

Eindrapport

S-Risk stoffenfiches – deel 2: BTEX, styreen en trimethylbenzenen

C. Cornelis, J. Bierkens, A. Standaert

Studie uitgevoerd in opdracht van OVAM
2014/MRG/R/40

November 2013



VITO NV

Boeretang 200 - 2400 MOL - BELGIE
Tel. + 32 14 33 55 11 - Fax + 32 14 33 55 99
vito@vito.be - www.vito.be

BTW BE-0244.195.916 RPR (Turnhout)
Bank 375-1117354-90 ING
BE34 3751 1173 5490 - BBRUBEBB

Alle rechten, waaronder het auteursrecht, op de informatie vermeld in dit document berusten bij de Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek NV ("VITO"), Boeretang 200, BE-2400 Mol, RPR Turnhout BTW BE 0244.195.916. De informatie zoals verstrekt in dit document is vertrouwelijke informatie van VITO. Zonder de voorafgaande schriftelijke toestemming van VITO mag dit document niet worden gereproduceerd of verspreid worden noch geheel of gedeeltelijk gebruikt worden voor het instellen van claims, voor het voeren van gerechtelijke procedures, voor reclame of antireclame en ten behoeve van werving in meer algemene zin aangewend worden

INHOUD

Inhoud	I
Lijst van afkortingen	II
Lijst van wijzigingen	III
Inleiding	5
HOOFDSTUK 2. Stoffenfiches BTEX en styreen	7
2.1. <i>Benzeen</i>	7
2.2. <i>Tolueen</i>	10
2.3. <i>Ethylbenzeen</i>	12
2.4. <i>o-Xyleen</i>	14
2.5. <i>m-Xyleen</i>	16
2.6. <i>p-Xyleen</i>	18
2.7. <i>Styreen</i>	20
HOOFDSTUK 3. Stoffenfiches trimethylbenzenen	22
3.1. <i>1,2,3-Trimethylbenzeen</i>	22
3.2. <i>1,2,4-Trimethylbenzeen</i>	24
3.3. <i>1,3,5-Trimethylbenzeen</i>	26
Literatuurlijst	28

LIJST VAN AFKORTINGEN

ABS	absorptiefactor
Al	aluminiumgehalte
BCF	bioconcentratiefactor
BTEXS	benzeen, toluen, ethylbenzeen, styreen
BTF	biotransferfactor
Da	diffusiecoëfficiënt in lucht
Dpe	diffusiecoëfficiënt in polyethyleen
Dpvc	diffusiecoëfficiënt in PVC
Dw	diffusiecoëfficiënt in water
FA	factor gebruikt bij de berekening van dermale absorptie vanuit water
Fe	ijzergehalte
K _d	sorptiecoëfficiënt bodem-water
K _{oa}	verdelingscoëfficiënt octanol-lucht
K _{oc}	verdelingscoëfficiënt organische koolstof-water
K _{ow}	verdelingscoëfficiënt octanol-water
K _p	dermale permeabiliteitscoëfficiënt
MTBE	methyl-t-butylether
OVAM	Openbare Vlaamse Afvalstoffenmaatschappij
PAK	polyaromatische koolwaterstof
P _{tot}	totaal fosforgehalte
TCL	Toelaatbare Concentratie in Lucht
TDI	Toelaatbare Dagelijkse Inname
TGD	Technical Guidance Document
VMM	Vlaamse MilieuMaatschappij

LIJST VAN WIJZIGINGEN

04/11/2013 p-xyleen: door wegvallen van een rij in de tabel stond de limiet voor lucht bij drinkwater en de limiet voor drinkwater bij de gewasnorm, dit is gecorrigeerd

INLEIDING

De stoffenfiches vatten de gegevens samen zoals opgenomen in S-Risk 1.0. De stoffenfiches zijn een kopie van de stoffenfiches opgemaakt in het kader van de voorstellen voor bodemsaneringsnormen in Vlaanderen. Door het gewijzigde formularium van S-Risk in vergelijking met het tot nu toe gebruikte model Vlier-Humaan, zijn ook een aantal nieuwe parameterwaarden geïntroduceerd. Daarnaast werden een aantal supplementaire opties mogelijk, die eveneens wijzigingen in de invoergegevens tot gevolg hadden. Voor deze wijzigingen werden nieuwe gegevens opgezocht. De belangrijkste wijzigingen zijn:

- Dermale absorptie: er zijn twee nieuwe parameters (die de oude parameters vervangen), met name de fractie geabsorbeerd voor dermale opname via bodem en stof, en de dermale permeabiliteitscoëfficiënt voor dermale opname vanuit water. Deze laatste gaat samen met een parameter FA.
- Bioconcentratiefactoren plant (BCF): voor *metalen en arseen* ontbrak vaak een BCF voor hetzij maïs, hetzij gras. In de meeste gevallen werd de BCF-relatie voor gras en maïs dan gelijk gesteld. Dit is niet correct. Er is bijgevolg een nood om hiervoor aanvullende BCF-relaties op te zoeken.
- Bioconcentratiefactoren plant (BCF): voor organische verbindingen kan in S-Risk de opname ofwel berekend worden uitgaande van stof- en planteigenschappen, ofwel kunnen BCF's ingevoerd worden in eenheden van mg/kg ds in de plant per mg/m³ bodemoplossing. Voor de meeste organische verbindingen wordt de opname berekend. Voor een aantal organische verbindingen heeft de stoffenfiche waarden in eenheden van mg/kg ds in de plant per mg/kg ds in de bodem. Deze waarden kunnen niet overgenomen worden in S-Risk en voor deze stoffen werd dan gebruik gemaakt van de modelberekeningen. Dit is toegelicht in de stoffenfiche indien van toepassing.
- Biotransferfactoren dierlijke producten (BTF): S-Risk laat toe om biotransferfactoren voor dierlijke producten te specificeren naar vlees, melk, nieren, lever. Voor anorganische verbindingen werken we telkens met ingevoerde BTF-waarden. In de originele stoffenfiches stonden alleen waarden voor vlees en melk. Er werden bijkomende gegevens opgezocht in het rapport De Raeymaecker et al. (2005). Voor organische verbindingen wordt de BTF altijd berekend in het model.
- Biotransferfactoren eieren (BTF): S-Risk laat toe om transfer naar kippeneieren te berekenen. Dit is nieuw ten opzichte van Vlier-Humaan. De blootstellingsweg staat standaard niet geactiveerd. Voor de metalen werden transferfactoren naar ei opgezocht, en ingevuld in de stoffenfiche. Voor organische verbindingen werden geen biotransferfactoren opgezocht en werden de waarden gelijk gesteld aan nul. Indien deze blootstellingsweg geactiveerd wordt in S-Risk, moet de gebruiker geschikte BTF-waarden naar ei opzoeken of berekenen.
- Toxiciteitsgegevens: de toxiciteitsgegevens werden als dusdanig overgenomen uit de stoffenfiches. Waar Vlier-Humaan alleen berekeningen toeliet voor systemische effecten en ofwel carcinogene effecten ofwel niet-carcinogene effecten, kan S-Risk verschillende eindpunten simultaan doorrekenen. Dit betekent dat de toxiciteitsgegevens in de stoffenfiches soms uitgebreider zijn dan in de oorspronkelijke stoffenfiches stond.
- Achtergrondblootstelling en achtergrondconcentraties: Vlier-Humaan liet toe om slechts één waarde voor achtergrondblootstelling (weliswaar afhankelijk van bestemmingstype) via voeding in te voeren. S-Risk laat een leeftijdsafhankelijke achtergrondblootstelling via voeding toe. De leeftijdsafhankelijkheid wordt meestal standaard genomen (volgens verhoudingen gegeven in de TGD). De bestemmingsafhankelijkheid wordt berekend op

