

## Factsheet – Consumentenproducten

# Geurstoffen

Dit Factsheet is onderdeel van een onderdeel van een serie factsheets over consumentenproducten. Alle factsheets zijn beschikbaar op [www.kiwk.nl](http://www.kiwk.nl)

### INHOUDSOPGAVE

BEKNOPTE SAMENVATTING .....	2
1. INLEIDING .....	2
2. WETTELIJKE KADERS .....	6
3. EIGENSCHAPPEN & ANALYSEMETHODEN .....	6
4. CONCENTRATIES IN HET MILIEU & RISICOGRENZEN .....	7
5. RISICO'S EN KANSEN .....	9
6. BRONNEN & LINKS .....	10
7. COLOFON .....	11
BIJLAGE I: Informatie over wettelijke kaders .....	13
BIJLAGE II: Informatie over stofeigenschappen en analysemethoden .....	15
BIJLAGE III: Concentraties in het milieu .....	17
BIJLAGE IV: Risicogrenzen voor ecotoxicologie, visconsumptie en drinkwater .....	18

## BEKNOPTE SAMENVATTING

- Linalool en limoneen zijn twee veelgebruikte geurstoffen in consumentenproducten.
- Linalool lost goed op in water. Limoneen is echter slecht oplosbaar. Ze zijn niet met eenvoudige middelen uit het water te zuiveren, maar zijn beiden goed biologisch afbreekbaar en blijken goed te verwijderen door middel van het gebruik van biofilters en geactiveerd slib.
- Er zijn geen officiële waterkwaliteitsnormen voor linalool vastgesteld. In deze factsheet is voor deze geurstof een ecotoxicologische risicogrens voor oppervlaktewater afgeleid van 20 µg/L.
- Er zijn twee officiële waterkwaliteitsnormen voor limoneen in oppervlaktewater (0,14 µg/L voor het R-isomeer en 0,18 µg/L voor limoneenmengsels).
- Het gezondheidkundig risico bij inname is laag, de stoffen zijn toegelaten voor gebruik in levensmiddelen.
- De voorspelde concentraties in oppervlaktewater als gevolg van het gebruik in consumentenproducten liggen in de ordegrootte van enkele nanogrammen per liter. Dit is vele malen lager dan de risicogrenzen voor ecologie en gezondheid van mensen.
- De berekende concentraties zijn gebaseerd op generieke schattingen en zijn onzeker. Er zijn weinig meetgegevens om de berekende concentraties te valideren.

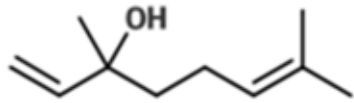
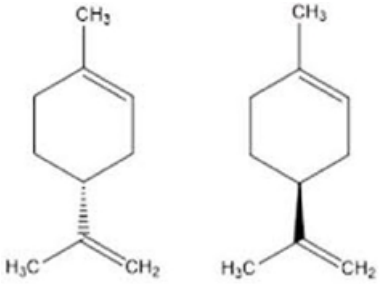
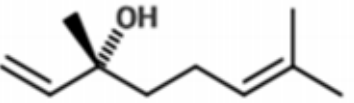
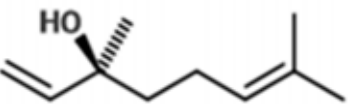
## 1. INLEIDING

Geurstoffen worden gebruikt om producten een voor consumenten aantrekkelijke geur te geven. Hierbij kun je denken aan shampoo, wasmiddel en wasverzachter. De algemene Engelse term is 'fragrance', en in het Nederlands staat vaak ook 'parfum' op het etiket. De meeste geurstoffen zijn organische verbindingen, wat betekent dat de verbinding koolstof bevat. Er zijn natuurlijke geurstoffen die uit planten of dieren worden gewonnen (bijvoorbeeld lavendel- of citroenolie), en synthetische geurstoffen die via chemische processen worden gemaakt. Geurstoffen zijn vluchtig, omdat ze anders niet te ruiken zijn en de meeste geurstoffen zullen zich tot op zekere hoogte

hechten aan haar, huid of kleding om die een tijdje lekker te laten ruiken. Een deel van de geurstoffen zal echter via het riool in de waterketen terechtkomen. Om het gedrag en de mogelijke risico's van geurstoffen in de waterketen te verkennen, zijn in de Ketenvraker twee representatieve en veelgebruikte stoffen gekozen; linalool en limoneen. Beide geurstoffen zijn organische verbindingen. Linalool en limoneen komen van nature voor in planten en kunnen worden gewonnen uit plantenextracten of door destillatie van essentiële oliën. De stoffen kunnen ook worden gemaakt door pineen of turpentine uit coniferen en naaldbomen chemisch te bewerken. Andere opties zijn volledige chemische synthese of biotechnologische productie door micro-organismen (OECD, 2002; Jongedijk et al., 2016). In onderstaande tabellen staat informatie over de identiteit van beide stoffen.

