

BTO 2014.006 | Maart 2014

BTO rapport

Prioriteren van stoffen voor de (drink)waterketen

KWR Watercycle Research Institute

BTO

Prioriteren van chemische bedreigingen voor de (drink)waterketen

BTO 2014.006 | Maart 2014

Opdrachtnummer
B222023

Projectmanager
Merijn Schriks

Opdrachtgever
BTO - Thematisch onderzoek - Nieuwe stoffen

Kwaliteitsborger(s)
Kees van Leeuwen

Auteur(s)
Rosa Sjerps, Thomas ter Laak, Annemarie van Wezel

Verzonden aan
Dit rapport is openbaar

Jaar van publicatie
2014

Meer informatie

T 030 60 69 704
E rosa.sjerps@kwrwater.nl

PO Box 1072
3430 BB Nieuwegein
The Netherlands

T +31 (0)30 60 69 511
F +31 (0)30 60 61 165
E info@kwrwater.nl
I www.kwrwater.nl

KWR Watercycle Research Institute

BTO | Januari 2014 © KWR

Alle rechten voorbehouden.
Niets uit deze uitgave mag worden verveelvoudigd, opgeslagen in een geautomatiseerd gegevensbestand, of openbaar gemaakt, in enige vorm of op enige wijze, hetzij elektronisch, mechanisch, door fotokopieën, opnamen, of enig andere manier, zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van de uitgever.

Samenvatting

Veel van de stoffen die door de mens worden geproduceerd kunnen terechtkomen in de waterketen en dus in het drinkwater. Om aandacht te schenken aan de stoffen die een relatief groot risico vormen voor de (drink)waterkwaliteit is prioritering van belang van de mogelijke chemische bedreigingen. In dit project is een prioriteringssysteem ontwikkeld met als doel een selectie te maken van de meest relevante stoffen op basis van een aantal toegankelijke gegevens over fysisch-chemische eigenschappen, toxicologische eigenschappen, verwijdering in de drinkwaterzuivering, en voorkomen in de waterketen. Het systeem maakt gebruik van toegankelijke gegevens en heeft de vorm van een vereenvoudigde risico-inschatting zonder een uitgebreide stofstudie uit te hoeven voeren. De stoffen die met deze vereenvoudigde risicobeoordeling worden geprioriteerd zijn het meest relevant voor intensievere monitoring, aanvullend onderzoek of diepgaande risicoanalyse

Het prioriteringssysteem biedt de structuur voor het selecteren van stoffen voor verder onderzoek. Zo wordt er kennis ontwikkeld die nodig is om de veiligheid van de chemische drinkwaterkwaliteit nu en in de toekomst te waarborgen. Binnen dit project zijn er geen aanvullende risicoanalyses uitgevoerd voor de geprioriteerde stoffen.

In het project signaleren (Sjerps et al., 2013) wordt periodiek een aandachtstoffenlijst gegenereerd met stoffen mogelijk relevant voor de drinkwaterketen (‘longlist’). Het ontwikkelde prioriteringssysteem heeft als doel deze aandachtstoffenlijst te reduceren tot een prioritaire stoffenlijst met de meest relevante stoffen (‘shortlist’). In een tweede fase volgt voor deze stoffen desgewenst een meer diepgaande risicoanalyse.

Het beoordelen en prioriteren van stoffen is niet nieuw. Binnen vele instanties, organisaties en ook in de wetgeving en regulering van het gebruik van stoffen zijn prioriteringssystemen ontwikkeld en toegepast om uit grote aantallen, stoffen te selecteren. Ondanks de vele prioriteringssystemen zijn er niet veel systemen specifiek voor drinkwater ontwikkeld en gepubliceerd. De grondslag van de meeste prioriteringssystemen is een grove risicobeoordeling waarmee de ratio van effect en blootstelling wordt bepaald. Het effect geeft aan wat de intrinsieke schadelijke effecten van een stof zijn, voor de mens en/of het milieu. De blootstelling bepaalt wat de kans is dat mensen en/of ecosystemen in aanraking komen met de stof, en is dus een maat voor potentiële effecten. De ratio van effect en blootstelling geeft een indicatie van het risico van een stof voor een organisme. Veelal wordt in de bestaande prioriteringssystemen een twee-staps benadering gevolgd, namelijk een voorselectie van kandidaat stoffen en vervolgens een ranking op basis van ratio’s tussen effect en voorkomen. Deze aanpak vraagt vaak om meetgegevens, waardoor juist de stoffen waarvan al redelijk veel bekend is worden geprioriteerd.

Er is gekozen voor een eenvoudigere risico-inschatting van stoffen op basis van toegankelijke gegevens. Dit biedt de mogelijkheid om stoffen te prioriteren waarover relatief weinig bekend is en waarvan (nog) niet of nauwelijks meetgegevens zijn: zowel stoffen met, als stoffen zonder meetgegevens zijn geschikt voor de gehanteerde systematiek. De ontwikkelde prioriteringssystematiek is geen vervanging voor bestaande prioriteringssystemen en risicoanalyses. De systematiek dient als selectiemodel (als grove filter) voor de grote aantallen stoffen die het meest relevant zijn voor vervolgonderzoek Het

ontwikkelde prioriteringssysteem maakt gebruik van de ratio tussen de (verwachte) concentratie in drinkwater en het (verwachte) niveau waarbij ongewenste effecten optreden gebaseerd op de zogenaamde Benchmark Quotiënt (BQ) van Schriks et al. (2010). De uitkomst van de beoordelingssystematiek is een score die wordt berekend met de volgende formule:

$$Score = \frac{(MON\ of\ GDR) * ZUI}{SMA\ of\ GEZ}$$

Waarbij MON = monitoring, GDR = gedrag in het milieu, ZUI= verwijdering in de zuivering, SMA = geur/smaakdrempel, GEZ = niveau van schadelijke gezondheidseffecten.

Deze score bepaalt of een stof prioritair (score ≥ 1), mogelijk prioritair (score ≥ 0,1) of niet prioritair (score ≤ 0,01) is voor verdiepend onderzoek. Een overzicht van de mogelijke waarden voor de parameters MON, GDR, ZUI, SMA en GEZ worden weergegeven in Tabel 1.

*Tabel 1 Scores voor het voorkomen van de stof in drinkwater [MON of GDR * ZUI] en de score voor het niveau waarop schadelijke gezondheidseffecten kunnen optreden (GEZ of SMA). De score voor GEZ wordt vervangen door SMA wanneer de geur- of smaakdrempel <TTC.*

Afkorting	Omschrijving	Klassen	Score
MON	Gemiddelde concentratie in oppervlaktewater,	>0,1 µg/L	1000
	oeverfiltraat of grondwater	0,01-0,1 µg/L	100
		0,001-0,01 µg/L	10
		<0,001 µg/L	1
GDR	V*H*P		
	Gebruiksvolume (V)	HPVC*	10
		rest	1
	Hydrofobiciteit (H)	log K_{ow} < 4	10
		log K_{ow} > 4	1
	Persistentie (P)	T1/2 >50 dagen	10
		T1/2<50 dagen	1
ZUI	Verwijdering in de zuivering (%)	Stof komt voor in drinkwater	1
	De mate van sorptie aan actief kool wordt bepaald door de waarde van log K_{ow}	log K_{ow}>4	0,1
		log K_{ow}<4	1
GEZ	Eindpunt is carcinogeniteit of hormoonverstoring	carc/horm	100
		rest	1000
SMA	Smaak of geurdrempel	<TTC	100

**HPVC = high production volume chemical*

Voor de prioritaire stoffen wordt in eerste instantie gekeken of er meer gedetailleerde informatie kan worden verkregen. Wanneer informatie ontbreekt, kan vervolgens een uitgebreide risicoanalyse worden uitgevoerd. De ontwikkelde systematiek is toegepast op

nieuwe en bekende mogelijke probleemstoffen. Van de oude stoffen 1,4-dioxaan, dimethylsulfamide, AMPA en MTBE worden beoordeeld als prioritair. Glyfosaat, benzo(a)pyreen, aniline en 2-aminoacetophenon worden beoordeeld als mogelijk prioritair. Daarnaast wordt 3,4,5-trichloorfenolbeoordeeld beoordeeld als niet prioritair. De stoffen kunnen na de veronderstelde eenvoudige zuivering voorkomen in drinkwater in ongewenste hoge concentraties. In werkelijkheid is de drinkwaterzuivering meer uitgebreid, en komen de stoffen wel voor in drinkwater, maar is er geen sprake van gerapporteerde normoverschrijdingen. Van de nieuwe stoffen worden oxazepam en PFOS als prioritair beoordeeld. Daarnaast worden benzalkonium chloride en nonaanzuur als mogelijk prioritair beoordeeld. Deze stoffen kunnen in drinkwater voorkomen in ongewenst hoge concentraties. Deze nieuwe stoffen komen in aanmerking voor een uitgebreide risicoanalyse en eventueel aanvullende meetcampagnes. De rest van de beoordeelde nieuwe stoffen, decabromodiphenyl, pentabromophenol, maleïnehydrazine en estradiol, wordt als niet prioritair beoordeeld.

De eenvoud van het model maakt het makkelijk toepasbaar, maar generiek. Het is dus wenselijk om voor stoffen met hoge prioriteit aanvullende (risico)analyses uit te voeren. Daarnaast kunnen er een aantal zaken worden verbeterd aan het model, waaronder de score voor GDR en de prioritering van zeer potente stoffen.

De vergelijking met de Benchmark Quotiënt (BQ)-waarden bepaald door Schriks *et al*., (2010) geeft aan dat deze vereenvoudigde risico-inschatting moet worden gebruikt als een voorselectie van stoffen, waarvan vervolgens aan de hand van meer informatie het werkelijke risico kan worden beoordeeld. De prioriteringssystematiek bepaalt in grove mate de prioriteit van chemische stoffen en geeft een score van het risico op basis van een conservatieve toxicologische grenswaarde (de TTC). Het werkelijke risico op basis van stofspecifieke toxicologische gegevens kan aanzienlijk lager worden beoordeeld. De vergelijking met een andere uitgebreide risico evaluatie laat zien dat de gekozen methode van prioriteren op basis van 'afhankelijke parameters' (voorkomen, zuiveringsefficiëntie en effect) het werkelijke risico goed kan benaderen. Echter, door de eenvoud van de beoordelingssystematiek kunnen meer gedetailleerde gegevens, zoals voor trendanalyse, de prioriteit anders beoordelen.

De prioritering inclusief een inschatting van het zuiveringsrendement van drinkwaterzuivering is met name wat de hier ontwikkelde systematiek onderscheidt van bestaande prioriteringssystemen. Stoffen die in alle verschillende toegepaste zuiveringsmethoden niet goed verwijderd worden, zijn relevanter voor prioritering. Zuiveringsmethoden verschillen aanzienlijk tussen de waterbedrijven vanwege de verschillende kwaliteit van de bronnen maar ook afhankelijk van de visie van het betreffende waterbedrijf. Een verdere verfijning van de hier ontwikkelde prioriteringsmethode is mogelijk door in de toekomst specifiek voor drinkwaterzuivering ontwikkelde QSARs te incorporeren in de prioriteringssystematiek.

De huidige prioriteringssystematiek is nog niet toepasbaar op grote aantallen stoffen. Om te vermijden dat steeds dezelfde stoffen in de aandacht komen (het Matthew effect, Daughton, 2014) is het van belang een zeer grote selectie van stoffen te gebruiken voor het prioriteringsmodel. Het meest ideale prioriteringssysteem maakt gebruik van modelgegevens van een zeer grote selectie van stoffen, met als resultaat een optimale inschatting van stoffen die tot relevante blootstelling kunnen leiden. Dergelijke modelleringen van waterconcentraties hebben in de Verenigde Staten grootschalig plaatsgevonden, en worden ook in Europese stroomgebieden uitgevoerd op basis van REACH en CTGB gegevens. Om zulke modelgegevens toepasbaar te maken voor de drinkwatersector kan een combinatie

gemaakt worden de gemodelleerde waterconcentraties op basis van emissies en fysisch-chemische eigenschappen én van brede screening meetgegevens. In vervolgonderzoek kunnen uit deze grote selectie van stoffen mogelijk relevante chemicaliën met betrekking tot blootstelling via drinkwater worden gekozen.

Inhoud

Samenvatting 3

Inhoud 7

1 Inleiding 9
1.1 Achtergrond 9
1.2 Doel en aanpak 9
1.3 Leeswijzer 11

2 Het kader 13
2.1 Introductie 13
2.2 Prioriteren in de literatuur 13
2.3 Prioriteren binnen wettelijke kaders 15
2.4 Buiten de wettelijke kaders 16
2.5 Evaluatie 17

3 Prioriteringssystematiek 19
3.1 Inleiding 19
3.2 Beschrijving van de prioriteringssystematiek 20
3.3 Het scoresysteem 22

4 Toetsen van de prioriteringssystematiek 27
4.1 Beoordelen van oude en nieuwe stoffen 27
4.2 Evaluatie van het prioriteringssysteem 28
4.3 Vergelijking van de resultaten met uitgebreidere risicobeoordeling 29

5 Discussie en conclusie 33
5.1 Toegevoegde waarde van drinkwater-specifiek prioriteringssyteem 33
5.2 Tekortkomingen huidige systematiek en suggestie voor verdere ontwikkeling 33

6 Dankwoord 35

7 Referenties 37

Bijlage I 42
- Oude prioriteringssystematiek: schema en scoreberekening 42

Bijlage II 46
- Opzoekmogelijkheden gegevens 46

Bijlage III 47
- Scores voor de toetsstoffen 47

Bijlage IV 50
- Factsheets van de toetsstoffen 50

1 Inleiding

1.1 Achtergrond

Chemicaliën worden zeer intensief gebruikt in onze technologische maatschappij. In de mondiale economie zijn meer dan 100.000 stoffen op de markt, en worden honderden nieuwe stoffen jaarlijks geïntroduceerd (UNEP 2012, McKinney *et al.*, 2007). Nieuwe toepassingen en ontwikkelingen in de chemische industrie leiden tot een steeds veranderend palet van stoffen. Deze stoffen komen via effluenten, landbouw, atmosferische depositie, lozingen, en door af- of uitspoeling in het milieu terecht en in de bronnen voor drinkwater. Daarnaast kunnen nieuwe stoffen ontstaan tijdens het doorlopen van de watercyclus, bijvoorbeeld tijdens zuiveringsprocessen of door afbraak in het milieu.

'Emerging substances', oftewel 'nieuwe stoffen' hebben binnen de wetenschappelijke wereld geen vast omlijnde definitie. Volgens het NORMAN-netwerk zijn het stoffen die niet zijn opgenomen in routinematige monitoringsprogramma's en wel mogelijk kandidaten zijn voor wetgeving. Volgens de US Geological Survey zijn het synthetische of natuurlijke stoffen die niet zijn opgenomen in monitoringsprogramma's in het milieu, maar die wel de potentie hebben in het milieu terecht te komen en schadelijke gezondheidseffecten kunnen veroorzaken. Volgens de Tweede Kamer zijn het stoffen waarvoor geen normen zijn opgenomen in de wetgeving en die een impact kunnen hebben op de ecologische of chemische status van de waterketen. Het zijn stoffen die onder de aandacht komen doordat analytische technieken het mogelijk maken ze in het milieu te meten. Onder deze stoffen vallen zowel organische als anorganische stoffen, en het kan gaan om relatief nieuwe maar ook reeds lang in het milieu voorkomende stoffen. Kenmerk is verder dat er doorgaans geen regelgeving is voor bijvoorbeeld toelaatbare niveaus in het milieu of in drinkwater. Consumentenproducten, zoals geneesmiddelen, insecticiden, biociden, cosmetica, brandvertragers, microplastics en nanodeeltjes, zijn nieuwe relevante stoffen (Wuijts, 2013). Met name de meer polaire stoffen kunnen niet goed worden verwijderd in rioolwaterzuiveringsinstallaties (RWZI's).

De Europese Kaderrichtlijn Water (KRW) verplicht de Europese lidstaten drinkwaterbronnen te beschermen en achteruitgang te voorkomen. Hoewel de concentraties van de stoffen individueel (nog) geen risico vormen voor de volksgezondheid, is uit voorzorgsprincipe de aanwezigheid ervan ongewenst (Smit, 2012). Ook maken burgers zich zorgen over de chemische risico's voor drinkwaterkwaliteit (Kher *et al.*, 2013). Het is onmogelijk om voor álle stoffen het gedrag en de risico's te kennen en meetmethoden te ontwikkelen. Groepsgewijze aanpak via bijvoorbeeld QSAR (Eriksson *et al.*, 2003) of read-across benaderingen (Van Leeuwen *et al.*, 2007, Schaafsma *et al.*, 2009), en het combineren van effectgerichte en analytisch-chemische tools helpen om inzichten te veralgemeniseren en de meest relevante stoffen voor bepaalde effecten te ontrafelen. Prioritering is van belang voor het efficiënt omgaan met mogelijke bedreigingen en het selecteren van stoffen die een relatief groot risico vormen voor de (drink)waterkwaliteit. In een tweede fase volgt voor deze stoffen desgewenst een meer diepgaande risicoanalyse.

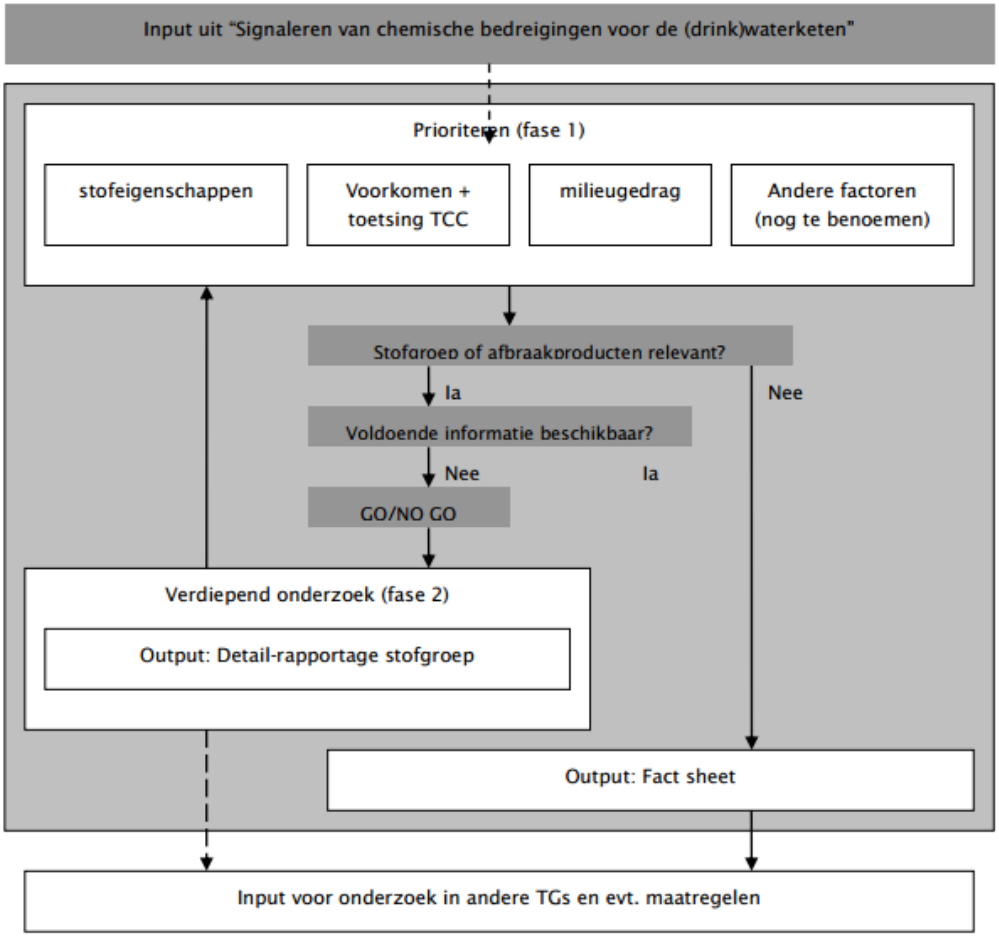
1.2 Doel en aanpak

Het doel van dit onderzoek is het ontwikkelen van een prioriteringssystematiek voor chemische stoffen die mogelijk een risico vormen voor de (drink)waterkwaliteit. Deze

systematiek wordt toegepast op nieuwe en bekende mogelijke probleemstoffen. De systematiek biedt handvatten om de stoffen gestructureerd te prioriteren op basis van de fysisch-chemische eigenschappen, de toxicologische eigenschappen, de verwijdering in de drinkwaterzuivering, en het voorkomen in de waterketen. Juist voor stoffen zonder meetgegevens, zal de beoogde systematiek gebruik maken van productiegegevens, gegevens over de toepassing van stoffen en daarmee hun geschatte emissie, en intrinsieke stofeigenschappen.

