

Eindrapport

S-Risk stoffenfiches – deel 5: hexaan, heptaan, octaan, MTBE en cyaniden

C. Cornelis, J. Bierkens, A. Standaert

Studie uitgevoerd in opdracht van OVAM
2014/MRG/R/43

Februari 2017



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 8. Stoffenfiches alkanen en MTBE	7
8.1. <i>Hexaan</i>	7
8.2. <i>Heptaan</i>	9
8.3. <i>Octaan</i>	11
8.4. <i>Methyl-t-butylether (MTBE)</i>	13
HOOFDSTUK 9. Stoffenfiches cyaniden	15
9.1. <i>Vrij cyanide</i>	15
9.2. <i>Niet-chlooroxideerbare cyaniden (complexe cyaniden)</i>	17
Literatuurlijst	20

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

12/01/2017 Het CAS-nummer van hexaan werd gewijzigd.

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 8. STOFFENFICHES ALKANEN EN MTBE

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).

8.1. HEXAAN

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		110-54-3	ATSDR (1999) – n-hexaan
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	86	
Oplosbaarheid	mg/l	9,50 bij 20°C	Verschuieren (1983)
Dampdruk	Pa	16000 bij 20°C	Verschuieren (1983)
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	berekend	
log Kow	g/g	2,77	Heath et al. (1993)
log Koc	dm ³ /kg	2,95	Heath et al. (1993)
Log Koa	g/g	berekend	
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	4,00.10 ⁻⁶	Van den Berg (1994)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,648	Heath et al. (1993)
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	berekend	
Kp	[cm/h]	berekend	
FA	-	1	
ABS dermaal bodem/stof	-	0	 verwaarloosbaar, vluchtige stof
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	Geen referentie
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	6.10 ⁻²	US-EPA IRIS 1994 (niet meer traceerbaar, verouderd)
TCL inhalatoir ^{a)}	mg/m ³	2.10 ⁻¹	US-EPA IRIS 1995 (niet meer traceerbaar, verouderd)
TDI dermaal	mg/kg.d	6.10 ⁻²	= orale waarde
uitmiddeldingsduur		kind, jongere, volwassene	

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
Limiet in lucht	mg/m ³	2,00.10 ⁻¹	US-EPA, 1995 (niet meer traceerbaar, verouderd)
Limiet in drinkwater	mg/m ³	10	Vlaamse Regering (1989)(maximaal gehalte aan minerale olie in drinkwater)
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	
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	2,20.10 ⁻³	VMM (1992)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	2,20.10 ⁻³	☒ = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	0	☒ Geen gegevens

- 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.

8.2. HEPTAAN

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		142-82-5	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	100	
Oplosbaarheid	mg/l	3 bij 20°C	Verschueren (1983)
Dampdruk	Pa	4700 bij 20°C	Verschueren (1983)
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	berekend	
log Kow	g/g	3,92	Van den Berg (1994)
log Koc	dm ³ /kg	berekend	
Log Koa	g/g	berekend	N
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	4,00.10 ⁻⁶	Van den Berg (1994)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,5592	Van den Berg (1994)
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	berekend	
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		niet-carcinogeen	?
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	3,1	Vermeire et al. (1991)
TCL inhalatoir ^{a)}	mg/m ³	19	berekend uit orale waarde
TDI dermaal	mg/kg.d	3,1	= orale waarde
uitmiddeldingsduur		kind, jongere, volwassene	
Limiet in lucht	mg/m ³	19	berekend uit orale waarde
Limiet in drinkwater	mg/m ³	10	Vlaamse Regering (1989)(maximaal gehalte aan minerale olie in drinkwater)
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	

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
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	1,00.10 ⁻³	VMM (1992)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	1,00.10 ⁻³	= buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	0	

- 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.