Tabel 1. Relevante informatie over de identiteiten van de twee geurstoffen linalool en limoneen.

Stofnaam	Linalool	Limoneen
<b>IUPAC-naam</b>	3,7-dimethyl-1,6-octadien-3-ol; (3S)-3,7-dimethylocta-1,6-dien-3-ol (3R)-3,7-dimethylocta-1,6-dien-3-ol	1-methyl-4-prop-1-en-2-ylcyclohexene (R)-p-mentha-1,8-diene (S)-p-mentha-1,8-diene
<b>Synoniemen</b>	Linalool is een mengsel van twee stereoisomeren (stoffen die dezelfde samenstelling hebben maar elkaars spiegelbeeld zijn). R-isomeer: R-linalool, licareol, l-linalool, S-isomeer: S-linalool, coriandrol, d-linalool. In dit document gebruiken we de algemene naam linalool, waarvan toepassing verwijzen we naar de afzonderlijke isomeren.	Limoneen of dipenteen is een mengsel van twee stereoisomeren R-isomeer: (+)-limoneen, dextro-limoneen, D-limoneen S-isomeer: (-)-limoneen, laevo-limoneen, L-limoneen. In dit document gebruiken we de algemene naam limoneen, waarvan toepassing verwijzen we naar de afzonderlijke isomeren.
<b>CAS-nummer</b>	linalool: 78-70-6 R-linalool: 126-91-0 S-linalool: 126-90-9 Het CAS nummer van linalool verwijst naar een stof die tussen 10 en 80% R- en S- bevat	limoneen: 138-86-3 R-limoneen: 5989-27-5 S-limoneen: 5989-54-8
<b>Molecuulformule</b>	$C_{37}H_{36}N_2O_9S_3 \cdot 2Na$	$C_{10}H_{16}$
<b>Molaire massa</b>	792,9 g/mol	136,23

<p><b>Structuurformule</b></p>	<p>linalool:</p> 	
	<p>R-linalool:</p> 	
	<p>S-linalool:</p> 	

## 2. WETTELIJKE KADERS

Linalool, R-linalool, R-limoneen en S-limoneen zijn geregistreerd volgens de Europese chemicaliënverordening REACH. Limoneen en S-linalool hebben geen aparte registratie. Linalool en limoneen zijn opgenomen in de Cosmeticaverordening en hebben een geharmoniseerde classificatie volgens de CLP-verordening (classification, labelling and packaging). Hieruit volgt welke pictogrammen, gevaarsaanduidingen en voorzorgsmaatregelen op het etiket moeten staan. Beide stoffen zijn toegelaten als geurstof in diverse voedingsmiddelen en diervoeder. Een overzicht van relevante informatie over de registratie, toelating en wettelijke kaders voor de twee geurstoffen is te vinden in Bijlage I.

## 3. EIGENSCHAPPEN & ANALYSEMETHODEN

### *3.1 Fysisch-chemische eigenschappen*

Linalool is zeer goed oplosbaar in water; de oplosbaarheid wordt geschat op ongeveer een gram per liter. Limoneen lost veel minder goed op in water; de oplosbaarheid van deze stof wordt geschat op enkele milligrammen per liter. De octanol-water partitievoëfficiënt ( $\log K_{ow}$ ) en de sorptievoëfficiënt ( $\log K_{oc}$ ) geven aan dat linalool een matig vetminnend karakter heeft en mobiel is in de waterketen. Limoneen zal meer ophopen in vet en beter binden aan slib of sediment, maar is nog steeds relatief mobiel. Linalool en limoneen zullen uit water vervluchtigen naar de lucht. Dat is voor de toepassing als geurstof noodzakelijk om via de lucht geroken te kunnen worden. Een overzicht van relevante fysisch-chemische eigenschappen van de drie stoffen is te vinden in Bijlage II.

