



Opkomende stoffen in bodem en ondergrond

Aanzet tot een signalerings-, beoordelings- en prioriteringssysteem

Uitvoeringsprogramma Convenant Bodem en Ondergrond (2016-2020)

30 september 2020

Project Opkomende stoffen in bodemen ondergrond
Opdrachtgever Uitvoeringsprogramma Convenant Bodem en Ondergrond (2016-2020)

Document Aanzet tot een signalerings-, beoordelings- en prioriteringssysteem
Status Definitief
Datum 30 september 2020
Referentie 105010/20-014.696

Projectcode 105010
Projectleider Martijn van Houten
Projectdirecteur Maarten Kraneveld

Auteurs (deel 1) Arne Alphenaar, Marloes Luitwieler, Hans Slenders
Gecontroleerd door Ko Hage, Martijn van Houten
Goedgekeurd door Martijn van Houten

Paraaf

Adres penvoerder Witteveen + Bos Raadgevende ingenieurs B.V.
Leeuwenbrug 8
Postbus 233
7400 AE Deventer
+31 (0)570 69 79 11
www.witteveenbos.com
KvK 38020751

 ARCADIS Design & Engineering
for nature and
well-being

 bioclear
earth

 TTE
consultants

 Witteveen + Bos

 Rijksinstituut voor Volksgezondheid
en Milieu
Ministerie van Volksgezondheid,
Welzijn en Sport

Het kwaliteitsmanagementsysteem van Witteveen+Bos is gecertificeerd op basis van ISO 9001.

© Witteveen+Bos

Niets uit dit document mag worden veeelvoudigd en/of openbaar gemaakt in enige vorm zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van Witteveen+Bos noch mag het zonder dergelijke toestemming worden gebruikt voor enig ander werk dan waarvoor het is vervaardigd, behoudens schriftelijk anders overeengekomen. Witteveen+Bos aanvaardt geen aansprakelijkheid voor enigerlei schade die voortvloeit uit of verband houdt met het wijzigen van de inhoud van het door Witteveen+Bos geleverde document.

INHOUDSOPGAVE

DEEL 1: PROCES EN ORGANISATIE VAN SIGNALERING	5	
1	INLEIDING	7
2	SIGNALEREN	10
2.1	Signalen uit de maatschappij	11
2.2	Onderzoek stoffen	12
3	BEOORDELEN EN PRIORITEREN	14
3.1	1 ^e screening signalen	14
3.2	Stapsgewijze beoordeling	16
4	TOEPASSEN: HET FUNCTIONEREN VAN HET SYSTEEM	17
DEEL 2: BEOORDELEN EN PRIORITEREN OPKOMENDE STOFFEN IN DE BODEM	19	
5	INLEIDING	20
6	OPBOUW MODEL	22
7	UITWERKING FATE ONDERDEEL	24
7.1	Uitwerking fate onderdeel trede 1	26
7.1.1	Tonnagegegevens en stofeigenschappen	26
7.1.2	Tonnage van Europese schaal naar Nederlandse schaal	26
7.1.3	Emissiefactoren naar de milieucompartimenten	26
7.1.4	Modelleren van milieuconcentratie met behulp van SimpleBox	27
7.2	Voorzet Fate trede 2	27
7.2.1	Aanvullende activiteiten	28
7.2.2	Integratie aanvullende activiteiten in SimpleBox	28
7.3	Databeschikbaarheid fate onderdeel	28

8	UITWERKING TOXICITEIT MODEL	30
8.1	Screening voor ZZS en mogelijke ZZS	30
8.1.1	Methoden voor screening ZZS en mogelijke ZZS	31
8.1.2	Databeschikbaarheid ZZS-screening	32
8.2	Uitwerking humane toxiciteit trede 1	32
8.2.1	Prioritering op basis van het humaan gezondheidsrisico	32
8.2.2	Trede 2 humane toxiciteit	36
8.2.3	Data beschikbaarheid humane toxiciteit	39
8.3	Uitwerking ecotoxicologisch onderdeel	39
8.3.1	Ecotoxicologisch onderdeel trede 1	39
8.3.2	Ecotoxicologisch onderdeel trede 2	41
8.3.3	Databeschikbaarheid ecotoxicologisch onderdeel	41
8.4	Uitwerking doorvergiftiging	42
8.4.1	Doorvergiftiging trede 1	42
8.4.2	Databeschikbaarheid doorvergiftiging	45
9	CONCLUSIES	46
10	REFERENTIES	47
	Laatste pagina	48
	Bijlage(n)	Aantal pagina's
I	Indeling van Cramer classes	1
II	Andere mogelijkheden tot prioritering voor humaan risico	1
III	Deelnemers aan het project POP-UP	3

DEEL 1: PROCES EN ORGANISATIE VAN SIGNALERING

Deel 1 is uitgewerkt door het POP-UP consortium:

Arne Alphenaar

Ko Hage

Hans Slenders

Martijn van Houten

Marloes Luitwieler

1

INLEIDING

Overheden, burgers en bedrijven worden in toenemende mate geconfronteerd met (nog) onbekende, (nog) niet genormeerde stoffen. Om mogelijke schade zo snel mogelijk te beperken en maatschappelijke onrust te voorkomen is van belang om zo snel mogelijk vast te kunnen stellen of een stof in een bepaalde situatie een significant negatief effect heeft op het bodemsysteem (de 'milieubezwaarlijkheid' voor het bodemsysteem).

