Data for Organic Chemicals. Volume IV in Solvents 2. ed. pp. 577: Lewis Publisher.
- Huels, A.G. (1989).
Verteilungskoeffizient n-Oktanol-Wasser (Pow-Wert) für "Altstoffe".
- IARC (1999).
Monographs on the evaluation of carcinogenic risks to humans. Vol. 73: Some chemicals that cause tumours of the kidney or urinary bladder in rodents and some other substances; pp. 339-383. International Agency for Research on Cancer, World Health Organization, Lyon, France.
- IPCS (1998).
Environmental Health Criteria 206: Methyl-t-butyl ether. International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland.
- Janssen P.J.C.M., M.E. van Apeldoorn, J.E.M. van Koten-Vermeulen, W.C. Mennes (1995).
Human-toxicological criteria for serious soil contamination – compounds evaluated in 1993 and 1994. RIVM-rapport 715810009. RIVM, Bilthoven.
- Janssen, M.P.M., T.P. Traas, J-P. Rila, P.L.A. van Vlaardingen (2004).
Guidance for deriving Dutch Environmental Risk Limits from EU-Risk Assessment Reports of existing substances. RIVM-rapport 601501020/2004, RIVM, Bilthoven.
- Karickhoff, S.W. (1981). Semi-empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments. Water Res. 13: 241-248.
- Kreule, P., R. van den Berg, M.F.W. Waitz, F.A. Swartjes (1995).
Calculation of human-toxicological serious soil contamination concentrations and proposals for intervention values for clean-up of soil and groundwater. RIVM-rapport 715810010, RIVM, Bilthoven.

- Lijzen, J.P.A.; A.J. Baars, P.F. Otte, M. Rikken, F.A. Swartjes, E.M.J. Verbruggen, A.P. van Wezel (2001).
Technical evaluation of the Intervention Values for Soil/sediment and Groundwater. Human and ecotoxicological risk assessment and derivation of risk limits for soil, sediment and groundwater. RIVM-rapport 711701023. RIVM, Bilthoven.
- Lijzen, J.P.A., A.J. Baars, P.F. Otte, E.M.J. Verbruggen, A.P. van Wezel (2002).
Achtergronden bij de herziene risicogrenzen voor bodem, sediment en grondwater in het kader van de "Evaluatie interventiewaarden bodemsanering". RIVM, Bilthoven. report 711701028/2002.
- Lyman, W.J. et al. (1982). Handbook of Chem. Property Estimation Methods Environmental Behavior of organic Compounds NY. Mc Graw-Hill.
- Meylan, W., P.H. Howard, R.S. Boethling (1992).
Molecular Topology/Fragment Contribution Method for Predicting Soil Sorption Coefficients. Environ. Sci. Technol. 26: 1560-7.
- Min.van VROM (1988).
Omgaan met risico's. Bijlage bij National MilieuBeleidsplan. Tweede Kamer-sessie 1988-1989, 21 137, no. 5.
- Min.van VROM (2000).
Circulaire van streefwaarden en interventiewaarden. DBO/1999226863. 4 februari 2000.
- Morgenstern P.P., G.A.L. Korte de, E.A. Hogendoorn, J.F.M. Versteegh (2002).
De aanwezigheid van methyl tert-butylether (MTBE) in drinkwater en drinkwaterbronnen. RIVM-rapport 703719001. RIVM, Bilthoven.
- Otte, P.F. J.P.A. Lijzen, J.G. Otte, F.A. Swartjes, C.W. Versluijs (2001).
Evaluation and revision of the CSOIL parameter set. RIVM-rapport 711701021, RIVM, Bilthoven.
- Prins, Th.M. MtBE: Wat is de praktijk? (2002)
In: P. van Mullekom (Ed.). Samenvattingen (Voordrachten en posters) Bodem Breed 2002: 60.
- Rikken, M.G.J, J.P.A. Lijzen, A.A. Cornelese (2001).
Evaluation of model concepts on human exposure; proposals for updating of the most relevant exposure routes of CSOIL. RIVM-rapport 711701022, RIVM, Bilthoven.
- RIVM (1997).
Herevaluatie MTR (lucht, humaan) van methyl-t-butylether. RIVM/CSR brief report 1670/97 CSR HK/WM/pw dated June 13, 1997. National Institute of Public Health and the Environment (RIVM), Bilthoven, The Netherlands.
- RIVM (2002).
Aflleiding van een toxicologische drinkwaterrichtlijn voor methyl-t-butylether. Unnumbered RIVM/CSR report dated May 7, 2002. National Institute of Public Health and the Environment (RIVM), Bilthoven, The Netherlands.
- Robinson, M., R.H. Bruner, G.R. Olson (1990). Fourteen- and ninety-day oral toxicity

studies of methyl tertiary-butyl ether in Sprague-Dawley rats. *Journal of the American College of Toxicology*, 9, 525-540.

Sabljić, A., H. Güsten, H. Verhaar, J. Hermens (1995).

Qsar modelling of soil sorption. Improvement and systematics of log K_{oc} vs. log K_{ow} correlations. *Chemosphere* 31: 11-12; 4489-4514.

Schmidt, C.T., P. Kleinert, C. Stengel, B.S. Haderlein (2002).

Polar Fuel Constituents: Compound Identification and Equilibrium Partitioning between Nonaqueous Phase Liquids and Water. *Eviron. Sci. Technol.* 36, 976-978.

Swartjes, F.A. 2002.

Variation in calculated human exposure: Comparison of calculations with seven European human exposure models. RIVM-rapport 711701030. RIVM, Bilthoven.

Trapp, S., M. Matthies (1995). Generic one-compartment model for uptake of organic chemicals by foliar vegetation. *Environmental Science and Technology*, vol. 29, no.9, 2333-2338.

US-EPA (1993).

Integrated Risk Information System (IRIS): methyl-t-butyl ether, dated September 1, 1993. US Environmental Protection Agency, Washington DC, USA.

Vonk, M.W. (1985). Permeation of organic chemicals through piping materials.

Mededelingen no. 85, KIWA, Nieuwegein, The Netherlands (in Dutch), also in: *H₂O*, 18: 529-538 (in Dutch).

Waitz, M.F.W., J.I. Freijer, P. Kreule, F.A. Swartjes (1996).

The Volasoil risk assessment model based on CSOIL for soils contaminated with volatile compounds. RIVM, Bilthoven, RIVM report 715810014.

Zogorsky, J., A. Morduchowitz, A. Baehr, B. Bauman, J. Pankow, E. Washington (1997).

Fuel Oxygenates and Water Quality Coordinated by the Interagency Oxygenated Fuel Assessment. Washington, DC: Office of Science and Technology Policy, Executive Office of the President.

Geraadpleegde databases, datasets en secundaire bronnen

- Chemiekaarten Negentiende editie 2004. Uitgeverij ten Hagen Stam.
- EFOA (2002). MTBE Resource Guide. The European Fuel Oxygenates Association.
www.efoa.org
- Mackay, D., Shiu, W. and Ma, K. (2000). Physical-Chemical properties and environmental fate handbook. CRC netbase 2000.
- Hazardous Substances Data bank (HSDB). 1990 to present. The National Library of Medicine.
- Epiwin v. 3.10, EPI SUITE. US EPA, 1990-2000.
- Merck Index, version 12:1 (on CD-ROM)
- IUCLID 2000 CD-rom ed., ECB ESIS.

Bijlage 1 Brieven met de adviesaanvraag

B1.1 Adviesaanvraag werkgroep BONS

Beste collega

Aangezien de werkgroep BONS de komende weken niet bij elkaar zal komen, informeer ik u schriftelijk over afgeleide risicogrenzen voor MTBE en verzoek u om schriftelijk commentaar.

Bijgesloten vindt u een concept-rapport, genaamd **Risicogrenzen voor MTBE (Methyl tertiair-Butyl Ether) in grond en grondwater, oppervlaktewater en drinkwater**. Deze rapportage werd opgesteld in opdracht van DGM/ Directie Locale Milieukwaliteit en Verkeer (LMV). In het programma van eisen werd onder andere toetsing in de werkgroep BONS opgenomen. Tevens hechten wij zelf aan een beleidsmatige toetsing. Derhalve wordt u vriendelijk verzocht het concept-rapport te toetsen voor wat betreft de implementatie van de voorgestelde risicogrenzen in het beleid van de beoordeling van bodemverontreiniging. Graag ontvingen wij uiterlijk 20/10/2004 uw commentaar*. Meer specifiek zijn de volgende vragen van belang:

- Zijn de voorgestelde risicogrenzen bruikbaar voor (of tenminste niet conflicterend met) toepassing in de dagelijkse praktijk van de beoordeling van bodemverontreiniging? Zo niet: kunt u hiertoe de reden en/of voorstellen voor verbetering aangeven?
- Sluiten de gevolgde procedure en de hieruit resulterende risicogrenzen aan bij het op dit moment in bewerking zijnde nieuwe bodembeleid (de Beleidsbrief)?
- Heeft u aanvullende op- of aanmerkingen bij, respectievelijk op het concept-rapport?

U wordt hartelijk bedankt, bij voorbaat, voor uw commentaar! Met vriendelijke groet,

Dr.ir. Frank Swartjes

*fa.swartjes@rivm.nl

RIVM, F.A. Swartjes, Postbus 1, 3720 BA Bilthoven

B1.2 Adviesaanvraag OnderzoeksBegeleidingsgroep humaan

Beste collega

Aangezien de OZBGhumaan de komende weken niet bij elkaar zal komen, informeer ik u schriftelijk over afgeleide risicogrenzen voor MTBE en verzoek u om schriftelijk commentaar.

Bijgesloten vindt u een concept-rapport, genaamd **Risicogrenzen voor MTBE (Methyl *tertiair*-Butyl Ether) in grond en grondwater, oppervlaktewater, sediment en drinkwater**. Deze rapportage werd opgesteld in opdracht van DGM/ Directie Locale Milieukwaliteit en Verkeer (LMV). In het programma van eisen werd onder andere toetsing in de OZBGhumaan opgenomen. Tevens hechten wij zelf aan een inhoudelijke toetsing. Derhalve wordt u vriendelijk verzocht het concept-rapport te toetsen voor wat betreft de humaan-toxicologische onderbouwing. Graag ontvangen wij uiterlijk 20/10/2004 uw commentaar. Meer specifiek zijn de volgende vragen van belang:

- Vindt de humaan-toxicologische onderbouwing van de risicogrenzen voor grond (interventiewaarden) en drinkwater correct en volgens de huidige stand der wetenschap plaats? Zo niet: kunt u voorstellen voor verbetering aangeven?
- Is de afstemming met internationale risicogrenzen van MTBE voldoende geborgd? Zo niet: kunt u voorstellen voor verbetering aangeven?
- Heeft u verdere op- of aanmerkingen over de humaan-toxicologische onderbouwing van de risicogrenzen voor grond (interventiewaarden) en drinkwater?
- Heeft u aanvullende op- of aanmerkingen bij, respectievelijk op het concept-rapport als geheel?

U wordt hartelijk bedankt, bij voorbaat, voor uw commentaar! Met vriendelijke groet,

Ir. J.P.J. Lijzen (secretaris OZBGhumaan)

B1.3 Adviesaanvraag wetenschappelijk klankbord INS

Beste collega

Aangezien het wetenschappelijk klankbord INS de komende weken niet bij elkaar zal komen, informeer ik u schriftelijk over afgeleide risicogrenzen voor MTBE en verzoek ik u om schriftelijk commentaar. Het afronden van dit rapport maakt het helaas niet mogelijk dit rapport in de komende klankbordgroep INS te behandelen.