### *3.2 Gedrag in de waterketen*

De voornaamste emissieroute van linalool en limoneen uit consumentenproducten naar oppervlaktewater is via de rioolwaterzuiveringsinstallaties (RWZI's). Zoals eerder aangegeven is linalool mobiel in de waterketen, wat betekent dat deze stof zich makkelijk verspreiden in het water. Op basis van de hoge mobiliteit is te verwachten dat deze stof beperkt verwijderd wordt door zuiveringsprocessen als bezinking, flocculatie en sorptie, omdat de stof niet makkelijk bindt aan slib, bodem en sediment. Limoneen is echter veel minder mobiel en zal dan ook eenvoudiger aan slib binden dan

linalool. Beide isomeren van limoneen en linalool worden als gemakkelijk biologisch afbreekbaar beoordeeld (ECHA, 2021a, b, c, d). Een deel van de stoffen zal dus al afgebroken worden voordat deze de waterzuiveringsinstallaties bereiken. Daarnaast kunnen de stoffen in de RWZI's verder afgebroken worden met behulp van technieken waarbij micro-organismen worden ingezet, zoals biofilters en geactiveerd slib. Meerdere studies laten zien dat op deze manier meer dan 90% van de linalool- en limoneenconcentraties uit het afvalwater verwijderd kunnen worden (Godayol et al., 2015; Schaider et al. 2017).

### *3.3 Analysemethoden*

Linalool en limoneen zijn eenvoudig te detecteren in oppervlaktewater door middel van gaschromatografie. Concentraties in het oppervlaktewater kunnen tot op enkele honderden nanogrammen worden bepaald. Dit maakt dat de concentraties van linalool en limoneen in water betrouwbaar bepaald kunnen worden op het niveau van de risicogrenzen (zie onder). Meer informatie over specifieke analysemethoden om deze stoffen te detecteren in water staat in Bijlage II.

## 4. CONCENTRATIES IN HET MILIEU & RISICOGRENZEN

### *4.1 Concentraties in het milieu*

Gegevens van gemeten concentraties in het water zijn verzameld in databases. Daarin is alleen een beperkt aantal (oude) gegevens van limoneen aanwezig. Een negental metingen in effluent van RWZI's leveren concentraties op die variëren tussen 0,5 en 1 µg/L. In één influentmonster is 1,4 µg/L gemeten en er is nog één eenmalige meting in oppervlaktewater van 10 µg/L.

De concentraties in het oppervlaktewater zijn ook geschat met behulp van gegevens over het aantal producten waarin een stof zit, het gehalte van de stof in een product en gegevens over het gebruik. Bij berekening van de *Predicted Environmental Concentration* (PEC) is aangenomen dat afspoeling van consumentenproducten onder de douche, in bad of onder de kraan de enige emissiebron is. Er is dus geen rekening gehouden met de emissie van geurstoffen uit andere producten of via andere routes. Voor een toelichting op de gebruikte methodiek kan het document "Verantwoording

stofselectie en risicobeoordeling” worden geraadpleegd. De gebruikte gegevens en de uitkomsten van de PEC-berekening staan in Bijlage III. De berekende PEC’s zijn 6 ng/L voor linalool, 0,52 ng/L voor limoneen en 3,2 ng/L voor benzylsalicylaat. Daarmee ligt de berekende waarde voor limoneen een factor 1000 lager is dan de gemeten concentraties voor deze stof (zie Bijlage III).

Van de producten waarvan gegevens bekend zijn, leveren conditioner, shampoo, scheerschuim en hand- en bodylotion de belangrijkste bijdrage aan linalool-, limoneenconcentraties in het oppervlaktewater.

#### 4.2 Risicogrenzen

Voor het beoordelen van de risico’s voor de waterketen kijken we naar de ecologische functie van oppervlaktewater (water als leefomgeving voor het waterecosysteem) en naar water als bron van voedsel (visconsumptie) en drinkwater. Voor linalool is geen bestaande waterkwaliteitsnorm bekend, voor limoneen geldt een beleidsmatige vastgestelde norm gebaseerd op voor ecotoxicologische risico’s (inclusief doorvergiftiging van vogels en zoogdieren). Voor aspecten waarvoor geen normen bekend zijn, zijn de risicogrenzen geschat op basis van ecotoxiciteitsgegevens en informatie over gezondheidskundige effecten. Voor meer uitleg over het afleiden van deze risicogrenzen, zie het document “Verantwoording stofselectie en risicobeoordeling”. De risicogrenzen voor de twee stoffen voor de drie aspecten (ecotoxicologie, visconsumptie en drinkwater) zijn samengevat in Tabel 2 en worden in de Bijlage IV verder toegelicht. Voor beide stoffen zijn de ecotoxicologische risicogrenzen lager dan die voor visconsumptie en drinkwater.

Tabel 2. Risicogrenzen voor de twee geurstoffen linalool en limoneen.