basis van ingegeven achtergrondconcentraties via voeding. S-Risk rekt ook apart de achtergrondblootstelling via drinkwater door. Achtergrondconcentraties in drinkwater werden opgezocht op basis van VMM-data.

- Normen voor levensmiddelen: voor een aantal stoffen zijn er normen voor toetsing van de berekende concentraties in levensmiddelen. Er werd nagegaan of de wetgeving nog actueel was, en waar nodig werden nieuwe waarden genomen.

De bestaande informatie, die overgenomen werd in S-Risk is gebaseerd op de stoffenfiches:


- Zware metalen: OVAM (2009c) en (OVAM, 2009d) met bijhorend rekenblad;
- BTEXS: OVAM (2009a)
- Chlooralifaten: OVAM (2004) voor 1,1,1-trichloorethaan, 1,1,2-trichloorethaan, 1,1-dichloorethaan, cis-1,2-dichlooretheen, trans-1,2-dichlooretheen, dichloormethaan, tetrachlooretheen, tetrachloormethaan, trichlooretheen; OVAM (2009b) voor 1,2-dichloorethaan, vinylchloride, trichloormethaan (chloroform)
- Chlooraromaten: OVAM (2004); OVAM (2009b) voor hexachloorbenzeen
- PAK's: OVAM (2003a) voor PAK's; OVAM (2005a) voor wijzigingen in de toetsingscriteria voor benzo(a)pyreen en dibenzo(a,h)antraceen
- Cyaniden: OVAM (2004)
- Trimethylbenzenen: OVAM (2003b)
- Chloorfenolen: OVAM (2005b)
- Hexaan, heptaan, octaan: OVAM (2004)
- MTBE: OVAM (2003a)

Details van de nieuwe informatie zijn telkens terug te vinden in het rapport van de doorrekening op niveau bodemsaneringsnormen met S-Risk (Cornelis, Bierkens, and Standaert, 2013a). In de stoffenfiches is aangegeven welke informatie nieuw of gewijzigd is ten opzichte van de oorspronkelijke, hierboven vermelde stoffenfiches.









De stoffenfiches S-Risk bestaan uit 6 documenten:

- Deel 1: stoffenfiches metalen en arseen
- **Deel 2: stoffenfiches benzeen, toluen, ethylbenzeen, xylenen, styreen en trimethylbenzenen**
- Deel 3: stoffenfiches chlooralifaten, chloorbenzenen en chloorfenolen
- Deel 4: stoffenfiches polyaromatische koolwaterstoffen
- Deel 5: stoffenfiches alkanen, MTBE en cyaniden
- Deel 6: stoffenfiches oliefracties.

HOOFDSTUK 2. STOFFENFICHES BTEX EN STYREEN

Indien stoffengegevens niet overgenomen zijn uit de stoffenfiches, wordt dit aangeduid met  en eventueel een toelichting. Gedetailleerde informatie voor nieuwe gegevens is opgenomen in Cornelis et al. (2013a).

2.1. BENZEEN

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		71-43-2	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	78,11	
Oplosbaarheid	mg/l	1777 bij 25°C	gemiddelde
Dampdruk	Pa	12516 bij 25°C	gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	552 bij 25°C	gemiddelde
log Kow	g/g	2,13	Geometrisch gemiddelde
log Koc	dm ³ /kg	1,9	Geometrisch gemiddelde
Log Koa	g/g	berekend	
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	1,4.10 ⁻⁶	van den Berg (1995)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,74	gemiddelde
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	9,07.10 ⁻⁵	gemiddelde
Kp	[cm/h]	berekend	
FA	-	1	
ABS dermaal bodem/stof	-	0	 als verwaarloosbaar beschouwd
BTF rundsvlees	d/kg	berekend	
BTF schapenvlees	d/kg	berekend	
BTF lever	d/kg	berekend	
BTF nier	d/kg	berekend	
BTF melk	d/kg	berekend	
BTF bodem – ei	d/kg	0	geen waarden opgezocht
BTF voeder - ei	d/kg	0	geen waarden opgezocht
Carcinogeniteit		1 A	IARC (1999b) US-EPA (2000a)
Systemische effecten drempel ^{a)}			 (niet in Vlarebo-normering meegenomen)
<i>TDI oraal</i>	mg/kg.d	5.10 ⁻⁴	ATSDR (2007)
<i>TCL inhalatoir</i>	mg/m ³	9,6.10 ⁻³	ATSDR (2007)
<i>TDI dermaal</i>	mg/kg.d	5.10 ⁻⁴	= orale waarde



Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
Systemische effecten geen drempel ^{b)}			
<i>Hellingsfactor oraal</i>	(mg/kg.d) ⁻¹	0,0303	WHO (1996)
<i>Eenheidsrisico inhalatoir</i>	(mg/m ³) ⁻¹	0,006	WHO (2000)
<i>Hellingsfactor dermaal</i>	(mg/kg.d) ⁻¹	0,0303	☒ = orale waarde
Limiet in lucht	mg/m ³	5,00.10 ⁻³	EC ("Richtlijn 2000/69/EG van het Europees Parlement en de Raad van 16 november 2000 betreffende grenswaarden voor benzeen en koolstofmonoxide in de lucht," 2000)
Limiet in drinkwater	mg/m ³	10	WHO (1996)
Gewasnorm	mg/kg vg	-	
Vleesnorm			
Rundsvlees	mg/kg vg	-	
Schapenvlees	mg/kg vg	-	
Lever	mg/kg vg	-	
Nier	mg/kg vg	-	
Melk	mg/kg vg	-	
Boter	mg/kg vg	-	
Ei	mg/kg vg	-	
Achtergrond voeding volwassene	mg/kg dag	3,40.10 ⁻⁵	MAFF (1995)
Achtergrond voeding kinderen	mg/kg.dag	relatief t.o.v. volwassenen cfr. TGD	☒ Cornelis et al. (2013b)
Achtergrond aardappel	mg/kg vg	0,001	MAFF (1995)
Achtergrond wortelgewassen	mg/kg vg	0,001	MAFF (1995)
Achtergrond bolgroenten (ui, ...)	mg/kg vg	0,001	MAFF (1995)
Achtergrond vruchtgroenten	mg/kg vg	0,001	MAFF (1995)
Achtergrond kool	mg/kg vg	0,001	MAFF (1995)
Achtergrond bladgroenten	mg/kg vg	0,001	MAFF (1995)
Achtergrond peulvruchten	mg/kg vg	0,001	MAFF (1995)
Achtergrond rundsvlees	mg/kg vg	0,005	MAFF (1995)
Achtergrond orgaanvlees	mg/kg vg	0,006	MAFF (1995)
Achtergrond melk	mg/kg vg	0,001	MAFF (1995)
Achtergrond boter	mg/kg vg	0,001	MAFF (1995)
Achtergrond eieren	mg/kg vg	0,001	☒ MAFF (1995)
Achtergrond buitenlucht	mg/m ³	1,60.10 ⁻³	VMM (1998)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	1,60.10 ⁻³	☒ = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	1,00.10 ⁻¹	☒ VMM (2006)

^{a)} In de normering werd alleen rekening gehouden met het meest kritische effect, met name kanker. Ter illustratie van de S-Risk benadering, werden waarden voor systemische effecten met drempel opgezocht en mee in de S-Risk databank opgenomen.

^{b)} In de originele stoffenfiles staan de toetsingswaarden voor carcinogene effecten zonder drempel vermeld als de levenslange dosis bij 1/10⁵ extra kankergevallen. S-Risk maakt gebruik van hellingsfactoren en eenheidsrisico's. De omrekening is als volgt: hellingsfactor ((mg/kg.d)⁻¹) = 1.10⁻⁵/(dosis bij 1.10⁻⁵ (mg/kg.d)). Voor inademing geldt nog een vooafgaande omrekening van mg/kg.d naar mg/m³ door vermenigvuldiging met 70 kg (lichaamsgewicht) en deling door 20 m³/d (ademvolume).

2.2. TOLUEEN




Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		3108-88-3	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	92,13	
Oplosbaarheid	mg/l	523 bij 25°C	gemiddelde
Dampdruk	Pa	3802 bij 25°C	gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	655 bij 25°C	gemiddelde
log Kow	g/g	2,65	Geometrisch gemiddelde
log Koc	dm ³ /kg	2,12	Geometrisch gemiddelde
Log Koa	g/g	berekend	
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	1,2.10 ⁻⁶	van den Berg (1995)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,6936	gemiddelde
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	7,66.10 ⁻⁵	gemiddelde
Kp	[cm/h]	berekend	☒
FA	-	1	☒
ABS dermaal bodem/stof	-	3,00.10 ⁻²	☒ US-EPA (1995, 2003)
BTF rundsvlees	d/kg	berekend	☒
BTF schapenvlees	d/kg	berekend	
BTF lever	d/kg	berekend	☒
BTF nier	d/kg	berekend	☒
BTF melk	d/kg	berekend	
BTF bodem – ei	d/kg	0	☒ geen waarden opgezocht
BTF voeder - ei	d/kg	0	☒ geen waarden opgezocht
Carcinogeniteit		2B D	IARC (1999a) US-EPA (2000b)
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	2,23.10 ⁻¹	WHO (1996)
TCL inhalatoir ^{a)}	mg/m ³	2,6.10 ⁻¹	WHO (2000)
TDI dermaal	mg/kg.d	2,23.10 ⁻¹	☒ = orale TDI
uitmiddeldingsduur		kind, jongere, volwassene	
Limiet in lucht	mg/m ³	2,60.10 ⁻¹	WHO (2000)
Limiet in drinkwater	mg/m ³	700	WHO (1996)
Gewasnorm	mg/kg vg	-	
Vleesnorm			
Rundsvlees	mg/kg vg	-	
Schapenvlees	mg/kg vg	-	
Lever	mg/kg vg	-	
Nier	mg/kg vg	-	
Melk	mg/kg vg	-	
Boter	mg/kg vg	-	
Ei	mg/kg vg	-	
Achtergrond voeding volwassene	mg/kg dag	1,10.10 ⁻⁴	MAFF (1995)
Achtergrond voeding kinderen	mg/kg.dag	relatief t.o.v. volwassenen cfr. TGD	☒ Cornelis et al. (2013b)

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
Achtergrond aardappel	mg/kg vg	0,003	MAFF (1995)
Achtergrond wortelgewassen	mg/kg vg	0,003	MAFF (1995)
Achtergrond bolgroenten (ui, ...)	mg/kg vg	0,003	MAFF (1995)
Achtergrond vruchtgroenten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond kool	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond bladgroenten	mg/kg vg	0,003	MAFF (1995)
Achtergrond peulvruchten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond rundsvlees	mg/kg vg	0,014	MAFF (1995)
Achtergrond orgaanvlees	mg/kg vg	0,014	MAFF (1995)
Achtergrond melk	mg/kg vg	0,004	MAFF (1995)
Achtergrond boter	mg/kg vg	0,02	MAFF (1995)
Achtergrond eieren	mg/kg vg	0,007	 MAFF (1995)
Achtergrond buitenlucht	mg/m ³	4,20.10 ⁻³	Berekend uit VMM (1999, 2000)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	4,20.10 ⁻³	 = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	0	geen gegevens Vlaanderen

^{a)} In de originele stoffenfiches wordt de toetsingswaarde voor inademing uitgedrukt in mg/kg.d. S-Risk gebruikt een toetsingswaarde in mg/m³. De omrekening gebeurt door vermenigvuldiging van de waarde in mg/kg.d met een lichaamsgewicht van 70 kg en deling door een ademvolume van 20 m³/d.