Het doel van prioriteren is het selecteren van de meest relevante stoffen voor de waterketen waarvoor meer aandacht is gewenst. In het BTO project signaleren (BTO 2013.052) is een overzicht gegenereerd welke stoffen mogelijk in de drinkwaterketen terecht kunnen komen (de aandachtstoffen). Deze lijst biedt structuur voor de input van stoffen voor het prioriteringssysteem. Een schematische weergave van het project wordt gegeven in Figuur 1-1. Het prioriteringssysteem functioneert als een selectiemodel, waar met een beperkte hoeveelheid informatie de stof wordt beoordeeld. De uitkomst van de beoordeling bepaalt welke stoffen de meeste aandacht verdienen: de prioritaire stoffen. Wanneer nog veel informatie ontbreekt van een stof, bepaalt het prioriteringssysteem hoe relevant de stof is voor verdiepend onderzoek.

Voor de beoordeelde stoffen wordt de vergaarde informatie vastgelegd in een factsheet van een stof(groep). In deze factsheet worden de belangrijkste eigenschappen en eventuele risico's van een stof(groep) vastgelegd en in een context geplaatst.



Schematische weergave van het project "Prioriteren van chemische bedreigingen voor de (drink)waterketen"

1.3 Leeswijzer

Dit rapport is naast een inleiding en een conclusie opgebouwd uit vier hoofdstukken. In hoofdstuk 2 wordt een literatuuroverzicht gemaakt van bestaande prioriteringsmodellen. In hoofdstuk 3 wordt de ontwikkelde beoordelingssystematiek beschreven om deze vervolgens in hoofdstuk 4 te toetsen met een selectie van oude en nieuwe stoffen. In de discussie in hoofdstuk 5 wordt uiteengezet wat de toegevoegde waarde is van het prioriteringssysteem, of de uitkomsten van het prioriteringssysteem zijn te vergelijken met resultaten van een uitgebreidere risico-evaluatie, en wat de tekortkomingen zijn van de systematiek, tevens worden er suggesties gedaan voor verdere ontwikkeling van de prioriteringssystematiek.

2 Het kader

2.1 Introductie

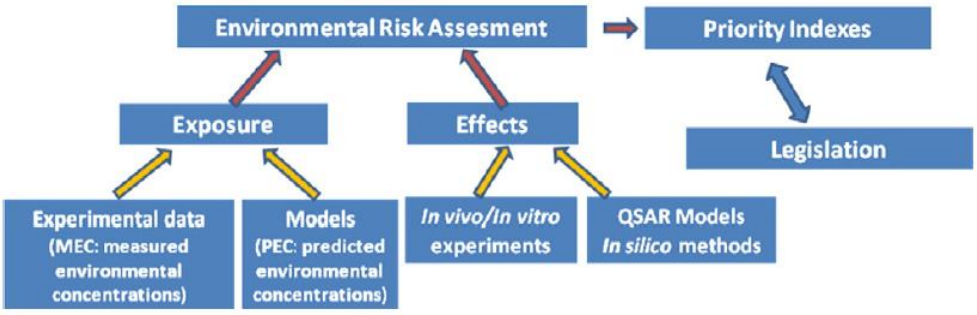
Prioriteren is een methode om tot een selectie te komen van de 'meest relevante' stoffen. In het kader van dit project is de prioritering gericht op selectie van de meest relevante stoffen voor de drinkwaterproductie. De meest relevante stoffen zijn de stoffen die zeer ongewenst zijn in het drinkwater, omdat ze in concentraties (kunnen) voorkomen waarin gezondheidseffecten niet zijn uit te sluiten of een vieze geur of smaak ten uiting komt. Prioriteren is van belang omdat er vele duizenden stoffen worden geproduceerd en toegepast.

De toelating op de markt is gereguleerd, bijvoorbeeld voor industriële chemicaliën via REACH (Registration, Evaluation and Authorisation of CHemicals, EU-Verordening nr. 1907/2006), via de pesticiden- en biociden- richtlijn (2009/128/EG en 98/8/EG), via de wetgeving over (dier)geneesmiddelen (2001/83/EG en 2003/53/EEG), en via de cosmetica richtlijn 76/768/EG en de voedingsadditieven richtlijn (95/2/EG). Deze toelating op de markt geeft echter geen garantie dat er geen problematische concentraties in bronnen van drinkwater kunnen ontstaan, omdat de handhaving, het gebruik en de emissie van de stoffen regionaal sterk kan verschillen en stoffen in meerdere toepassingen kunnen voorkomen. Bovendien worden niet in alle genoemde richtlijnen de milieurisico's expliciet beoordeeld. Daarom worden complexe mengsels van stoffen frequent aangetroffen in RWZI effluenten, oppervlakte- en grondwateren in Europa (Loos *et al.*, 2009; Loos *et al.*, 2010; Loos *et al.*, 2013).

Het beoordelen en prioriteren van stoffen is niet nieuw. Binnen vele instanties, organisaties en ook in de wetgeving en regulering van het gebruik van stoffen zijn prioriteringssystemen ontwikkeld en toegepast om grote aantallen stoffen te selecteren. Dit hoofdstuk geeft achtergrond informatie over het prioriteren van chemische stoffen. Ten eerste wordt met behulp van de literatuur de basisprincipes van prioriteren beschreven, vervolgens worden bestaande prioriteringssystemen in wettelijke kaders en binnen de drinkwatersector uiteengezet.

2.2 Prioriteren in de literatuur

De grondslag van de meeste prioriteringssystemen is de risicobeoordeling (Guillén *et al.*, 2012). Deze beoordeling wordt gevormd door de combinatie van blootstelling en effect (Figuur 2-1). Het effect geeft aan wat de intrinsieke schadelijke effecten van een stof zijn, voor de mens en/of het milieu. De blootstelling bepaalt wat de kans is dat mensen en/of ecosystemen in aanraking komen met de stof, en dus met de effecten. De ratio van effect en blootstelling geeft een indicatie van het risico van een stof voor een organisme.



Figuur 2-1 Het proces van 'environmental risk assessment' dat leidt tot het prioriteren van stoffen (Guillén et al., 2012).

2.2.1 Blootstelling

Blootstelling wordt vaak uitgedrukt als concentraties in het milieu. Meetgegevens van stof concentraties in milieu zijn een weergave van de werkelijkheid, maar de resultaten zijn bijvoorbeeld op Europese schaal afhankelijk van de bemonsterings, voorbewerking en chemisch analytische methodologie en zijn tijd- en plaats bepaald. Vaak zijn er slechts gegevens beschikbaar voor een beperkt aantal doelstoffen. Niet voor alle stoffen zijn meetmethoden beschikbaar, vooral moeilijk ioniseerbare en zeer polaire organische stoffen zijn lastig te meten. Tegelijk worden brede screeningsmethoden steeds meer gebruikt die een groot aantal, niet tevoren gedefinieerde, stoffen tegelijk meten (Hogenboom et al., 2009; Krauss et al., 2010; ter Laak et al., 2012).

Wanneer geen meetgegevens aanwezig zijn, kunnen concentraties in het milieu worden voorspeld op basis van gebruik en emissie van de stof. De modellen waarmee deze voorspellingen worden gedaan leiden tot een inschatting van de verdeling en verspreiding van stoffen in verschillende milieucompartimenten (water, sediment, bodem, lucht, organismen). Deze modellen maken het mogelijk om stoffen te beoordelen waarvoor niet of nauwelijks meetgegevens beschikbaar zijn. Vaak wordt gebruik gemaakt van zogenaamde multimedia lotgeval modellen, waarmee concentraties in verschillende milieucompartimenten (water, sediment, lucht, bodem, biota) worden gemodelleerd (Mackay and Paterson, 1991). Vereisten voor de inschatting van het voorkomen en het lot van stoffen in het milieu zijn eigenschappen van de stof (fysisch-chemische eigenschappen, persistentie, bioaccumulatie) en gegevens over productie, gebruik en emissie van de stof (Mitchell *et al.*, 2013; Wambaugh *et al.*, 2013). Onzekerheden bij het inschatten van deze parameters werken door in het uiteindelijke resultaat, waarbij vooral emissiegegevens grote onzekerheid in de geschatte blootstelling veroorzaken (Arnot *et al.*, 2012).

2.2.2 Effect

Het gevaar van een stof wordt bepaald door de schadelijke effecten op organismen. Het risico wordt bepaald door het gevaar in combinatie met de blootstelling. Het effect van een stof hangt af van het toxicologisch werkingsmechanisme en wordt bepaald door chemische structuur van een stof (Munro *et al.*, 1996; Kroes *et al.*, 2004). Binnen de toxicologie worden de volgende werkingsmechanismen onderscheiden: niet-specifieke, reactieve en specifieke toxiciteit. De toxiciteit wordt vaak bepaald op basis van proefdierstudies, of meer recent via 'intelligente test strategieën' waarbij gebruik wordt gemaakt van de effecten op celniveau, getest in zogenoemde *in vitro* studies (Van Leeuwen *et al*, 2007). Met behulp van veiligheidsfactoren wordt op basis van deze gegevens een toelaatbaar niveau van blootstelling afgeleid waarbij geen nadelige effecten te verwachten zijn (Van Leeuwen en Vermeire, 2010). Als er geen of beperkte toxiciteitsdata beschikbaar zijn, wat zeker voor 'emerging chemicals' vaak het geval is, kan een aanpak via de zogenaamde 'threshold of

toxicological concern' (TTC) een eerste conservatieve inschatting geven van een veilig effect niveau (Kroes *et al.*, 2004). Voor drinkwater is dit inmiddels ook uitgewerkt (Mons *et al.*, 2013). Vergeleken met stoffen waarvoor toxiciteitsdata zijn, is de TTC een zeer conservatieve risicoschatting (Schriks *et al.*, 2010). De TTC is een drempelwaarde, waaronder geen schadelijke effecten zijn te verwachten. Er zijn verschillende TTC waarden afgeleid: 0,01 µg/L voor genotoxische en hormoonverstorende stoffen en 0,1 µg/L voor alle andere stoffen.

2.3 Prioriteren binnen wettelijke kaders

Binnen de Europese wet- en regelgeving zijn er diverse risicobeoordelingen uitgevoerd voor chemicaliën. Voorbeelden hiervan zijn:

- REACH Verordening (EC 1907/2006)
- Kaderrichtlijn water (KRW)
- EPA Environmental Protection Agency
- EFSA European food safety authority
- EU regulation 793/93
- European commission 98/8/EC

2.3.1 REACH

De REACH verordening (EC 1907/2006), omtrent Registratie, Evaluatie, Autorisatie en beperking van Chemische stoffen is sinds 1 juni 2007 van kracht. Deze regelgeving stelt kaders voor de veiligheid- en gezondheidsaspecten van chemische stoffen in consumentenproducten, op de werkvloer of in het milieu. Met de komst van REACH is de industrie in grote mate zelf verantwoordelijk voor het beoordelen van de risico's van geproduceerde stoffen, het nemen van risico-beperkende maatregelen en het classificeren en labelen van stoffen. Zij levert gegevens aan en overheden hebben een controlerende taak in samenwerking met het ECHA (European Chemical Agency) in Helsinki. ECHA heeft een coördinerende en uitvoerende taak binnen de REACH-regelgeving.

Binnen REACH zijn momenteel 10.000 stoffen geregistreerd. In Nederland is een prioriterings-methode opgezet door RIVM en TNO om de stoffen te selecteren die voorrang krijgen bij de evaluatie of voor beleidsmaatregelen (Schuur, 2010). De systematiek rangschikt een groep stoffen op basis van het risico, gedefinieerd als een combinatie van het gevaar van de stof en de blootstelling eraan. Het gevaar (hazard) wordt bepaald door PBT-eigenschappen (persistentie, bioaccumulatie en toxiciteit), waaronder CMR (carcinogene, mutagene, reproductie-toxische) effecten. Blootstelling (exposure) wordt vooral bepaald door het gebruik en de emissie naar het milieu (uitgedrukt in environmental release categories). De prioritering wordt vervolgens voor o.a. het risico door indirecte blootstelling aan de mens in punten uitgedrukt. Hierbij is gebruik gemaakt van bestaande prioriteringsinstrumenten en ondersteunende modellen.

Tabel 2-1 Prioritering onder REACH op basis van gevaarseigenschappen en blootstelling voor mens indirect.

	Prioriteitsklasse op basis van blootstelling							
Prioriteitsklasse op basis van gevaars-eigenschappen	1	2	3	4	5	6	7	8
1	2	3	4	5	6	7	8	9
2	3	4	5	6	7	8	9	10
3	4	5	6	7	8	9	10	11
4	5	6	7	8	9	10	11	12
5	6	7	8	9	10	11	12	13
6	geen	geen	geen	geen	geen	geen	Geen	geen

2.3.2 Kaderrichtlijn Water (KRW)

De Kaderrichtlijn Water is in 2000 van kracht gegaan en heeft als doel de kwaliteit van oppervlakte- en grondwater te waarborgen. Onder de KRW worden prioritaire stoffenlijsten opgesteld (European Commision, 2000). Voor deze prioritaire stoffen worden kwaliteitsnomen geformuleerd om te zorgen voor controle en vermindering van deze stoffen in de waterketen. (http://www.rivm.nl/rvs/Stoffenlijsten/KRW/KRW_Stoffenlijst).

Het prioriteringsproces bestaat uit twee aspecten: gevaar en blootstelling (Smit, 2012). Het risico wordt bepaald door de PEC/PNEC ratio (predicted environmental concentration/ predicted no effect concentration). PNEC (oftewel gevaar) is gebaseerd op de PBT-aanpak volgens REACH. Blootstelling is gebaseerd op productie, gebruik en monitoringsgegevens of modelleringsgegevens.

2.4 Buiten de wettelijke kaders

Naast prioriteringsschema's onder REACH en de KRW zijn er diverse prioriteringsschema's voor een risicobeoordeling van stoffen in de literatuur beschikbaar (zie voor een recent overzicht bijvoorbeeld Guillén *et al* 2012).

2.4.1 Het NORMAN-netwerk

Binnen het Europese NORMAN netwerk -een zelfstandig netwerk van laboratoria, onderzoekcentra en andere organisaties op het gebied van chemische en biologische monitoring van 'emerging substances' in het milieu- is ook een prioriteringssystematiek ontwikkeld (Dulio, 2013). Deze prioriteringssystematiek richt zich op de schadelijkheid van stoffen voor het ecosysteem en houdt expliciet rekening met het feit dat voor veel nieuwe stoffen gegevens voor een volledige risico-inschatting ontbreken. De prioritering kent echter twee beperkingen. Ten eerste zijn de effectgegevens voor de meeste stoffen gebaseerd op acute toxiciteitsgegevens uit standaardtesten (bacterie, alg, watervlo, vis) of op QSARS (Quantitative Structure Activity Relationships). Echter, voor een goede risico-inschatting met relevantie voor de humane gezondheid zouden ook specifieke eindpunten, zoals hormoonverstoring, groei of gedragsverandering moeten worden meegenomen (Smit, 2012). Daarnaast kent de stoffendatabase van NORMAN een gevarieerde samenstelling (EMPODAT); monitoringsgegevens verschillen sterk in het aantal metingen en in ruimtelijke variatie, en hebben vooral betrekking op oppervlaktewater terwijl gegevens van grondwater en andere milieucompartimenten grotendeels ontbreken. In de toekomst zal deze database worden aangevuld en geoptimaliseerd.

2.4.2 Waterbedrijven

Ondanks de vele prioriteringssystemen zijn er niet veel systemen specifiek voor drinkwater ontwikkeld en gepubliceerd. Een uitzondering hierop is de ontwikkelde beoordelingssystematiek van de Global Water Research Coalition (GWRC) om

geneesmiddelen in de waterketen te beoordelen (de Voogt *et al.*, 2009). Deze studie heeft met behulp van bestaande prioriteringsmodellen, criteria opgesteld voor het prioriteren van geneesmiddelen in de watercyclus. Van de 17 gebruikte criteria in de literatuur (25 studies met 153 stoffen), zijn 7 criteria geselecteerd die het meest relevant werden geacht: regelgeving, consumptie/verkoop, fysisch-chemische eigenschappen, afbreekbaarheid en persistentie, verwijdering in de zuivering, (eco)toxiciteit, en voorkomen in oppervlakte/grond/drinkwater en afvalwater.

Naast de literatuur, is er binnen drinkwaterbedrijven aandacht voor het selecteren van relevante stoffen om meet- en onderzoeksplannen op te stellen. Zo is door HWL (Houtman, 2010) een overzicht gemaakt van relevante nieuwe stoffen voor drinkwater geproduceerd uit oppervlaktewater. Op basis van meetgegevens van RIWA zijn eerder stoffen geprioriteerd voor drinkwater uit oppervlaktewater. Het beslisschema van RIWA (Smeenk, 2000, Van Genderen, 2000) hanteert de volgende criteria: het meerdere malen aantreffen in hetzelfde stroomgebied, het voorkomen in drinkwater of, indien dit niet is gemeten, de K_{OW}-waarde om een indicatie te krijgen van het gedrag in het milieu en in de drinkwaterzuivering. De log K_{ow} is de verdelingscoëfficiënt tussen n-octanol en water en correleert sterk met o.a. (1) de oplosbaarheid van een stof in water (stoffen met hoge K_{OW}-waarde lossen meestal slechter op in water), (2) met de bioaccumulatie in vissen en visetende vogels en zoogdieren, en (3) met de adsorptie van stoffen aan organisch materiaal, bijvoorbeeld slib. Voor het effect wordt de concentratie getoetst aan een aanwezige norm, drempelwaarde van carcinogene/mutagene effecten, of de TTC. Tevens is in opdracht van RIWA-Maas een selectie van relevante stoffen voor de Maas gemaakt (Fischer *et al.*, 2011). Dit is gedaan met een scorepuntensysteem aan de hand van monitoringsdata. Ook Waternet heeft stoffen geprioriteerd voor de Bethunepolder (Scholte-Veenendaal *et al.*, 2010; Schriks *et al.*, 2012). Met behulp van een classificatiesysteem naar het voorkomen in drinkwater en in het watersysteem rond de winning, zijn stoffen in drie groepen ingedeeld: probleemstoffen, potentiële probleemstoffen en aandachtstoffen. Om de risico's voor humane gezondheid in beeld te brengen is verder onderzoek uitgevoerd door Schriks *et al.* (2012), door de potentiële aandachtstoffen te beoordelen op (I) mogelijkheid om door te dringen in de drinkwaterwinning (mobiliteit in de bodem) en (II) humaan toxicologische eigenschappen.