Risicogrens [ $\mu\text{g/L}$ ]	Linalool	Limoneen
Ecotoxicologie	20	0,14/0,18 <sup>a</sup>
Visconsumptie	niet relevant	34
Drinkwater	3500	700

a: beleidsmatig vastgesteld indicatief Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau (i-MTR) voor de R-isomeer/racemisch mengsel, afgeleid met een extra veiligheidsfactor voor doorvergiftiging.



## 5. RISICO'S EN KANSEN

### 5.1 Kennisleemtes

Er zijn zeer weinig tot geen gegevens beschikbaar over de gemeten concentraties van de geurstoffen in oppervlaktewater. Bovendien zitten er onzekerheden in de berekende concentraties. De geurstoffen komen in 14 typen producten voor, waaronder haarverf waarvan geen gebruikscijfers beschikbaar zijn. Er zijn echter veel typen producten waarvoor het gehalte van de stoffen in het product niet bekend zijn. In de PEC wordt daardoor slechts een beperkt deel van de producten meegenomen in de berekening. De PEC onderschat hierdoor de belasting van het oppervlaktewater.

De hier gepresenteerde risicogrenzen zijn afgeleid op basis van een beperkte screening van openbare databases. Voor de risicogrenzen voor visconsumptie en drinkwater is het van belang te vermelden dat deze niet zijn getoetst door experts op het gebied van gezondheidkundige risico's.

Het i-MTR voor limoneen is afgeleid op basis van een andere methodiek dan tegenwoordig wordt gebruikt en er zijn recentere gegevens. Bij het afleiden van waterkwaliteitsnormen worden tegenwoordig de routes directe ecotoxiciteit en voedselketeneffecten doorgerekend en de laagste waarde bepaalt de norm (zie document "Verantwoording stofselectie en risicobeoordeling"). Met een update van de waterkwaliteitsnorm kan het risico beter worden ingeschat. De vluchtigheid van geurstoffen stelt producenten ook voor uitdagingen. Soms is het wenselijk dat deze geurstoffen lang hun geur blijven afgeven, bijvoorbeeld zodat de was ook na langere perioden "fris" blijft ruiken. Daarom worden tegenwoordig wel 'fragrance encapsulates' gebruikt, waarbij geurstoffen worden ingekapseld in heel kleine polymeren of olieachtige bolletjes, waaruit ze gedoseerd vervluchtigen over een langere periode. Er is nog weinig onderzoek gedaan naar hoe een dergelijke toepassing de emissie en verspreiding in de waterketen kan beïnvloeden. Een recente studie laat zien dat de micro-capsules wel kunnen worden opgenomen door organismen (Keuhr et al., 2021)

### 5.2 Risico's en kansen met betrekking tot de waterketen

Linalool en limoneen zijn beiden eenvoudig te verwijderen door reguliere rioolwaterzuiveringstechnieken (door middel van geactiveerd slib en biofilters), doordat ze goed biologisch afbreekbaar zijn. De voorspelde (en gemeten) concentraties in het oppervlaktewater zijn relatief laag en er lijkt er geen sprake van een gezondheidkundig risico door het gebruik van deze stoffen in consumentenproducten. Mogelijkerwijs kunnen er wel ecologische risico's ontstaan bij hoge concentraties geurstoffen. Een beperkte screening in effluenten of in de buurt van een rioolwaterzuivering kan een beter beeld geven van de werkelijke concentraties in Nederlands oppervlaktewater.

### 5.3 Handelingsperspectieven

Voor de geurstoffen gepresenteerd in deze factsheet lijkt geen directe noodzaak om maatregelen te nemen om emissies te reduceren, wanneer er gekeken wordt naar potentiële gezondheidkundige risico's voor de mens bij inname van deze stoffen via drinkwater. Het is wel wenselijk om beter inzicht te krijgen in de omvang van de emissies en de bijdrage van consumentenproducten (en andere bronnen).

## 6. BRONNEN & LINKS

- Aprotosoiaie, A. C., Hăncianu, M., Costache, I. I., & Miron, A. (2014). Linalool: a review on a key odorant molecule with valuable biological properties. *Flavour and fragrance journal*, 29(4), 193-219. <https://doi.org/10.1002/ffj.3197>
- Bicchi, C., Liberto, E., Matteodo, M., Sgorbini, B., Mondello, L., Zellner, B. d. A., Rubiolo, P. (2008). Quantitative analysis of essential oils: a complex task. *Flavour and fragrance journal*, 23(6), 382-391. <https://doi.org/10.1002/ffj.1905>
- De Poorter LRM, Van Herwijnen R, Janssen PJCM, Smit CE. 2015. Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen. Bilthoven, Nederland: RIVM. [Rapport nr. 2015-0057](#).
- ECHA. 2021a. Registratiedossier Linalool. Beschikbaar via <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/14501>.
- ECHA. 2021b. Registratiedossier (R)-3,7-dimethyl-1,6-octadien-3-ol. <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/27524>.
- ECHA. 2021c. Registratiedossier (R)-p-mentha-1,8-diene. Beschikbaar via <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/15256>.
- ECHA. 2021d. Registratiedossier (S)-p-mentha-1,8-diene. Beschikbaar via <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/10807>.