2.3. ETHYLBENZEEN




Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		100-41-4	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	106,2	
Oplosbaarheid	mg/l	165 bij 25°C	gemiddelde
Dampdruk	Pa	1280 bij 25°C	gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	788 bij 25°C	gemiddelde
log Kow	g/g	3,15	Geometrisch gemiddelde
log Koc	dm ³ /kg	2,3	Geometrisch gemiddelde
Log Koa	g/g	berekend	N
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	2,1.10 ⁻⁶	van den Berg (1995)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,6168	gemiddelde
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	7,18.10 ⁻⁵	gemiddelde
Kp	[cm/h]	berekend	N
FA	-	1	N
ABS dermaal bodem/stof	-	3,00.10 ⁻²	N US-EPA (1995, 2003)
BTF rundsvlees	d/kg	berekend	N
BTF schapenvlees	d/kg	berekend	
BTF lever	d/kg	berekend	N
BTF nier	d/kg	berekend	N
BTF melk	d/kg	berekend	
BTF bodem – ei	d/kg	0	N geen waarden opgezocht
BTF voeder - ei	d/kg	0	N geen waarden opgezocht
Carcinogeniteit		3 D	IARC (2000) US-EPA (1991)
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	9,71.10 ⁻²	WHO (1996)
TCL inhalatoir ^{a)}	mg/m ³	22	WHO (2000)
TDI dermaal	mg/kg.d	9,71.10 ⁻²	N = orale TDI
uitmiddeldingsduur		kind, jongere, volwassene	
Limiet in lucht	mg/m ³	22	WHO (2000)
Limiet in drinkwater	mg/m ³	300	WHO (1996)
Gewasnorm	mg/kg vg	-	
Vleesnorm			
Rundsvlees	mg/kg vg	-	
Schapenvlees	mg/kg vg	-	
Lever	mg/kg vg	-	
Nier	mg/kg vg	-	
Melk	mg/kg vg	-	
Boter	mg/kg vg	-	
Ei	mg/kg vg	-	
Achtergrond voeding volwassene	mg/kg dag	6,00.10 ⁻⁵	MAFF (1995)
Achtergrond voeding kinderen	mg/kg.dag	relatief t.o.v. volwassenen cfr. TGD	N Cornelis et al. (2013b)

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
Achtergrond aardappel	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond wortelgewassen	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond bolgroenten (ui, ...)	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond vruchtgroenten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond kool	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond bladgroenten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond peulvruchten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond rundsvlees	mg/kg vg	0,004	MAFF (1995)
Achtergrond orgaanvlees	mg/kg vg	0,003	MAFF (1995)
Achtergrond melk	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond boter	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond eieren	mg/kg vg	0,002	 MAFF (1995)
Achtergrond buitenlucht	mg/m ³	8,00.10 ⁻⁴	Berekend uit VMM (1999, 2000)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	8,00.10 ⁻⁴	 = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	0	 geen gegevens Vlaanderen

^{a)} In de originele stoffenfiches wordt de toetsingswaarde voor inademing uitgedrukt in mg/kg.d. S-Risk gebruikt een toetsingswaarde in mg/m³. De omrekening gebeurt door vermenigvuldiging van de waarde in mg/kg.d met een lichaamsgewicht van 70 kg en deling door een ademvolume van 20 m³/d.

2.4. O-XYLEEN





Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		95-47-6	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	106,2	
Oplosbaarheid	mg/l	186 bij 25°C	gemiddelde
Dampdruk	Pa	889 bij 25°C	gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	548 bij 25°C	gemiddelde
log Kow	g/g	3,07	Geometrisch gemiddelde
log Koc	dm ³ /kg	2,15	Geometrisch gemiddelde
Log Koa	g/g	berekend	☒
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	1,6.10 ⁻⁶	van den Berg (1995)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,7512	gemiddelde
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	7,73.10 ⁻⁵	gemiddelde
Kp	[cm/h]	berekend	☒
FA	-	1	☒
ABS dermaal bodem/stof	-	3,00.10 ⁻²	☒ US-EPA (1995, 2003)
BTF rundsvlees	d/kg	berekend	☒
BTF schapenvlees	d/kg	berekend	
BTF lever	d/kg	berekend	☒
BTF nier	d/kg	berekend	☒
BTF melk	d/kg	berekend	
BTF bodem – ei	d/kg	0	☒ geen waarden opgezocht
BTF voeder - ei	d/kg	0	☒ geen waarden opgezocht
Carcinogeniteit		3 D	IARC (1999a) US-EPA IRIS datum niet traceerbaar, voor 2002
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	1,79.10 ⁻¹	WHO (1996)
TCL inhalatoir ^{a)}	mg/m ³	8,7.10 ⁻¹	WHO (2000)
TDI dermaal	mg/kg.d	1,79.10 ⁻¹	☒ = orale waarde
uitmiddeldingsduur		kind, jongere, volwassene	
Limiet in lucht	mg/m ³	8,70.10 ⁻¹	WHO (2000)
Limiet in drinkwater	mg/m ³	500	WHO (1996)
Gewasnorm	mg/kg vg	-	
Vleesnorm			
Rundsvlees	mg/kg vg	-	
Schapenvlees	mg/kg vg	-	
Lever	mg/kg vg	-	
Nier	mg/kg vg	-	
Melk	mg/kg vg	-	
Boter	mg/kg vg	-	
Ei	mg/kg vg	-	
Achtergrond voeding volwassene	mg/kg dag	6,60.10 ⁻⁵	MAFF (1995)

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
Achtergrond voeding kinderen	mg/kg.dag	relatief t.o.v. volwassenen cfr. TGD	 Cornelis et al. (2013b)
Achtergrond aardappel	mg/kg vg	0,004	MAFF (1995)
Achtergrond wortelgewassen	mg/kg vg	0,004	MAFF (1995)
Achtergrond bolgroenten (ui, ...)	mg/kg vg	0,004	MAFF (1995)
Achtergrond vruchtgroenten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond kool	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond bladgroenten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond peulvruchten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond rundsvlees	mg/kg vg	0,005	MAFF (1995)
Achtergrond orgaanvlees	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond melk	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond boter	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond eieren	mg/kg vg	0,002	 MAFF (1995)
Achtergrond buitenlucht	mg/m ³	9,00.10 ⁻⁴	Berekend uit VMM (1999, 2000)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	9,00.10 ⁻⁴	= buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	3,33.10 ⁻²	 VMM (2006) – waarde voor xyleen gedeeld door 3

^{a)} In de originele stoffenfiches wordt de toetsingswaarde voor inademing uitgedrukt in mg/kg.d. S-Risk gebruikt een toetsingswaarde in mg/m³. De omrekening gebeurt door vermenigvuldiging van de waarde in mg/kg.d met een lichaamsgewicht van 70 kg en deling door een ademvolume van 20 m³/d.