Bijgesloten vindt u een concept RIVM-rapport, genaamd **Risicogrenzen voor MTBE (Methyl tertiair-Butyl Ether) in grond en grondwater, oppervlaktewater, sediment en drinkwater**. Deze rapportage werd opgesteld in opdracht van DGM/ Directie Locale Milieukwaliteit en Verkeer (LMV). In het programma van eisen werd onder andere toetsing in de Wetenschappelijke Klankbordgroep INS (voorheen OZBG-eco) opgenomen. Tevens hechten de auteurs zelf aan een inhoudelijke toetsing. Derhalve wordt u vriendelijk verzocht het concept-rapport te toetsen voor wat betreft de ecologische onderbouwing. Graag ontvingen ik uiterlijk 20/10/2004 uw commentaar.

Meer specifiek zijn de volgende vragen van belang:

- Vindt de ecologische onderbouwing van de risicogrenzen voor grond (streef- en interventiewaarden), sediment en oppervlaktewater correct en volgens de huidige stand der wetenschap plaats? Zo niet: kunt u voorstellen voor verbetering aangeven?
- Is de afstemming met internationale risicogrenzen van MTBE voldoende geborgd? Zo niet: kunt u voorstellen voor verbetering aangeven?
- Heeft u verdere op- of aanmerkingen over de ecologische onderbouwing van de risicogrenzen voor grond (streef- en interventiewaarden), sediment en oppervlaktewater?
- Heeft u aanvullende op- of aanmerkingen bij, respectievelijk op het concept-rapport als geheel?

U wordt hartelijk bedankt, bij voorbaat, voor uw commentaar! Met vriendelijke groet,

Martien Janssen
Expert Centre for Substances , RIVM
P.O.Box 1
3720 BA Bilthoven
The Netherlands
phone +31-30-2742276
fax +31-30-2744401
E-mail: Martien.Janssen@rivm.nl

Bijlage 2: Gevonden fysisch-chemische data voor MTBE

Methyl-T-Butyl-ether (MTBE) 1634-04-4		OPLOSBAARHEID		
database / dataset / review / etc.	S	Eenheid	T (°C)	S in mg/dm ³ (bij T = 10°C), genoemde referentie / verwijzing/primaire bron
Chemiekaarten, 19 ed., 2004	5.10E+04	mg/l	25	3.91E+04
HSDB: Hazardous Substance Database	5.10E+04	mg/l	25	3.91E+04 Bennett GM, Philip WG; J Chem Soc pp. 1930-7 (1928)
Merck	4.80E+04	mg/l	25	3.68E+04
Mackay database, CDROM, 1999	5.16E+04	mg/l	25	3.96E+04 thermostatic volumetric, Bennet & Phillip 1928)
Mackay database, CDROM, 1999	5.43E+04	mg/l	25	4.17E+04 Hansch et al., 1968)
Mackay database, CDROM, 1999	4.80E+04	mg/l	25	3.68E+04 Windholz 1983; Budavari 1989
Mackay database, CDROM, 1999	4.20E+04	mg/l	19.8	3.51E+04 Stephenson, 1992
Mackay database, CDROM, 1999	3.10E+04	mg/l	29.6	2.22E+04 Stephenson, 1992
Mackay database, CDROM, 1999	5.43E+04	mg/l	25	4.17E+04 Wang et al., 1992
Epiwin	5.10E+04	mg/l	25	3.91E+04 Bennett GM, Philip WG; J Chem Soc pp. 1930-7 (1928)
Epiwin	1.98E+04	mg/l	25	1.52E+04 calc. WSKOW using exp Kow of 0.94
EFOA, 2002	4.20E+01	g/l	20	3.49E+04 selected voor EUSES, Risk assessment
IUCLID 2000 CD-rom ed.	2.60E+01	g/l	10	2.60E+04 ARCO CHEMIE NEDERLANDS LTD R'dam
IUCLID 2000 CD-rom ed.	2.60E+01	g/l	10	2.60E+04 ARCO chem Euriope, Inc. Maidenhead, berkshire
IUCLID 2000 CD-rom ed.	4.20E+00	?	20	ARCO chem Euriope, Inc. Maidenhead, berkshire
IUCLID 2000 CD-rom ed.	4.30E+00	?	20	ARCO CHEMIE NEDERLANDS LTD R'dam
IUCLID 2000 CD-rom ed.	4.80E+01	g/l	20	3.99E+04 ARCO chem Euriope, Inc. Maidenhead, berkshire
IUCLID 2000 CD-rom ed.	5.00E+01	g/l	25	3.83E+04 ARCO chem Euriope, Inc. Maidenhead, berkshire
IUCLID 2000 CD-rom ed.	2.60E+01	g/l	26	1.96E+04 MABANAFT GmbH Hamburg
geometrisch gemiddelde mediaan				3.24E+04
EU RAR, 2001	4.20E+01	g/l	20	3.68E+04
				3.49E+04
percentile 10				21162
percentile 90				40616
standaard dev				8380

Methyl-T-Butyl-ether (MTBE) 1634-04-4		DAMPDRUK					
database / dataset / review / etc.	Vp	eenheid	Vp in Pa	T	Vp bij T=10 C	opmerking	genoemde referentie / verwijzing / primaire bron
Mackay database, CDROM, 1999	3.27E+04	Pa	3.27E+04	25	17472		Windholz 1983; Budavari 1989
Mackay database, CDROM, 1999	3.35E+04	Pa	3.35E+04	25	17945	berekend	calculated-Antoine-eqn: Stephenson & Malanowski 1987)
Merck	2.45E+02	mm Hg	3.27E+04	25	17475		
Chemiekaarten, 19 ed., 2004	2.68E+02	mbar	2.68E+04	20	17536		
HSDB: Hazardous Substance Database	2.50E+02	mm Hg	3.33E+04	25	17832	berekend	Daubert, T.E., R.P. Danner. Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and
	2.52E+02	mmHg	3.36E+04	25	17974	berekend	mean of Antoine & Grain methods
EU RAR, 2001	2.70E+02	hPa	2.70E+04	20	17667		IUCLID, (CRC, 1996)
EU RAR, 2001	3.30E+02	hPa	3.30E+04	25	17653		IUCLID, (CRC, 1996)
IUCLID 2000 CD-rom ed.	2.68E+02	hPa	2.68E+04	20	17536		ARCO chemie Nederlands LTD R'dam
IUCLID 2000 CD-rom ed.	2.68E+02	hPa	2.68E+04	20	17536		ARCO chemicals Europe
IUCLID 2000 CD-rom ed.	2.68E+02	hPa	2.68E+04	20	17536		ARCO chemicals Europe
IUCLID 2000 CD-rom ed.	2.68E+02	hPa	2.68E+04	20	17536		MABANAFT GmbH (1994)
IUCLID 2000 CD-rom ed.	2.70E+02	hPa	2.70E+04	20	17667		ARCO chemicals Europe Inc. Maidenhead berkshire
IUCLID 2000 CD-rom ed.	3.30E+02	hPa	3.30E+04	25	17653		ARCO chemie Nederlands LTD R'dam
IUCLID 2000 CD-rom ed.	3.30E+02	hPa	3.30E+04	25	17653		Anonima Petroli Italiana ROMA
IUCLID 2000 CD-rom ed.	3.30E+02	hPa	3.30E+04	25	17653		ARCO chemicals Europe Inc. Maidenhead berkshire
IUCLID 2000 CD-rom ed.	3.30E+02	hPa	3.30E+04	25	17653		Statoil A/S Kopenhagen
IUCLID 2000 CD-rom ed.	3.30E+02	hPa	3.30E+04	25	17653		Statoil Iteland Ltd. Dublin
IUCLID 2000 CD-rom ed.	3.34E+02	hPa	3.34E+04	25	17867		ARCO chemie Nederlands LTD R'dam
IUCLID 2000 CD-rom ed.	3.34E+02	hPa	3.34E+04	25	17867		Anonima Petroli Italiana ROMA
IUCLID 2000 CD-rom ed.	3.34E+02	hPa	3.34E+04	25	17867		ARCO chemicals Europe Inc. Maidenhead berkshire
IUCLID 2000 CD-rom ed.	3.34E+02	hPa	3.34E+04	25	17867		Statoil A/S Kopenhagen
IUCLID 2000 CD-rom ed.	3.34E+02	hPa	3.34E+04	25	17867		Statoil Ireland Ltd. Dublin
IUCLID, 1996	3.30E+02	hPa	3.30E+04	25	17653		REPSOL PETROLEO, SA MADRID, 1985
IUCLID, 1996	3.35E+02	hPa	3.35E+04	25	17921		Ambrose et al., 1976
IUCLID, 1996	4.08E+02	hPa	4.08E+04	30			ARCO, 1989
IUCLID, 1996	482.1-551.7	hPa	5.17E+04	38			ARCO, june 1993
IUCLID, 1996	5.99E+02	hPa	5.99E+04	40			ARCO, 1989 (DIPPR database
IUCLID, 1996	6.05E+02	hPa	6.05E+04	40			ARCO 1989
EFOA, 2002	3.34E+04	Pa	3.34E+04	25	17867	SELECTED BY EFOA, 2002	
geometrisch gem. geselecteerde waarden					17680		
standaardafwijking					158		
percentile 10					17536		
percentile 90					17867		

Methyl-T-Butyl-ether (MTBE)
1634-04-4

Log Kow

database / dataset / review / etc.

waarde

geselecteerd

karakteristiek

genoemde referentie / verwijzing / primaire bron

Chemiekaarten, 19 ed., 2004

database / dataset / review / etc.	waarde	geselecteerd	karakteristiek	genoemde referentie / verwijzing / primaire bron
HSDB: Hazardous Substance Database	9.40E-01		QSAR waarde?	Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995. 15
Mackay database, CDROM, 1999	1.06	1.06	calc.?	Hansch et al., 1968; Kier & Hall 1976)
Mackay database, CDROM, 1999	1.06		calc.	predicted-x, Murray et al., 1975
Mackay database, CDROM, 1999	1.16		calc.	calculated-x, Kier & Hall 1976
Mackay database, CDROM, 1999	1.30		calc.	calc. F-constant., Hansch & Leo 1979; quated veith et al., 1983
Mackay database, CDROM, 1999	0.94	0.94		shake flask-GC, Funasaki et al., 1985; quoted Sangster 1989
Mackay database, CDROM, 1999	1.30		calc.	Abernethy et al., 1989
Mackay database, CDROM, 1999	0.94			recommended, Sangster, 1989
Mackay database, CDROM, 1999	0.94			quoted, van Leeuwen et al., 1992
Epiwin	0.94		calc.	Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society., 1995. 15
Epiwin	1.43		calc.	KOWWIN v. 1.66
EU RAR, 2001	1.06	1.06	acc. OECD /GL	Huels AG, 1989
EU RAR, 2001	1.06			IUCLID, GLP study
EU RAR, 2001	0.94			shake flask-GC, Funasaki et al., 1985; quoted Sangster 1989
EU RAR, 2001	1.24	1.24		Fujiwara et al., 1984
EU RAR, 2001	1.3	1.30		Veith, GD et al., 1983
EU RAR, 2001	1.06		calc.	Hansch C, et al., J Org Chem (1968) 33:347
EU RAR, 2001	1.24		calc.	REPSOL PETROLEO, A.A.
IUCLID 2000 CD-rom ed.	0.94	0.94		ARCO chemicals Europe Inc. Maidenhead berkshire
IUCLID 2000 CD-rom ed.	1.06-1.24		calc.	Statoil A/S Kopenhagen
IUCLID 2000 CD-rom ed.	1.06-1.24		calc.	Anonima Ptroli Italiana ROMA
IUCLID 2000 CD-rom ed.	1.06	1.06		Flask-shaking method, Arco Chem Europe R'dam
IUCLID 2000 CD-rom ed.	1.06		calc.	ARCO chemicals Europe Inc. Maidenhead berkshire
IUCLID 2000 CD-rom ed.	1.06	1.06	acc. GLP	MABANAFT GmbH Hamburg
EFOA, 2002	1.06E+00			selected voor EUSES, Risk assessment
rekenkundig gemiddelde			1.08	
min			0.94	
max			1.30	
mediaan			1.06	
st. dev			0.13	

Methyl-T-Butyl-ether (MTBE)
1634-04-4

Henry constante

Standaardeenheden

database / dataset / review / etc.