- ECHA. (2021). Wat houdt CLP in? Beschikbaar via <https://echa.europa.eu/nl/regulations/clp/understanding-clp>
- Godayol, A., Besalú, E., Anticó, E., & Sanchez, J. M. (2015). Monitoring of sixteen fragrance allergens and two polycyclic musks in wastewater treatment plants by solid phase microextraction coupled to gas chromatography. *Chemosphere*, 119, 363-370. DOI: [10.1016/j.chemosphere.2014.06.072](https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2014.06.072)
- Hansler RJ, Fleuren RHLJ, Heugens EHW, Janssen PJCM, Posthumus R, Smit CE. 2007. Indicatieve milieukwaliteitsnormen 2005-2006 Overzicht van in 2005 en 2006 door het RIVM afgeleide indicatieve milieukwaliteitsnormen voor stoffen. Bilthoven, Nederland: RIVM. Rapport 601570001/2007. Beschikbaar via <https://www.rivm.nl/bibliotheek/rapporten/601570001.pdf>.
- Kuehr S, Windisch H, Schlechtriem C, Leon G, Gasparini G, Gimeno. S. 2021. Are fragrance encapsulates taken up by aquatic and terrestrial invertebrate species? <https://setac.onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/10.1002/etc.5202>
- Neumann, M. and I. Schliebner (2019). Protecting the sources of our drinking water: The criteria for identifying persistent, mobile and toxic (PMT) substances and very persistent and very mobile (vPvM) substances under EU Regulation [REACH \(EC\) No 1907/2006](#).
- Schaidler, L. A., Rodgers, K. M., & Rudel, R. A. (2017). Review of organic wastewater compound concentrations and removal in onsite wastewater treatment systems. [Environmental science & technology](#), 51(13), 7304-7317.
- US EPA. 2000-2012. [Epi Suite version 4.11](#). US Environmental Protection Agency.
- US EPA. 2021. The ECOTOXicology knowledgebase (ECOTOX). Version 5. US Environmental Protection Agency. Beschikbaar via <http://cfpub.epa.gov/ecotox/>.
- OECD. 2002. Linalool. SIDS Initial Assessment Report For SIAM 14 26–28 March 2002, Paris, France. Beschikbaar via <https://hpcchemicals.oecd.org/UI/handler.axd?id=906fb255-e07e-4aeb-8023-c4955c362eff>.
- Wilkinson, J., Hooda, P. S., Barker, J., Barton, S., & Swinden, J. (2017). Occurrence, fate and transformation of emerging contaminants in water: An overarching review of the field. *Environmental pollution*, 231, 954-970. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2017.08.032>
- WHO. 1998. Concise International Chemical Assessment Document 5. LIMONENE. Geneve, Zwitserland: Wereld Gezondheidsorganisatie. Beschikbaar via: <https://www.who.int/ipcs/publications/cicad/en/cicad05.pdf>

## 7. COLOFON

Deze notitie is geschreven in het kader van het project Ketenverkenner van de Kennisimpuls Waterkwaliteit. In de Kennisimpuls werken Rijk, provincies, waterschappen, drinkwaterbedrijven en kennisinstututen aan meer inzicht in de kwaliteit

van het grond- en oppervlaktewater en de factoren die deze kwaliteit beïnvloeden. Daarmee kunnen waterbeheerders en andere partijen de juiste maatregelen nemen om de waterkwaliteit te verbeteren en de biodiversiteit te vergroten.

In het programma brengen partijen bestaande en nieuwe kennis bijeen, en maken ze deze kennis (beter) toepasbaar voor de praktijk. Hiermee verstevigen ze de basis onder het waterkwaliteitsbeleid. Het programma is gestart in 2018 en duurt vier jaar. Het wordt gefinancierd door het ministerie van Infrastructuur en Waterstaat, STOWA, waterschappen, provincies en drinkwaterbedrijven.