Het nadeel van de bovengenoemde systemen is echter dat stoffen worden beoordeeld waarvoor meetgegevens beschikbaar zijn. Stoffen waarvoor (nog) geen meetgegevens zijn worden niet beoordeeld.

2.5 Evaluatie

Veelal wordt in de bestaande prioriteringssystemen een twee-staps benadering gevolgd, namelijk een voorselectie van kandidaat stoffen en vervolgens een ranking op basis van ratio's tussen effect en voorkomen.

Deze aanpak vraagt vrij veel gegevens. Ook worden vooral de stoffen geprioriteerd waarvan al redelijk veel bekend is. Dit terwijl de bekende, goed bestudeerde en veel gemeten stoffen maar een zeer kleine fractie vormen van het totale aantal stoffen dat in het milieu aanwezig is (ter Laak et al., 2012). Dit fenomeen is ook beschreven voor farmaceutica door Daughton (2014). Hierin noemt hij het 'Matthew Effect', een psychologisch fenomeen, dat beschrijft hoe uitkomsten uit voorgaande studies nieuwe studies beïnvloeden (bias), terwijl de mogelijke andere oorzaken ongezien blijven door een gebrek aan data. Dit fenomeen wordt ook wel het 'ijsberg effect' genoemd, omdat de aandacht steeds uitgaat naar het topje van de ijsberg. Omdat er juist behoefte is om stoffen waarover relatief weinig bekend is en waarvan (nog) niet of nauwelijks meetgegevens zijn te beoordelen in de prioritering, maken we gebruik van zowel meetgegevens als gegevens over productie en stofeigenschappen. Op

deze wijze wordt een optimale inschatting van de blootstelling van alle stoffen in de waterketen verkregen en besteden we ook aandacht “aan de ijsberg onder water”, aan talloze stoffen die door de bias meestal buiten beeld bleven.

Daarnaast is een beperking van de meeste prioriteringssystemen dat zij geen rekening houden met mengseltoxiciteit.

Tenslotte houden de bestaande prioriteringssystemen doorgaans geen rekening met de technologische mogelijkheden om stoffen te verwijderen.

3 Prioriteringssystematiek

3.1 Inleiding

In deze paragraaf wordt de opzet van de in dit project ontwikkelde prioriteringssystematiek beschreven. Deze systematiek gaat uit van een voorselectie van mogelijk relevante stoffen op basis van verschillende bronnen (media, literatuur, monitoring etc.). De systematiek biedt handvatten om de gesignaleerde nieuwe stoffen (de aandachtstoffen), die veelal op deze 'longlist' zijn gekomen op basis van meetgegevens of literatuur, te reduceren naar een prioritaire stoffenlijst (de 'shortlist') van stoffen die extra aandacht verdienen in monitoringsinspanning of voorrang krijgen bij uitgebreide risicobeoordeling.

De mogelijkheden om een prioriteringssysteem vorm te geven zijn talrijk. Verschillende opties voor het vormgeven van een prioriteringssysteem zijn: een beslisboom, een scoresysteem met ranking, waaronder het Norman prioriteringssysteem (Dulio, 2013) of een risicobeoordeling. Daarbij kunnen zowel meetgegevens of modelgegevens in het model worden beoordeeld.

In dit rapport zijn twee systemen ontwikkeld en getoetst: 1) de beslisboom en 2) de vereenvoudigde risico-evaluatie. De beslisboom biedt een overzichtelijke structuur waarin stoffen via het te doorlopen schema afvallen of als prioritair worden beoordeeld (zie Bijlage I). Als uitgangspunt werd het schema van RIWA (Smeenk, 2000, Van Genderen, 2000) gekozen. Naast alleen gebruik te maken van meetgegevens werd het schema aangevuld met de beoordeling van stofeigenschappen die het voorkomen in het milieu bepalen. Om de stoffen te rangschikken naar de mate van prioriteit zijn de meetgegevens, stofeigenschappen, en toxicologische eigenschappen beoordeeld met scores, waarvan de som de totale score en de prioriteit bepaalt.

Uiteindelijk is er niet voor gekozen de beslisboom (Bijlage I) als prioriteringssysteem te gebruiken. Ten eerste werd het moeilijk om weging van bepaalde onderdelen af te stemmen. Bovendien was voor de beoordeling van de schadelijke gezondheidseffecten er veel informatie nodig om de score te bepalen, zodat het systeem meer op een werkelijke risico-evaluatie ging lijken.

Er is gekozen voor een nieuwe invulling van het prioriteringssysteem in de vorm van een vereenvoudigd, parameter-schaars systeem. Dit systeem heeft een duidelijke functie: een voorselectie maken op basis van een aantal toegankelijke gegevens. Na de voorselectie kan voor deze stoffen gedetailleerde informatie worden verkregen. De aanpak biedt mogelijkheden om een groot aantal stofgroepen te beoordelen waarover relatief weinig bekend is, zoals stoffen zonder meetgegevens of stoffen zonder toxiciteitsgegevens. Het is daardoor echter ook minder specifiek, waardoor er geen rangschikking plaatsvindt. De geprioriteerde stoffen moeten daarom in een tweede fase aan verdiepend onderzoek worden onderworpen.

Het prioriteringssysteem maakt gebruik van toegankelijke gegevens en is een vereenvoudigde risico-inschatting zonder een uitgebreide stofstudie uit te hoeven voeren. De systematiek is niet geschikt voor stofgroepen, omdat de prioritering mede wordt bepaald door stof-specifieke eigenschappen zoals carcinogeniteit, persistentie en hydrofobiciteit.

De beoordeling van een stof wordt bepaald door de ratio tussen blootstelling en effect, de twee basisprincipes van een risicobeoordeling. De prioriteringssystematiek is gebaseerd op de zogenaamde Benchmark Quotiënt (BQ) Schriks et al. (2010). De BQ wordt berekend door de maximum concentratie in oppervlaktewater te delen door de berekende concentratie waaronder geen chronische risico's zijn te verwachten op basis van toxicologische data.

De beoordeling van stoffen met behulp van de ontwikkelde prioriteringssystematiek gebeurt aan de hand van de ratio tussen de (verwachte) concentratie in drinkwater en het (verwachte) niveau waarbij ongewenste effecten optreden. Deze systematiek onderscheidt zich van veel andere systemen, door het meenemen van het effect van de zuivering in de beoordeling van het risico van stoffen in drinkwater. Het scoresysteem bepaalt de mate van prioriteit van een stof. Zowel stoffen met, als stoffen zonder meetgegevens zijn geschikt voor de gehanteerde systematiek. Wanneer meetgegevens (concentraties in bronnen van drinkwater) ontbreken zijn stofeigenschappen nodig. Er is gekozen voor het gebruik van gegevens die op een toegankelijke manier beschikbaar zijn. Een belangrijke bron van deze informatie is de Estimation Program Interface (EPI) Suite, waarin de parameters met behulp van verschillende modellen worden berekend (US EPA, 2013). Wanneer informatie ontbreekt of inconsistent is, geldt bij deze stoffen een 'worst case scenario' voor persistentie, oplosbaarheid of het niveau waarop ongewenste effecten te verwachten zijn. De stoffen kunnen desgewenst opnieuw worden geëvalueerd nadat meer informatie beschikbaar is.

3.2 Beschrijving van de prioriteringssystematiek

Een schematische weergave van de prioriteringssystematiek is weergegeven in Figuur 3-1. De schematische weergave laat zien welke onderwerpen aan bod komen bij de prioritering van stoffen met de ontwikkelde systematiek. Het scoresysteem is nader toegelicht in paragraaf 3.3.

Er zijn verschillende wegen hoe stoffen in het vizier kunnen komen voor de aandachtstoffenlijst als mogelijk relevant voor de drinkwaterketen. Deze lijst van stoffen is samengesteld in het project 'Signaleren van nieuwe stoffen' (BTO2013.052). Deze lijst wordt regelmatig herzien en aangevuld.

- Gemeten in het milieu (oppervlaktewater, grondwater, drinkwater of afvalwater)
- Modelgegevens, de stof wordt geproduceerd en gebruikt, op basis van deze gegevens wordt de verwachte concentratie in het milieu gemodelleerd
- Imago, zoals belangstelling in de media
- Literatuur, de stof wordt in de literatuur beschreven als relevant.
- Productie, de stof wordt geproduceerd en toegepast in bijvoorbeeld de industrie

Deze stoffen zijn mogelijk relevante stoffen die dienen als input voor de prioriteringssystematiek. Stoffen die niet verdacht zijn of waar al voldoende onderzoek naar uitgevoerd is en waar een drinkwaternorm voor bestaat, zijn niet relevant voor dit project. Voorbeelden van onverdachte stoffen zijn beton, NaCl of humuszuren.

De volgende stap bestaat uit het scoren van het voorkomen van de stof in het milieu (blootstelling). Dit kan door middel van werkelijke meetgegevens van de gemiddelde concentratie in (bronnen voor) drinkwater, of wanneer deze gegevens ontbreken eigenschappen die het voorkomen in het milieu bepalen: het gebruiksvolume, de hydrofobiciteit en de persistentie.

Daarnaast wordt gekeken naar het gedrag in de zuivering. Zuiveringsmethoden verschillen tussen de waterbedrijven. In de prioriteringssystematiek wordt daarom beoordeeld wat de verwijdering is met een klassieke zuivering, beluchting en filtratie, en actieve kool filtratie. Stoffen die moeizaam verwijderd worden, hebben een grotere kans in het drinkwater terecht te komen.

Het vóórkomen in het milieu (ingeschat of gemeten) en de verwijdering in de klassieke zuivering bepalen samen de score voor het (mogelijk) vóórkomen in drinkwater.

De volgende stap in de systematiek betreft de ongewenste eigenschappen van een stof; de geur- of smaakdrempel en de humane gezondheidseffecten. Ongewenste effecten in het milieu zijn zeer relevant, maar niet met betrekking tot het drinkwater waar deze prioriteringssystematiek zich op richt. De humane gezondheidseffecten worden op een vereenvoudigde wijze gescoord in deze systematiek, gebaseerd op de conservatieve TTC-grenswaarde voor drinkwater (Mons *et al.*, 2013). Stoffen die carcinogene of hormoonverstorende eigenschappen hebben scoren hierbij hoger voor de gezondheidskundige beoordeling.

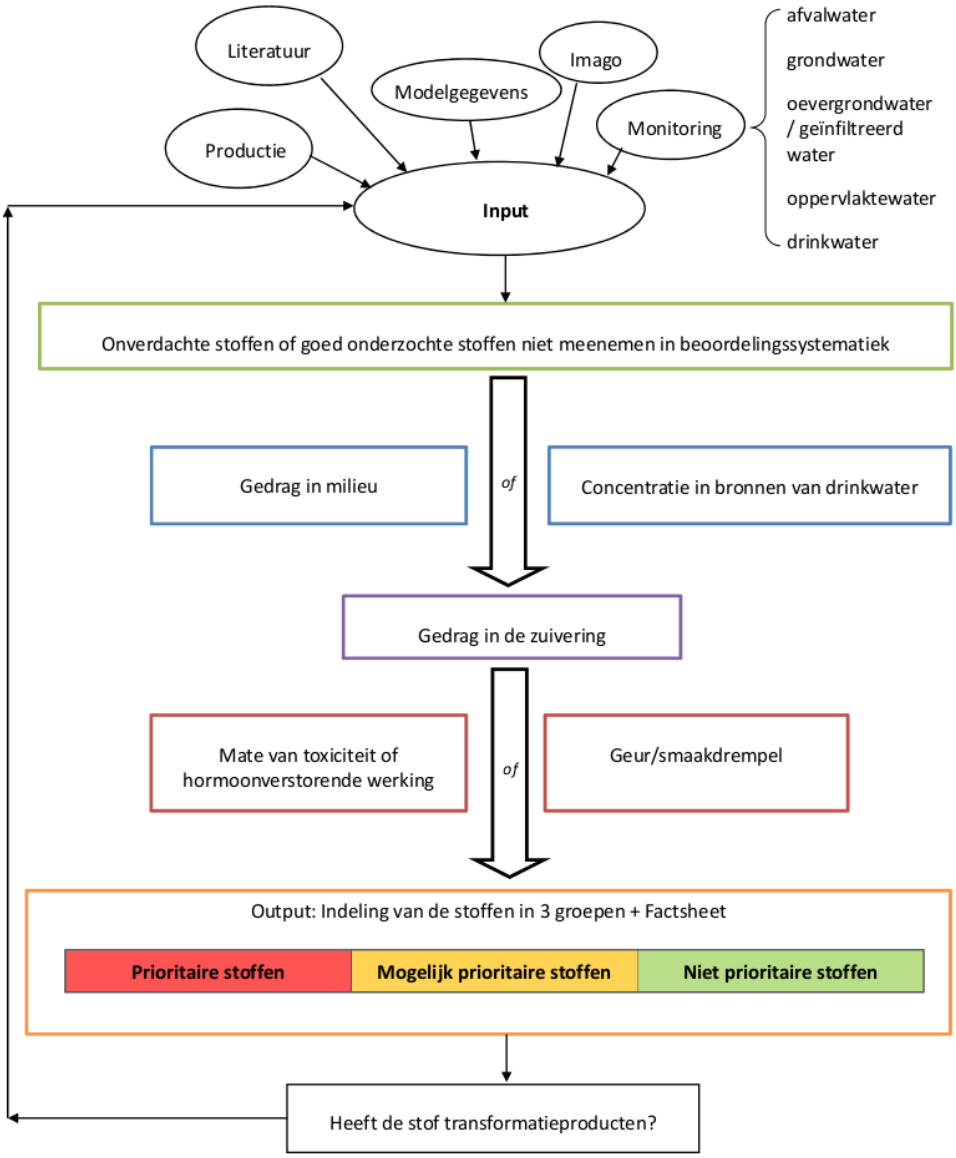
Conform het principe van de zogenaamde Benchmark Quotiënt (Schriks *et al.*, 2010) is het resultaat van de beoordelingssystematiek een score gebaseerd op de ratio van de (mogelijke) concentratie in drinkwater en het (mogelijke) niveau waarbij ongewenste effecten optreden. De uitkomst bepaalt of een stof prioritair, mogelijk prioritair of niet prioritair is voor verdiepend onderzoek (Tabel 3-1).

Tabel 3-1 Beoordeling van een stof met behulp van het prioriteringssysteem.

	Voorkomen in (bronnen voor) drinkwater hoog	Voorkomen in (bronnen voor) drinkwater niet of laag
Ongewenste effecten bij lage concentratie	Prioritaire stoffen	Mogelijk prioritaire stoffen
Ongewenste effecten bij hoge concentratie	Mogelijk prioritaire stoffen	Niet prioritaire stoffen

Prioritaire stoffen zijn de stoffen die voorrang kunnen krijgen bij een uitgebreide risicobeoordeling en het genereren van monitoringsgegevens. Mogelijk prioritaire stoffen verdienen meer aandacht in bijvoorbeeld monitoring. Niet prioritaire stoffen hebben een lage relevantie voor verdiepend onderzoek.

Als laatste stap voor de stoffen waarvan het voorkomen in de bronnen voor drinkwater hoog wordt ingeschat wordt gekeken of de moederstof transformatieproducten kan krijgen in het milieu of in de drinkwaterzuivering. Een voorbeeld van een systematiek waarmee transformatieproducten worden voorspeld is beschreven door Kern et al., (2009). Wanneer dit het geval is kunnen de transformatieproducten van de stoffen waarvan het voorkomen in (bronnen voor) drinkwater hoog wordt ingeschat, - met andere eigenschappen dan de moederstof - opnieuw worden beoordeeld.



Figuur 3-1 Schematische weergave van de prioriteringssystematiek.

3.3 Het scoresysteem

De prioriteringssystematiek is een scoresysteem toegepast op de stappen volgens het schema in Figuur 3-1. Het resultaat van de beoordelingssystematiek is een score gebaseerd op een zogenaamde Benchmark Quotiënt tussen (verwachte) concentratie in drinkwater en (verwachte) niveau waarbij ongewenste effecten optreden (Schriks *et al.*, 2010). Onderstaande vergelijking geeft de berekening van de score voor individuele stoffen. De puntentelling is hieronder verder toegelicht. In Bijlage II staan de opzoekmogelijkheden voor de benodigde gegevens.

$$Score = \frac{(MON\ of\ GDR) * ZUI}{SMA\ of\ GEZ}$$

MON = monitoring/meetgegevens in bronnen voor drinkwater

GDR = gedrag in het milieu

ZUI = verwijderingsefficiëntie in klassieke zuivering

SMA = hoge of lage geur/smaakdrempel

GEZ = eindpunt gezondheidseffecten

3.3.1 Voorkomen in drinkwater

Monitoringsgegevens of stofeigenschappen, samen met het aandeel dat niet wordt verwijderd in de zuivering, bepaalt wat de (verwachte) concentratie in drinkwater is. De score voor het vóórkomen van een stof in bronnen voor drinkwater gebeurt in eerste instantie aan de hand van de meetgegevens (MON) en als alternatief aan de hand van het gedrag in het milieu (GDR). Er zijn in beide gevallen minimaal 1 punt tot maximaal 1000 punten te scoren.

De score aan de hand van meetgegevens (MON) hangt af van de gemiddelde gemeten concentratie in bronnen voor drinkwater van de bedrijfsspecifieke monitoringsgegevens (Tabel 3-2). Dit is een grove inschatting van de orde van grootte waarin de gemiddelde stofconcentratie zich bevindt. Voor een strenge risico inschatting kan het 90 percentiel worden gebruikt. Echter, een voorwaarde is dat de dataset een goede dekking heeft in plaats en tijd van de metingen. De score voor de verschillende klassen voor MON zijn uitgezet in Tabel 3-2 en bedraagt 1, 10, 100 of 1000 punten. Er is echter niet gekozen voor het gebruik van de maximale concentratie in drinkwaterbronnen zoals bij de Benchmark Coëfficiënt uit Schriks *et al.* (2010), omdat dit geen representatieve waarde is voor concentraties onder 'normale omstandigheden'. Bij onduidelijkheid geldt echter wel een 'realistic worst case scenario' en wordt er eerder gekozen voor een klasse met iets hoge concentraties en een hogere score dan een klasse met een lagere score. Wanneer bij metingen concentraties onder de detectielimiet liggen, wordt de detectielimiet aangehouden.