waarde

Eenheid

waarde

Eenheid

H constante
dimensieloos

opmerking

genoemde referentie / verwijzing / primaire bron

database / dataset / review / etc.	waarde	Eenheid	waarde	Eenheid	H constante dimensieloos	opmerking	genoemde referentie / verwijzing / primaire bron
HSDB: Hazardous Substance Database	5.87E-04	atm m3/m	5.95E+01	Pa m3/mo	2.53E-02 (20 C)		Hine J and Mookerjee PK; J Org Chem 40: 292-8 (1975)
Mackay database, CDROM, 1999	5.95E+01	Pa.m3/mo	5.95E+01	Pa m3/mo	2.53E-02		calc. Hine&Mookerjee 1975
Mackay database, CDROM, 1999	1.43E+02	Pa.m3/mo	1.43E+02	Pa m3/mo	6.06E-02		calc. Hine&Mookerjee 1975
Mackay database, CDROM, 1999	3.05E+02	Pa.m3/mo	3.05E+02	Pa m3/mo	1.30E-01		calc. Hine&Mookerjee 1975
Mackay database, CDROM, 1999	6.00E+01	Pa.m3/mo	6.00E+01	Pa m3/mo	2.55E-02		calculated P/C using indholz 1983 data
Epiwin	5.87E-04	atm m3/m	5.95E+01	Pa m3/mo	2.53E-02		exp.database
Epiwin	2.02E-03	atm m3/m	2.05E+02	Pa m3/mo	8.69E-02	calc	Bond method, HENRYWIN v 3.10
Epiwin	1.44E-03	atm m3/m	1.46E+02	Pa m3/mo	6.20E-02	calc	GROUP method, HENRYWIN v 3.10
Epiwin	1.48E-03	atm m3/m	1.50E+02	Pa m3/mo	6.35E-02	calc	VP/WSol est using EPI values
EU RAR, 2001	4.50E-04	atm m3/m	4.56E+01	Pa m3/mo	1.94E-02		Nest Co. Safety Data Sheet
EU RAR, 2001	4.33E-04	atm m3/m	4.39E+01	Pa m3/mo	1.86E-02	measured	Robbins et al., 1993
EU RAR, 2001	5.28E-04	atm m3/m	5.35E+01	Pa m3/mo	2.27E-02	measured	Robbins et al., 1993
EU RAR, 2001	5.87E-04	atm m3/m	5.95E+01	Pa m3/mo	2.53E-02		Howard 1990
EU RAR, 2001	5.46E-04	atm m3/m	5.53E+01	Pa m3/mo	2.35E-02		seleced RAR value
EFOA, 2002	7.01E+01	Pa m3/mo	7.01E+01	Pa m3/mo	2.98E-02		selected voor EUSES, Risk assessment

3.52E-02

4.38E-02

2.05E-02 berekend uit S en VP

Stof CAS nummer Eigenschap/Referentienr. Log Koc	Methyl-T-Butyl-ether (MTBE) 1634-04-4			Temperatuur (1 ^o Referentie	
	log Koc	Koc Koc	log Koc selected		
HSDB: Hazardous Epiwin	6	0.778	6.0	0.78	Shatter KL and Uchrin CG; Bull Environ Contam Toxicol 59: 744-9 (1997) PCKOCwin Schmidt, C.T., Kleinert, P., Stengel, C. and Haderlein, B.S., 2002. Polar Fuel Constituents: Compound Identification and Equilibrium Partitioning between Non Aqueous Phase Liquids and Water. Envir. Sci. Technol., 36, 4070- FROM SOLUBILITY DATA FROM KOW data Howard, 1993 acc Sabljic, predominantly hydrophobics (Kow 1.06) acc Sabljic, predominantly hydrophobics (Kow 1.06) selected EU RAR
	13	0.721	5.3	0.72	
Chisala, B.N. et al., 2004		0.940	8.7		blijkt een
EU RAR, 2001	14	1.090	12.3	1.09	log Kow te zijn
EU RAR, 2001	14	1.040	10.96	1.04	
EU RAR, 2001	14	1.049	11.2	1.05	
EU RAR, 2001	14	0.959	9.1	0.96	
EU RAR, 2001	14	1.571	37.3		
EU RAR, 2001		1.050	11.2	1.05	
Sabljic QSAR		1.571	37.3	1.57	
EFOA, 2002		1.0-1.1	11.2	1.05	Zogorski, 1997
rekenkundig gemiddelde				1.03	
mediane waarde				1.05	
min				0.72	
max				1.57	
st dev				0.24	
aantal				9	

Bijlage 3: Basisgegevens voor onderbouwing humaan-toxicologische criteria

B3.1 Toxicology

B3.1.1 Toxicokinetics

Absorption

MTBE is rapidly and well absorbed following oral and inhalation exposure. In rats oral absorption is virtually complete, while inhalation absorption was approximately 50% (*Miller et al., 1997, BRL 1990b*). For humans no firm data on oral absorption are available, but the limited data indicate similar uptake kinetics compared with rats. Inhalation absorption by humans was reported to vary between 32 and 49% with an average of 38% (*Pekari et al., 1996; Nihlén et al., 1998; Prah et al., 2000*). Following occluded exposure, dermal absorption in rats is about one-third of the oral rate, but it is assumed that non-occluded skin contact results in lower bioavailability, mainly due to MTBE's high volatility (*Miller et al., 1997; BRL 1990a-d, 1991; Prah et al., 2000*).

Distribution

MTBE is distributed extensively in the mammalian body. It is moderately soluble in blood, and 7-10 times more soluble in fat tissues. Solubilities in rat liver and muscle were quite similar to that in blood, but in male rat kidney it was 6 times higher than in blood (*Borghoff et al., 1990*), which is believed to be species- and sex-specific: there is strong evidence that MTBE interacts with α_2 -globulin (a protein specifically occurring in male rat kidney; *Poet and Borghoff 1997; Prescott-Mathews et al., 1999*).

In rats whole body exposed to MTBE at 50 - 300 ppm (180 - 1100 mg/m³) for periods from 2 to 15 weeks, tissue concentrations were directly exposure-related throughout the whole study period (*Savolainen et al., 1985*).

Biotransformation

In rats and humans MTBE is oxidatively metabolised to t-butanol (TBA) and formaldehyde (only observed *in vitro*); formaldehyde is known to be rapidly metabolised to formic acid and CO₂, or becomes incorporated into the one-carbon pool (*McMartin et al., 1979; Savolainen et al., 1985; Miller et al., 1997; Nihlén et al., 1998, 1999; Amberg et al., 1999*). TBA in turn is metabolised to 2-methyl-1,2-propanediol and 2-hydroxyisobutyric acid; next to these, low amounts of free TBA, TBA-glucuronide, and another conjugate (probably TBA-sulphate) were identified in urine. After inhalation exposure of rats and humans more than half of the MTBE retained in the body was biotransformed to urinary metabolites and less than half was exhaled unchanged, however, rats exposed to a high level (8000 ppm during 6 h, approx. 30 gram per m³) the main part was exhaled indicating metabolic saturation (*Miller et al., 1997*:

Nihlén et al., 1998; Amberg et al., 1999). The biotransformation of MTBE is depicted in Figure B3.1.

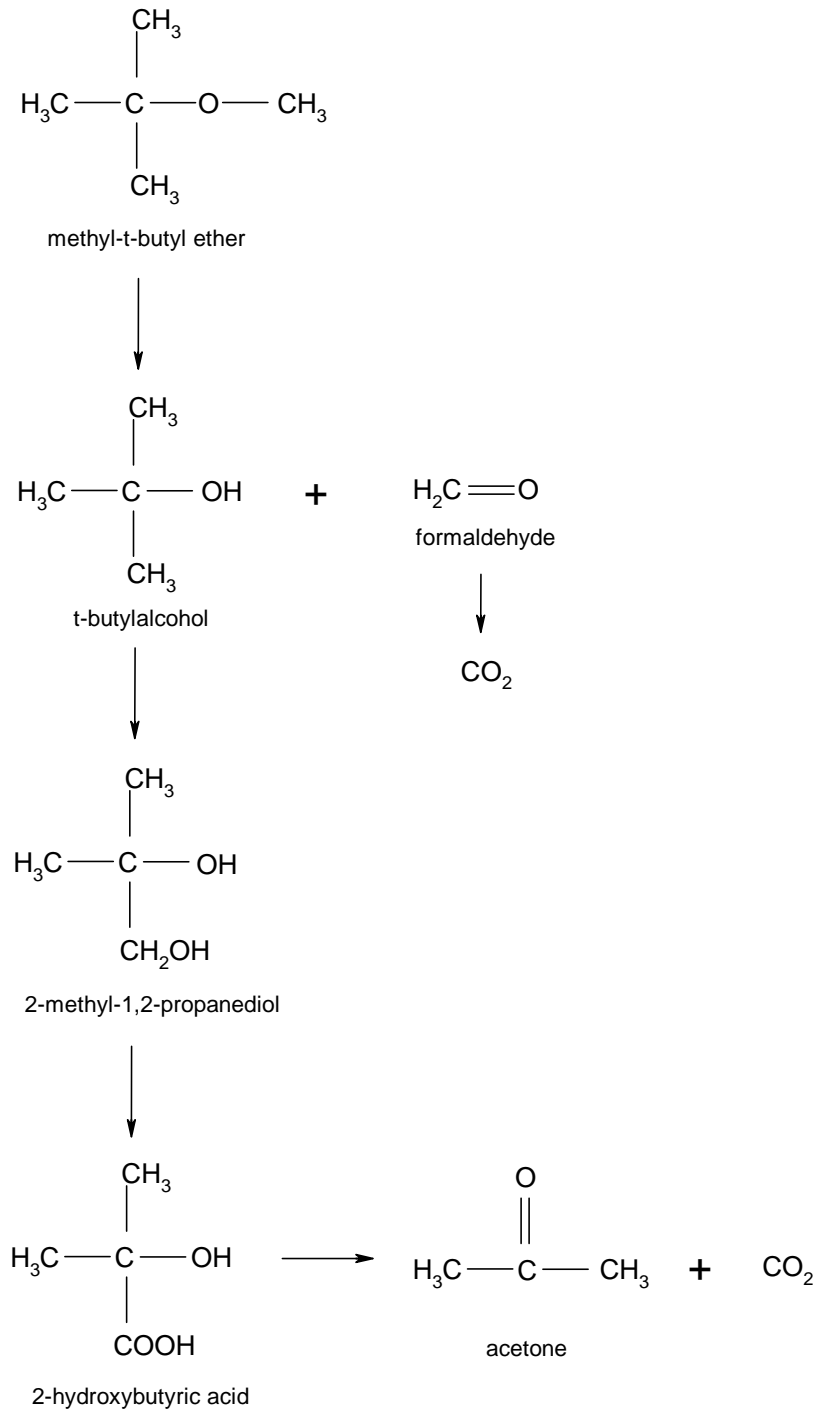


Figure B3.1: Biotransformation of MTBE.

Excretion

With all routes of administration, MTBE given to rats is rapidly removed from the blood by exhalation and by biotransformation to TBA. Elimination is rapid and largely completed within 24 h after administration. Metabolites are mainly excreted in the urine; less than 2% is found in the faeces. At higher doses a higher proportion of MTBE is exhaled, indicating saturation of metabolic pathways. The apparent plasma half life of MTBE is in the range of 0.45 to 2.3 h. Following administration of radiolabelled MTBE to rats, the excretion of radioactivity via expired air was virtually complete 3 h after treatment, and consisted mainly of parent compound. The results of all kinetic experiments indicate that the general elimination of MTBE is not route or sex dependent, and is rather similar in experimental animals and in humans (*Leuschner et al., 1991; Johanson et al., 1995; Pekari et al., 1996; Miller et al., 1997; Nihlén et al., 1998; Dekant et al., 2001*).