Kennisimpuls Waterkwaliteit. Beter weten wat er speelt en wat er kan.

Versie: 21 december 2021

### **Auteurs**

Milo de Baat (KWR), Renske Hoondert (KWR), Joep van den Broeke (KWR), Thomas ter Laak (KWR), Gerlinde Roskam (Deltares), Els Smit (RIVM)

## BIJLAGE I: Informatie over wettelijke kaders

Tabel BI-1. Relevante informatie over de registratie, toelating en wettelijke kaders voor de twee geurstoffen linalool en limoneen.

Kader	Linalool	Limoneen
REACH Verordening (EG) 1907/2006	<ul style="list-style-type: none"> <li>• linalool: 29 actieve registranten, gezamenlijk registratiedossier</li> <li>• R-linalool: 3 actieve registranten, gezamenlijk registratiedossier</li> <li>• S-linalool: geen aparte registratie (ECHA, 2021a,b)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• limoneen: geen aparte registratie</li> <li>• R-limoneen: 62 actieve registranten, gezamenlijk registratiedossier</li> <li>• S-limoneen: 3 actieve registranten, gezamenlijk registratiedossier (ECHA, 2021c,d)</li> </ul>
	Er wordt jaarlijks 1000-10000 ton linalool en 10-100 ton R-linalool gemaakt en/of geïmporteerd in Europa.	Er wordt jaarlijks 1000-10000 ton R-limoneen en 100-1000 ton S-limoneen gemaakt en/of geïmporteerd in Europa.
Indeling, etikettering en verpakking (Classificatie en Labelling) Verordening (EG) 1272/2008	Geharmoniseerde gevaarsindeling <ul style="list-style-type: none"> <li>- Huidsensibilisatie categorie 1B (H317)</li> </ul> (geldt voor alle isomeren)	Geharmoniseerde gevaarsindeling <ul style="list-style-type: none"> <li>- Huidirritatie categorie 1 (H315)</li> <li>- Huidsensibilisatie categorie 1 (H317)</li> <li>- Acute aquatische toxiciteit categorie 1 (H400)</li> <li>- Chronische aquatische toxiciteit categorie 1 (H410)</li> </ul> (geldt voor alle isomeren)
Cosmetica verordening (EU) 2020/1683	Opgenomen in Bijlage IV van de Cosmeticaverordening en toegestaan voor gebruik in cosmetica. Voor haarkleurmiddelen geldt	

	een concentratielimiet van 0,5% volgens Bijlage III van de Cosmeticaverordening.	
	Linalool: Aanwezigheid moet vermeld op etiket bij concentraties >0,001% in <i>leave-on</i> producten en >0,01% in <i>rinse-off</i> producten.	Limoneen en R-limoneen: Aanwezigheid moet vermeld op etiket bij concentraties >0,001% in <i>leave-on</i> producten en >0,01% in <i>rinse-off</i> producten.
	R- en S-linalool zijn niet apart vermeld.	Limoneen, R-limoneen en S-limoneen: peroxidewaarde moet kleiner zijn dan 20 mM <sup>1</sup> .
Voedselaroma's Verordening (EG) 1334/2008	Linalool is toegelaten als smaakstof onder nummer 02.013; ook toegepast in diervoeding.	Toegelaten als smaakstof onder nummer 01.001 (limoneen), 01.045 (R-limoneen) en 01.046 (S-limoneen); ook toegepast in diervoeding.
Drinkwaterbesluit en drinkwaterregeling	Het Drinkwaterbesluit bevat geen specifieke kwaliteitseisen voor drinkwater. De Drinkwaterregeling bevat geen specifieke eisen voor oppervlaktewater bestemd voor de bereiding van drinkwater, de signaleringsparameter van 1 µg/L voor overige antropogene stoffen is van toepassing.	
Zeer Zorgwekkende Stoffen	Niet opgenomen op de Nederlandse lijst van (potentieel) Zeer Zorgwekkende Stoffen	

<sup>1</sup> De peroxidewaarde is een maat voor de oxidatieprocessen die in olie, vet of was hebben opgetreden en die het product 'ranzig' maken, met stank en ongewenste bijproducten tot gevolg.

## BIJLAGE II: Informatie over stofeigenschappen en analysemethoden

Tabel BII-1. Relevante fysisch-chemische eigenschappen van linalool en limoneen en informatie over gedrag in het milieu. Bron: ECHA 2021a,b,c,d (tenzij anders vermeld).