8.3. OCTAAN



Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		111-65-9	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	114	
Oplosbaarheid	mg/l	$6,60 \cdot 10^{-1}$ bij 20°C	Verschuieren (1983)
Dampdruk	Pa	1470 bij 20°C	Verschuieren (1983)
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	berekend	
log Kow	g/g	4,4	Van den Berg (1994)
log Koc	dm ³ /kg	berekend	
Log Koa	g/g	berekend	N
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	$3,40 \cdot 10^{-6}$	Van den Berg (1994)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	0,5208	Van den Berg (1994)
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	berekend	
Kp	[cm/h]	berekend	N
FA	-	1	N
ABS dermaal bodem/stof	-	$3,00 \cdot 10^{-2}$	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		niet-carcinogeen	? geen referentie gegeven
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	3,1	Vermeire et al. (1991)
TCL inhalatoir ^{a)}	mg/m ³	19	omgerekend uit orale waarde
TDI dermaal	mg/kg.d	3,1	= orale waarde
Limiet in lucht	mg/m ³	19	Omgerekend uit orale waarde
Limiet in drinkwater	mg/m ³	10	Vlaamse Regering (1989)(maximaal gehalte aan minerale olie in drinkwater)
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	4,00.10 ⁻⁴	VMM (1992)
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	4,00.10 ⁻⁴	<input checked="" type="checkbox"/> = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	0	<input checked="" type="checkbox"/> Geen gegevens

- 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.


8.4. METHYL-T-BUTYLETHER (MTBE)

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		1634-04-4	
Type		organisch	
Dissociërend		neen	
Molmassa	g/mol	88,15	
Oplosbaarheid	mg/l	$4,20 \cdot 10^4$	Stephenson (1992)
Dampdruk	Pa	26800	ECB (2000)
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	43,8	Robbins (1993)
log Kow	g/g	1,14	Gemiddelde
log Koc	dm ³ /kg	0,826075	Geometrisch gemiddelde
Log Koa	g/g	berekend	
BCF		berekend	
Dpe	m ² /d	$1,00 \cdot 10^{-7}$	Kreule (1995)
Dpvc	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	berekend	
Kp	[cm/h]	$1,09 \cdot 10^{-1}$	Fan et al. (2007)
FA	-	1	
ABS dermaal bodem/stof	-	0	verwaarloosbaar
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 (niet indeelbaar) geen indeling	IARC (1999) US-EPA (1993)
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	$1 \cdot 10^{-1}$	US-EPA (1997)
TCL inhalatoir ^a	mg/m ³	3	US-EPA (1993)
TDI dermaal	mg/kg.d	$1 \cdot 10^{-1}$	= orale waarde
uitmiddeldingsduur		kind, jongere, volwassene	
Limiet in lucht	mg/m ³	3	US-EPA (1993)
Limiet in drinkwater	mg/m ³	300	berekend uit orale waarde
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	
Achtergrond aardappel	mg/kg vg	0	












Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
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	1,00.10 ⁻³	Geen referentie in stoffenfiche
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	1,00.10 ⁻³	 = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	1,00.10 ⁻¹	



- 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 9. STOFFENFICHES CYANIDEN

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).










9.1. VRIJ CYANIDE



Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		57-12-5	
Type		organisch	
Dissociërend			
Zuurdissociatie ^{a)}		Als niet-dissociërend beschouw	
(pKa		9,2	 niet gebruikt)
Molmassa	g/mol	26	(uitgedrukt als CN-)
Oplosbaarheid	mg/l	1,00.10 ⁶	mengbaar (arbitrair hoge waarde)
Dampdruk	Pa	83993 bij 20°C (HCN)	ATSDR (1997)
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	5168 bij 20°C	ATSDR (1997)
log Kow	g/g	0,87	ATSDR (1997)
log Koc	dm ³ /kg	3 (KCN)	ATSDR (1997)
Log Koa	g/g	berekend	
BCF		0	Towill et al. (1978)
Dpe	m ² /d	0	
Dpvc	m ² /d	0	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	berekend	
Kp	[cm/h]	5,50.10 ⁻⁴	 gemiddelde van Dugard (1987) in Johanson (2008)
FA	-	1	
ABS dermaal bodem/stof	-	1,00.10 ⁻¹	 Cal-EPA (1999)
BTF rundsvlees	d/kg	0	
BTF schapenvlees	d/kg	0	
BTF lever	d/kg	0	
BTF nier	d/kg	0	
BTF melk	d/kg	0	
BTF bodem – ei	d/kg	0	 geen data opgezocht
BTF voeder - ei	d/kg	0	 geen data opgezocht
Carcinogeniteit		D niet klasseerbaar als menselijk carcinogeen	US-EPA IRIS, 1998 (niet traceerbaar, verouderd)
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	1,2.10 ⁻²	WHO (1996)
TCL inhalatoir ^{b)}	mg/m ³	2.10 ⁻¹	Vermeire (1991)