After exposure to MTBE, TBA is found in blood for a longer period and at higher concentrations than MTBE. The elimination half-life of TBA in blood is approximately 3 h in rats (*BRL, 1990a, b*) and approximately 10 h in humans (*Prah et al., 2000*).

It can be concluded that MTBE or its metabolites will not accumulate in the human body to a significant extent (*ECB, 2002*).

B3.1.2 Acute toxicity

Animal studies

Symptoms of acute toxicity after oral exposure included hunching, piloerection, hypoactivity, hyperpnea, prostration and muscular weakness. High dose levels also provoke inflammation of the stomach and intestine. The oral LD₅₀ is 3.8 – 3.9 gram per kg bw (*ARCO, 1980; RBM, 1996c*).

Inhalation resulted in irritation of eyes and nose, lack of co-ordination, and irregular and rapid breathing. In another study ataxia, tremors, lacrimation, muscular contractions and hypoactivity were observed. In surviving animals congestion of blood in the lungs was seen. The LC₅₀ is 85 - 120 mg/L (4 h exposure; *Mastri et al., 1969; ARCO, 1980*).

Dermal exposure of rats to 2 gram per kg bw resulted only in slight erythema at the sight of application, signs of systemic toxicity were not noted (*RBM, 1996c*). In two rabbit studies (doses of 6,8 and 10,2 gram per kg bw) erythema and slight to moderate oedema were reported; mortality did not occur; the LD₅₀ was reported to be > 10 gram per kg bw (*Mastri et al., 1969; ARCO, 1980*).

Human studies

In humans treated with MTBE for dissolution of gallstones or bile duct stones usually small quantities are instilled by a transhepatic or nasobiliary catheter during up to 7 days, to a total volume of 30 - 480 ml (*Neoptolemos et al., 1990; Leuschner et al., 1991*). During dissolution treatment in 5-25% of the patients mild complications were seen, including nausea, drowsiness, vomiting, and local burning sensations. In human volunteer studies with inhaled

MTBE mild symptoms of central nervous system toxicity were reported (*Prah et al., 1994; Nihlén et al., 1998*).

B3.1.3 Irritation

Skin

Rabbit skin exposed to MTBE for 4 h under occlusion (according to OECD guidelines) showed one h after exposure moderate to severe oedema and moderate erythema, these effects lasted 8 days (*Mürmann, 1985*). Another similar study with rabbits resulted in slight erythema but no oedema (*RBM, 1996a*). MTBE can be considered a skin irritant, but it is not corrosive (*ECB, 2002*).

Eye

An eye irritation study with rabbits (according to OECD guidelines) resulted in redness of the conjunctiva and inflammation of the iris starting one h after application which lasted for 72 h (*RBM, 1996b*). Several Draize tests showed transient corneal opacity and irritation to the iris and conjunctiva, these effects were all reversible (*Mastri et al., 1969; Cuthbert 1979*). Despite MTBE's slight eye-irritating properties, on the basis of the EU guidelines it is not classified as an eye irritant (*ECB, 2002*).

Respiratory tract

MTBE vapours caused slight to transient irritation of the respiratory tract of experimental animals: a sensory irritation threshold (13% reduction of breathing rate) of 300 mg/m³ was reported, there were no indications of lung injury (*Tepper et al., 1994*).

Sensitisation

A Magnusson-Kligman maximisation test with guinea pigs did not show hypersensitivity reactions (*Cuthbert, 1979*); also another sensitisation study was negative (*ARCO, 1980*). MTBE is considered not sensitising in guinea pigs (*ECB, 2002*).

Human studies

At 270 mg/m³ during 2 h (with light physical exercise) MTBE caused subjective symptoms of irritation of the respiratory tract and heaviness in the head in young non-smoking healthy volunteers; these symptoms were not recorded at 180 mg/m³. Objective symptoms of eye or nose irritation could not be found (*Prah et al., 1994; Johanson et al., 1995; Cain et al., 1996; Riihimäki et al., 1996; Nihlén et al., 1998*). Observations on sensitising potential in humans are not available (*ECB, 2002*).

B3.1.4 Mutagenicity

MTBE

Out of nine bacterial gene mutation tests with *Salmonella typhimurium*, only one (with metabolic activation) was positive, but the metabolic activation could have been responsible for formaldehyde involvement. The same holds for the one positive result in two mouse lymphoma gene mutation tests. One *in vitro* UDS test (rat hepatocytes) was positive, but two other well-conducted tests were negative. Two gene mutation tests with CHV79 cells were negative, as was a chromosome aberration test with CHO cells. Two SCE tests with CHO cells and a mouse micronucleus tests were also negative (ECB, 2002).

Of the reported *in vivo* tests, a sex-linked recessive lethal test in *Drosophila melanogaster*, a mouse UDS test, a mouse spleen lymphocyte gene mutation test, two mouse erythrocyte micronucleus tests, a rat cytogenetic bone marrow test, and a rat bone marrow chromosome aberration test were all negative. Only a Comet assay on rat lymphocytes was positive, but the biological significance of this test result is questionable (ECB, 2002). Based on the available information, MTBE cannot be considered a mutagen (ECB, 2002).

Formaldehyde and TBA

Formaldehyde is mutagenic in a number of *in vitro* assays, but this activity decreases when S9 is added, indicating rapid conversion of formaldehyde to non-mutagenic products (such as formate) (ECB, 2002). Also experiments with endogenously produced formaldehyde suggested strongly that the rate of formation of formaldehyde from MTBE was slow relative to its rate of oxidation to formate and incorporation in the one-carbon pool of the organism (Casanova and Heck, 1997).

TBA has been tested for its ability to induce gene mutations in several *Salmonella typhimurium* strains, but the results were negative, with as well as without S9 metabolic activation. A mouse lymphoma cell assay scored positive regarding forward mutations, but the results could not be reproduced. Chromosome aberration tests with CHO cells were negative. Also an *in vivo* micronucleus test in mouse erythrocytes was negative (NTP, 1995, 1997).

B3.1.5 Subacute and subchronic toxicity

In several subacute and subchronic studies with rats and mice the principal target organs were liver and kidneys; generally adverse effects were seen at LOAELs for oral exposures ≥ 300 mg/kg bw/day and inhalation exposures ≥ 10 gram/m³. The studies are summarised in Table B3.1. Degenerative changes and protein droplet nephropathy of the male rat kidney proximal tubules are most commonly seen. In the inhalation studies up to 3.5 gram/m³ only slight indications of kidney toxicity are seen: at 15 gram per m³ male rats showed clear protein droplet formation. Of the oral studies, Williams *et al.* (2000) noted protein droplet nephropathy visible in light microscopy in male rats at 250 mg/kg bw/day. The 90-day study by Robinson *et al.* (1990) reported this only at 1200 mg/kg bw/day, while Zhou and Ye

(1999) mentioned no signs of nephropathy up to 1000 mg/kg bw/day in the same rat strain. Most studies also reported increased liver weight; *Zhou and Ye (1999)* noted morphological changes of the smooth endoplasmic reticulum visible only in electron microscopy, while *Williams et al. (2000)* observed centrilobular hypertrophy in light microscopy at 500 mg/kg bw/day. Hypertrophy and the subsequent weight increase and smooth endoplasmic reticulum changes are typically adaptive liver responses which do not appear to result in irreversible or anatomical impairments. The kidney changes are most probably associated with α 2u-globulin and its accumulation, this phenomenon is discussed in the next paragraph (2,6).

Table B3.1: Summary of subacute and subchronic studies with MTBE (data taken from ECB, 2002 and ECETOC, 2003)

Duration/route	Species	Effects	NOAEL	Reference
14 d, oral (gavage)	Sprague-Dawley rat	increased kidney weight, decreased lung weight, kidney hyaline droplet formation	<357 mg/kg bw	<i>Robinson et al., 1990</i>
28 d, oral (gavage)	Sprague-Dawley rat	increased kidney weight, hyaline droplet formation in kidney proximal tubular cells	90 mg/kg bw	<i>IITRL 1992</i>
28 d, oral (gavage)	Sprague-Dawley rat	nephropathy, kidney hyaline droplet formation, increased liver weight	<250 mg/kg bw (LOEL for minor effects)	<i>Williams et al., 2000</i>
90 d, oral (gavage)	Sprague-Dawley rat	kidney hyaline droplet formation, increased liver and kidney weight, AST, LDH and cholesterol, decreased body weight gain and blood urea nitrogen	300 mg/kg bw	<i>Robinson et al., 1990</i>
90 d, oral (gavage)	Sprague-Dawley rat	increased liver and kidney weight, morphological changes in hepatocyte structure	<200 mg/kg bw (LOEL for minor effects)	<i>Zhou & Ye 1999</i>
28 d, inhalation (6 h/d, 5 d/wk)	Fischer-344 rat	increased liver and kidney weight, kidney proximal tubular cell proliferation	1440 mg/m ³ *)	<i>Chun & Kintigh 1993</i>
28 d, inhalation (6 h/d, 5 d/wk)	CD-1 mouse	increased liver weight, liver cell proliferation	1440 mg/m ³ *)	<i>Chun & Kintigh 1993</i>
90 d, inhalation (6 h/d, 5 d/wk)	Sprague-Dawley rat	females: depressed lung weight; males: increased haemoglobin, blood urea nitrogen and LDH	1800 mg/m ³ *)	<i>Greenough et al., 1980</i>
90 d, inhalation (6 h/d, 5 d/wk)	Fischer-344 rat	abnormalities in kidney proximal tubular cells, changed hormone levels, alteration in red blood cell parameters	2900 mg/m ³ *)	<i>Dodd & Kintigh 1989, Lington et al., 1997</i>

AST: aspartate amino transferase

LDH: lactate dehydrogenase

*) for exposure of 6 h/day, 5 days/week

B3.1.6 Chronic toxicity and carcinogenicity

The chronic toxicity and potential carcinogenicity of MTBE has been studied in well-conducted long-term inhalation studies in CD-1 mice (*Burleigh-Flayer et al., 1992; Bird et al., 1997*) and Fischer-344 rats (*Chun et al., 1992; Bird et al., 1997*). A Sprague-Dawley rat oral intubation study has been reported by *Belpoggi et al. (1995, 1998)*.

F-344 rats (50 of each sex) were exposed to 0, 400, 3000 or 8000 ppm MTBE (equivalent with 0, 1440, 10800 or 28800 mg/m³) for 6 h/day, 5 days/week during two years. High dosed animals showed decreased body weight gain. Mortality occurred in all male dose groups and was dose-related. Relative liver and kidney weights were increased in the two highest dose groups (males and females). The predominant finding at necropsy was an increased frequency of chronic progressive nephropathy in treated males. Tumour incidences are summarised in Table B3.2.

CD-1 mice (50 of each sex) were exposed to 0, 400, 3000 or 8000 ppm MTBE (equivalent with 0, 1440, 10800 or 28800 mg/m³) for 6 h/day, 5 days/week during 18 months. A slight increase in mortality was seen in high dosed males. Body weight, body weight gain, and brain weights were decreased in high dosed males and females. Kidney weights and relative liver weights were dose-relatedly increased in all treated males, but at the lowest dosage the increases were only minor and not considered adverse. Absolute and relative adrenal weights were increased in high-dosed males, and absolute kidney and spleen weights were increased in high-dosed females. At the end of the study both sexes had an increased corticosterone level at the highest dose (significant for males). Tumour incidences are summarised in Table B3.2.

Sprague-Dawley rats (60 of each sex) were given MTBE in olive oil (gavage) at doses of 0, 250 or 1000 mg/kg bw at all days except Wednesdays and the weekend (resulting in total weekly doses of 0, 1000 or 4000 mg/kg bw/week, or average daily doses of 0, 143 or 571 mg/kg bw/day), for two years. The test animals had no treatment-related adverse clinical signs, and neither gross examination at necropsy nor microscopic examination did reveal any adverse changes that were not tumour-related. In the high dose group mortality was lower than in the two other groups. Unfortunately the report of this chronic oral study is inadequate in many aspects, including the (lack of) observations on systemic toxic effects and the applied statistics (*ECB, 2002; ECETOC, 2003*). Tumour incidences are summarised in Table B3.2.