Eigenschap	Linalool	Limoneen
Oplosbaarheid in water [mg/L]	854 <sup>a</sup> 1590 <sup>b</sup>	5,69 <sup>a</sup> 13,8 <sup>b</sup>
Vervluchtiging uit water (Henry-coëfficiënt [Pa m <sup>3</sup> /mol])	2,18 <sup>b</sup>	3,23 x 10 <sup>3</sup> <sup>b</sup>
Vetminnendheid (Log Octanol-water partiticoëfficiënt [log K <sub>ow</sub> ])	2,97 <sup>a,b</sup>	4,38 <sup>b</sup>
Bindingscoëfficiënt aan organisch koolstof in sediment en bodem (Log organisch koolstof -water partiticoëfficiënt [log K <sub>oc</sub> ])	1,9-2,2 <sup>c</sup>	3,0-3,8 <sup>c</sup>
Bioconcentratiefactor BCF [L/kg]	42 <sup>c</sup>	361 <sup>c</sup>

a: OECD (2002)

b: EPI Suite experimentele waarden (US EPA, 2000-2012)

c: EPI Suite geschatte waarde (US EPA, 2000-2012)

### Analysemethoden

Er is veel literatuur over de analyse van linalool, limoneen en andere geurstoffen in voedsel en (af)wasmiddelen. Verschillende technieken worden gebruikt om de aanwezigheid van geurstoffen te detecteren. Toegepaste extractie- en detectietechnieken zijn onder andere gaschromatografie, gecombineerd met massaspectofotometrische detectie (GC-MS), en gaschromatografie gecombineerd met een vlamionisatiedetector (FID), beide met helium als draaggas (Aprotosoiaie et al., 2014).

Het is echter niet makkelijk om daadwerkelijke concentraties van deze stoffen te kwantificeren, omdat de focus van onderzoekers jarenlang heeft gelegen op het identificeren van nieuwe (potentieel toxische) vluchtige stoffen, in plaats van op het bepalen van de concentraties van de stof (Bicchi et al., 2008). De aanwezigheid van geurstoffen wordt om deze reden vaak gerapporteerd in een percentage (of relatieve

intensiviteit) van de stof in het mengsel op basis van de massa. Om toch tot een daadwerkelijke concentratie van de stof (in  $\mu\text{g/L}$ ) te komen, moeten de gerapporteerde relatieve percentages worden omgezet door gebruik te maken van een kalibratielijne (Bicchi et al., 2008; Rubiolo, et al., 2010). De detectielimieten en rapportagegrenzen met deze technieken liggen op 0,1 ng/L en 0,17 ng/L voor linalool en limoneen, respectievelijk. Op basis van deze literatuur is de conclusie dat de concentraties van linalool en limoneen in water betrouwbaar bepaald kunnen worden op het niveau van de risicogrenzen (zie onder).



## BIJLAGE III: Concentraties in het milieu

Tabel BIII-1. Gebruikte gegevens en de uitkomsten van de PEC-berekening voor de drie geurstoffen linalool en limoneen.

productcategorie	gebruik	Linalool			Limoneen		
		prod	gehalte	bijdrage	prod	gehalte	bijdrage
aftershave	0.6	-			-		
body wash	4.5	3.9			4.6	0.0055	11.4
bubble bath	1.2	7.8			3.1		
deodorant	1.7	10.2	0.0055	13.9	8.2	0.0055	7.6
face cream/moisturizer	0.7	13.0			12.0		
hair color	ND	6.7			2.1		
hair conditioner	4.9	21.9	0.0055	86.1	21.7	0.0055	58.2
hair spray	0.9	19.6			20.9		
hair styling	3.1	33.6			32.8		
hand/body lotion	4.0	14.4			11.9		
shampoo	2.4	20.4			17.4	0.0055	22.8
shaving cream	3.0	5.0			5.8		
sunscreen	0.4	2.4			1.9		
toothpaste	2.2	-			1.6		
zuiveringsrendement	(%)	6.54			94.42		
PEC <sub>CONS</sub>	(ng/l)	6.00			0.52		

gebruik	Het gebruik van het product (in g of mL per dag);
prod	Het percentage producten dat de betreffende stof bevat;
gehalte	Het gehalte van de betreffende stof in de productcategorie (in µg/L);
zuiveringsrendement	Zuiveringsrendement zoals berekend door EpiSuite;
bijdrage	De bijdrage aan de PEC <sub>CONS</sub> van de betreffende productcategorie.