Wanneer er weinig of geen bedrijfsspecifieke monitoringsgegevens beschikbaar zijn wordt de score berekend aan de hand van het gedrag (GDR). De score voor het gedrag in het milieu wordt bepaald door gegevens over het gebruiksvolume, de hydrofobiciteit en de persistentie van een stof. Elke parameter kent twee klassen waarbij 1of 10 punten te verkrijgen zijn (Tabel 3-2). Het maximaal te scoren aantal punten bedraagt dus 10*10*10=1000 en het minimaal te scoren aantal punten bedraagt 1*1*1=1. Gebruiksgegevens zijn lastig te verkrijgen. Enkel stoffen waarvan bekend is dat zij met hoge productie volumina op de markt komen krijgen een score van 10 en de rest van de stoffen een score van 1 (Tabel 3-2). De High Production Volume Chemicals (HPVC) zijn geregistreerd bij ECHA (ECHA, 2013) en worden geproduceerd en of geïmporteerd in volumina ≥ 1000 ton per jaar in de Europese Unie als geheel. De aanname is dat stoffen met hogere productie- en importvolumina uiteindelijk ook in hogere volumes in het milieu terechtkomen. De hydrofobiciteit, uitgedrukt als log K_{ow}, is sterk gecorreleerd met de oplosbaarheid en indicatief voor hoe graag de stof in de waterfase blijft of zich juist bindt aan sediment of bodemdeeltjes. De grenswaarde tussen hydrofiel (score 10) en hydrofoob (score 1) is gesteld op log K_{ow} = 4, volgens de US EPA (2013). Persistentie wordt gescoord via de halfwaardetijd in water, verkregen uit de EPISuite toolbox (US EPA, 2013). Het model BIOWIN 3 berekent de snelheid van aerobe en anaerobe biodegradatie in het milieu (water, bodem en sediment). Meer informatie over het model is te vinden in de EPISuite toolbox (EPA, 2013). De grenswaarde is gesteld op een halfwaardetijd van 50 dagen in water. Moeilijk afbreekbare stoffen met een halfwaardetijd langer dan 50 dagen worden gescoord met 10 punten. De verblijftijd van water in diverse spaarbekkens en in grondwater (o.a. duinwater, oeverfiltraat) voor onttrekking varieert van weken tot jaren.

De biologische activiteit in deze milieucompartimenten verschilt ook sterk. Om aan de veilige kant van deze range te zitten is gekozen voor een relatief korte halfwaardetijd van 50 dagen.

Monitoringsgegevens (MON) en het voorspelde gedrag in het milieu (GDR) scoren het (mogelijke) voorkomen van een stof in het milieu. Om in te schatten wat de mate van voorkomen van de stof is in drinkwater, wordt de score vermenigvuldigd met een inschatting van het percentage dat niet wordt verwijderd in de zuivering (MON of GDR * ZUI). Als de stof is aangetroffen in drinkwater en deze gegevens worden gebruikt voor de parameter MON, krijgt de parameter ZUI een score van 1. Wanneer er geen monitoringsgegevens van drinkwater beschikbaar zijn, wordt een inschatting gemaakt van het percentage verwijdering.

De diversiteit aan drinkwaterzuiveringen en (combinaties van) maakt het moeilijk om een generieke maat voor verwijdering in de drinkwaterzuivering te bepalen. Daarom wordt de mate van verwijdering bepaald in een eenvoudige drinkwaterzuivering. Een degelijke zuivering bestaat uit beluchting, flocculatie, snelfiltratie en actief koolfiltratie. Deze zuiveringsstappen zijn in de meeste drinkwaterzuiveringen aanwezig. In diverse zuiveringen waar grondwater wordt gebruikt voor de productie van drinkwater ontbreekt actief koolfiltratie vaak. De passage van de bodem heeft echter een soortgelijk effect als actief koolfiltratie waardoor deze generalisatie gehandhaafd kan worden. In deze zuivering vinden drie belangrijke processen plaats die zorgen voor verwijdering: vervluchtiging, sorptie en biodegradatie. De verblijftijd in een drinkwaterzuivering is echter erg kort, waardoor biodegradatie voor beperkte verwijdering zorgt. Daarnaast is vluchtigheid vaak gerelateerd aan sorptie aan actief kool. De beoordeling van de verwijdering is daarom niet gebaseerd op het proces van biodegradatie en vervluchtiging maar aan de hand van sorptie. De sorptie van stoffen aan actief kool (of bodem is een complex samenspel van factoren en interacties tussen stof, water en sorbent. Als simplificatie is gekozen om de verwijdering alleen aan de hand van de log K_{ow} te beoordelen. Met deze parameter kan een grove schatting worden gemaakt van de verwijdering in drinkwaterzuiveringsinstallaties. Stoffen met een log K_{ow} >4 zijn geclassificeerd als hydrofoob (EPA, 2013) en worden verwacht dat zij binden aan actief kool. Stoffen met een log K_{ow} <4 zijn hydrofiel(er) en binden minder sterk aan actief kool. Daarnaast kan onderzoek bij KWR of in de literatuur deze indicatie onderbouwen of verwerpen. In een 2^{e} fase kan de geschatte verwijdering worden genuanceerd met bijvoorbeeld gegevens over de verwijdering met uitgebreide zuiveringstechnieken (de Ridder et al., 2010; Hofman-Caris et al., 2012).

*Tabel 3-2 Scores voor het voorkomen van de stof in drinkwater [MON of GDR * ZUI].*

Afkorting	Omschrijving	Klassen	Score
MON	Gemiddelde concentratie in oppervlaktewater,	>0,1 µg/L	1000
	oeverfiltraat of grondwater	0,01-0,1 µg/L	100
		0,001-0,01 µg/L	10
		<0,001 µg/L	1
GDR	V*H*P	HPVC*	10
	Gebruiksvolume (V)	rest	1
	Hydrofobiciteit (H)	log K_{ow} < 4	10
		log K_{ow} > 4	1
	Persistentie (P)	T1/2 >50 dagen	10
		T1/2<50 dagen	1
ZUI	Verwijdering in de zuivering (%)	Drinkwater	1
	De mate van sorptie aan actief kool wordt	log K_{ow}>4	0,1
	bepaald door de waarde van log K_{ow}	log K_{ow}<4	1

**HPVC = high production volume chemical*

3.3.2 Effect

De vereenvoudigde risicobeoordeling maakt geen gebruik van uitgebreide toxiciteitsgegevens, aangezien dat voor een prioritering te tijdrovend is. Wanneer een uitgebreide risicobeoordeling volgt, wordt er uiteraard wel gebruik gemaakt van literatuurgegevens over toxiciteit. Voor het effect wordt een score toegekend die aangeeft wat het niveau is waarbij ongewenste effecten optreden, gebaseerd op de TTC (threshold of toxicological concern). Mons *et al*. (2013) berekende voor drinkwater twee conservatieve grenswaarden waaronder geen toxicologische effecten zijn te verwachten. Voor individuele stoffen met genotoxische en hormoonverstorende werking is de grenswaarde gesteld op 0,01 µg/L. Voor alle andere stoffen is de grenswaarde gesteld op 0,1 µg/L. Ook voor bestrijdingsmiddelen is de drinkwaternorm 0,1µg/L. Om de score van het voorkomen te toetsen aan deze TTC is voor genotoxische en hormoonverstorende stoffen een 'GEZ' score van 100 toegekend. Voor de stoffen zonder carcinogene of hormoonverstorende werking wordt het effect gescoord met 1000 punten. Deze score is een factor 10 hoger, conform het verschil in TTC. De score voor ongewenste geur of smaakverschijnselen optreden (SMA) is alleen relevant als deze geur- en smaakdrempel onder de TTC ligt. Deze stoffen krijgen in plaats van een score voor GEZ een score van 1000 punten voor SMA.

Tabel 3-3 Score voor het niveau waarop schadelijke gezondheidseffecten kunnen optreden (GEZ of SMA). De score voor GEZ wordt vervangen door SMA wanneer de geur- of smaakdrempel <TTC.

Afkorting	Omschrijving	Klassen	Score
GEZ	Eindpunt is carcinogeniteit of hormoonverstoring	carc/horm	100
		rest	1000
SMA	Smaak of geurdrempel	<TTC	100

De uitkomst van de prioriteringssystematiek bepaalt of een stof zeer prioritair, prioritair of niet prioritair is voor verdiepend onderzoek.

*Tabel 3-4 De beoordeling van een stof (zie Tabel 3-1) aan de hand van de score van het voorkomen (VRK = MON of GDR * ZUI) en het Effect (EFF). De score leidt tot de beoordeling: ≥1 Prioritair, ≥0,1 Mogelijk prioritair, of <0,1 Niet prioritair.*

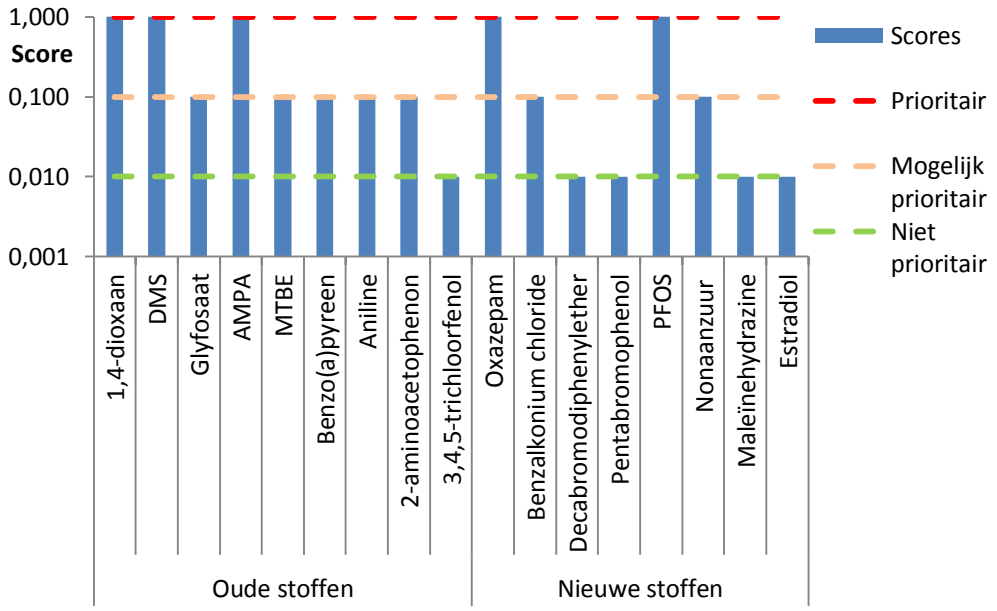
Score	VRK = 1000	VRK = 100	VRK = 10	VRK = 1
EFF = 100	10	1	0,1	0,01
EFF = 1000	1	0,1	0,01	0,001

4 Toetsen van de prioriteringssystematiek

4.1 Beoordelen van oude en nieuwe stoffen

Om de ontwikkelde prioriteringssystematiek te toetsen zijn er diverse stoffen beoordeeld. Het gaat om negen stoffen waarvoor veel informatie bekend is (1,4-dioxaan, dimethylsulfamide, glyfosaat, AMPA, MTBE, benzo(a)pyreen, aniline, 2-aminoacetophenon en 3,4,5-trichloorfenol), en zeven stoffen waarvan relatief weinig bekend is (oxazepam, benzalkonium chloride, decabromodiphenyl ether, pentabromophenol, PFOS, nonaanzuur, maleïnehydrazine en estradiol). In dit hoofdstuk zijn de resultaten zijn beschreven, gevolgd door een evaluatie van het model en de resultaten. De resultaten staan in Figuur 4-1, de scores en de onderbouwing van de scores van de stoffen voor elke parameter staan in Bijlage III. Van een aantal stoffen is een factsheet opgesteld (zie Bijlage IV).

De oude stoffen, 1,4-dioxaan, dimethylsulfamide, AMPA, MTBE worden beoordeeld als prioritair. Glyfosaat, benzo(a)pyreen, aniline en 2-aminoacetophenon wordt beoordeeld als mogelijk prioritair. Daarnaast wordt 3,4,5-trichloorfenolbeoordeeld beoordeeld als niet prioritair. De (mogelijk) prioritaire stoffen kunnen naar verwachting voorkomen in drinkwater, na de veronderstelde eenvoudige zuiveringsstappen, in concentraties die ongewenst zijn. In werkelijkheid is de drinkwaterzuivering meer uitgebreid met zuiveringsstappen als oxidatie, en is er geen sprake van gerapporteerde normoverschrijdingen voor deze stoffen. Van de nieuwe stoffen worden oxazepam en PFOS als prioritair beoordeeld. Daarnaast worden benzalkonium chloride en nonaanzuur als mogelijk prioritair beoordeeld. Deze stoffen kunnen in drinkwater voorkomen in concentraties waarbij ongewenste effecten niet uit te sluiten zijn. Deze nieuwe stoffen komen in aanmerking voor een uitgebreide risicoanalyse, eventueel aanvullende meetcampagnes of studies naar het gedrag van de stoffen in het milieu en bij zuiveringstechnieken. De overige beoordeelde nieuwe stoffen, decabromodiphenyl, pentabromophenol, maleïnehydrazine en estradiol, worden als niet prioritair beoordeeld.



Figuur 4-1 Scores voor de teststoffen in de prioriteringssystematiek. De lijnen geven aan wanneer een stof mogelijk prioritair is (≥0,1) of prioritair (≥1).

4.2 Evaluatie van het prioriteringssysteem

Het prioriteringssysteem is een vereenvoudigd model dat op basis van meetgegevens en eigenschappen een grove selectie maakt van de meest relevante stoffen voor de drinkwaterketen die voorrang krijgen bij uitgebreide risicoanalyse. De eenvoud van het model maakt het makkelijk toepasbaar, maar generiek. Het is dus wenselijk om voor stoffen met hoge prioriteit aanvullende (risico)analyses uit te voeren.

Het blijkt dat de score voor het voorkomen in milieu aan de hand van monitoringsgegevens (MON) en aan de hand van stofeigenschappen (GDR) niet voor elke stof overeenkomt. Vaak wordt de score voor GDR in vergelijking met MON onderschat. Dit komt doordat geen van de getoetste stoffen én goed oplosbaar én persistent én een hoog productievolume heeft, waardoor de maximale score van 1000 niet wordt gehaald. Een aantal van deze stoffen wordt wel aangetroffen in bronnen voor drinkwater in concentraties > 0,1 µg/L (1000 punten). Hierdoor ontstaat een discrepantie tussen de twee scores. De stoffen die in concentraties voorkomen tussen de 0,01 µg/L en 0,1 µg/L (score MON = 100) zijn vaak of persistent (T1/2 > 50 dagen) of goed oplosbaar (log K_{ow} < 4), maar zelden beide, waardoor de score voor GDR vaak lager is dan 100. Het is echter niet wenselijk dat stoffen op basis van werkelijke concentraties een hogere score krijgen dan op basis van stofeigenschappen. De prioriteit van de stoffen waarvoor nog geen monitoringsgegevens beschikbaar zijn, zou hierdoor onderschat kunnen worden. Een mogelijke oplossing is het aanpassen van de score voor persistentie (P), door de grenswaarde aan te scherpen naar een kortere halfwaardetijd in water, bijvoorbeeld naar 30 dagen.

Uit de toetsing van estradiol blijkt dat de prioriteit van een zeer potente stof toch laag kan zijn. De oorzaak van de lage score is het gebruik van de TTC-grenswaarde in de beoordeling. De TTC-grenswaarde is voor alle carcinogene en hormoonverstorende stoffen gelijk. Deze waarde wijkt (slechts) een factor 10 af voor stoffen die deze effecten niet hebben. De potentie van verschillende hormoonverstorende en carcinogene stoffen kan echter ordegrootten verschillen. Echter, deze nuance wordt niet in de beoordeling meegenomen. De TTC-grenswaarde is voor de meeste stoffen een zeer conservatieve waarde, maar voor de meest potente stoffen is deze waarde minder conservatief. Bijvoorbeeld. 17β-estradiol is een

zeer potente hormoonverstorende stof die met dit model wordt beoordeeld als niet prioritair voor drinkwater, omdat estradiol niet in concentraties in het drinkwater wordt verwacht waarbij schadelijke effecten kunnen optreden. Concentraties in het oppervlaktewater zijn maximaal 10 ng/L en bovendien is de stof goed te verwijderen in de zuivering. De stof heeft echter een scherpe ecotoxicologische norm van 143 ng/L in oppervlaktewater en bovendien wordt door Europese Commissie voorgesteld deze ecotoxicologische norm aan te scherpen tot 0,4 ng/L.). De humane streefwaarde is gesteld op 7 ng/L (RIVM) of 3,8 ng/L (Brand et al., 2013). Dat is in dezelfde orde grootte als de drempelwaarde van het TTC concept (10 ng/L). Voor humane blootstelling via drinkwater is de huidige prioritering voor deze stof op basis van de TTC daarom toereikend.

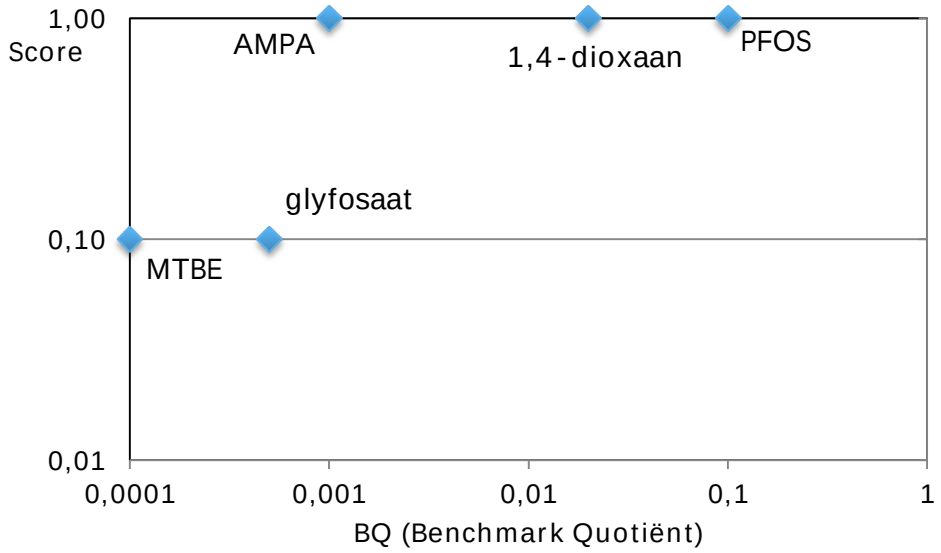
Het TTC concept verondersteld voorkennis over de toxicologische werking van een stof. Voor de stoffen waarvan onbekend is of ze carcinogeen of hormoonverstorend zijn is onduidelijk welke TTC waarde moet worden gehanteerd. Gebrek aan informatie blijft in de beoordeling een heikel punt. Verschillende studies (Kolkman *et al.*, 2014) hebben echter laten zien dat de chemische structuur met behulp van zogenoemde 'structural alerts' kan worden ingeschat of een stof carcinogene of hormoonverstorende potentie heeft. Op basis van deze structural alerts kan de chemische structuur informatie geven over mogelijke effecten door (1) chemische structuren die samenhangen met een bepaald effect (bijvoorbeeld genotoxiciteit) of (2) verwantschap met een andere stof met een bekend effect. Deze verbanden tussen molecuulstructuur en effect kunnen worden gemodelleerd met programma's als Toxtree (Patlewicz, 2008, Toxtree, 2014) en de OECD toolbox (OECD, 2014). Met behulp van dergelijke schattingsmethoden kunnen ontbrekende effectgegevens in de toekomst mogelijk worden aangevuld

4.3 Vergelijking van de resultaten met uitgebreidere risicobeoordeling

De resultaten van de getoetste stoffen kunnen worden vergeleken met waarden van de uitgebreidere risicobeoordelingen. Schriks *et al.* heeft voor vijf van de getoetste stoffen een zogenoemde Benchmark Quotiënt (BQ) bepaald. Deze stoffen hebben alle vijf een BQ onder de score van de prioriteringssystematiek (zie Figuur 4-2). De score van de prioriteringssystematiek is een conservatieve score door het gebruik van de (conservatieve) TTC grenswaarde. Het risico wordt daardoor vrijwel altijd overschat in vergelijking met uitgebreidere beoordelingen op basis van toxiciteitdata uit de literatuur zoals uitgevoerd door Schriks *et al.* (2010). De nuance is daardoor verloren, waardoor AMPA, 1,4-dioxaan en PFOS een gelijke score krijgen, terwijl het werkelijke risico 2 factoren verschil kent. Voor glyfosaat en MTBE is de prioriteit ook hoger ingeschat dan in de studie van Schriks *et al.*, (2010).