Table B3.2: Tumour incidences in F-344 rats and CD-1 mice inhalatory exposed to MTBE (data taken from ECB, 2002 and ECETOC, 2003)

Tumour type	Dose (mg/m ³ , 6 h/day, 5 days/week)			
	0	1440	10800	28800
Fischer-344 rats (24 months)				
Parathyroid adenomas	0/50	0/50	4/50	1/50
renal tubular cell adenomas and/or carcinomas	1/50	0/50	8/50 #	3/50
Testicular interstitial cell adenomas	32/50	35/50	41/50 *	47/50 *
CD-1 mice (18 months)				
Hepatocellular adenomas and/or carcinomas (males)	12/49	12/50	12/50	16/49
Hepatocellular adenomas and/or carcinomas (females)	2/50	2/50	2/50	11/50 *
cystic hyperplasia of uterine endometrium (females)	26/50	17/48	15/50 #	6/50 *

statistically significantly different from controls (p<0,05)

* statistically significantly different from controls (p<0,01)

Table B3.3: Tumour incidences in Sprague-Dawley rats orally exposed to MTBE (data taken from ECB, 2002 and ECETOC, 2003)

Tumour type	Dose (mg/kg bw, 4 days/week, 2 years)		
	0	250	1000
lymphomas and leukaemias (females)	2/60	7/60	12/60 *
testicular interstitial cell adenomas	2/60	2/60	11/60 #

statistically significantly different from controls (p<0,05)

* statistically significantly different from controls (p<0,01)

Relevance of tumours following chronic exposure to MTBE

Kidney tumours in F-344 rats

The male rat kidney secretes several milligrams of α 2u-globulin per day which is normally cleared via the urine. A similar protein has never been found in human kidneys. Many xenobiotics cause an overload of α 2u-globulin in male rats, the so-called α 2u-globulin syndrome, which is initiated by binding of the xenobiotic to α 2u-globulin, making it more resistant to hydrolysis (Borghoff *et al.*, 1990; Borghoff 1993). This leads to an accumulation of hyaline droplets and damage to the proximal convoluted tubule, finally resulting in chronic progressive nephropathy and in the long term urothelial hyperplasia and ultimately tubular neoplasia. Many studies indicate that α 2u-globulin-associated nephropathy is the mechanism in MTBE induced kidney tumour formation in male rats (Robinson *et al.*, 1990; Bird *et al.*, 1997; Prescott-Mathews *et al.*, 1997, 1999). Hence for man these tumours are considered irrelevant (ECB, 2002).

Leydig cell tumours in F-344 and Sprague-Dawley rats

Testicular interstitial cell adenomas are characteristic for Leydig cell tumourigenesis, and occur spontaneously at high rates (up to >90%) and strongly age-related in ageing rats, particularly (but not limited to) F-344 rats. A disturbance of the hormonal balance (reduced testosterone or estradiol followed by compensation through increasing levels of LH) has been suggested as a possible mechanism. Although decreased testosterone (and increased corticosterone) levels were found following exposure to MTBE (*Day et al., 1998; Allgaier and De Peyster 1999; Williams et al., 2000*), increasing LH levels were not found. Historical data record a spontaneous incidence of Leydig cell tumours in F-344 control rats of at average 89% (*Haseman et al., 1990*). In the MTBE-studies of *Chun et al. (1992)* and *Belpoggi et al. (1995)* cited above, significant increases are only seen at the highest or two highest doses, and the dose-response relationship is rather weak or even absent. Moreover, in the oral study mortality in the high dose group was lower than in the two other groups, which might have skewed the incidences of Leydig cell tumours. In conclusion, there is evidence that MTBE causes an increased incidence of Leydig cell tumours in rats. The interpretation of these results is hampered by the limited data, and also because it is not clear if and how the differences in anatomy and physiology between rat and human testes influence the susceptibility to Leydig cell tumourigenesis. In humans testicular cancer is rare: about 1% of all human neoplasms. Of these testes cancers only 2-3% are Leydig cell tumours. This suggests an important difference in sensitivity or behaviour in Leydig cells between rat and man. In conclusion the relevance to humans of the observed increase in Leydig cell tumourigenesis is probably low (*ECB, 2002*).

Haematopoietic neoplasms in Sprague-Dawley rats

In the oral rat study an increasing incidence of lymphoma/leukaemia in females was reported, but there were no signs of neoplastic lymphoid cell changes in the carcinogenicity inhalation studies with F-344 rats and CD-1 mice. The report of the oral Sprague-Dawley rat study is inadequate in many aspects (*ECB, 2002; ECETOC, 2003*), resulting in a low level of confidence of the results. The tumours may be of relevance, but on the basis of this low-quality study firm conclusions are not possible (*ECB, 2002*).

Parathyroid neoplasia in F-344 rats

The proliferative changes seen in the parathyroid of male F-344 rats are likely due to hyperparathyroidism which is commonly seen in cases where the parathyroid compensates for hypercalcaemia caused by, e.g., chronic renal failure (*ECB, 2002*).

Liver tumours in CD-1 mice

The increase in adenoma incidence was only seen in females at the highest dose, suggesting female specificity. It has been postulated that interference of MTBE in oestrogen-affected tissues may play a role in mouse liver tumour formation. MTBE, however, was shown not to have tumour-promoting activity (*Moser et al., 1997*). In conclusion, MTBE causes changes in oestrogen-sensitive tissues without affecting serum oestrogen levels. There may be a connection with these changes and the increased incidence of liver adenomas seen in female mice at high dose, but there is no evidence to corroborate such a theory. The relevance of these tumours to man is questionable (*ECB, 2002*).

Conclusion on chronic toxicity/carcinogenicity

MTBE produces tumours in mice and rats at doses $\geq 10,800 \text{ mg/m}^3$ (6 h/day, 5 days/week) after chronic inhalation exposure, and in rats at chronic oral doses $\geq 250 \text{ mg/kg}$ (4 days/week). There is no evidence of a genotoxic mode of action, and the tumours appear mostly at very high and systemically toxic doses. Based on the weight of evidence on carcinogenicity and genotoxicity, the threshold approach can be applied.

B3.1.6 Reproductive and developmental toxicity

Reproductive toxicity

In a one-generation inhalation study with Sprague-Dawley rats whole body exposed to 0, 900, 3600 or 9000 mg/m^3 MTBE (6 h/day, 5 days/week before, during and after mating and lactation), parent animals showed no signs of toxicity. Pup viability was significantly lower in the mid- and high dose groups of the F1b litter, but no such changes were seen in the F1a litter (*Biles et al., 1987*). However, the viability of control F1b litter was 99,0% while the viability of the control F1a litter was 97.6%, which may have skewed the significant difference seen.

In a two-generation inhalation study with Sprague-Dawley rats whole body exposed to 0, 1440, 10800 or 28800 mg/m^3 MTBE (6 h/day, 5 days/week before, during and after mating and lactation), there were general signs of (parental) toxicity at the two highest dose groups in both generations of parent animals. No significant changes in the reproduction parameters could be seen even at the highest dose. Some toxicity was also recorded for pups in the F1 and F2 generations in terms of pup viability and survival, but this was not considered of biological significance (*Bevan et al., 1997a*). The NOAEL for maternal toxicity was 1440 mg/m^3 .

It can be concluded that MTBE does not cause significant toxicity to reproduction in Sprague-Dawley rats (*ECB, 2002*).

Developmental toxicity

Effects of MTBE on development have been investigated in a number of studies in mice, rats and rabbits, by exposure of pregnant animals at certain days of gestation to MTBE vapours ranging from 900 to 28,800 mg/m^3 .

In a rat and a mouse study MTBE was not maternally toxic, embryotoxic or teratogenic at exposures up to 9000 mg/m^3 (which was the highest exposure in these two studies; *Conaway et al., 1985*).

In another mouse study animals were exposed to 0, 3600, 14400 or 28800 mg/m^3 MTBE vapour. Maternal toxicity was seen at 14400 and 28800 mg/m^3 ; also gestation parameters were affected at these concentrations. At the highest dose there was a significant increase in the incidence of cleft palate (*Tyl and Neeper-Bradley 1989; Bevan et al., 1997b*). The NOAEL for maternal and developmental toxicity was 3600 mg/m^3 .

In a rabbit study pregnant animals were exposed to similar MTBE concentrations. The two highest exposure levels were maternally toxic, but there were no treatment-related effects on gestation parameters (*Tyl 1989; Bevan et al., 1997b*). The NOAEL for maternal toxicity was 3600 mg/m³, the NOAEL for developmental toxicity was at least 28,800 mg/m³. In conclusion it can be stated that MTBE does not appear to induce adverse foetal development at exposure levels that do not cause maternal toxicity (*ECB, 2002*).

B3.2 Evaluation

RIVM adopts the conclusions of the recent European risk assessment report (*ECB, 2002*).

The principal studies are summarised in Tables B3.4 and B3.5.

The weight of evidence indicates that MTBE is not genotoxic. The substance induced testicular (Leydig cell) tumours in male rats (F-344 and Sprague-Dawley), renal tumours in male rats (F-344), liver tumours in female mice (CD-1) and lymphomas and leukaemias in female rats (Sprague-Dawley).

All investigations on nephrotoxicity are consistent with the renal tumours observed in F-344 rats being related to α 2u-globulin nephropathy, an effect considered specific to male rats and thus of no relevance to humans (*IPCS 1998; ECB, 2002*).

Leydig cell tumours have been induced in two strains of rats. This tumour type has been reported to be induced by non-genotoxic carcinogens that disturb the hormonal balance of testosterone, luteinizing hormone and luteinizing hormone releasing factor in rats. Due to the differences between rats and humans in the regulation of gonadotropins it is questionable that a similar effect will occur in humans.

Liver tumours have been induced in female mice. The effect was modest and occurred only at high doses and in association with hepatocellular hypertrophy and altered oestrogen metabolism. The relevance of these mouse liver tumours for human risk assessment is considered questionable (*IPCS, 1998; ECB, 2002*).

In an oral study with rats (Sprague-Dawley) the frequency of lymphomas and leukaemias were increased in the high dose group females, but this effect was not supported by any indication of relevant effects of the lymphoid system in other studies. Moreover, the description of the study makes it difficult to evaluate the results in an adequate way (*IPCS 1998; ECB, 2002*).

In line with the previous RIVM-evaluation, the two-year chronic toxicity/carcinogenicity inhalation study with rats (*Chun et al., 1992*) is considered the pivotal study for derivation of the TCA. The NOAEL in this study is 1440 mg/m³ for a chronic exposure of 6 h/day, 5 days/week. Corrected for exposure duration this results in a NOAEL of $6/24 \times 5/7 \times 1440 = 260$ mg/m³. Application of a UF of 100 (10x10 for inter- and intraspecies variation; *RIVM, 1997*) results in the TCA of 2.6 mg/m³.

In previous RIVM-evaluations the TDI has been derived from the subchronic (90-day) oral (gavage) study with rats of *Robinson et al. (1990)*. Evaluation of the chronic (2-year) oral (gavage) study of *Belpoggi et al. (1995)* shows that this study does not provide the solid

information which is needed to justify a correction of the previously derived TDI. The study of *Zhou and Ye (1999)* does not report detectable changes by light microscopy - in contrast to many other studies - and only observed nephrotoxicity at higher dosages (≥ 1000 mg/kg bw/day). By electron microscopy some hepatocellular effects were seen (with a LOEL of ≤ 200 mg/kg/day), but these are considered not to be adverse. *Williams et al. (2000)* focussed mainly on endocrine effects with less attention for other toxicologically relevant endpoints, observing at the LOEL (≤ 250 mg/kg bw/day) only an increase in kidney weight. Consequently the study of *Robinson et al. (1990)* is still considered the pivotal one. The NOAEL of 300 mg/kg bw/day and the application of a UF of 1000 (10x10 for inter- and intraspecies differences, and an additional 10 for limited duration of the study and database deficiencies; *RIVM, 2002*) results in the TDI of 0.3 mg/kg bw/day.