2.5. M-XYLEEN





Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		108-38-3	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	106,2	
Oplosbaarheid	mg/l	166 bij 25°C	gemiddelde
Dampdruk	Pa	1121 bij 25°C	gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	710 bij 25°C	gemiddelde
log Kow	g/g	3,18	Geometrisch gemiddelde
log Koc	dm ³ /kg	2,29	Geometrisch gemiddelde
Log Koa	g/g	-	N
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	1,6.10 ⁻⁶	van den Berg (1995)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,5952	gemiddelde
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	6,74.10 ⁻⁵	gemiddelde
Kp	[cm/h]	berekend	N
FA	-	1	N
ABS dermaal bodem/stof	-	3,00.10 ⁻²	N US-EPA (1995, 2003)
BTF rundsvlees	d/kg	berekend	N
BTF schapenvlees	d/kg	berekend	
BTF lever	d/kg	berekend	N
BTF nier	d/kg	berekend	N
BTF melk	d/kg	berekend	
BTF bodem – ei	d/kg	0	N geen waarden opgezocht
BTF voeder - ei	d/kg	0	N geen waarden opgezocht
Carcinogeniteit		3 D	IARC (1999a) US-EPA IRIS datum niet traceerbaar, voor 2002
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	1,79.10 ⁻¹	WHO (1996)
TCL inhalatoir ^{a)}	mg/m ³	8,7.10 ⁻¹	WHO (2000)
TDI dermaal	mg/kg.d	1,79.10 ⁻¹	N = orale waarde
uitmiddeldingsduur		kind, jongere, volwassene	
Limiet in lucht	mg/m ³	8,70.10 ⁻¹	WHO (2000)
Limiet in drinkwater	mg/m ³	500	WHO (1996)
Gewasnorm	mg/kg vg	-	
Vleesnorm			
Rundsvlees	mg/kg vg	-	
Schapenvlees	mg/kg vg	-	
Lever	mg/kg vg	-	
Nier	mg/kg vg	-	
Melk	mg/kg vg	-	
Boter	mg/kg vg	-	
Ei	mg/kg vg	-	
Achtergrond voeding volwassene	mg/kg dag	7,00.10 ⁻⁵	MAFF (1995)

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
Achtergrond voeding kinderen	mg/kg.dag	relatief t.o.v. volwassenen cfr. TGD	 Cornelis et al. (2013b)
Achtergrond aardappel	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond wortelgewassen	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond bolgroenten (ui, ...)	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond vruchtgroenten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond kool	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond bladgroenten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond peulvruchten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond rundsvlees	mg/kg vg	0,007	MAFF (1995)
Achtergrond orgaanvlees	mg/kg vg	0,004	MAFF (1995)
Achtergrond melk	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond boter	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond eieren	mg/kg vg	0,002	 MAFF (1995)
Achtergrond buitenlucht	mg/m ³	1,90.10 ⁻³	Berekend uit VMM (1999, 2000)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	1,90.10 ⁻³	 = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	3,33.10 ⁻²	 VMM (2006) – waarde voor xyleen gedeeld door 3

^{a)} In de originele stoffenfiches wordt de toetsingswaarde voor inademing uitgedrukt in mg/kg.d. S-Risk gebruikt een toetsingswaarde in mg/m³. De omrekening gebeurt door vermenigvuldiging van de waarde in mg/kg.d met een lichaamsgewicht van 70 kg en deling door een ademvolume van 20 m³/d.

2.6. P-XYLEEN

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		106-42-3	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	106,2	
Oplosbaarheid	mg/l	179 bij 25°C	gemiddelde
Dampdruk	Pa	1173 bij 25°C	gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	713 bij 25°C	gemiddelde
log Kow	g/g	3,16	Geometrisch gemiddelde
log Koc	dm ³ /kg	2,47	Geometrisch gemiddelde
Log Koa	g/g	berekend	N
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	1,6.10 ⁻⁶	van den Berg (1995)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,6648	gemiddelde
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	7,06.10 ⁻⁵	gemiddelde
Kp	[cm/h]	berekend	N
FA	-	1	N
ABS dermaal bodem/stof	-	3,00.10 ⁻²	N US-EPA (1995, 2003)
BTF rundsvlees	d/kg	berekend	
BTF schapenvlees	d/kg	berekend	N
BTF lever	d/kg	berekend	N
BTF nier	d/kg	berekend	N
BTF melk	d/kg	berekend	
BTF bodem – ei	d/kg	0	N geen waarden opgezocht
BTF voeder - ei	d/kg	0	N geen waarden opgezocht
Carcinogeniteit		3 D	IARC (1999a) US-EPA IRIS datum niet traceerbaar, voor 2002
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	1,79.10 ⁻¹	WHO (1996)
TCL inhalatoir ^{a)}	mg/m ³	8,7.10 ⁻¹	WHO (2000)
TDI dermaal	mg/kg.d	1,79.10 ⁻¹	N = orale waarde
Uitmiddeldingsduur Kind, jongere, volwassene			
Limiet in lucht	mg/m ³	8,70.10 ⁻¹	WHO (2000)
Limiet in drinkwater	mg/m ³	500	WHO (1996)
Gewasnorm	mg/kg vg		
Vleesnorm			
Rundsvlees	mg/kg vg	-	
Schapenvlees	mg/kg vg	-	
Lever	mg/kg vg	-	
Nier	mg/kg vg	-	
Melk	mg/kg vg	-	
Boter	mg/kg vg	-	
Ei	mg/kg vg	-	
Achtergrond voeding volwassene	mg/kg dag	7,00.10 ⁻⁵	MAFF (1995)

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
Achtergrond voeding kinderen	mg/kg.dag	relatief t.o.v. volwassenen cfr. TGD	 Cornelis et al. (2013b)
Achtergrond aardappel	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond wortelgewassen	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond bolgroenten (ui, ...)	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond vruchtgroenten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond kool	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond bladgroenten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond peulvruchten	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond rundsvlees	mg/kg vg	0,007	MAFF (1995)
Achtergrond orgaanvlees	mg/kg vg	0,004	MAFF (1995)
Achtergrond melk	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond boter	mg/kg vg	0,002	MAFF (1995)
Achtergrond eieren	mg/kg vg	0,002	 MAFF (1995)
Achtergrond buitenlucht	mg/m ³	1,90.10 ⁻³	Berekend uit VMM (1999, 2000)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	1,90.10 ⁻³	 = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	3,33.10 ⁻²	 VMM (2006) – waarde voor xyleen gedeeld door 3

^{a)} In de originele stoffenfiches wordt de toetsingswaarde voor inademing uitgedrukt in mg/kg.d. S-Risk gebruikt een toetsingswaarde in mg/m³. De omrekening gebeurt door vermenigvuldiging van de waarde in mg/kg.d met een lichaamsgewicht van 70 kg en deling door een ademvolume van 20 m³/d.