De vergelijking met de BQ-waarden geeft aan dat deze eenvoudige risico-inschatting kan worden gebruikt als selectiemethode van stoffen. Vervolgens zullen de geprioriteerde stoffen aan de hand van aanvullend onderzoek in meer detail moeten worden beoordeeld. De prioriteringssystematiek bepaalt in grove mate de prioriteit van chemische stoffen en geeft een hoge inschatting van het risico. Het werkelijke risico op basis van uitgebreidere toxicologische gegevens kan aanzienlijk lager blijken te zijn.

De resultaten zijn tevens vergeleken met een uitgebreidere risicobeoordeling van Dunea (Slootweg en Fischer, 2012). Slootweg en Fischer hebben een selectie van stoffen geëvalueerd met een uitgebreidere risicobeoordeling. Van elk van deze stoffen is een uitgebreide factsheet opgesteld met daarin een toxicologische beoordeling in de vorm van de Benchmark Quotiënt (op basis van toxicologische gegevens en eigen monitoringsgegevens) en een kwalitatieve score berekend naar Puijker *et al.* (2008). Drie



Figuur 4-2 Resultaten van de score vergeleken met de Benchmark Quotiënt uit Schriks et al. (2010).De assen hebben een logaritmische schaal.

van de getoetste stoffen zijn ook in deze studie geprioriteerd. Dit zijn glyfosaat, AMPA en MTBE. De kwalitatieve score van Slootweg en Fisher wordt berekend door het optellen van scores voor (1) het voorkomen, (2) de verwijderingsefficiëntie tijdens zuivering en (3) de aard van het risico. De optelsom is een getal van 3 tot 9 en dient ter rangschikking van de stoffen. De scores voor glyfosaat, AMPA en MTBE zijn te vinden in Tabel 4-1. Tevens is in deze tabel de berekende Benchmark Quotiënt (BQ) door Slootweg en Fischer weergegeven en de score van het in dit rapport gepresenteerde prioriteringssysteem (Score Prioriteringssysteem).

Tabel 4-1 Kwalitatieve scoring en Benchmark Quotiënt (BQ) van de stoffen glyfosaat, AMPA en MTBE berekend door Slootweg en Fischer (2012), met in de laatste kolom de score aan de hand van het prioriteringssysteem in het onderhavige rapport.

	Score Slootweg en Fischer					Score Prioriteringssysteem
	Kwantitatieve score				BQ	
Stof	Voorkomen	Verwijdering	Risico	Optelsom		
Glyfosaat	3	2	3	8	0,0003	0,1 (mogelijk prioritair)
AMPA	3	2	1	6	0,002	1 (prioritair)
MTBE	2	3	1	6	0,0001	0,1 (mogelijk prioritair)

De kwalitatieve scores van Slootweg en Fisher voor deze drie stoffen komen niet overeen met de berekende BQ-waarden en de prioritaire scores in het onderhavige rapport (Tabel 4-1). AMPA heeft de hoogste BQ-waarde en wordt in de huidige studie als prioritair aangemerkt terwijl de stof niet de hoogste score oplevert in de beoordeling (kwantitatieve score) van Slootweg en Fisher. Waarschijnlijk wordt deze discrepantie veroorzaakt door het verschil in het beoordelen van het humane gezondheidseffect. In de prioriteringssystematiek wordt het effect van glyfosaat en AMPA gelijk beoordeeld (zelfde TTC-waarde), terwijl Slootweg en Fischer het risico van glyfosaat hoger scoren dan AMPA. Daarnaast wordt in de prioriteringssystematiek het voorkomen van AMPA een factor hoger gescoord, terwijl Slootweg en Fischer het voorkomen gelijk beoordelen. Omdat glyfosaat en AMPA regelmatig

aangetroffen worden in oppervlaktewater, en in normoverschrijdende concentraties, bevelen Slootweg en Fischer aan om de verbinding te blijven monitoren, en op de lijst prioritaire stoffen te houden. Dit is in overeenstemming met de prioriteit van de stoffen beoordeeld met het door ons gehanteerde prioriteringssysteem.

Slootweg en Fischer beoordelen MTBE als een niet relevante stof met betrekking tot humane gezondheidsrisico's. Het is voor Dunea niet langer nodig om MTBE te kenmerken als bedreigende stof. De oorzaak hiervan is de dalende trend in de meetresultaten (2007-2012). Toch wordt de stof in het door ons gehanteerde prioriteringssysteem beoordeeld als mogelijk prioritair.

Er is een belangrijk verschil tussen de kwantitatieve beoordeling zoals toegepast door Slootweg en Fisher, en de huidige prioritering. In de beoordeling door Slootweg en Fisher worden voorkomen, verwijdering en toxicologische scores als 'onafhankelijke variabelen' opgeteld, terwijl in de huidige studie deze variabelen als 'afhankelijke parameters' worden gezien en derhalve worden vermenigvuldigd. Deze laatste methode biedt de kans om met de relevante parameters (voorkomen, zuiveringsefficiëntie en effect) het werkelijke risico te benaderen.

5 Discussie en conclusie

5.1 Toegevoegde waarde van drinkwater-specifiek prioriteringssyteem

Dit rapport beschrijft een prioriteringssystematiek voor stoffen die mogelijk een risico vormen voor de (drink)waterkwaliteit. Prioriteren is van belang omdat er vele duizenden stoffen worden geproduceerd en toegepast. De ontwikkelde systematiek is toegepast op nieuwe en bekende mogelijke probleemstoffen. De systematiek baseert de prioritering van stoffen op basis van fysisch-chemische eigenschappen, toxicologische eigenschappen, verwijdering in de drinkwaterzuivering, en voorkomen in de waterketen. De uitkomst van de prioritering bepaalt welke stoffen in aanmerking komen voor vervolgonderzoek, zoals uitgebreide risicobeoordeling, metingen of bepaling van gedrag in de waterketen.

Het beoordelen en prioriteren van stoffen is niet nieuw. Binnen vele instanties, organisaties en ook in de wetgeving en regulering van het gebruik van stoffen zijn prioriteringssystemen ontwikkeld en toegepast om grote aantallen stoffen te selecteren. De grondslag van de meeste prioriteringssystemen is een grove risicobeoordeling, en het afleiden van de ratio van effect en blootstelling. Het ontwikkelde prioriteringssysteem is geen vervanging voor de reeds bestaande prioriteringssystemen. De systematiek heeft als doel de lijst met mogelijk relevante stoffen (de aandachtstoffenlijst) te reduceren naar een lijst met de meest relevante stoffen (de prioritaire stoffenlijst) en biedt daarmee structuur voor verdiepend onderzoek.

Ondanks de vele prioriteringssystemen zijn er niet veel systemen ontwikkeld en gepubliceerd specifiek voor drinkwater. Bestaande prioriteringssystemen houden doorgaans geen rekening met stoffen waarvoor geen meetgegevens bestaan en de technologische mogelijkheden om stoffen te verwijderen. In de ontwikkelde systematiek is hier wel rekening mee gehouden. Het prioriteringssysteem maakt gebruik van toegankelijke gegevens en is een vereenvoudigde risico-inschatting zonder een uitgebreide stofstudie. De systematiek is niet geschikt voor stofgroepen, omdat de prioritering mede wordt bepaald door stof-specifieke eigenschappen zoals carcinogeniteit, persistentie en hydrofobiciteit. Het scoresysteem bepaalt de prioriteit van een stof. Zowel stoffen met, als stoffen zonder meetgegevens zijn geschikt voor de hier ontwikkelde systematiek. Wanneer meetgegevens (concentraties in bronnen van drinkwater) ontbreken, worden gegevens van stofeigenschappen gebruikt die op een makkelijk toegankelijk zijn.

5.2 Tekortkomingen huidige systematiek en suggestie voor verdere ontwikkeling

In bestaande prioriteringssystemen wordt net als in dit rapport meestal een twee-staps benadering gevolgd; een voorselectie van kandidaat-stoffen en vervolgens een ranking. In de voorselectie komen vaak stoffen terecht die al redelijk veel gemeten worden. (het Matthew Effect, zie paragraaf 2.5). De goed bestudeerde en veel gemeten stoffen vormen echter maar een zeer kleine fractie van de totale hoeveelheid op de markt aanwezige stoffen. Om dit fenomeen te doorbreken kunnen juist ook de stoffen waarover weinig bekend is en waarvan niet of nauwelijks meetgegevens zijn worden beoordeeld met de prioriteringssystematiek. De huidige prioriteringssystematiek is daarvoor geschikt, maar kan daarentegen nog niet worden toegepast op grote aantallen stoffen.

Om zo min mogelijk stoffen ‘over het hoofd te zien’, is het van belang een zeer grote selectie van stoffen te gebruiken in het prioriteringssysteem. Zo wordt een optimale inschatting gemaakt van stoffen die tot een relevante blootstelling kunnen leiden. Voor deze

grote hoeveelheid stoffen zijn model- en/of meetgegevens nodig van blootstelling. Hiervoor kan een combinatie gemaakt worden van brede screening meetgegevens én gemodelleerde waterconcentraties op basis van emissies en fysisch-chemische eigenschappen om mogelijk relevante chemicaliën met betrekking tot blootstelling via drinkwater te selecteren. Dergelijke modelberekeningen hebben in de USA grootschalig plaatsgevonden (Arnot *et al.,* 2012, Wambaugh *et al.,* 2013), maar ook in Europese stroomgebieden op basis van REACH en CTGB gegevens (ongepubliceerde data RIVM).

Daarnaast is een beperking van de meeste prioriteringssystemen, zo ook de huidige rapportage, dat geen rekening wordt gehouden met mengseltoxiciteit. Dit kan worden opgelost door concentratie-additie te veronderstellen, een realistische aanname (Backhaus en Faust 2012, Silva *et al.*, 2002). Hierbij kan per groep van stoffen met eenzelfde toxicologisch werkingsmechanisme worden gesommeerd, in de prioriteringsfase zonder extra toxicologische gegevens in eerste instantie op basis van de TTC (Mons *et al* 2013).

De prioritering inclusief zuivering is met name wat een prioriteringssystematiek voor drinkwaterrelevante stoffen onderscheidt van bestaande prioriteringssystemen. Stoffen die in alle verschillende toegepaste zuiveringsmethoden niet goed verwijderd worden, zijn relevanter voor prioritering. Zuiveringsmethoden verschillen aanzienlijk tussen de waterbedrijven, ondermeer vanwege verschillende in de kwaliteit van de bronnen maar ook afhankelijk van de visie van het betreffende waterbedrijf. In de huidige prioriteringssystematiek is alleen de verwijdering in de klassieke zuivering aan de hand van sorptie aan actief kool beoordeeld, en niet de meer geavanceerde technieken zoals membraanfiltratie, desinfectie met UV of oxidatie met ozon of$UV+H_2O_2$ technieken. Beluchting is vooral relevant voor relatief vluchtige verbindingen, de verwijdering bij filtratiestappen is vooral afhankelijk van de grootte van een molecuul. Verder is bij klassieke zuivering doorgaans een stap ingebouwd met passage over actief kool, bodem, duin of rivieroever. Een zeer grove schatting van klassieke drinkwaterzuivering is gemaakt aan de hand van de log K_{ow}, welke vooral bepaald wat de mate van sorptie is aan actief kool. Een verdere verfijning van de hier ontwikkelde prioriteringsmethode is om specifiek voor drinkwaterzuivering ontwikkelde QSARs (bv. Delgado *et al.* 2012) te incorporeren in de prioriteringssystematiek.

6 Dankwoord

Wij bedanken Corine Houtman, Patrick Bauerlein, Luc Palmen, Albert Brand en Leo Puijker voor hun input op dit rapport.

7 Referenties

Arnot, J.A., Brown, T.N., Wania, F., Breivik, K., McLachlan, M.S., 2012. Prioritizing chemicals and data requirements for screening-level exposure and risk assessment. Environmental Health Perspectives 120, 1565-1570.

Backhaus T, Faust M (2012) Predictive environmental risk assessment of chemical mixtures: A conceptual framework. Environ Sci Technol 46:564-2573

Brand, W., de Jongh, C.M., van der Linden, S.C., Mennes, W., Puijker, L.M., van Leeuwen, C.J., van Wezel, A.P., Schriks, M., Heringa, M.B., 2013. Trigger values for investigation of hormonal activity in drinking water and its sources using CALUX bioassays. Environment International 55, 109-118.

Brodin, T., Fick, J., Jonsson, M., Klaminder, J., 2013. Dilute Concentrations of a Psychiatric Drug Alter Behavior of Fish from Natural Populations. Science 339, 814-815.

Daughton, C.G., 2014. The Matthew Effect and widely prescribed pharmaceuticals lacking environmental monitoring: Case study of an exposure-assessment vulnerability. Science of the Total Environment 466-467, 315-325.

de Voogt, P., Janex-Habibi, M.-L., Sacher, F., Puijker, L.M., Mons, M., 2009. Development of a common priority list of pharmaceuticals relevant for the water cycle. Water Sci Technol 59, 39-46.

Delgado LF, Charles P, Glucina K, Morlay C (2012) QSAR-like models: A potential tool for the selection of PhACs and EDCs for monitoring purposes in drinking water treatment systems - A review. Water Res 46:6196-6209

Du, G., Hu, J., Huang, H., Qin, Y., Han, X., Wu, D., Song, L., Xia, Y., Wang, X., 2013. Perfluorooctane sulfonate (PFOS) affects hormone receptor activity, steroidogenesis, and expression of endocrine-related genes *in vitro* and in vivo. Environmental Toxicology and Chemistry 32, 353-360.

Dulio, V., von der Ohe, P.C., 2013. NORMAN Prioritisation framework for emerging substances. Verneuil En Halatte, p. 61.

ECHA, 2013. http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances.

EPA, 2013. http://www.chemadvisor.com/docs/SFWorkshop/04%20-%20EPISuite%20-%20Physical-Chemical%20Properties%20and%20Environmental%20Fate.pdf.

Eriksson, L., Jaworska, J., Worth, A.P., Cronin, M.T.D., McDowell, R.M., Gramatica, P., 2003. Methods for reliability and uncertainty assessment and for applicability evaluations of classification- and regression-based QSARs. Environmental Health Perspectives 111, 1361-1375.

Eschauzier, C., Beerendonk, E., Scholte-Veenendaal, P., De Voogt, P., 2012. Impact of treatment processes on the removal of perfluoroalkyl acids from the drinking water production chain. Environmental Science and Technology 46, 1708-1715.

European Commision, 2000. EU Water Framework Directive - integrated river basin management for Europe, 2000/60/EC. Brussels, Belgium.

Fischer, A., Bannink, A., Houtman, C.J., 2011. Relevant substances for Drinking Water production from the river Meuse: An update of selection criteria and substances lists. HWL, Haarlem, the Netherlands, p. 53.

Van Genderen, J., Mons, M.N., Leerdam, J.A. (2000). Inventarisatie en toxicologische evaluatie van organische microverontreinigingen. RIWA rapport. Vereniging van Rivierwaterbedrijven, Nieuwegein.

Guillén, D., Ginebreda, A., Farré, M., Darbra, R.M., Petrovic, M., Gros, M., Barceló, D., 2012. Prioritization of chemicals in the aquatic environment based on risk assessment: Analytical, modeling and regulatory perspective. Science of the Total Environment 440, 236-252.

Hofman-Caris, R.C.H.M., Harmsen, D.J.H., Beerendonk, E.F., Knol, T.H., Houtman, C.J., Metz, D.H., Wols, B.A., 2012. Prediction of advanced oxidation performance in various pilot UV/H2O2 reactor systems with MP- and LP- and DBD-UV lamps. Chemical Engineering Journal 210, 520-528.

Hogenboom, A.C., van Leerdam, J.A., de Voogt, P., 2009. Accurate mass screening and identification of emerging contaminants in environmental samples by liquid chromatography-hybrid linear ion trap Orbitrap mass spectrometry. Journal of Chromatography A 1216, 510-519.

Houtman, C.J., 2010. Emerging contaminants in surface waters and their relevance for the production of drinking water in Europe. J Integrat Environ Sci 2010, 1-25.

Kern, S., Fenner, K., Singer, H.P., Schwarzenbach, R.P., Hollender, J., 2009. Identification of transformation products of organic contaminants in natural waters by computer-aided prediction and high-resolution mass spectrometry. Environmental Science and Technology 43, 7039-7046.

Kher, S.V., De Jonge, J., Wentholt, M.T.A., Deliza, R., de Andrade, J.C., Cnossen, H.J., Luijckx, N.B.L., Frewer, L.J., 2013. Consumer perceptions of risks of chemical and microbiological contaminants associated with food chains: a cross-national study. International Journal of Consumer Studies 37, 73-83.

Kinney NL, Schoch RM, Yonavjak L (2007) Environmental science: systems and solutions. Jones & Bartlett learning inc.

Kolkman, A., Bauerlein, P., Vughs, D., Baken, K., Schriks, M. (2014). Groepsgewijze analyse en beoordeling van stoffen. *–in prep.*

Krauss, M., Singer, H., Hollender, J., 2010. LC-high resolution MS in environmental analysis: From target screening to the identification of unknowns. Analytical and Bioanalytical Chemistry 397, 943-951.

Kroes, R., Renwick, A.G., Cheeseman, M., Kleiner, J., Mangelsdorf, I., Piersma, A., Schilter, B., Schlatter, J., van Schothorst, F., Vos, J.G., Würtzen, G., 2004. Structure-based thresholds of toxicological concern (TTC): guidance for application to substances present at low levels in the diet. Food and Chemical Toxicology 42, 65-83.

ter Laak, T.L., Puijker, L.M., van Leerdam, J.A., Raat, K.J., Kolkman, A., de Voogt, P., van Wezel, A.P., 2012. Broad target chemical screening approach used as tool for rapid assessment of groundwater quality. Science of the Total Environment 427-428, 308-313.

ter Laak, T., Kolkman, A., Sjerps, R., Kools, S. (2013). Evaluatie screening RWS 2011-2012. Rapportage screeningsonderzoek van microverontreinigingen in de Nederlandse oppervlaktewateren van Rijkswaterstaat. Rijkswaterstaat rapport A309550.