Table B3.4: Principal adverse effects and NOAELs in MTBE inhalation studies

Species	Exposure	Effects	NOAEL (mg/m ³)	Reference
Man	0.19 mg MTBE per m ³	odour threshold	-	<i>Prah et al., 1994</i>
Man	2 h	slight irritation of respiratory tract, head heaviness	180	<i>Johanson et al., 1995, Riihimäki et al., 1996</i>
Rat	90 days subchronic toxicity	liver and kidney toxicity	2880 *)	<i>Dodd and Kintigh 1989</i>
Rat	24 months chronic toxicity and carcinogenicity	liver and kidney toxicity, kidney tumours (m)	1440 *)	<i>Chun et al., 1992</i>
Mouse	18 months chronic toxicity and carcinogenicity	liver and kidney toxicity, liver tumours (f)	1440 *)	<i>Burleigh-Flayer et al., 1992</i>
Rat	2 generations reproductive toxicity	Parental toxicity (no reproductive toxic effects)	1440 *)	<i>Bevan et al., 1997a</i>
Mouse	gestation day 6-15 developmental toxicity	Maternal toxicity, secondary developmental toxicity	3600 *)	<i>Tyl & Neeper-Bradley 1989, Bevan et al., 1997b</i>

*) for exposure of 6 h/day, 5 days/week

Table B3.5: Principal adverse effects and NOAELs in MTBE oral studies

Species	Exposure	Effects	NOAEL (mg/kg bw/day)	Reference
Rat	90 days (gavage)	kidney and liver toxicity	300	<i>Robinson et al., 1990</i>
Rat	90 days (gavage)	liver and kidney toxicity	<200 (LOEL for minor effects)	<i>Zhou & Ye 1999</i>
Rat	24 months chronic toxicity and carcinogenicity	haematopoietic neoplasms (f), testicular interstitial cell adenomas	250 *)	<i>Belpoggi et al., 1995</i>

*) for exposure during 4 days/week

The background exposure was estimated by *ECB (2002)* in a reasonable *worst case* exposure scenario for a person who is exposed to MTBE at the petrol station during and after refueling his/her car and who lives near to (50 m) a petrol station, and amounts to 70 - 470 µg/day, equivalent to 1 - 7 µg/kg bw/day. This scenario includes also the exposure due to commuting by car and bus. Exposure to MTBE in drinking water would in a *worst case* scenario add at most approximately 30 µg/day, equivalent to 0.5 µg/kg bw/day.

B3.3 Evaluations by other organisations

ATSDR derived a chronic inhalation MRL (minimal risk level; equivalent to a TCA) of 2.5 mg/m³ based on the chronic toxicity/carcinogenicity study by *Chun et al. (1992)*, extrapolating the NOAEL of 1440 mg/m³ to the MRL by applying correction for exposure duration and a UF of 100 (for intra- and interspecies extrapolation; *ATSDR, 1996*).

ATSDR derived an oral MRL for intermediate duration (comparable to a TDI) of 0.3 mg/kg bw/day based on the subchronic study by *Robinson et al. (1990)*, extrapolating the LOAEL of 100 mg/kg bw/day (LOAEL for decreased blood urea nitrogen)⁶) to the MRL by applying a UF of 100 (for intra- and interspecies extrapolation) and an additional UF of 3 (although in general a factor of 10 is used) for the use of a LOAEL for minor effects (*ATSDR, 1996*).

US-EPA derived a RfC (equivalent to a TCA) of 3 mg/m³ based on the chronic toxicity/carcinogenicity study by *Chun et al. (1992)*, extrapolating the NOAEL of 1440 mg/m³ to the MRL by applying correction for exposure duration and a UF of 100 (and rounding off) (*US-EPA, 1993*).

ECB (2002) did not derive a TDI or TCA but took the oral NOAEL of 300 mg/kg bw/day from *Robinson et al. (1990)* and the inhalation NOAEL of 1440 mg/m³ from *Chun et al. (1992)* as the basis for their calculations of margins of safety in which these NOAELs are compared with exposures estimated according to several exposure scenarios.

IARC assessed the available data in 1998 and concluded that "there is limited evidence in experimental animals for the carcinogenicity of MTBE, and there is inadequate evidence in humans for the carcinogenicity of MTBE - *MTBE is not classifiable as to its carcinogenicity to humans*" (group 3; *IARC, 1999*).

⁶) In all other evaluations this effect is not considered relevant.

B3.4 Resume

Substance	TDI	TCA	Background exposure	Odour threshold
Methyl-t-butyl ether	0.3 mg/kg bw/day	2.6 mg/m ³	0.004 – 0.005 mg/kg bw/day	0.19 mg/m ³

TCA tolerable concentration in air

TDI tolerable daily dose

Background exposure: the mean of the reasonable *worst case* exposure scenarios as estimated by *ECB (2002)*.

References as cited in the key references

- Allgaier BS, De Peyster A (1999). Methyl-t-butyl ether (MTBE) effects on plasma luteinising hormone (LH) in gonadectomised male rats. *Toxicologist* 48: 266 (abstract).
- Amberg A, Rosner E, Dekant W (1999). Biotransformation and kinetics of methyl-t-butyl ether in rats and humans. *Toxicol Sciences* 51: 1-8.
- ARCO (1980). Methyl-t-butyl ether: acute toxicological studies. Report July 1980, Arco Research and Development, Glenolden (PA), USA.
- ATSDR (1996).
Toxicological profile for methyl-t-butyl ether. US Dept. of Health & Human Services, Public Health Service, Agency for Toxic Substances and Disease Registry, Atlanta (GA), USA.
- Belpoggi F, Soffritti M, Maltoni C (1995). Methyl-t-butyl ether (MTBE), a gasoline additive, causes testicular and lymphohaemopoietic cancers in rats. *Toxicol Ind Health* 11: 119-149.
- Belpoggi F, Soffritti M, Maltoni C (1998). Pathological characterization of testicular tumours and lymphomas-leukaemias, and of their precursors observed in Sprague-Dawley rats exposed to methyl-t-butyl ether (MTBE). *Eur J Oncol* 3: 201-206.
- Bevan C, Neeper-Bradly TL, Tyl RW, Fisher LC, Panson RD, Kneiss JJ, Andrews LS (1997a). Two-generation reproductive toxicity study of methyl-t-butyl ether (MTBE) in rats. *J Appl Toxicol* 17 suppl 1: S13-S19.
- Bevan C, Tyl RW, Neeper-Bradly TL, Fisher LC, Panson RD, Douglas JF, Andrews LS (1997b). Developmental toxicity evaluation of methyl-t-butyl ether (MTBE) by inhalation in mice and rabbits. *J Appl Toxicol* 17 suppl 1: S21-S29.
- Biles RW, Schroeder RE, Holdsworth CE (1987). Methyl-t-butyl ether inhalation in rats: a single generation reproduction study. *Toxicol Ind Health* 3: 519-534.
- Bird MG, Burleigh-Flayer HD, Chun JS, Douglas JF, Kneiss JJ, Andrews LS (1997).
Oncogenicity studies of inhaled methyl-t-butyl ether (MTBE) in CD-1 mice and F-344 rats. *J Appl Toxicol* 17 Suppl 1: S45-S55.

- Borghoff SJ (1993). $\alpha_2\mu$ -Globulin-mediated male rat nephropathy and kidney cancer: relevance to human risk assessment. *CIIT Activities* 13: 1-8.
- Borghoff SJ, Short BG, Swenberg JA (1990). Biochemical mechanisms and pathobiology of $\alpha_2\mu$ -globulin nephropathy. *Ann Rev Pharmacol Toxicol* 30: 349-367.
- BRL (1990a). Pharmacokinetics of methyl-t-butyl ether (MTBE) and t-butyl alcohol (TBA) in male and female Fischer-344 rats after administration of MTBE by the intravenous, oral and dermal routes. Report no. 38842, Bio-Research Laboratories Ltd., Senneville (Quebec), Canada.
- BRL (1990b). Pharmacokinetics of methyl-t-butyl ether (MTBE) and t-butyl alcohol (TBA) in male and female Fischer-344 rats after single and repeat inhalation nose-only exposures to MTBE. Report no. 38844, Bio-Research Laboratories Ltd., Senneville (Quebec), Canada.
- BRL (1990c). Mass balance of radioactivity and metabolism of methyl-t-butyl ether (MTBE) in male and female Fischer-344 rats after intravenous, oral and dermal administration of ^{14}C -MTBE. Report no. 38843, Bio-Research Laboratories Ltd., Senneville (Quebec), Canada.
- BRL (1990d). Disposition of radioactivity and metabolism of methyl-t-butyl ether (MTBE) in male and female Fischer-344 rats after nose-only inhalation exposure to ^{14}C -MTBE. Report no. 38843, Bio-Research Laboratories Ltd., Senneville (Quebec), Canada.
- BRL (1991). Mass balance of radioactivity and metabolism in male Fischer-344 rats after intravenous and dermal administration of ^{14}C -methyl-t-butyl ether (MTBE). Follow up to project 38443, draft report no. 38843B, Bio-Research Laboratories Ltd., Senneville (Quebec), Canada.
- Burleigh-Flayer HD, Chun JS, Kintigh WJ (1992). Methyl-t-butyl ether: vapour inhalation oncogenicity study in CD-1 mice. Report of project 91N0013A, Union Carbide, Bushy Run Research Center, Export (PA), USA.
- Cain WS, Leaderer BP, Ginsberg GL, Andrews LS, Cometto-Muñiz JE, Gent JF, Buck M, Berglund LG, Mohensin V, Monahan E, Kjaergaard S (1996). Acute exposure to low-level MTBE: human reactions and pharmacokinetic response. *Inhal Toxicol* 8: 21-48.
- Casanova M, Heck HA (1997). Lack of evidence for the involvement of formaldehyde in the hepatocarcinogenicity of methyl-t-butyl ether in CD-1 mice. *Chem-Biol Interact* 105: 131-143.
- Chun JS, Burleigh-Flayer HD, Kintigh WJ (1992). Methyl-t-butyl ether: vapour inhalation oncogenicity study in Fischer 344 rats. Report of project no. 91N0013B, Union Carbide, Bushy Run Research Center, Export (PA), USA.
- Chun JS, Kintigh WJ (1993). Methyl-t-butyl ether: twenty-eight day vapor inhalation study in rats and mice. Report of project no. 93N1241, Union Carbide, Bushy Run Research Center, Export (PA), USA.
- Conaway CC, Schroeder RE, Snyder NK (1985). Teratology evaluation of methyl-t-butyl ether in rats and mice. *J Toxicol Environm Health* 16: 797-809.
- Cuthbert JA (1979). Safety tests on methyl-t-butyl ether, IRI project 412139. Report no. 1300, Inveresk Research International, Edinburgh, UK.