## BIJLAGE IV: Risicogrenzen voor ecotoxicologie, visconsumptie en drinkwater

### *Ecotoxicologie*

*Linalool.* Er zijn geen vastgestelde waterkwaliteitsnormen voor linalool. OECD (2002) vermeldt een Predicted No Effect Concentration voor het ecosysteem (PNEC) van 200 µg/L, gebaseerd op acute studies met vissen, watervlooien en algen met een veiligheidsfactor van 100. Het REACH-registratiedossier vermeldt dezelfde waarde. Omdat er geen chronische studies zijn met vissen of watervlooien, zou volgens de regels van de KaderrichtlijnWater en de indicatieve normaafleiding een veiligheidsfactor van 1000 moeten worden toegepast (EC, 2018; De Poorter et al., 2015). Voor deze factsheet gebruiken we daarom een ecotoxicologische risicogrens van 20 µg/L.

*Limoneen.* Er geldt een beleidsmatig vastgesteld indicatief Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau (i-MTR) van 0,14 µg/L. Deze waarde is gebaseerd op ecotoxiciteitsstudies met het R-isomeer van limoneen met vissen, watervlooien en insecten. Voor het limoneenmengsel is een iets hogere waarde van 0,18 µg/L afgeleid (Hansler et al., 2007). De REACH-registratiedossiers vermelden PNEC's van 14 en 5,4 µg/L voor de R- en S-isomeer. Er zit overlap in de ecotoxicologische datasets, maar in het REACH-dossier zitten recentere studies. Bovendien verschilt de manier van afleiden van het i-MTR voor limoneen op een aantal punten van de huidige methodiek. Zo is er destijds een extra veiligheidsfactor toegepast om rekening te houden met doorvergiftiging van vogels en zoogdieren. Tegenwoordig worden bij het afleiden van waterkwaliteitsnormen de routes directe ecotoxiciteit en voedselketeneffecten allebei doorgerekend en de laagste bepaalt de norm (zie document "Verantwoording stofselectie en risicobeoordeling").

### *Visconsumptie*

*Linalool.* Op basis van de gezondheidkundige classificatie en log  $K_{ow}$  van linalool is de route via visconsumptie niet relevant voor de risicobeoordeling. Omdat de stof hydrofiel is en dus niet vetminnend, wordt verwacht dat linalool niet eenvoudig zal bioaccumuleren en er geen hoge concentratie van deze stof in het vetweefsel van vissen aanwezig zal zijn.

*Limoneen.* Limoneen heeft een log  $K_{ow}$  van groter dan 3. De database van het Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Additives (JECFA) vermeldt dat er geen acceptabele dagelijkse inname (ADI) is vastgesteld. JECFA gebruikt deze aanduiding voor stoffen met een zeer lage toxiciteit die volgens de experts geen gevaar vormen voor de volksgezondheid. Het i-MTR houdt via een extra veiligheidsfactor rekening met doorvergiftiging, maar Hansler et al. (2007) vermelden ook een gezondheidskundige risicogrens voor limoneen van 0,1 mg/kg lichaamsgewicht per dag, afgeleid door de WHO (1998). De risicogrens voor visconsumptie wordt berekend voor een persoon met een lichaamsgewicht van 70 kg die dagelijks 115 gram vis eet, waarbij de inname via vis maximaal 20% van de totale inname mag zijn. Met de gezondheidskundige risicogrens van 0,1 mg/kg lichaamsgewicht per dag en de geschatte bioconcentratiefactor (BCF) van 361 L/kg, komt de risicogrens voor humane visconsumptie uit op  $0,1 \times 70 \times 0,2 / (0,115 \times 361) = 0,034$  mg/L (34 µg/L).

#### *Drinkwater*

*Linalool.* Er is een ADI van 0,5 mg/kg lichaamsgewicht per dag afgeleid door JECFA en de OECD (2002). De risicogrens voor drinkwater wordt berekend voor een persoon met een lichaamsgewicht van 70 kg die dagelijks 2 liter water drinkt, waarbij de inname via drinkwater maximaal 20% van de totale acceptabele inname mag zijn. Met deze gegevens komen we op een risicogrens van  $0,5 \times 70 \times 0,2 / 2 = 3,5$  mg/L.

*Limoneen.* Met de hierboven vermelde gezondheidskundige risicogrens voor limoneen van 0,1 mg/kg lichaamsgewicht per dag en de standaardaannames voor lichaamsgewicht, drinkwaterconsumptie en allocatie, komt de risicogrens voor drinkwater uit op 0,70 mg/L (700 µg/L). Omdat er geen specifieke gegevens zijn over het zuiveringsrendement, is de risicogrens voor drinkwater ook rechtstreeks van toepassing op het oppervlaktewater waaruit drinkwater wordt gemaakt.