Loos, R., Carvalho, R., António, D.C., Comero, S., Locoro, G., Tavazzi, S., Paracchini, B., Ghiani, M., Lettieri, T., Blaha, L., Jarosova, B., Voorspoels, S., Servaes, K., Haglund, P., Fick, J., Lindberg, R.H., Schwesig, D., Gawlik, B.M., 2013. EU-wide monitoring survey on emerging polar organic contaminants in wastewater treatment plant effluents. Water Research 47, 6475-6487.

van Leeuwen, C.J., Vermeire, T.G. (2010). Risk Assessment of Chemicals: An Introduction, Springer.

Loos, R., Gawlik, B.M., Locoro, G., Rimaviciute, E., Contini, S., Bidoglio, G., 2009. EU-wide survey of polar organic persistent pollutants in European river waters. Environmental Pollution 157, 561-568.

Loos, R., Locoro, G., Comero, S., Contini, S., Schwesig, D., Werres, F., Balsaa, P., Gans, O., Weiss, S., Blaha, L., Bolchi, M., Gawlik, B.M., 2010. Pan-European survey on the occurrence of selected polar organic persistent pollutants in ground water. Water Research 44, 4115-4126.

Mackay, D., Paterson, S., 1991. Evaluating the multimedia fate of organic chemicals: A level III fugacity model. Environmental Science and Technology 25, 427-436.

Mitchell, J., Pabon, N., Collier, Z.A., Egeghy, P.P., Cohen-Hubal, E., Linkov, I., Vallero, D.A., 2013. A Decision Analytic Approach to Exposure-Based Chemical Prioritization. PLoS ONE 8.

Mons, M.N., Heringa, M.B., van Genderen, J., Puijker, L.M., Brand, W., van Leeuwen, C.J., Stoks, P., van der Hoek, J.P., van der Kooij, D., 2013. Use of the Threshold of Toxicological Concern (TTC) approach for deriving target values for drinking water contaminants. Water Research 47, 1666-1678.

Munro, I.C., Ford, R.A., Kennepohl, E., Sprenger, J.G., 1996. Correlation of structural class with no-observed-effect levels: A proposal for establishing a threshold of concern. Food and Chemical Toxicology 34, 829-867.

OECD (2014). http://www.oecd.org/env/ehs/risk-assessment/theoecdqsartoolbox.htm. Pagina bezocht op 12-02-2014

Patlewicz G, Jeliazkova N, Safford RJ, Worth AP, Aleksiev B. (2008) An evaluation of the implementation of the Cramer classification scheme in the Toxtree software. SAR QSAR Environ Res. ;19(5-6):495-524.

Prevedouros, K., Cousins, I.T., Buck, R.C., Korzeniowski, S.H., 2006. Sources, fate and transport of perfluorocarboxylates. Environmental Science and Technology 40, 32-44.

Puijker L.M., Steen, R.J.C.A., Houtman C.J., Oorthuizen W.A. (2008). Inventarisatie van bedreigingen voor de waterkwaliteit van Duinwaterbedrijf Zuid-Holland; KWR Watercycle Research Institute en Het Waterlaboratorium.

de Ridder, D.J., Villacorte, L., Verliefde, A.R.D., Verberk, J.Q.J.C., Heijman, S.G.J., Amy, G.L., van Dijk, J.C., 2010. Modeling equilibrium adsorption of organic micropollutants onto activated carbon. Water Research 44, 3077-3086.

Schaafsma, G, Kroese, D, Tielemans, E, van de Sandt, H and K. Van Leeuwen. 2009 REACH, non-testing approaches and the urgent need for a change in mind set. Reg Toxicol Pharmacol 53: 70-80.Van de Voorde, A., Lorgeoux, C., Gromaire, M.-C., Chebbo, G., 2012. Analysis of quaternary ammonium compounds in urban stormwater samples. Environmental Pollution 164, 150-157.

Scholte-Veenendaal, P.W., van Alphen, J.C.A., Baars, E.J., VBechger, M., van Duijvenbode, S.W., Idsinga, M., van der Oost, R., Rook, J., Vendrig, K., 2010. Fase I - KRW spagaat Milieuvreemde stoffen in de watercyclus. Waternet, Amsterdam, p. 74.

Schriks, M., Heringa, M.B., van der Kooi, M.M.E., de Voogt, P., van Wezel, A.P., 2010. Toxicological relevance of emerging contaminants for drinking water quality. Water Research 44, 461-476.

Schriks, M., Puijker, L., ter Laak, T.L., Beemster, J., Hofman-Caris, C.H.M., 2012. KRW-spagaat: Aanwezigheid van (organische) microverontreinigingen in en rond de Bethunepolder, Een vervolgonderzoek. KWR Watercycle Research Institute, Nieuwegein, The Netherlands.

Schuur, A.G., Traas, T.P., 2010. Prioritering in processen van de Europese stoffenwetgeving REACH en CLP. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven.

Silva E, Rajapakse N, Kortenkamp A.2002. Something from "nothing" - Eight weak estrogenic chemicals combined at concentrations below NOECs produce significant mixture effects. Environ. Sci. Technol. 36:1751-1756

Sjerps, R.M.A., Brandt, A., Speksnijder, P., Gaag, B.,ter Laak, T. (2013). Signaleren van nieuwe stoffen (2013). KWR Rapport BTO 2013.052. KWR Watercycle Research Institute, Nieuwegein.

Smit, C.E., Wuijts, S., 2012. Specifieke verontreinigende en drinkwater relevante stoffen onder de Kaderrichtlijn water. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, De Bilt.

Smeenk, J.G.M.M. (2000). Ontwikkeling en toepassing van selectiecriteria. Vereniging van Rivierwaterbedrijven – RIWA, Nieuwegein.

Speksnijder, P. (2013). Facsheet Onkruidbestrijdingsmiddel Ultima. KWR rapport BTO 2012.241(s). KWR Watercycle Research Institute, Nieuwegein.

Toxtree (2014) http://toxtree.sourceforge.net pagina bekeken 12-02-2014

UNEP (2012) Global chemicals outlook 2012, towards sound management of chemicals. United Nations Environment Programma

US EPA. (2013). Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.11. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.

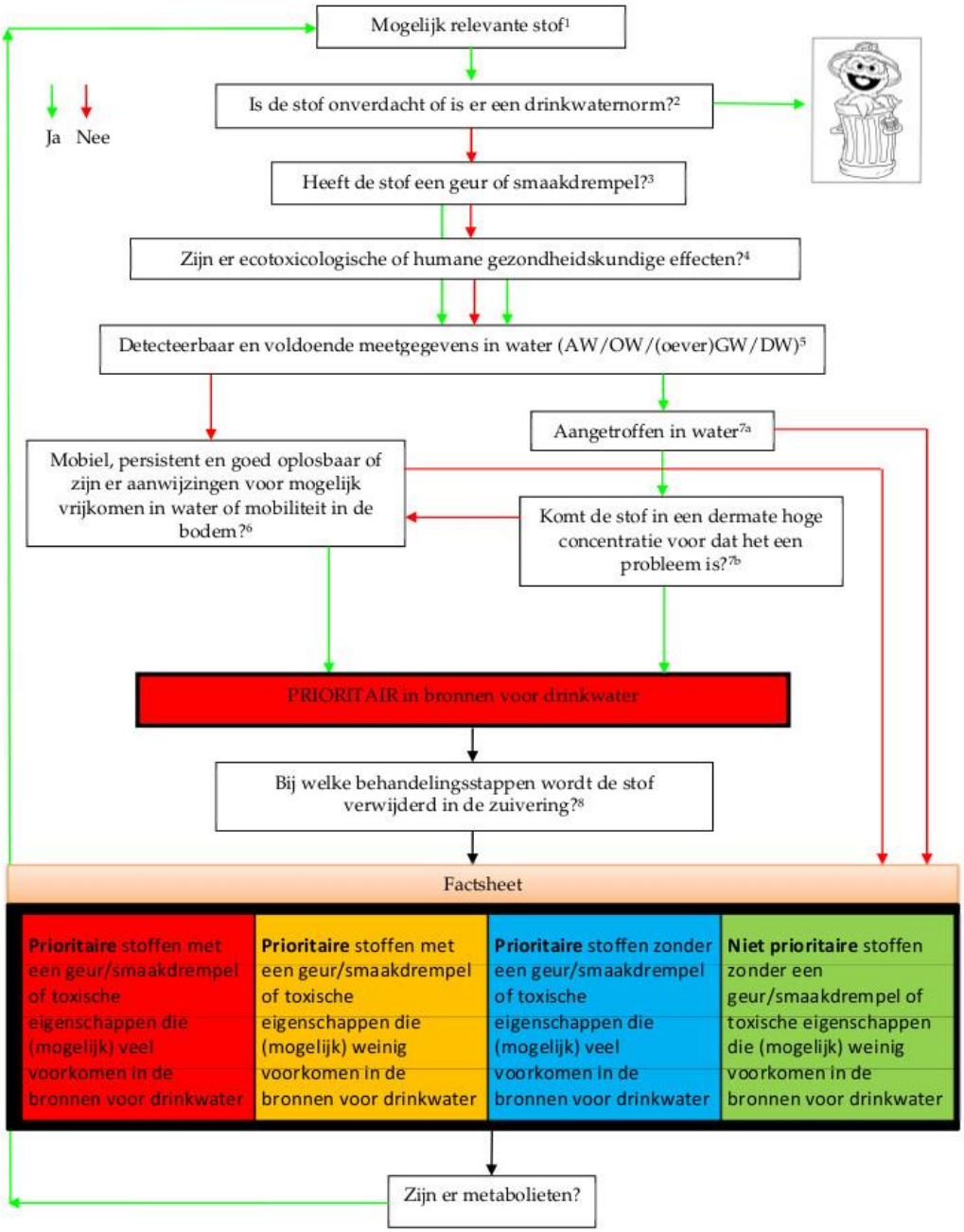
Van Leeuwen, C.J., G.Y. Patlewicz, and A.P. Worth. 2007. Intelligent Testing Strategies In: Risk Assessment of Chemicals. An Introduction (2nd edition). Van Leeuwen, C.J. and T.G. Vermeire, eds. Springer Publishers, Dordrecht, The Netherlands, pp 467-509.

Wambaugh, J.F., Setzer, R.W., Reif, D.M., Gangwal, S., Mitchell-Blackwood, J., Arnot, J.A., Joliet, O., Frame, A., Rabinowitz, J., Knudsen, T.B., Judson, R.S., Egeghy, P., Vallero, D., Cohen Hubal, E.A., 2013. High-throughput models for exposure-based chemical prioritization in the ExpoCast project. Environmental Science and Technology 47, 8479-8488.

Wuijts, S., Versteegh, J.F.M., 2013. Bescherming drinkwaterbronnen in het nationaal beleid. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, De Bilt.

Bijlage I

Oude prioriteringssystematiek: schema en scoreberekening



	Uiteindelijke score: som van het aantal scorepunten van de doorgelopen vakken	**SCORE = SMA + GEZ + MOB + CON + MON + ZUI**
	Extra informatie en rangschikkingsysteem	**Aantal scorepunten**
1.	Input van gegevens van literatuur, productie, imago en monitoring	
2.	Stof niet relevant genoeg om verder te gaan in schema, vanwege samenstelling (zoals beton) of omdat er al genoeg onderzoek naar gedaan is (vanwege de drinkwaternorm). Zie drinkwaternorm in http://wetten.overheid.nl/BWBR0030111/geldigheidsdatum_17-06-2013#BijlageA	-
3.	Stoffen met sterke geur en smaak zijn ongewenst in het drinkwater. De gegevens moeten vastgesteld zijn door een geur- en smaakpanel.	**[SMA]=10**
4.	**Gezondheidskundige effecten** De gezondheidseffecten [GEZ] worden gescoord op GNT (genotoxisch/carcinogeen) of TOX (overige toxiciteit)	**[GEZ] = GNT of TOX**
4a.	De effecten van de stof zijn genotoxisch/carcinogeen. Deze stoffen zijn toxisch zonder veilige grenswaarden. Deze stoffen zijn bekend bij de IARC. Aantal scorepunten genotoxisch/carcinogene stoffen naar de IARC categorieën of met andere specifieke testen (in vivo of *in vitro*). http://monographs.iarc.fr/ENG/Classification/ClassificationsGroupOrder.pdf CMR categorie 1 carcinogeen voor mensen (bewijs op basis van gegevens voor de mens) of op een andere manier aangetoonde toxiciteitseffecten voor de mens CMR categorie 2A waarschijnlijk carcinogeen voor mensen (bewijs op basis van voldoende diergegevens) of andere in vivo testen CMR categorie 2B mogelijk carcinogeen voor mensen (bewijs op basis van beperkte diergegevens) Toxiciteit aangetoond met *in vitro* testen, zoals de Ames test	**GNT** 12 10 8 6
4b.	Overige toxiciteit en andere gezondheidsffecten, zoals hormoonverstorende werking. Deze stoffen hebben een veilige dosis.	**TOX = [H] of [Q]**
	1) De score voor de gezondheidskundige beoordeling wordt op basis van de mate van toxiciteit [E] en aangetoond met het soort test [T]	**H = [T] x [E]**

	De score voor de mate van **chronische toxiciteit [E]** wordt bepaald aan de hand van de provisional guideline value. Wanneer onbekend, kan deze worden berekend aan de hand van de NOAEL (no observed adverse effect level). PGV in de orde grootte ug/L PGV in de orde grootte mg/L PGV in de orde grootte g/L **Wat voor soort test [T]** Mens In vivo (dierproeven) *In vitro* (celniveau) Ecotox 2) Als er geen gegevens bekend zijn, kunnen QSARs worden gebruikt voor een indicatie	**[E]** 3 2 1 [T] 4 3 2 1 **[Q]=0-5**
5.	De stof moet onderzocht zijn in water door de waterbedrijven/KWR/RIWA volgens de volgende criteria: 1. Detecteerbaar: de methode moet goed zijn, geschikt voor de verschillende matrices en de detectielimiet moet lager zijn dan, indien bekend, de gevaarlijke concentratie, anders >TTC. 2. Voldoende meetgegevens: Gemeten op verschillende locaties en in verschillende matrices.	**-**
6.	**Mobiliteit [MOB}: bepaald door oplosbaarheid, de zuurdissociatieconstante (pKa) en indien bekend de bodem-partitie-coëfficiënt**	**MOB=[O]x[A+B]+[X] +[E]**
6a.	De oplosbaarheid [O] is afhankelijk van de pH. De pH bepaald de verhouding van de geprotoneerde/gedeprotoneerde versie van de stof. De pKa is een stofeigenschap voor deze verhouding. Stoffen met een verschillende lading hebben ook een verschillende oplosbaarheid. Neem voor de pH 7 of voor u de meest relevante zuurgraad (bijvoorbeeld van de grondstof). www.chemicalize.org geeft informatie over de verhouding bij bepaalde pH-waarden. Bepaal de log K_{OW} waarde op basis van deze informatie. Oplosbaarheid in orde grootte g/L of log K_{OW} <2 Oplosbaarheid in orde grootte mg/L of log K_{OW} 2-5 Oplosbaarheid in orde grootte ug/L of log K_{OW} >5 Niet oplosbaarheid of log K_{OW} >10 Extra punt als log Koc<2 [B] (indicatie voor sorptie aan bodem)	**[O] + [B]** 3 2 1 0 1
6b.	Afbreekbaarheid [A]: verschil in oxisch of anoxisch milieu meenemen? Gebruik T50 of BIOWIN? T50=>2 maanden T50= 1-4 weken T50=2-7 dagen T50=<2 dagen Onbekend	**[A]** 4 3 2 1 1

	6C) Zijn er aanwijzingen [X] voor vrijkomen, zoals aanhechting aan NOM of nanodeeltjes?	Ja: **[X]=**2
	6D) Is het op basis van emissiegegevens [E] aannemelijk dat de stof in het milieu kan voorkomen?	Ja: [E] = 0-5
7	**Aangetroffen in water door monitoring [MON]**	**MON=[AAN]+[CON]**
7a	**Aantreffen [AAN]** **Locatie [L] van aantreffen bij KWR en waterbedrijven** Drinkwater Grondwater, Oevergrondwater of geïnfiltreerd duinwater, Oppervlaktewater Afvalwater Niet aangetroffen Onbekend **Frequentie [F]: aantal keer aangetroffen/aantal keer gemeten** >50% 5-50% <5% Onbekend **Trend [T]** Toenemend Constant Afnemend Onbekend	**[AAN]=[L]x[F]x[T]** **[L]** 3 2 1 0 2 **[F]** 3 2 1 3 **[T]** 3 2 1 2
7b.	**Probleemstof vanwege concentratie [CON]** Concentratie>norm Concentratie>TTC Concentratie>signaleringswaarde	[**CON]** 3 2 1
8.	**Verwijdering in zuivering** Niet bekend Nee Ja, met klassieke zuivering en oxidatiestap, ionenwisselaar of RO Ja, met klassieke zuivering en actieve kool Ja, met klassieke zuivering (beluchting en filtratie)	**[ZUI]** 3 3 2 1 0

Bijlage II

Opzoekmogelijkheden gegevens

Parameter	Link
HPVC	ECHA, 2013. http://echa.europa.eu/web/guest/information-on-chemicals/registered-substances Uit 2004: http://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-assessment/33883530.pdf
Log K_{ow}, T1/2, verwijdering in waste water treatment	EPISuite: download dit programma van http://www.epa.gov/oppt/sf/tools/methods.htm#m1
Carcinogene stoffen	http://monographs.iarc.fr/ENG/Classification/
Transformatieproducten	Kern *et al.*, 2009

Bijlage III

Scores voor de toetsstoffen

Oude stoffen

	Oude stoffen								
	1,4-dioxaan	DMS	Glyfosaat	AMPA	MTBE	Benzo(a)-pyreen	Aniline	2-amino-acetophenon	3,4,5-tri-chloorfenol
	1	1	0,1	1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,01
MON	100	1000	100	1000	100	100	100	100	100
GDR	100	100	100	10	100	10	100	10	10
ZUI	1	1	1	1	1	0,1	1	1	0,1
SMA	x	x	x	x	1000	x	x	x	x
GEZ	100	1000	1000	1000	1000	100	1000	1000	1000

**1,4-dioxaan, DMS, AMPA en MTBE worden aangetroffen in drinkwater*

Nieuwe stoffen

	Nieuwe stoffen							
	Oxazepam	Benzalkonium chloride	Decabromo-diphenylether	Pentabromo-phenol	PFOS	Nonaan-zuur	Maleïne-hydrazine	Estradiol
	1	0,1	0,01	0,01	1	0,1	0,01	0,01
MON	100	1000	10	10	100	-	1000	10
GDR	10	10	100	10	10	100	10	1
ZUI	1	0,1	0,1	0,1	1	1	1	0,1
SMA	x	x	x	x	x	x	x	x
GEZ	100	1000	100	100	100	1000	1000	100