- Day KJ, De Peyster A, Allgaier BS, Luong A, MacGregor JA (1998). Methyl-t-butyl ether (MTBE) effects on the male rat reproductive endocrine axis. *Toxicologist* 42: 147 (abstract).
- Dekant W, Bernauer U, Rossner E, Amberg A (2001). Biotransformation of MTBE, ETBE and TAME after inhalation or ingestion in rats and humans. In: metabolism of ether oxygenates added to gasoline, Research report no. 102 dated May 2001. Health Effects Institute, Cambridge (MA), USA.
- Dodd DE, Kintigh WJ (1989). Methyl-t-Butyl ether: repeated (13-week) vapor inhalation study in rats with neurotoxicity evaluation. Report no. 52-507, Union Carbide, Bushy Run Research Center, Export (PA), USA.
- ECB (2002).
European Union Risk Assessment Report t-butyl methyl ether. European Chemicals Bureau, 3rd Priority list, volume 19; Office for Official Publications of the EC, Luxembourg.
- Greenough RJ, McDonald P, Robinson P, Maule W, Macnaughton F, Rushton A (1980). Methyl-t-butyl ether (Driveron), three month inhalation toxicity in rats. Report no. 1596, Inveresk Research International, Edinburgh, UK.
- Haseman JK, Arnold J, Eustis SL (1990). Tumor incidences in Fischer F344 rats: NTP historical data. In: Pathology of the Fischer rat (Boorman GA, ed), pp 555-564, Academic Press, London, UK.
- IARC (1999).
Monographs on the evaluation of carcinogenic risks to humans. Vol. 73: Some chemicals that cause tumours of the kidney or urinary bladder in rodents and some other substances; pp. 339-383. International Agency for Research on Cancer, World Health Organization, Lyon, France.
- IITRL (1992). Twenty-eight day oral (gavage) toxicity study of methyl-t-butyl ether (MTBE) in rats. Report of project L08100, study 1602, Illinois Institute of Technology Research Laboratories, Chicago (IL), USA.
- IPCS (1998).
Environmental Health Criteria 206: Methyl-t-butyl ether. International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland.
- Johanson G, Nihlén A, Löf A (1995). Toxicokinetics and acute effects of MTBE and ETBE in male volunteers. *Toxicol Letters* 82/83: 713-718.
- Leuschner U, Hellstern A, Schmidt K, Fischer H, Güldütuna S, Hübner K, Leuschner M (1991). Gallstone dissolution with methyl-t-butyl ether in 120 patients - efficacy and safety. *Digestive Dis Sci* 36: 193-199.
- Lington AW, Dodd DE, Ridlon SA, Douglas JF, Kneiss JJ, Andrews LS (1997). Evaluation of 13-week inhalation toxicity study on methyl-t-butyl ether (MTBE) in Fischer 344 rats. *J Appl Toxicol* 17: 37-44.
- Mastri C, Keplinger ML, Fancher OE (1969). Acute toxicity studies on X-801-25. Report no. IBT A6809, Industrial Bio-test Laboratories Inc., Northbrook (IL), USA.

- McMartin KE, Martin-Amat G, Noker PE, Tephly TR (1979). Lack of a role for formaldehyde in methanol poisoning in the monkey. *Biochem Pharmacol* 28: 645-649.
- Miller MJ, Ferdinandi ES, Klan M, Andrews LS, Douglas FJ, Kneiss JJ (1997). Pharmacokinetics and disposition of methyl-t-butyl ether in Fischer-344 rats. *J Appl Toxicol* 17 suppl 1: S3-S12.
- Moser GJ, Wolf DC, Wong A, Goldsworthy TL (1997). Loss of tumor-promoting activity of unleaded gasoline in N-nitrosodiethylamine-initiated ovariectomized B6C3F1 mouse liver. *Carcinogenesis* 18: 1075-1083.
- Mürmann P (1985). Prüfung der akuten Hautreizwirkung von Driveron (MTBE). Report no. 0375, Chemische Werke Hüls, Marl, Germany.
- Neoptolemos JP, Hall C, O'Connor HJ, Murray WR, Carr-Locke DL (1990). Methyl-t-butyl ether for treating bile duct stones: the British experience. *Brit J Surg* 77: 32-35.
- Nihlén A, Löf A, Johanson G (1998). Experimental exposure to methyl-t-butyl ether, I: toxicokinetics in humans. *Toxicol Appl Pharmacol* 148: 274-280.
- Nihlén A, Sumner SC, Löf A, Johanson G (1999). ¹³C(2)-Labeled methyl-t-butyl ether: toxicokinetics and characterization of urinary metabolites in humans. *Chem Res Toxicol* 12: 822-830.
- NTP (1995). Toxicology and carcinogenesis studies of t-butyl alcohol in F344 rats and B6C3F1 mice (drinking water studies). Technical report no. 436, US Dept. of Health and Human Services, Research Triangle Park (NC), USA.
- NTP (1997). Toxicity studies of t-butyl alcohol (CAS no. 75-65-0), administered by inhalation to F344/N rats and B6C3F1 mice. Toxicity report no. 53, US Dept. of Health and Human Services, Research Triangle Park (NC), USA.
- Pekari K, Riihimäki V, Vainiotalo S, Teräväinen E, Aito A (1996). Experimental exposure to methyl-t-butyl ether (MTBE) and methyl-t-amyl ether (MTAE). Abstracts International Symposium on Biological Monitoring in Occupational and Environmental Health, Sept. 1996, pp. 27-28, Finnish Institute of Occupational Health, Espoo, Finland.
- Poet TS, Borghoff SJ (1997). In vitro uptake of methyl-t-butyl ether in male rat kidney - use of a two compartment model to describe protein interactions. *Toxicol Appl Pharmacol* 145: 340-348.
- Prah J, Ashley D, Leavens T, Borghoff S, Case M (2000). Uptake and elimination of methyl-t-butyl alcohol (TBA) in human subjects by the oral route of exposure. *Toxicologist* 54: 57 (abstract).
- Prah J, Goldstein GM, Devlin R, Otto D, Ashley D, House D, Cohen KL, Gerrity T (1994). Sensory, symptomatic, inflammatory, and ocular responses to and the metabolism of methyl-t-butyl ether in a controlled human exposure experiment. *Inhal Toxicol* 6: 521-538.
- Prescott-Mathews JS, Poet TS, Borghoff SJ (1999). Evaluation of the in vivo interaction of methyl-t-butyl ether with α 2u-globulin in male F-344 rats. *Toxicol Appl Pharmacol* 157: 60-67.
- Prescott-Mathews JS, Wolf DC, Wong BA, Borghoff SJ (1997). Methyl-t-butyl ether causes alpha2u-globulin nephropathy and enhanced renal cell proliferation in male F-344 rats. *Toxicol Appl Pharmacol* 143: 301-314.

- RBM (1996a). Acute dermal irritation study in New Zealand White rabbits treated with the test article MTBE. Istituto di Recerche Biomediche 'Antoine Marxer' SpA, Roma, Italy.
- RBM (1996b). Acute eye irritation study in New Zealand White rabbits treated with the test article MTBE. Istituto di Recerche Biomediche 'Antoine Marxer' SpA, Roma, Italy.
- RBM (1996c). Acute oral toxicity study in rats treated with the test article MTBE. Istituto di Recerche Biomediche 'Antoine Marxer' SpA, Roma, Italy.
- Riihimäki V, Matikainen E, Aklia R, Teräväinen E, Mutanen P, Pekari K, Vainiotalo S, Vilhunen R, Aitio A (1996). Central nervous system effects of the gasoline additive methyl-t-butyl ether (MTBE). Final report, Finnish Institute of Occupational Health, Helsinki, Finland.
- Robinson M, Bruner RH, Olson GR (1990). Fourteen- and ninety-day oral toxicity studies of methyl-t-butyl ether in Sprague-Dawley rats. *J Am Coll Toxicol* 9: 525-540.
- Savolainen H, Pfäffli P, Elovaara E (1985). Biochemical effects of methyl-t-butyl ether in extended vapour exposure of rats. *Arch Toxicol* 57: 285-288.
- Tepper JS, Jackson MC, McGee JK, Costa DL, Graham JA (1994). Estimation of respiratory irritancy from inhaled methyl-t-butyl ether in mice. *Inhal Toxicol* 6: 563-570.
- Tyl RW (1989). Developmental toxicity study of inhaled methyl-t-butyl ether in New Zealand white rabbits. Report of project no. 51-628, Union Carbide, Bushy Run Research Center, Export (PA), USA.
- Tyl RW, Neeper-Bradley TL (1989). Developmental toxicity study of inhaled methyl-t-butyl ether in CD-1 mice. Report of project no. 52-526, Union Carbide, Bushy Run Research Center, Export (PA), USA.
- US-EPA (1993).
Integrated Risk Information System (IRIS): methyl-t-butyl ether, dated September 1, 1993. US Environmental Protection Agency, Washington DC, USA.
- Williams TM, Cattley RC, Borghoff SJ (2000). Alterations in endocrine responses in male Sprague-Dawley rats following oral administration of methyl-t-butyl ether. *Toxicol Sci* 54: 168-176.
- Zhou W, Ye SH (1999). Subchronic oral methyl-t-butylether (MTBE) exposure in male Sprague-Dawley rats and effects of health on MTBE exposed workers. *J Occup Health* 41: 33-38.

Bijlage 4: CSOIL output

Naam:	rivm-er	Datum:	1 okt 2004
Model:	CSOIL	Versie:	2000 (read-only)
File:	D:\USR\711701AH-ad hoc advisering\2004\ad-hoc MTBE\CSOIL2000\CSOIL2000-A1-layout improved.xls		

Stof	methyl-tert-butylether (MTBE)	CASnr.	1634-04-4
Scenario	2	status	voorstel IW, 2004

OPMERKINGEN	
--------------------	--

HUMANE RISICO GRENSWAARDEN

HUM-TOX EBVC	220.791		
verhouding blootstelling / MTR	1.00		
bodemgehalte (mg/kd d.s.)	2.208E+02	C gw-max (ug/dm3)	9.42E+03

BLOOTSTELLING: BIJDRAGE VAN DE DIVERSE ROUTES KIND, VOLW, LEVENSLANG-GEMIDDELD

in mg/kg l.g. *d							
	ingestie grond	dermale opn. binnen	dermale opn. buiten	inhalatie grond	inhalatie binnenlucht	inhalatie buitenlucht	
kind	1.47E-03	4.52E-06	9.02E-05	3.46E-06	1.04E+00	8.82E-04	
volwassene	1.58E-04	1.42E-06	1.72E-05	1.97E-06	6.35E-01	9.85E-05	
levenslang gemiddeld	2.70E-04	1.68E-06	2.34E-05	2.10E-06	6.70E-01	1.66E-04	
	ingestie gewas	permeatie drinkw.	dampen douchen	derm. opn. douchen	totaal	totaal (geen correctie)	
kind	8.42E-02	7.43E-03	1.07E-03	1.69E-04	3.31E-01	1.14E+00	
volwassene	3.70E-02	3.18E-03	6.01E-04	6.84E-05	2.97E-01	6.76E-01	
levenslang gemiddeld	4.11E-02	3.55E-03	6.41E-04	7.70E-05	3.00E-01	7.15E-01	

PROCENTUELE BIJDRAGE ROUTES KIND, VOLW, LEVENSLANG-GEMIDDELD

in %							
	ingestie grond	dermale opn. binnen	dermale opn. buiten	inhalatie grond	inhalatie binnenlucht	inhalatie buitenlucht	
kind	0.13%	0.00%	0.01%	0.00%	91.61%	0.08%	
volwassene	0.02%	0.00%	0.00%	0.00%	93.91%	0.01%	
levenslang gemiddeld	0.04%	0.00%	0.00%	0.00%	93.60%	0.02%	
	ingestie gewas	permeatie drinkw.	dampen douchen	derm. opn. douchen	verhouding cor/onc	totaal (geen correctie)	
kind	7.41%	0.65%	0.09%	0.01%	29.12%	100.00%	
volwassene	5.47%	0.47%	0.09%	0.01%	43.95%	100.00%	
levenslang gemiddeld	5.74%	0.50%	0.09%	0.01%	41.93%	100.00%	

CONCENTRATIES IN DE DIVERSE MILIEUCOMPARTIMENTEN

bodem (mg/kg d.s.)	2.21E+02	plant-blad (mg/kg ww)	2.37E-01	binnenl. (mg/dm3)	2.33E-03
poriewater (mg/dm3)	2.44E+02	plant-aard. (mg/kg ww)	2.12E+02	kruipruimte (mg/dm3)	2.33E-02
porielucht (mg/dm3)	4.61E+00	plant-metaal (mg/kg ds)	-		

INVOER GEGEVENS (dataset)