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
TDI dermaal	mg/kg.d	$1,2 \cdot 10^{-2}$	= orale waarde
Limiet in lucht	mg/m ³	$2,00 \cdot 10^{-1}$	Vermeire (1991)
Limiet in drinkwater	mg/m ³	70	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	0	Vermeire (1991)
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	0	
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	0	 = binnenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	0	

- a) In Vlier-Humaan wordt bij een zuurdissociërende verbinding de Kd berekend uit de Koc (Koc-waarde voor vrij cyanide in de stoffenfiche = 1000 (waarde voor KCN)). In S-Risk wordt de Kd bij zuurdissociërende stoffen rechtstreeks uit de Koc berekend. Gezien de impact op de risicoberekening hebben we vrij cyanide in S-Risk als niet-zuurdissociërend ingevoerd, waardoor de Koc kon gebruikt worden. De invloed van de pH op berekende risico's is afwezig in het gebied met een pH < 7,5 en nog zeer beperkt bij een pH = 8.
- 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.

9.2. NIET-CHLOOROXIDEERBARE CYANIDEN (COMPLEXE CYANIDEN)

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
CAS nr.		-	
Type		anorganisch	
Molmassa	g/mol	26	(uitgedrukt als CN-)
Oplosbaarheid	mg/l	26	Meeussen (1992)
Dampdruk	Pa	0	
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	0	
Kd	dm ³ /kg	0	
BCF		2,82 voor ondergrondse groenten 1,41 voor bovengrondse groenten	berekend uit Wallace et al. (1977)
Dpe	m ² /d	0	
Dpvc	m ² /d	0	
Diffusiecoëfficiënt lucht (Da)	m ² /d	berekend	
Diffusiecoëfficiënt water (Dw)	m ² /d	berekend	
Kp	[cm/h]	0	
FA	-	1	
ABS dermaal bodem/stof	-	1,00.10 ⁻²	 Cal-EPA (1999)
BTF rundsvlees	d/kg	0	
BTF schapenvlees	d/kg	0	
BTF lever	d/kg	0	
BTF nier	d/kg	0	
BTF melk	d/kg	0	
BTF bodem – ei	d/kg	0	 geen data opgezocht
BTF voeder - ei	d/kg	0	 geen data opgezocht
Carcinogeniteit		niet-carcinogeen	? geen referentie
Systemische effecten drempel			
TDI oraal	mg/kg.d	1,3.10 ⁻²	Vermeire et al. (1991)
TCL inhalatoir	mg/m ³	1	ACROS (1998)
TDI dermaal ^{a)}	mg/kg.d	1,3.10 ⁻²	= orale waarde
uitmiddeldingsduur		kind, jongere, volwassene	
Limiet in lucht	mg/m ³	1	ACROS (1998)
Limiet in drinkwater	mg/m ³	70	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	4,00.10 ⁻⁴	Vermeire et al. (1991)
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	

Parameter	Eenheid	Waarde	Bron
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	0	
Achtergrond binnenlucht	mg/m ³	0	 = buitenlucht
Achtergrond drinkwater	mg/m ³	0	

- 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.