2.7. STYREEN

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		9003-53-6	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	104,51	
Oplosbaarheid	mg/l	272 bij 25°C	gemiddelde
Dampdruk	Pa	850 bij 25°C	gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	271 bij 25°C	gemiddelde
log Kow	g/g	2,97	Geometrisch gemiddelde
log Koc	dm ³ /kg	2,86	Geometrisch gemiddelde
Log Koa	g/g	berekend	N
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	2.10 ⁻⁶	van den Berg (1995)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,6144	gemiddelde
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	6,96.10 ⁻⁵	gemiddelde
Kp	[cm/h]	berekend	N
FA	-	1	N
ABS dermaal bodem/stof	-	3,00.10 ⁻²	N US-EPA (1995, 2003)
BTF rundsvlees	d/kg	berekend	
BTF schapenvlees	d/kg	berekend	N
BTF lever	d/kg	berekend	
BTF nier	d/kg	berekend	
BTF melk	d/kg	berekend	N
BTF bodem – ei	d/kg	0	N geen waarden opgezocht
BTF voeder - ei	d/kg	0	N geen waarden opgezocht
Carcinogeniteit		2B	IARC (2002)
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	7,7.10 ⁻³	WHO (1996)
TCL inhalatoir ^{a)}	mg/m ³	2,6.10 ⁻¹	WHO (2000)
TDI dermaal	mg/kg.d	7,7.10 ⁻³	N = orale waarde
uitmiddeldingsduur		kind, jongere, levenslang	
Limiet in lucht	mg/m ³	2,60.10 ⁻¹	WHO (2000)
Limiet in drinkwater	mg/m ³	20	WHO (1996)
Gewasnorm	mg/kg vg	-	
Vleesnorm			
Rundsvlees	mg/kg vg	-	
Schapenvlees	mg/kg vg	-	
Lever	mg/kg vg	-	
Nier	mg/kg vg	-	
Melk	mg/kg vg	-	
Boter	mg/kg vg	-	
Ei	mg/kg vg	-	
Achtergrond voeding volwassene	mg/kg dag	5,70.10 ⁻⁵	MAFF (1999)
Achtergrond voeding kinderen	mg/kg.dag	relatief t.o.v. volwassenen cfr. TGD	N Cornelis et al. (2013b)
Achtergrond aardappel	mg/kg vg	0,00015	MAFF (1999)











Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
Achtergrond wortelgewassen	mg/kg vg	0,00015	MAFF (1999)
Achtergrond bolgroenten (ui, ...)	mg/kg vg	0,00015	MAFF (1999)
Achtergrond vruchtgroenten	mg/kg vg	0,00085	MAFF (1999)
Achtergrond kool	mg/kg vg	0,00085	MAFF (1999)
Achtergrond bladgroenten	mg/kg vg	0,00045	MAFF (1999)
Achtergrond peulvruchten	mg/kg vg	0,00085	MAFF (1999)
Achtergrond rundsvlees	mg/kg vg	0,007	MAFF (1999)
Achtergrond orgaanvlees	mg/kg vg	0,004	MAFF (1999)
Achtergrond melk	mg/kg vg	0,002	MAFF (1999)
Achtergrond boter	mg/kg vg	0,002	MAFF (1999)
Achtergrond eieren	mg/kg vg	0,002	MAFF (1999)
Achtergrond buitenlucht	mg/m ³	4,00.10 ⁻⁴	VMM (1998)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	4,00.10 ⁻⁴	MAFF = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	1,00.10 ⁻¹	VMM (2006)

^{a)} In de originele stoffenfiches wordt de toetsingswaarde voor inademing uitgedrukt in mg/kg.d. S-Risk gebruikt een toetsingswaarde in mg/m³. De omrekening gebeurt door vermenigvuldiging van de waarde in mg/kg.d met een lichaamsgewicht van 70 kg en deling door een ademvolume van 20 m³/d.

HOOFDSTUK 3. STOFFENFILES TRIMETHYLBENZENEN

Indien stoffengegevens niet overgenomen zijn uit de stoffenfiles, wordt dit aangeduid met  en eventueel een toelichting. Gedetailleerde informatie voor nieuwe gegevens is opgenomen in Cornelis et al. (2013a).

3.1. 1,2,3-TRIMETHYLBENZEEN

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		526-73-8	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	120,2	geometrisch gemiddelde
Oplosbaarheid	mg/l	67,4 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Dampdruk	Pa	225 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	401 bij 25°C	Berekend uit S en P
log Kow ^{a)}	g/g	3,6 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
log Koc	dm ³ /kg	2,836957	geometrisch gemiddelde
Log Koa	g/g	berekend	
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	6,4.10 ⁻⁶	van den Berg (1997)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,696 bij 25°C	berekende waarde
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	6,86.10 ⁻⁵ bij 25°C	berekende waarde
Kp	[cm/h]	berekend	
FA	-	1	
ABS dermaal bodem/stof	-	0,1	 semi-vluchtige stof (US-EPA, 2004)
BTF rundsvlees	d/kg	berekend	
BTF schapenvlees	d/kg	berekend	
BTF lever	d/kg	berekend	
BTF nier	d/kg	berekend	
BTF melk	d/kg	berekend	
BTF bodem – ei	d/kg	0	 geen waarden opgezocht
BTF voeder - ei	d/kg	0	 geen waarden opgezocht
Carcinogeniteit		Niet-carcinogeen	
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	5.10 ⁻²	CEHT (2001)
TCL inhalatoir ^{b)}	mg/m ³	5,83.10 ⁻³	CEHT (2001)
TDI dermaal	mg/kg.d	5.10 ⁻²	 = orale waarde
uitmiddeldingsduur		kind, jongere, volwassene	
Limiet in lucht	mg/m ³	5,83.10 ⁻³	CEHT, 2001
Limiet in drinkwater	mg/m ³	150	Berekend uit TDor
Gewasnorm	mg/kg vg	-	




Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
Vleesnorm			
Rundsvlees	mg/kg vg	-	
Schapenvlees	mg/kg vg	-	
Lever	mg/kg vg	-	
Nier	mg/kg vg	-	
Melk	mg/kg vg	-	
Boter	mg/kg vg	-	
Ei	mg/kg vg	-	
Achtergrond voeding volwassene	mg/kg dag	0	
Achtergrond voeding kinderen	mg/kg.dag	0	
Achtergrond aardappel	mg/kg vg	0	
Achtergrond wortelgewassen	mg/kg vg	0	
Achtergrond bolgroenten (ui, ...)	mg/kg vg	0	
Achtergrond vruchtgroenten	mg/kg vg	0	
Achtergrond kool	mg/kg vg	0	
Achtergrond bladgroenten	mg/kg vg	0	
Achtergrond peulvruchten	mg/kg vg	0	
Achtergrond rundsvlees	mg/kg vg	0	
Achtergrond orgaanvlees	mg/kg vg	0	
Achtergrond melk	mg/kg vg	0	
Achtergrond boter	mg/kg vg	0	
Achtergrond eieren	mg/kg vg	0	
Achtergrond buitenlucht	mg/m ³	4,25.10 ⁻⁴	Berekend uit VMM (1999, 2000)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	4,25.10 ⁻⁴	<input checked="" type="checkbox"/> = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	0	<input checked="" type="checkbox"/>

^{a)} In de stoffenfiles staat vermeld Kow = 3,6. De correcte waarde is log Kow = 3,6. Deze laatste waarde is ook gebruikt in de normberekening en is in Vlier-Humaan opgenomen.

^{b)} In de originele stoffenfiles wordt de toetsingswaarde voor inademing uitgedrukt in mg/kg.d. S-Risk gebruikt een toetsingswaarde in mg/m³. De omrekening gebeurt door vermenigvuldiging van de waarde in mg/kg.d met een lichaamsgewicht van 70 kg en deling door een ademvolume van 20 m³/d.

3.2. 1,2,4-TRIMETHYLBENZEEN

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		95-63-6	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	120,2	
Oplosbaarheid	mg/l	62.2 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Dampdruk	Pa	225 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	631 bij 25°C	Berekend uit S en P
log Kow ^{a)}	g/g	3,6 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
log Koc	dm ³ /kg	3,106871	geometrisch gemiddelde
Log Koa	g/g	berekend	N
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	6,4.10 ⁻⁶	van den Berg (1997)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,6864 bij 25°C	berekende waarde
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	6,86.10 ⁻⁵ bij 25°C	berekende waarde
Kp	[cm/h]	berekend	N
FA	-	1	N
ABS dermaal bodem/stof	-	0,1	N semi-vluchtige stof (US-EPA, 2004)
BTF rundsvlees	d/kg	berekend	
BTF schapenvlees	d/kg	berekend	N
BTF lever	d/kg	berekend	N
BTF nier	d/kg	berekend	N
BTF melk	d/kg	berekend	
BTF bodem – ei	d/kg	0	N geen waarden opgezocht
BTF voeder - ei	d/kg	0	N geen waarden opgezocht
Carcinogeniteit		D	US-EPA (niet traceerbaar)
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	0,05	CEHT (2001)
TCL inhalatoir ^{b)}	mg/m ³	5,83.10 ⁻³	CEHT (2001) en RAIS 2002?/RAIS niet traceerbaar
TDI dermaal	mg/kg.d	0,05	N = orale waarde
uitmiddeldingsduur		kind, jongere, volwassene	
Limiet in lucht	mg/m ³	5,83.10 ⁻³	US-EPA, 1997 en RAIS, 2002?, waarden niet traceerbaar
Limiet in drinkwater	mg/m ³	150	Berekend uit TDlor
Gewasnorm	mg/kg vg	-	
Vleesnorm			
Rundsvlees	mg/kg vg	-	
Schapenvlees	mg/kg vg	-	
Lever	mg/kg vg	-	
Nier	mg/kg vg	-	
Melk	mg/kg vg	-	
Boter	mg/kg vg	-	
Ei	mg/kg vg	-	
Achtergrond voeding volwassene	mg/kg dag	1,67E-04	?

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
Achtergrond voeding kinderen	mg/kg.dag	relatief t.o.v. volwassene volgens TGD	 Cornelis et al. (2013b)
Achtergrond aardappel	mg/kg vg	0	
Achtergrond wortelgewassen	mg/kg vg	0	
Achtergrond bolgroenten (ui, ...)	mg/kg vg	0	
Achtergrond vruchtgroenten	mg/kg vg	0	
Achtergrond kool	mg/kg vg	0	
Achtergrond bladgroenten	mg/kg vg	0	
Achtergrond peulvruchten	mg/kg vg	0	
Achtergrond rundsvlees	mg/kg vg	0	
Achtergrond orgaanvlees	mg/kg vg	0	
Achtergrond melk	mg/kg vg	0	
Achtergrond boter	mg/kg vg	0	
Achtergrond eieren	mg/kg vg	0	
Achtergrond buitenlucht	mg/m ³	1,53E-03	Berekend uit VMM (1999, 2000)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	1,53E-03	 = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	0	

^{a)} In de stoffenfiches staat vermeld $Kow = 3,6$. De correcte waarde is $\log Kow = 3,6$. Deze laatste waarde is ook gebruikt in de normberekening en is in Vlier-Humaan opgenomen.

^{b)} In de originele stoffenfiches wordt de toetsingswaarde voor inademing uitgedrukt in mg/kg.d. S-Risk gebruikt een toetsingswaarde in mg/m³. De omrekening gebeurt door vermenigvuldiging van de waarde in mg/kg.d met een lichaamsgewicht van 70 kg en deling door een ademvolume van 20 m³/d.

3.3. 1,3,5-TRIMETHYLBENZEEN

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		108-67-8	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	120,2	
Oplosbaarheid	mg/l	67,6 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Dampdruk	Pa	326 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	774 bij 25°C	Berekend uit S en P
log Kow ^{a)}	g/g	3,7 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
log Koc	dm ³ /kg	2,832509	geometrisch gemiddelde
Log Koa	g/g	berekend	☒
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	6,4E-06	van den Berg (1997)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,6864 bij 25°C	berekende waarde
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	6,86.10 ⁻⁵ bij 25°C	berekende waarde
Kp	[cm/h]	berekend	☒
FA	-	1	☒
ABS dermaal bodem/stof	-	0,1	☒ semi-vluchtige stof (US-EPA, 2004)
BTF rundsvlees	d/kg	berekend	
BTF schapenvlees	d/kg	berekend	☒
BTF lever	d/kg	berekend	☒
BTF nier	d/kg	berekend	☒
BTF melk	d/kg	berekend	
BTF bodem – ei	d/kg	0	☒ geen waarden opgezocht
BTF voeder - ei	d/kg	0	☒ geen waarden opgezocht
Carcinogeniteit		D	US-EPA (niet traceerbaar)
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	0,05	CEHT (2001)
TCL inhalatoir ^{b)}	mg/m ³	5,83.10 ⁻³	RAIS (2002) niet traceerbaar
TDI dermaal	mg/kg.d	0,05	☒ = orale waarde
uitmiddeldingsduur		kind, jongere, volwassene	
Limiet in lucht	mg/m ³	5,83.10 ⁻³	RAIS (2002) (niet traceerbaar)
Limiet in drinkwater	mg/m ³	150	Berekend uit TDlor
Gewasnorm	mg/kg vg	-	
Vleesnorm			
Rundsvlees	mg/kg vg	-	
Schapenvlees	mg/kg vg	-	
Lever	mg/kg vg	-	
Nier	mg/kg vg	-	
Melk	mg/kg vg	-	
Boter	mg/kg vg	-	
Ei	mg/kg vg	-	
Achtergrond voeding volwassene	mg/kg dag	0	
Achtergrond voeding kinderen	mg/kg.dag	0	