**Benzalkonium chloride wordt goed verwijderd door de zuivering*

**PFOS wordt aangetroffen in drinkwater (ng/L)*

	1,4-dioxaan	DMS	Glyfosaat	AMPA	MTBE	Benzo(a)pyreen	Aniline	2-amino-acetophenon	3,4,5-tri-chloorfenol	Oxazepam	Benzalkonium chloride	Decabromo-diphenylether	Pentabro-mophenol	PFOS	Nonaan-zuur	Maleïne-hydrazine	Estradiol
	1	1	0,1	1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,01	1	0,1	0,01	0,01	1	0,1	0,01	0,01
gem conc	dl nog niet toereikend	x	Maas 0,05 ug/L	Maas 1 ug/l	Maas: 0,93 ug/L in 2012	Maas 0,01 ug/L	Maas 0,05 ug/L	Maas 0,05 g/L	Maas 0,06 ug/L	11 ng/L VEWIN	0,2 ug/l ow	1-10 ng/L		10-100 ng/L in literatuur (Eschauzier)	x	0,8-2,5 ug/L	1-5 ng/L Rijn
hoogste conc	x	x	Maas 1 ug/L	Maas 3,2 ug/L	Maas: 0,27 ug/L	Maas 0,06 ug/L	Maas 0,11 ug/L	Maas 0,085 ug/L	Maas 0,1 ug/L	1-2 ug/L VEWIN	x			1,3 ug/L	x	2,5 ug/L	
HPVC	1 in 2004: >1000 ton per jaar >100 ton per jaar	0	1 in 2004>1000 ton per jaar	0	1 ja >1 miljoen ton per jaar	0	1 1x10^6 - 10x10 ^6 ton/yr	0	0	0	0	1 ja, >10.000 ton per jaar	0	0	1 1000-10.000 ton/yr	0	0 intermediate
log Kow	-0,27	0,92	-4	-3,52	0,94	6,13	0,9	1,63	4,01	3,34	2,93	5,4	6,3-12,6	4,49	3,42	-0,84	4,01
biowin 3	2,99		3,21	2,98	2,78	1,84	2,88	2,74	2,199	2,49	2,77	-0,33	1,5	0,29	3,51	2,9	2,45
half life water (uur)	**360**	**-**	**360**	**360**	**360**	**1440**	**360**	**900**	**1440**	**900**	**360**	**4320**	**4320**	**4320**	**208**	**360**	**900**
half life soil (uur)	**720**	**-**	**720**	**720**	**720**	**2880**	**720**	**1800**	**2880**	**1800**	**720**	**8640**	**8640**	**8640**	**416**	**720**	**1800**
Toelichting	weeks	**zeer persistent !**	weeks	weeks	weeks	months	weeks	weeks-months	months	weeks-months	weeks	recalcitrant	recalcitrant	recalcitrant	days-weeks	weeks	weeks-months
in dw aangetroffen		1	0	1										1			
% total removal waste water treatment (episuite)	2,12	1,86	1,85	1,85	21,87	92,64	1,99	2,02	30,54	2,54	5,14	94,04	91,98	87,47	11,41	1,85	30,52
carcinogeen	IARC group 2B	not on IARC	not on IARC	not on IARC	not on IARC, smaak-drempel >TTC	IARC group 1	IARC group 3	not on IARC	not on IARC	IARC group 2B, endocrine disrupting		not on IARC	not on IARC	not on IARC, endorine disrupting	not on IARC	not on IARC	endocrine disrupting substance

Bijlage IV

Factsheets van de toetsstoffen

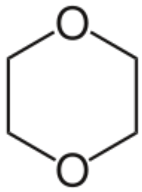
In deze Bijlage wordt meer informatie gegeven over de stoffen die zijn gebruikt voor het toetsen van de prioriteringssystematiek. Voor de stoffen benzo(a)pyreen, aniline, 2-aminoacetonphenon, 3,4,5-trichloorfenol en estradiol verwijzen we u naar de EPA en ander bronnen:

- Benzo(a)pyreen: http://www.epa.gov/ogwdw/pdfs/factsheets/soc/benzopyr.pdf
- Analine: http://www.epa.gov/chemfact/anali-sd.pdf
- 2-aminoacetophenon: http://www.chemicalbook.com/ChemicalProductProperty_EN_CB5383885.htm
- 3,4,5-trichloorfenol: http://www.chemicalbook.com/ProductChemicalPropertiesCB8314004_EN.htm
- Estradiol: http://iaspub.epa.gov/tdb/pages/contaminant/contaminantOverview.do?contaminantId=-1013719332

1,4-dioxaan

1,4-dioxaan is een organische, licht ontvlambare vloeistof die wordt gebruikt in de industrie en consumentenproducten. 1,4-dioxaan is beoordeeld als prioritair door de verwachte concentraties in drinkwater waarbij ongewenste effecten optreden. 1,4-dioxaan is goed oplosbaar (log K_{ow} = -0,27). De verwijdering van 1,4-dioxaan in de zuivering is ineffectief. Ook heeft de stof mogelijk schadelijke effecten: categorie 2B, mogelijk carcinogeen voor mensen (op bewijs op basis van beperkte diergegevens) van de IARC. De factsheet van 1,4-dioxaan is hieronder weergegeven.

1,4-dioxaan



Formule: $C_4H_8O_2$

Moleculaire massa: 88,1

CAS-nummer: 123-91-1

Toepassing: Industrieel oplosmiddel, als uitgangsstof voor de synthese van andere stoffen, als schuimmiddel in de polymeer-industrie en bij de productie van cosmetische stoffen en shampoos.

Productie: 1,4-dioxaan is een HPVC (high production volume compounds) onder REACH.

Meetgegevens: Onvoldoende meetgegevens. Alleen in de VS aangetroffen in grondwater in concentraties van 1 µg/L op een aantal locaties. In Nederlandse oppervlaktewateren alleen onder de rapportagegrens van 10 µg/L op 39 locaties.

Oplosbaarheid (25°C): 213,9 g/L (EPISuite)

log K_{ow}: -0,27

K_{OC}: 1,23

Afbreekbaarheid: Complete biodegradatie is in de orde grootte van weken. De halfwaardetijd in water is 360 uur (EpiSuite).

Effect: Categorie 2B van IARC: mogelijk carcinogeen voor mensen (bewijs op basis van beperkte diergegevens).

Provisional Guideline Value: 3 µg/L

Verwijdering: De verwijdering in RWZI's is zeer laag (2,12%, EPISuite). Beluchting, snelfiltratie en actief kool filtratie zijn ineffectief voor verwijdering van 1,4-dioxaan (KOA 97.068).

Conclusie: 1,4-dioxaan is een carcinogene stof die op basis van stofeigenschappen een grote kans heeft om in drinkwaterbronnen en dirnkwater voor te komen (nog niet genoeg meetgegevens voor Nederland beschikbaar).

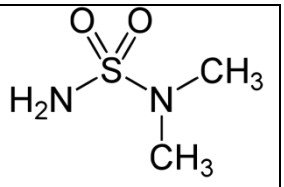
Score: Prioritair

Meer info: http://www.oehha.org/prop65/prop65_list/files/P65single040210.pdf, http://www.epa.gov/chemfact/dioxa-sd.pdf, http://www.epa.gov/tio/download/remed/542r06009.pdf, http://iaspub.epa.gov/tdb/pages/contaminantProcess/contaminantProcessOverview.do, KOA 97.068

Dimethylsulfamide

Dimethylsulfamide is een afbraakproduct van de bestrijdingsmiddelen dichlofluanide en tolyfluanide. Het ontstaat door hydrolyse van deze twee verbindingen via de tussenstoffen DMSA of DMST. DMS is aangetroffen in oppervlakte water van jachthavens, omdat dichlofluanide gebruikt wordt in coatings van boten als anti-aangroeimiddel. DMS staat op de lijst van probleemstoffen die door Vewin worden aangedragen aan het CTGB. DMS is beoordeeld als prioritair, vanwege zijn hoge concentraties in bronnen voor drinkwater en slechte verwijdering in de zuivering. De factsheet van DMS is hieronder weergegeven.

Dimethylsulfamide (DMS)



Formule: $C_2H_8N_2SO_2$

Moleculaire massa: 124.16

CAS-nummer: 3984-14-3

Toepassing: Afbraakproduct (hydrolyse van bestrijdingsmiddelen dichlofluanide en tolyfluanide)

Productie: Dichlorfluanide is niet meer toegelaten in de EU sinds 31 december 2003 en werd vervangen door tolyfluanide. Tolyfluanide wordt sinds 2007 niet meer toegepast (KWR 09.058).

Meetgegevens: DMS komt voor in water in concentraties >0,1 µg/L.(2007-2011). In drinkwater is de maximaal gemeten concentratie van DMS 0,3 µg/L (KWR 09.058).

Oplosbaarheid (25°C): 1,8 g/L (20°C)

log K_{ow}: -1,11

K_{OC}: 10,97

Afbreekbaarheid: DT_{50} (disappearance time voor 50%): 100 dagen (tolyfluanid DT_{50} <1 dag). DMS is zeer persistent.

Effect: Geen toxische effecten bekend. Volgens wikipedia minder toxisch dan dichlofluanide en tolyfluanide.

Verwijdering: DMS wordt aangetroffen in drinkwater en is niet goed verwijderbaar. Beluchting, snelfiltratie en actieve kool filtratie is ineffectief voor de verwijdering van DMS.

Conclusie: DMS is een zeer persistente en goed oplosbare stof die voorkomt in drinkwater**.** Er zijn nog geen effectgegevens bekend.

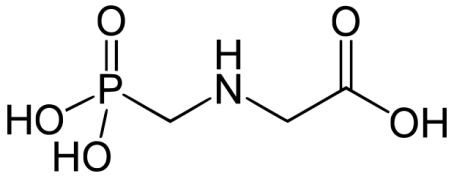
Score: Prioritair

Meer info: http://de.wikipedia.org/wiki/Dimethylsulfamid, KWR 09.058, BTO 09.066.

Glyfosaat en AMPA

Glyfosaat is een bestrijdingsmiddel met AMPA als afbraakproduct. Het herbicide glyfosaat heeft een drinkwaternorm van 0,1 µg/L en AMPA een signaleringswaarde van 1 µg/L vanwege de niet-toxicologische eigenschappen. AMPA is ook een afbraakproduct van andere fosfonaten, gebruikt in koelinstallaties en wasmiddelen. Glyfosaat is in productie sinds de jaren ’70 en wordt in 2018 verboden voor particulier en niet-commercieel gebruik. Glyfosaat is beoordeeld als mogelijk prioritair. AMPA is prioritair vanwege zijn hoge concentraties en slechte verwijdering in de zuivering. Beide stoffen hebben geen carcinogene of hormoonverstorende werking. De stoffen hebben echter wel lage toxiciteit. De factsheets van glyfosaat en AMPA zijn hieronder weergegeven.

Glyfosaat



Formule: $C_3H_8NO_5P$

Moleculaire massa: 169,1

CAS-nummer: 1071-83-6

Toepassing: Glyfosaat is een organische fosforverbinding die als niet-selectief herbicide ruim toegepast wordt. Het middel wordt gebruik in land- en tuinbouw en overheidswege voor het onkruidvrij houden van spoorwegen en autobanen.

Productie: Glyfosaat is in productie sinds de jaren '70 en wordt in 2018 verboden voor particulier en niet-commercieel gebruik.

Meetgegevens: Het jaargemiddelde van glyfosaat in de Maas is 0,05 ug/L. De maximale concentratie kwam net boven de drinkwaternorm van 0,1 ug/L (Voltz, 2010).

Oplosbaarheid (25°C): 12-1000 g/L (EPISuite)

log K_{ow}: -4,00 (EPISuite)

K_{OC}: 1,3

Afbreekbaarheid: Complete biodegradatie van glyfosaat is in de orde grootte van weken. De halfwaardetijd in water is ongeveer 360 uur (EPISuite).

Effect: Glyfosaat heeft een lage acute toxiciteit. Zuiver glyfosaat is irriterend voor de ogen en in mindere mate voor de huid. Glyfosaat is niet carcinogeen.

Drinkwaternorm: 0,1 µg/L

Verwijdering: De verwijdering in RWZI's is zeer laag (1,85%, EPISuite). Volgens onderzoek bij KWR wordt glyfosaat niet goed verwijderd door beluchting, snelfiltratie actieve kool filtratie (KWR 07.055). Echter, glyfosaat wordt weinig aangetroffen in drinkwater.

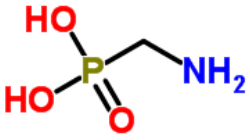
Conclusie: Glyfosaat is een bestrijdingsmiddel die zeer mobiel is in de waterketen met een lage toxiciteit. De stof wordt weinig aangetroffen in drinkwater.

Score: Mogelijk prioritair

Meer info: http://nl.wikipedia.org/wiki/Glyfosaat, http://www.riwa-maas.org/uploads/tx_deriwa/Glyfosaat_en_AMPA_in_het_stroomgebied_van_de_Maas_2010.pdf, http://www.who.int/water_sanitation_health/dwq/chemicals/glyphosateampa290605.pdf, http://www.inchem.org/documents/pds/pds/pest91_e.htm, http://www.roundup.nl/userfiles/WRC-report-UC7374-July-2007-Removal-of-glyphosate-and-AMPA-by-water-treatment.pdf, SWO 95.284, SWI 96.199, KWR 07.055

AMPA

Formule: $C_7H_{10}N_2O_4$



Moleculaire massa: 186,17

CAS-nummer: 001066-51-9

Toepassing: AMPA is het afbraakproduct van glyfosaat. AMPA is tevens het afbraakproduct van andere fosfonaten, gebruikt in koelinstallaties en wasmiddelen.

Productie: AMPA is het omzettingsproduct van glyfosaat dat sinds de jaren ’70 in productie is. Glyfosaat wordtvanaf 2018 verboden voor particulier en niet-commercieel gebruik.

Meetgegevens: Het jaargemiddelde van AMPA komt boven de streefwaarde van 1 ug/L. de hoogste concentratie is ongeveer 3,2 ug/L in de Maas (Voltz, 2010).

Oplosbaarheid (25°C): 21,6 g/L

log K_{ow}: -3,52

K_{OC}: 1,14

Afbreekbaarheid: Complete biodegradatie van AMPA is in de orde grootte van weken. De halfwaardetijd in water is ongeveer 360 uur (EPISuite).

Effect: AMPA heeft een lage toxiciteit, vergelijkbaar met glyfosaat. AMPA is niet carcinogeen.**PGV:** De streefwaarde van AMPA is 1 µg/L.

Verwijdering: De verwijdering in RWZI is zeer laag (1,85%, EPISuite). Beluchting, snelfiltratie en actieve kool filtratie zijn ineffectief voor de verwijdering van AMPA. Coagulatie is wel effectief voor de verwijdering van AMPA.

Conclusie: AMPA is een zeer mobiele en moeilijk afbreekbare stof zonder schadelijke effecten voor de gezondheid. De stof wordt niet goed verwijderd in de zuivering.

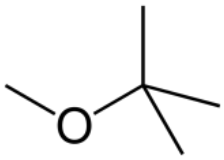
Score: Prioritair

Meer info: http://en.wikipedia.org/wiki/AMPA, http://www.riwa-maas.org/uploads/tx_deriwa/Glyfosaat_en_AMPA_in_het_stroomgebied_van_de_Maas_2010.pdf, http://www.who.int/water_sanitation_health/dwq/chemicals/glyphosateampa290605.pdf, http://www.roundup.nl/userfiles/WRC-report-UC7374-July-2007-Removal-of-glyphosate-and-AMPA-by-water-treatment.pdf, SWO 95.284, SWI 96.199, KWR 07.055

MTBE

MTBE (methyltertiairbutylether) is een vluchtige kleurloze vloeistof met een sterke geur. De stof wordt gebruikt als oplosmiddel bij de toevoeging aan benzine. Sinds eind jaren 80 wordt MTBE in Nederland gebruikt. MTBE wordt als prioritair beoordeeld door zijn hoge concentraties in bronnen voor drinkwater en slechte verwijdering in de zuivering. Ook is de stof ongewenst in drinkwater vanwege zijn lage geurdrempel van 15 µg/L. De factsheet van MTBE is hieronder weergegeven.

MTBE



Formule: $C_5H_{12}O$

Moleculaire massa: 88,15

CAS-nummer: 1634-04-4

Toepassing: Oplosmiddel, toevoeging aan benzine. Komt in grondwater terecht via lekkage opslagtanks benzine en in oppervlaktewater door gemotoriseerde watervoertuigen.

Productie: Wereldwijd 21,4 · 10^6 ton per jaar, in Nederland: 1,17 · 10^6 ton per jaar

Meetgegevens: MTBE is aangetroffen in oppervlaktewater, grondwater en drinkwater. Echter een enkele keer boven de norm van 1 µg/L (factsheet M. Mons). Concentraties lijken af te nemen van 2011 naar 2012 (ter Laak, 2013).

Oplosbaarheid (25°C): 19,8-51 g/L (EPISuite)

log K_{ow}: 0,94 of 1,43

K_{OC}: 1,05

Afbreekbaarheid: Complete biodegradatie is in de orde grootte van weken. De halfwaardetijd in water is 360 uur (EpiSuite). De twee belangrijkste metabolieten die worden gevormd zijn TBA en formaldehyde.

Effect: Geurdrempel op 15 µg/L en smaakdrempel op 39 µg/L. Organoleptische standaard = 20-40 µg/L (USEPA). Nadelige gezondheidseffecten liggen boven de geurdrempel.

Drinkwaternorm: 1 µg/L (signaleringsparameter).

Verwijdering: De verwijdering in RWZI's is laag (21,9%, EPISuite). Snelfiltratie en actieve kool filtratie zijn ineffectief voor de verwijdering van MTBE. Alleen beluchting kan MTBE verwijderen wanneer een hoge lucht/water verhouding aanwezig is in een striptoren (BTO 2007.004).

Conclusie: MTBE is een oplosmiddel toegepast in benzine, ongewenst in drinkwater door de sterke geur die in de waterketen en het drinkwater terecht komt boven de TTC, maar onder de signaleringswaarde.

Score: Prioritair

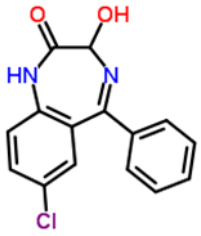
Meer info: http://nl.wikipedia.org/wiki/Methyl-tert-butylether, ter Laak, 2012, factsheet M. Mons, BTO 2007.004, BTO 2005.062.

Benzodiazepines

Benzodiazepines zijn geneesmiddelen en worden toegepast als kalmeringsmiddel en slaap bevorderaar. Deze middelen worden beter verdragen en zijn veel veiliger als de voorheen toegepaste barbituraten. Ter illustratie is een van de benzodiazepines geselecteerd om te beoordelen met de prioriteringssystematiek: oxazepam. Oxazepam wordt als prioritair beoordeeld vanwege zijn voorkomen in bronnen voor drinkwater, slechte verwijdering in de zuivering en hormoonverstorende werking. Oxazepam is ook ingedeeld in categorie 2B van IARC: mogelijk carcinogeen voor mensen (bewijs op basis van beperkte diergegevens). Een studie in Nature wees uit dat de concentraties in oppervlakte water in Zweden leidden tot

een veranderend gedrag en eetpatroon van wilde baarzen (Brodin *et al.*, 2013). De factsheet van oxazepam is hieronder weergegeven.