LITERATUURLIJST

- ACROS. (1998). Material Safety Data Sheet Prussion blue.
- ATSDR. (1997). Toxicological Profile for Cyanide.
- ATSDR. (1999). Toxicological profile for n-hexane.
- B. Vl. Ex. (1989). Besluit van de Vlaamse Executieve van 15 maart 1989 houdende vaststelling van een technische reglementering inzake drinkwater.
- Cal-EPA. (1999). Appendix A. In *Preliminary endangerment assessment guidance manual - a guidance manual for evaluating hazardous substance release sites*: California Environmental Protection Agency.
- 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.
- Dugard, P. H. (1987). The absorption of cyanide through human skin in vitro from solutions of sodium cyanide and gaseous HCN. In B. Ballantyne & T. C. Marrs (Eds.), *Clinical and Experimental Toxicology of cyanides*, (pp. 127-137). Bristol: Wright.
- ECB. (2000). Risk assessment Methyl tertiary-Butyl Ether (MTBE) - draft.
- Fan, V. S., Savage, R. E., & Buckley, T. J. (2007). Methods and measurements for estimating human dermal uptake of volatile organic compounds and for deriving dermal permeability coefficients. *Toxicology mechanisms and methods*, 17(5), 295-304.
- Heath, J. S., Koblis, K., & Sager, S. L. (1993). Review of chemical, physical and toxicologic properties of components of Total Petroleum Hydrocarbons. *Journal of Soil Contamination*, 2(1), 1-25.
- IARC. (1999). Some chemicals that cause tumors of the kidney or urinary bladder in rodents and some other substances. *Volume 73*.
- Johanson, G., & Rauma, M. (2008). Basis for skin notation. Part I. Dermal penetration data for substances on the Swedish OEL list.
- Kreule, P. R., van den Berg, R., Waitz, M. F. W., & Swartjes, F. (1995). Calculation of humantoxicological serious soil contamination concentrations and proposals for intervention values for clean-up of soil and groundwater: Third series of compounds.
- Meeussen, H. (1992). *Chemical speciation and behaviour of cyanide in contaminated soils*.
- 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)antraceen.
- 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.
- Robbins, G. A., Wang, S., & Stuart, J. D. (1993). Using the static headspace method to determine Henry's law constants. *Analytical Chemistry*, 65(21), 3113-3118.
- Stephenson, R. M. (1992). Mutual solubilities: water ketones, water ethers and water gasoline alcohols. *J Chem Eng Data*, 37, 80-95.
- Towill, L. E., Drury, J. S., Whitfield, B. L., Lewis, E. B., Calyan, E., & Hammons, A. S. (1978). Reviews of the environmental effects of pollutants. V. Cyanide.
- US-EPA. (1993). IRIS - Methyl tert-butyl ether (MTBE) (CAS n° 1634-04-4).
- US-EPA. (1995). Technical Guidance Manual - Assessing dermal contact with soil / existing guidance.
- US-EPA. (1997). Drinking water advisory: consumer acceptability advice and health effects analysis on methyl tertiary-butyl ether (MTBE).
- US-EPA. (2003). Updated dermal exposure assessment guidance.
- van den Berg, R. (1994). Blootstelling van de mens aan bodemverontreiniging. Een kwalitatieve en kwantitatieve analyse, leidend tot voorstellen voor humaan toxicologische C-toetsingswaarden (beperkt herziene versie).
- Vermeire, T. G., Apeldoorn, M. E., Fouw, J. C., & Janssen, P. J. C. M. (1991). Voorstel voor de humaan toxicologische onderbouwing van C-(toetsings)waarden.
- Verschueren, K. (1983). *Handbook of environmental data on organic chemicals*. New York, VS: Van Nostrand Reinhold.
- VMM. (1992). Luchtverontreiniging in het Vlaamse Gewest - Jaarverslag immisiemetnet 1990-1991.
- Wallace, A., Cha, J. W., & Mueller, R. T. (1977). Cyanide effects on transport of trace metals in plants. *Communications in Soil Science and Plant Analysis*, 8(9), 709-712.
- WHO. (1996). Guidelines for drinking-water quality, 2nd Ed. Vol. 2, Health criteria and other supporting information.