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
SCENARIO		2	wonen met tuin
type stof:		0	organische contaminant
Stofspecifieke parameters			
molmassa	M	88.15	[g/mol]
wateroplosbaarheid	S	3.49E+04	[mg/dm3]
dampdruk zuivere stof	Vp	1.76E+04	[Pa]
octanol-water verdelingscoëfficiënt	log Kow	1.06E+00	[-]
OC gecorrigeerde verdelingscoëff.	log Koc	1.05E+00	[dm3/kg]
permeatie coëfficiënt PE waterleiding	Dpe	1.00E-07	[m2/d]
Partiticoëfficiënt metalen	log Kp (metaal)	n.v.t.	[dm3/kg]
zuurdissociatieconstante	pKa	0.00E+00	[-]
fractie niet gedissocieerde stof	fnd	1.00E+00	[-]
BCF metalen	BCFM	n.v.t.	[(mg/kg d.g.) / (mg/kg d.g.)]
BCF organische stoffen (blad)	BCFPWS	8.45E-05	[(mg/kg v.g.) / (mg/dm3)]
BCF organische stoffen (wortel)	BCFPWR	8.68E-01	[(mg/kg v.g.) / (mg/dm3)]

RISICOGRENZEN HUMAAN

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau	MTR	3.00E-01	[mg/(kg l.g. d)]
Toelaatbare Concentratie Lucht	TCL	2.60E+00	[mg/m3]
TDI inhalatoir kind	MTR_LC	1.32E+00	[mg/(kg l.g. d)]
TDI inhalatoir volwassene	MTR_LA	7.43E-01	[mg/(kg l.g. d)]

LOCATIE SPECIFIEKE GEGEVENS

SCENARIO

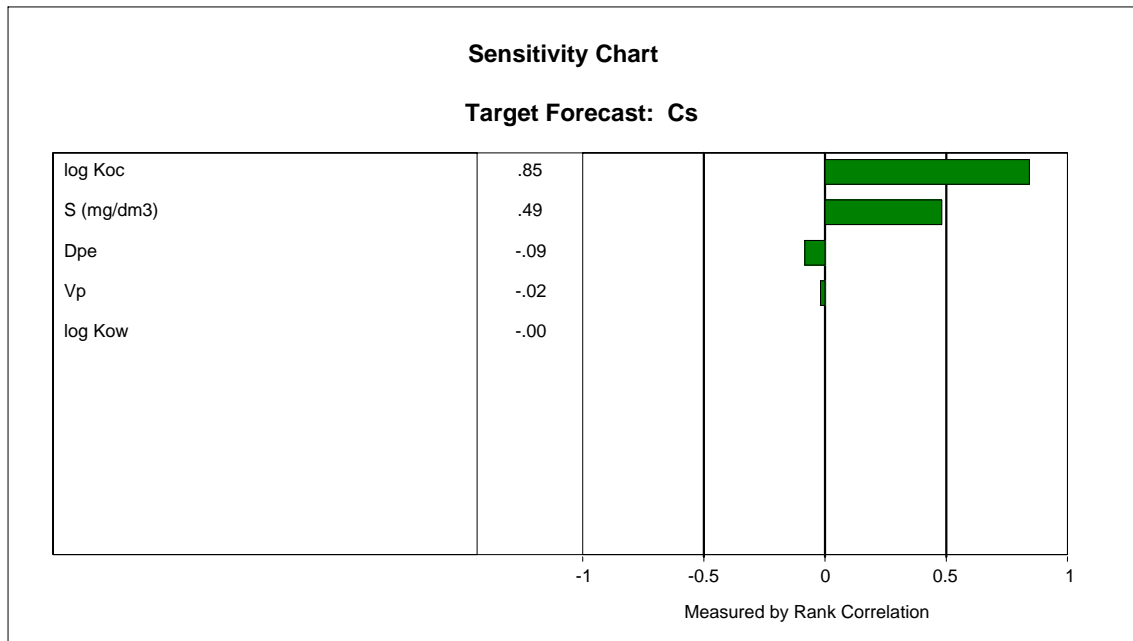
wonen met tuin

beschrijving	symbool	waarde	eenheid
totaalgehalte bodem (input-parameter)	CS	2.21E+02	[mg/kg d.w.]
bodemtemperatuur	T	283	[K]
volume fractie lucht	Va	0.20	[-]
volumefractie water	Vw	0.30	[-]
volumefractie grond	Vs	0.50	[-]
fractie organisch koolstof	foc	0.0580	[-]
percentage lutum	L	25	[%]
pH bodem	pH	6.00	[-]
volumieke massa droge grond	SD	1.20	[kg/dm3]

BLOOTSTELLINGSPARAMETERS

<i>beschrijving</i>	<i>symbool</i>	<i>waarde</i>	<i>eenheid</i>	
gasconstante	R	8.31	[Pa.m ³ /mol.k]	
grenslaagdikte	d	0.01	[m]	
flux van evaporerend water	Ev	0.0001	[m ³ /m ² .d]	
diepte verontreiniging	dp	1.25	[m]	
ventilatievoud	Vv	1.10	[1/h]	
hoogte kruipruimte	Bh	0.50	[m]	
fractie binnen/kruipruimte lucht	fbi	0.10	[-]	
diameter verontr. gebied	Lp	100	[m]	
verhouding droog/vers knol	fdwr	0.167	[-]	
verhouding droog/vers blad	fdws	0.098	[-]	
verhouding droog/vers gras	fdwg	0.200	[-]	
depositie constante	dpconst	1.00E-02	[-]	
fractie grond in stof binnen	frsi	0.80	[-]	
fractie grond in stof buiten	frso	0.50	[-]	
verduunningsfactor porie-grondwater	fdil	1.00	[-]	
temperatuur badwater	Tsh	313	[K]	
drinkwaterconstante	dwconst	45.60	[-]	
fractie blootgestelde huid douchen	fexp	4.00E-01	[-]	
retentiefactor deeltjes in longen	fr	7.50E-01	[-]	
relatieve absorptiefactor algemeen (excl grond)	Fa	1.00E+00	[-]	
relatieve absorptiefactor grond	Fag	1.00E+00	[-]	
matrixfactor dermale absorptie	fm	1.50E-01	[-]	
douchetijd per keer	tdc	2.50E-01	[h/d]	
verblijf in badkamer	td	5.00E-01	[h]	
type waterleiding	waterl	1.00E+00	code 1 = PE / code 0 = metaal	
fractie verontreinigd knol	Fvk	1.00E-01	[-]	
fractie verontreinigd blad	Fvb	1.00E-01	[-]	
fractie verontreinigd vlees	Fvme	5.00E-01	[-]	
fractie verontreinigde melk	Fvmi	5.00E-01	[-]	
fractie verontreinigde eieren	Fveg	5.00E-01	[-]	
<i>beschrijving receptoren</i>	<i>symbool</i>	<i>waarde voor kind</i>	<i>waarde voor volw.</i>	<i>eenheid</i>
lichaamsgewicht	BW	1.50E+01	7.00E+01	[kg]
dagelijkse inname grond	AIDc	1.00E-04	5.00E-05	[kg ds/d]
gewasconsumptie knol	Qk'c	5.95E-02	1.22E-01	[kg vg/d]
gewasconsumptie blad	Qb'c	5.83E-02	1.39E-01	[kg vg/d]
vleesconsumptie	Qmecac	4.40E-02	1.20E-01	[kg vg/d]
melkconsumptie	Qmicac	4.73E-01	3.78E-01	[kg vg/d]
consumptie eieren	Qegchc	7.80E-03	1.28E-02	[kg vg/d]
drinkwaterconsumptie	Qdw,c	1.00E+00	2.00E+00	[dm ³ /d]
geinhaleerde deeltjes	ITSPc	3.13E-07	8.33E-07	[kg/d]
inhalatie tijd binnen	Tiic	2.11E+01	2.29E+01	[h]
inhalatie tijd buiten	Tioc	2.86E+00	1.14E+00	[h]
ademvolume	Avc	3.17E-01	8.33E-01	[m ³ /h]
oppervlak lichaam	Atotc	9.50E-01	1.80E+00	[m ²]
blootgesteld oppervlak binnen	Aexpci	2.80E-01	9.00E-02	[m ²]
blootgesteld oppervlak buiten	Aexpco	2.80E-01	1.70E-01	[m ²]
bedekkingsgraad huid binnen	DAEci	5.60E-04	5.60E-04	[kg/m ²]
bedekkingsgraad huid buiten	DAEco	5.10E-03	3.75E-02	[kg/m ²]
dermale absorptiesnelheid	DARc	1.00E-02	5.00E-03	[1/h]
tijd blootstelling contact grond binnen	Tbci	9.14E+00	1.49E+01	[h/d]
tijd blootstelling contact grond buiten	Tbco	2.86E+00	1.14E+00	[h/d]
verduunningsnelheid	Vfc	1.61E+02	3.25E+02	[m/h]

Bijlage 5: Resultaten probabilistische berekeningen



Forecast: Cs (SRC humaan)

Cell: E12

Summary:

Display Range is from 5.00E+1 to 5.00E+2 mg/kg

Entire Range is from 5.67E+1 to 1.05E+3 mg/kg

After 25,000 Trials, the Std. Error of the Mean is 5.97E-1

Statistics:

	<u>Value</u>
Trials	25000
Mean	2.26E+02
Median	2.05E+02
Mode	---
Standard Deviation	9.44E+01
Variance	8.92E+03
Skewness	1.59
Kurtosis	7.43
Coeff. of Variability	0.42
Range Minimum	5.67E+01
Range Maximum	1.05E+03
Range Width	9.90E+02
Mean Std. Error	5.97E-01

Forecast: Cs (cont'd)**Cell: E12**

Percentiles:

<u>Percentile</u>	<u>mg/kg</u>
0%	5.67E+01
10%	1.30E+02
20%	1.51E+02
30%	1.69E+02
40%	1.87E+02
50%	2.05E+02
60%	2.28E+02
70%	2.53E+02
80%	2.88E+02
90%	3.48E+02
100%	1.05E+03

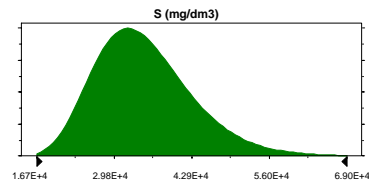
Assumptions

Assumption: S (mg/dm3)

Cell: E31

Lognormal distribution with parameters:
 Mean 3.49E+04
 Standard Dev. 8.38E+03

Selected range is from 1.00E+3 to 1.00E+5
 Mean value in simulation was 3.50E+4

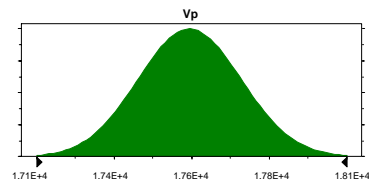


Assumption: Vp

Cell: E32

Lognormal distribution with parameters:
 Mean 1.76E+04
 Standard Dev. 1.58E+02

Selected range is from 0.00E+0 to +Infinity
 Mean value in simulation was 1.76E+4

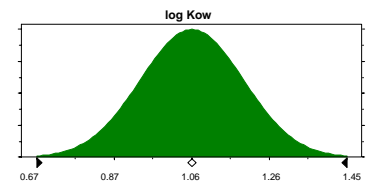


Assumption: log Kow

Cell: E34

Normal distribution with parameters:
 Mean 1.06
 Standard Dev. 0.13

Selected range is from -Infinity to +Infinity
 Mean value in simulation was 1.06

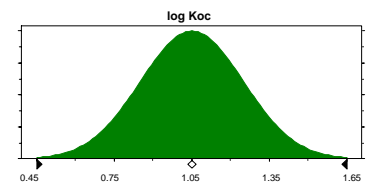


Assumption: log Koc

Cell: E35

Normal distribution with parameters:
 Mean 1.05
 Standard Dev. 0.20

Selected range is from -Infinity to +Infinity
 Mean value in simulation was 1.05



Assumption: Dpe

Cell: E36

Triangular distribution with parameters:
 Minimum 1.00E-08
 Likeliest 1.00E-07
 Maximum 1.40E-06

Selected range is from 1.00E-8 to 1.40E-6
 Mean value in simulation was 5.00E-7