Oxazepam



Formule: $C_{15}H_{11}ClN_2O_2$

Massa: 286,05

CAS-nummer: 604-75-1

Toepassing: Oxazepam is een kalmeringsmiddel (geneesmiddel)

Productie: Oxazepam staat in de top 10 geneesmiddelen met de meeste voorschriften van SFK. Oxazepam behoort tot de meest voorgeschreven medicijnen. Consumptiegegevens zijn niet bekend.

Meetgegevens: Concentraties gemeten in oppervlaktewater zijn gemiddeld 11 ng/L en maximaal 27 ng/L.

Oplosbaarheid (25°C): 20 mg/L (EPISuite)

log K_{ow}: 3,34

K_{oc}: 3,08

Afbreekbaarheid: Complete biodegradatie is in de orde grootte van weken tot maanden. De halfwaardetijd in water is 900 uur (EPISuite).

Effect: Categorie 2B van IARC: mogelijk carcinogeen voor mensen (bewijs op basis van beperkte diergegevens). Effecten in gedrag en eetpatroon aangetoond bij vissen (Brodin *et al.*, 2013).

Verwijdering: De verwijdering in RWZI's is zeer laag (2,54%, EPISuite). Beluchting en snelfiltratie zijn ineffectief voor de verwijdering van oxazepam.

Conclusie: Oxazepam is geneesmiddel met schadelijke gevolgen die in Nederlandse oppervlaktewateren voorkomt in concentraties van ng/L en waarschijnlijk niet goed wordt verwijderd in de zuivering.

Score: Prioritair

Meer info: http://www.oehha.org/prop65/prop65_list/files/P65single040210.pdf, http://www.epa.gov/chemfact/dioxa-sd.pdf

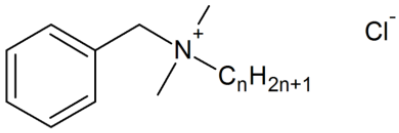
Quaternaire ammoiumverbindingen

Ammonium verbindingen worden vanwege hun ontsmettende anti-bacteriële werking (bijvoorbeeld benzalkonium kationen) toegepast in voedselindustrie en ziekenhuizen als desinfectiemiddelen (van de Voorde *et al.*, 2012). Deze stoffen worden steeds vaker gebruikt. Wel zijn er nog "weinig gegevens beschikbaar over de mate waarin biociden gebruikt worden". Verder adviseert het RIVM deze verbindingen te gaan meten (RIVM Briefrapport 601712007/2010). De stoffen zijn toxisch, concentraties vanaf ongeveer 6 µg/L leiden tot ernstige vergiftingsverschijnselen. Het gebruik van biociden zal onvermijdelijk leiden tot een verhoogd risico dat deze stoffen in de waterketen terechtkomen. Omdat deze verbindingen

geladen organische moleculen zijn, lossen ze in het algemeen goed op. Het is dus te verwachten dat ze, net zoals medicijnen, in bronnen van drinkwater terecht kunnen komen.

Ter illustratie is een quaternaire ammoniumverbinding geselecteerd om te beoordelen met de prioriteringssystematiek. Benzalkonium chloride is een mengsel van chloor en alkylbenzyldimethylammonium, waarvan de alkylgroep 8 tot 18 koolstofatomen heeft. Dit mengsel wordt veel gebruikt als desinfecterend middel en conserveermiddel. Toepassingen zijn: tegen voetschimmel, bestrijding van algen in zwembaden en waterbedden en ook in lage concentraties in oor-, oog- en neusdruppels, shampoos en schoonmaakproducten. Benzalkoniumchloride wordt beoordeeld als mogelijk prioritair vanwege zijn voorkomen in oppervlaktewater boven de TTC-grenswaarde. Benzalkoniumchloride wordt echter wel goed verwijderd bij actief kool filtratie.

Benzalkonium chloride



n = 8, 10, 12, 14, 16, 18

Formule: $C_{9+n}H_{13+(2n+1)}NCl$

Massa: variabel

CAS-nummer: 63449-41-2 (Alkyl: C_8–C_{18}), 8001-54-5 (algemeen), 68391-01-5 (Alkyl: C_{12}–C_{18})

Toepassing: Benzalkonium verbindingen worden gebruikt als desinfectie- en conserveermiddel.

Productie: Benzalkonium chloride wordt breed toegepast als synthetisch antimicrobieel ingrediënt in schoonmaak- en desinfectiemiddelen. **Meetgegevens:** Deze verbindingen zijn aangetoond in effluent van een ziekenhuis (1900 µg/L), afvalwater (0.03 – 2800 µg/L), in oppervlakte water (0.2 µg/L), urbane sedimenten (8900 µg/L) en rwzi-slib (8000 µg/L) (Van de Voorde *et al*., 2012). Er is nog geen meetmethode bij het KWR voor deze stoffen.

Oplosbaarheid: Goed oplosbaar

log K_{ow}: 2,93

K_{OC}: 2,4 – 5.4

Afbreekbaarheid: Complete biodegradatie is in de orde grootte van weken. De halfwaardetijd in water is 360 uur (EPISuite).

Effect: De toxiciteit van deze verbindingen betreft naast bacteriën ook algen, diatomen, crustaceae, ongewervelden en vis. Concentraties vanaf ongeveer 6 µg/L leiden tot ernstige vergiftingsverschijnsels. De effecten op de mens kunnen zijn astma, allergie en irritatie van de ogen.

Provisional Guideline Value: 6 µg/L?

Verwijdering: De verwijdering in RWZI's is zeer laag (5,14%, EPISuite). Beluchting is waarschijnlijk ineffectief voor de verwijdering van bezalkonium chloride. Door zijn positieve lading zijn snelfiltratie en actieve kool filtratie waarschijnlijk wel effectief bij de verwijdering.

Conclusie: Benzalkonium verbindingen zijn ammonium verbindingen die zijn aangetroffen in bronnen van drinkwater boven de TTC-grenswaarde.

Score: Mogelijk prioritair

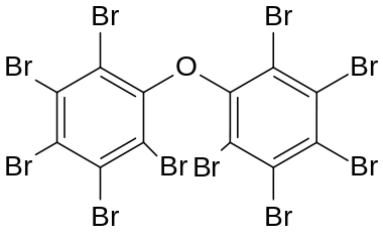
Meer info: http://nl.wikipedia.org/wiki/Benzalkoniumchloride

Gebromeerde brandvertragers

Gebromeerde brandvertragers zijn gebromeerde organische verbindingen die een remmend effect hebben op het vlamvatten van brandbaar materiaal. Ze worden toegepast in de bescherming van elektronica, kleding en meubels. Een aantal van deze stoffen is persistent en zijn giftig voor in water levende organismen. Twee stoffen zijn beoordeeld met behulp van de prioriteringssystematiek: decabromodiphenyl ether & de metaboliet pentabromophenol. De stoffen worden echter beoordeeld als niet prioritair, doordat beide stoffen zeer hydrofoob zijn, waardoor ze in lage concentraties voorkomen in drinkwater en

goed verwijderd worden in de zuivering. De eigenschappen van de stoffen zijn echter wel carcinogeen.

Decabromodiphenylether



Formule: $C_{12}Br_{10}O$

Moleculaire massa: 959,17

CAS-nummer: 1163-19-5

Toepassing: Vlamvertrager in consumentenproducten.

Productie: De jaarlijkse industriële consumptie van DBDE in Europa tussen 1990-2004 was stabiel op ongeveer 8000 ton. In 2006 leken de algemene concentraties van DBDE in het milieu te toe te nemen.

Meetgegevens: DBDE is aangetroffen in concentraties van 1-10 ng/L.

Oplosbaarheid (25°C): 20-30 µg/L (wikipedia), 0,01 µg/L (EPISuite)

log K_{ow}: 12,11 (EPISuite), 6,3-12,6 (EPA)

K_{OC}: 5,4 (EPISuite), 6,3 (EPA)

Afbreekbaarheid: DBDE is zeer persistent. Complete biodegradatie is recalcitrant. De halfwaardetijd in water is 180 dagen (4320 uur) (EPISuite). De stof breekt o.a. af naar pentabromophenol.

Effect: Op basis van dierproeven zijn effecten waargenomen voor de lever, schildklier, reproductiecellen en neurologische effecten. Polybrominated biphenyls zijn geclassificeerd als mogelijk carcinogeen voor mensen (IARC). De EPA beschrijft dat voor decaBDE bewijs is voor van carcinogeen potentieel.

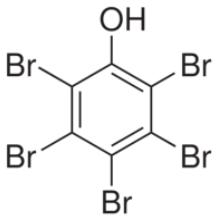
Verwijdering: De verwijdering in RWZI is zeer hoog (94%, EPISuite). Decabromodiphenyl wordt goed verwijderd in de zuivering door de grote mate van sorptie aan actief kool.

Conclusie: DBDE is een slecht oplosbare stof met schadelijke effecten voor de gezondheid. In de zuivering zal DBDE worden verwijderd.

Score: Niet prioritair

Meer info: http://en.wikipedia.org/wiki/Decabromodiphenyl_ether,
http://www.epa.gov/iris/toxreviews/0035tr.pdf,
http://www.epa.gov/fedfac/pdf/technical_fact_sheet_pbde_pbb.pdf
http://www.atsdr.cdc.gov/toxprofiles/tp.asp?id=529&tid=94

Pentabromophenol



Formule: C_6HBr_5O

Moleculaire massa: 488,59

CAS-nummer: 608-71-9

Toepassing: Pentabromophenol is het afbraakprodut van decabromodiphenyl en wordt gebruikt als valmvertreger.

Productie:

Meetgegevens:

Oplosbaarheid (25°C): 0,02 mg/L

log K_{ow}: 5,96

K_{OC}: 3,5

Afbreekbaarheid: Complete biodegradatie is in de orde grootte van weken tot maanden. De halfwaardetijd in water is 180 dagen.

Effect: De stof is toxisch bij inname. De stof kan zich gedragen als agonist voor de thyroid-stimulerende hormoon receptor en is dus hormoonverstorend.

Verwijdering: De verwijdering in RWZI's is zeer hoog (92%, EPISuite). Deze stof wordt goed verwijderd in de zuivering door de grote mate van sorptie aan actief kool.

Conclusie: Pentabromophenol is een slecht oplosbare stof met schadelijke effecten voor de gezondheid. In de zuivering zal de stof worden verwijderd.

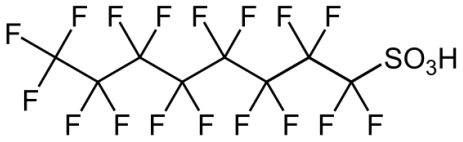
Score: Niet prioritair

Meer info: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=11852#x332

PFOS

PFOS is een antropogene stof, die zeer persistent en mobiel is in het milieu. PFOS is aangetroffen in drinkwater en samen met zijn hormoonverstorende eigenschappen wordt deze stof beoordeeld als prioritair.

PFOS (perfluoroctanesulfonate)



Formule: $C_8HF_{17}O_3S$

Moleculaire massa: 500,13

CAS-nummer: 1763-23-1

Toepassing: PFOS is een antropogene stof, en wordt toegepast op vele manier. Voornamelijk wordt PFOS gebruik voor de bescherming van materialen, zoals kleding, tapijt en kookmaterialen. Ook wordt de stof toegepast in brandblussers.

Productie: De geschatte emissie naar het milieu is in totaal 3200-7300 ton (Prevedouros *et al.*, 2006).

Meetgegevens: PFOS wordt aantroffen in oppervlakte- en grondwater in concentraties van ng/L. De stof wordt ook aangetroffen in drinkwater (Eschauzier *et al.*, 2012)

Oplosbaarheid (25°C): Voor het natriumzout van PFOS (PFOS komt altijd in geladen toestand voor) is de oplosbaarheid 550 mg/L in puur water en 370 mg/L in zoet water. De oplosbaarheid is afhankelijk van het zoutgehalte (OECD).

log K_{ow}: 4,49

K_{oc}: 3,4-4,9

Afbreekbaarheid: PFOS is zeer persistent door de sterke CF verbinding. PFOS heeft geen bekende metabolieten. Complete biodegradatie is recalcitrant. de halfwaardetijd in water is $4{,}32*10^3$ uur (EPISuite).

Effect: PFOS is geclassificeerd als toxisch door de EU en als gevaarlijk voor het milieu. Ook zijn er aanwijzingen dat de stof hormoon verstorende eigenschappen heeft (Du *et al.*, 2013).

Drinkwaternorm: 1 µg/L (signaleringsparameter).

Verwijdering: De verwijdering in RWZI's is laag (21,9%, EPISuite). PFOS wordt aangetroffen in drinkwater en wordt waarschijnlijk niet goed verwijderd met een klassieke zuivering (Eschauzier *et al.*, 2012). Actieve kool filtratie is wel effectief voor de verwijdering van PFOS.

Conclusie: PFOS is een zeer persistente en goed oplosbare stof die voorkomt in drinkwater met schadelijke effecten voor de gezondheid.

Score: Prioritair

Meer info: http://en.wikipedia.org/wiki/Perfluorooctanesulfonic_acid, http://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-assessment/2382880.pdf, http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/23074026

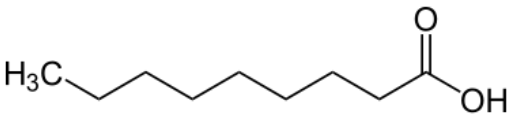
Ultima

Ultima is een herbicide die recent op de markt is gebracht. Het onkruidbestrijdingsmiddel is speciaal bedoeld voor toepassing op verharde oppervlakten. De werking is niet selectief en is geschikt voor bestrijding va onkruiden, mossen en algen. Het middel bestaat uit een basis van vetzuren, daardoor zijn relatief grote hoeveelheden nodig ter bestrijding van het onkruid.

Ultima bestaat uit nonaanzuur (97%, verzadigd vetzuur) en maleïnehydrazide (3%, kiemremmer). Nonaanzuur wordt beoordeeld als mogelijk prioritair en maleïnehadraziene als niet prioritair. Beide stoffen zijn waarschijnlijk aanwezig in lage concentraties in water en zijn niet schadelijk bij deze concentraties. Nonaanzuur iets hoger gescoord door zijn hoge productievolume. Recent is er een factsheet opgesteld van Ultima door Speksnijder (2013).

Ultima (nonaanzuur + maleinehydrazine)

1. Nonaanzuur



Formule: $C_9H_{18}O_2$

Moleculaire massa: 158,24

CAS-nummer: 112-05-0

Toepassing: Ultima is een onkruidbestrijdingsmiddel waarin nonaanzuur (een carbonzuur) is verwerkt. Het middel wordt toegepast op verharde oppervlakten. Daarnaast wordt nonaanzuur gebruikt bij de productie van smeermiddelen, alkydharsen en weekmakers. Nonaanzuur komt ook natuurlijk voor.

Productie: De verwachting is dat de productie van Ultima in Nederland voor de toekomst zeker zal toenmen tot meer dan 100 ton per jaar. Nonaanzuur wordt in Europa geproduceerd tussen de 1000 en 10.000 ton per jaar en is een HPVC.

Meetgegevens: geen

Oplosbaarheid (25°C): 0,3 µg/L (IFA), 64 mg/L (EPISuite)

log K_{ow}: 3,42 (IFA), 3,94 (EPISuite)

K_{OC}: 1,9

Afbreekbaarheid: Complete biodegradatie van nonaanzuur is in de orde grootte van weken. De halfwaardetijd in water is ongeveer 208 uur (9 dagen) (EPISuite).

Effect: Nonaanzuur geeft acute effecten door irritatie van de ogen en de luchtwegen en de huid, maar is niet toxisch.

Verwijdering: De verwijdering in RWZI's is laag (27,7%, EPISuite). Beluchting en snelfiltratie ineffectief voor de verwijdering van nonaanzuur. Mogelijk dat er door sorptie wat verwijdering optreedt door actieve kool filtratie.

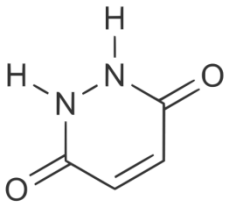
Conclusie: Nonaanzuur is een vetzuur dat redelijk mobiel is in de waterketen. De stof heeft geen schadelijke effecten voor de gezondheid bij lage concentraties.

Score: Mogelijk prioritair

Meer info: http://nl.wikipedia.org/wiki/Nonaanzuur, http://gestis-en.itrust.de/nxt/gateway.dll/gestis_en/038470.xml?f=templates$fn=default.htm$3.0,

http://media.affymetrix.com/support/technical/usb/msds/19970A.pdf,
www.pesticideinfo.org/references/112-05-0hsdb.doc

2. Maleïnehydrazine



Formule: $C_4H_4N_2O_2$

Moleculaire massa: 112,09

CAS-nummer: 123-33-1

Toepassing: Ultima is een onkruidbestrijdingsmiddel waarin maleïnehydrazine (een carbonzuur) is verwerkt. Maleïnehydrazide is een groeiregelaar die wordt ingezet om scheutvorming bij gerooide aardappelen en tabaksplanten te voorkomen. Het wordt ook gebruikt om de groei te vertragen van gras, dat niet voor dieren bestemd is. Maleïnehydrazine is opgenomen in de lijst van bestrijdingsmiddelen die toegalaten kunnen worden.

Productie: De verwachting is dat de productie van Ultima in Nederland voor de toekomst zeker zal toenmen tot meer dan 100 ton per jaar.

Meetgegevens: Maleïnehydrazine is in Zeelandse oppervlaktewateren aantroffen in concentraties van 0,8-2,5 µg/L.

Oplosbaarheid (25°C): 4,5 g/L

log K_{ow}: -0,84

K_{OC}: 1,02

Afbreekbaarheid: Complete biodegradatie van maleïnehydrazine is in de orde grootte van weken. De halfwaardetijd in water is ongeveer 360 uur (15 dagen) (EPISuite).

Effect: Maleïnehydrazine is geen acuut toxische stof. Effecten zijn alleen irritatie van de ogen en de huid.

PGV: De ADI is 0,25 mg/kg lichaamsgewicht, dit komt neer op ongeveer 87,5 mg/L via drinkwater (bij 10% inname via drinkwater, 2L per dag).

Verwijdering: De erwijdering in RWZI's is zer laag (1,85%, EPISuite). Maleïnehydrazine is zeer mobiel en wordt niet goed verwijderd in de zuivering. Beluchting en snelfiltratie ineffectief voor de verwijdering van maleïnehydrazine.

Conclusie: Maleïnehydrazine is een zeer mobiele stof zonder schadelijke effecten voor de gezondheid. De stof wordt waarschijnlijk niet verwijderd in de zuivering. Mogelijk dat er door sorptie wat verwijdering optreedt door actieve kool filtratie.

Score: Niet prioriritair

Meer info: http://nl.wikipedia.org/wiki/Male%C3%AFnehydrazide,
http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1365-3180.1975.tb01110.x/abstract