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
Achtergrond aardappel	mg/kg vg	0	
Achtergrond wortelgewassen	mg/kg vg	0	
Achtergrond bolgroenten (ui, ...)	mg/kg vg	0	
Achtergrond vruchtgroenten	mg/kg vg	0	
Achtergrond kool	mg/kg vg	0	
Achtergrond bladgroenten	mg/kg vg	0	
Achtergrond peulvruchten	mg/kg vg	0	
Achtergrond rundsvlees	mg/kg vg	0	
Achtergrond orgaanvlees	mg/kg vg	0	
Achtergrond melk	mg/kg vg	0	
Achtergrond boter	mg/kg vg	0	
Achtergrond eieren	mg/kg vg	0	
Achtergrond buitenlucht	mg/m ³	5,00.10 ⁻⁴	Berekend uit VMM (1999, 2000)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	5,00.10 ⁻⁴	$\frac{N}{V}$ = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	0	$\frac{N}{V}$

^{a)} In de stoffenfiches staat vermeld $Kow = 3,7$. De correcte waarde is $\log Kow = 3,7$. Deze laatste waarde is ook gebruikt in de normberekening en is in Vlier-Humaan opgenomen.

^{b)} In de originele stoffenfiches wordt de toetsingswaarde voor inademing uitgedrukt in mg/kg.d. S-Risk gebruikt een toetsingswaarde in mg/m³. De omrekening gebeurt door vermenigvuldiging van de waarde in mg/kg.d met een lichaamsgewicht van 70 kg en deling door een ademvolume van 20 m³/d.

LITERATUURLIJST

- ATSDR. (2007). Toxicological Profile for benzene.
- CEHT. (2001). Technical report: development of Cleanup Target Levels (CTLs) for Chapter 62-777.
- Cornelis, C., Bierkens, J., & Standaert, A. (2013a). Doorrekening van bodemsaneringsnormen met S-Risk - verkennende oefening.
- Cornelis, C., Standaert, A., & Willems, H. (2013b). S-Risk - Technical guidance document.
- IARC. (1999a). Re-evaluation of some organic chemicals, Hydrazine and hydrogen Peroxide. *Volume 71*.
- IARC. (1999b). Some industrial chemicals and dyestuffs. *Volume 29*.
- IARC. (2000). Some industrial chemicals. *Volume 77*.
- IARC. (2002). Some traditional herbal medicines, some mycotoxins, naphthalene and styrene. *Volume 82*.
- MAFF. (1995). Benzene and other aromatic hydrocarbons in food - average UK dietary intakes.
- MAFF. (1999). Total diet study: styrene.
- OVAM. (2003a). Aanvulling bij basisinformatie voor risico-evaluaties - polyaromatische koolwaterstoffen en MTBE.
- OVAM. (2003b). Aanvulling bij basisinformatie voor risico-evaluaties - trimethylbenzenen.
- OVAM. (2004). Basisinformatie voor risico-evaluaties / Deel 4 - SN - Stofdata normering. *Achtergronddocumenten bodemsanering*, 1-78.
- OVAM. (2005a). Aanvulling bij basisinformatie voor risico-evaluaties - aangepaste toetsingscriteria voor historische bodemverontreiniging met benzo(a)pyreen en dibenzo(a,h)antracene.
- OVAM. (2005b). Aanvulling bij basisinformatie voor risico-evaluaties - chloorfenolen: voorstel van normering en stofdata.
- OVAM. (2009a). Aanvulling bij basisinformatie voor risico-evaluaties - BTEXS stofdata.
- OVAM. (2009b). Aanvulling bij basisinformatie voor risico-evaluaties - carcinogene gechloreerde koolwaterstoffen (1,2-DCA, VC, CHL en HCB): stofdata.
- OVAM. (2009c). Aanvulling bij basisinformatie voor risico-evaluaties - zware metalen en arseen: stofdata.
- OVAM. (2009d). Rekenmodule voor de opname van zware metalen in planten en transfer naar de voedselketen.
- Richtlijn 2000/69/EG van het Europees Parlement en de Raad van 16 november 2000 betreffende grenswaarden voor benzeen en koolstofmonoxide in de lucht. (2000). (200/69/EG).
- US-EPA. (1991). IRIS - Ethylbenzene (CAS n° 100-41-4).
- US-EPA. (1995). Technical Guidance Manual - Assessing dermal contact with soil / existing guidance.
- US-EPA. (2000a). IRIS - Benzene (CAS n° 71-43-2).
- US-EPA. (2000b). IRIS - Toluene (CAS n° 108-88-3).
- US-EPA. (2003). Updated dermal exposure assessment guidance.
- US-EPA. (2004). Risk Assessment Guidance for Superfund Volume I: Human Health Evaluation Manual (Part E, Supplemental Guidance for Dermal Risk Assessment).

- van den Berg, R. (1995). Blootstelling van de mens aan bodemverontreiniging. Een kwalitatieve en kwantitatieve analyse, leidend tot voorstellen voor humaan toxicologische C-toetsingswaarden (Herziene versie).
- van den Berg, R. (1997). Verantwoording van gegevens en procedures voor de 1e tranche interventiewaarden: van RIVM-rapporten naar de Notitie Interventiewaarden bodemsanering.
- VMM. (1998). Luchtkwaliteit in het Vlaamse Gewest.
- VMM. (1999). Luchtkwaliteit in het Vlaamse Gewest 1998.
- VMM. (2000). Luchtkwaliteit in het Vlaamse Gewest 1999.
- VMM. (2006). Deel3: Drinkwaterkwaliteit in detail bekeken. *Kwaliteit van het drinkwater*.
- WHO. (1996). Guidelines for drinking-water quality, 2nd Ed. Vol. 2, Health criteria and other supporting information.
- WHO. (2000). Air quality guidelines for Europe, 2nd Ed., 91.