Milieubezwaarlijkheid voor het bodemsysteem

In de algemene beoordelingsmethodiek ter bepaling van de benodigde saneringsinspanning bij lozingen op basis van stoffeigenschappen (R.P.M. Berbee in opdracht van het ministerie IenW, 2016) wordt 'waterbezwaarlijkheid' gedefinieerd als 'de mate waarin er een kans is op nadelige effecten voor het aquatisch milieu'. In het verlengde hiervan richt het signaleringssysteem zich op de 'milieubezwaarlijkheid' voor het bodemsysteem: De kans op nadelige effecten voor de bodemen de daarmee samenhangende systemen (productie voedsel, drinkwater etc.).

Daartoe is een (aanzet tot een) signaleringssysteem uitgewerkt dat mogelijke effecten signaleert, de 'milieubezwaarlijkheid' voor het bodemsysteem (verder in deze tekst kortweg 'bodembezwaarlijkheid') van een stof beoordeelt en de wenselijkheid van te nemen van acties prioriteert. Die eventuele acties worden beschreven in de andere producten van het POP-UP-project:

- een **handreiking voor decentrale overheden** dat aangeeft op welke wijze concrete risico's voor mens en milieu kunnen worden aangepakt en beschrijft hoe negatieve maatschappelijke effecten zo veel mogelijk kunnen worden voorkomen;
- **adviezen voor het verbeteren van preventiestrategieën** die ervoor moet zorgen dat vergelijkbare problemen (met desbetreffend stof) in de toekomst voorkomen kunnen worden.

Signaleren in bodem en grondwater

Het POP-UP project, en dus ook deze 'Aanzet tot een signalerings-, beoordelings- en prioriteringssysteem' richt zich specifiek op opkomende stoffen in bodem en grondwater. De voorliggende tekst richt zich specifiek op het signaleren, beoordelen en prioriteren van de 'bodembezwaarlijkheid'. Ook met betrekking tot de problematiek rond opkomende stoffen zijn de compartimenten lucht, water en bodem echter onlosmakelijk met elkaar verbonden en vormen (het voorkomen van) opkomende stoffen in lucht of water daarbij een belangrijke aanleiding om de effecten op het bodemsysteem te onderzoeken.

In deel 1 van het voorliggende rapport wordt het signaleringssysteem procesmatig uitgewerkt. In deel 2 van dit rapport wordt de systematiek om de 'bodembezwaarlijkheid' te beoordelen en te prioriteren, technisch uitgewerkt door het RIVM. Een uitwerking die kan worden beschouwd als een aanzet tot een 'Risicoolbox opkomende stoffen in bodem'. Daarbij wordt aangesloten bij de analyses die in het kader van het internationale 'Solutions' project zijn ontwikkeld.

Het uitgangspunt van het signaleringssysteem is dat niet van alle stoffen voldoende bekend is om op basis van stoffeigenschappen vast te stellen welke stoffen waar (in welk compartiment) specifieke aandacht verdienen.

Scope

Niet alle stoffen zijn zorgwekkend en niet alle zorgwekkende stoffen belasten het bodemsysteem in Nederland. Om deze redenen benadert een signaleringssysteem de problematiek vanaf twee kanten:

- vanuit de stof: zo efficiënt mogelijk vaststellen welke stoffen negatieve effecten kunnen hebben, en dus aan welke stoffen specifieke aandacht moet worden besteed;
- vanuit het effect: zo efficiënt mogelijk vaststellen of signalen dat er 'iets' aan de hand is gerelateerd kunnen zijn aan een (nog onbekende) stof.

Een signaleringssysteem opkomende stoffen in bodem richt zich op:

- stoffen waarvan het gedrag in het milieu (fate) en de toxiciteit nog onbekend zijn en waarvan nog geen normen/risicogrenswaarden zijn vastgesteld ('nieuwe' stoffen);
- bekende stoffen die (bij nader inziens) mogelijk een nog niet eerder herkende bedreiging voor het bodemsysteem vormen;
- bekende stoffen die vanuit een nieuwe toepassingen een bedreiging voor de bodem kunnen vormen.

Signaleren

Onder signaleren verstaan we:

- het identificeren van potentieel bodemsysteem belastende stoffen (middels wetenschappelijk onderzoek of vanuit wetenschappelijke literatuur);
- het opmerken en rapporteren van signalen die kunnen duiden op schade door stoffen in het bodemsysteem.

Signaleringssysteem

Tijdig en juist signaleren en beoordelen van mogelijke risico's van stoffen (in dit geval voor het bodemsysteem) is een essentiële stap naar het effectief en efficiënt handelen rond 'opkomende' of 'zeer zorgwekkende' stoffen.

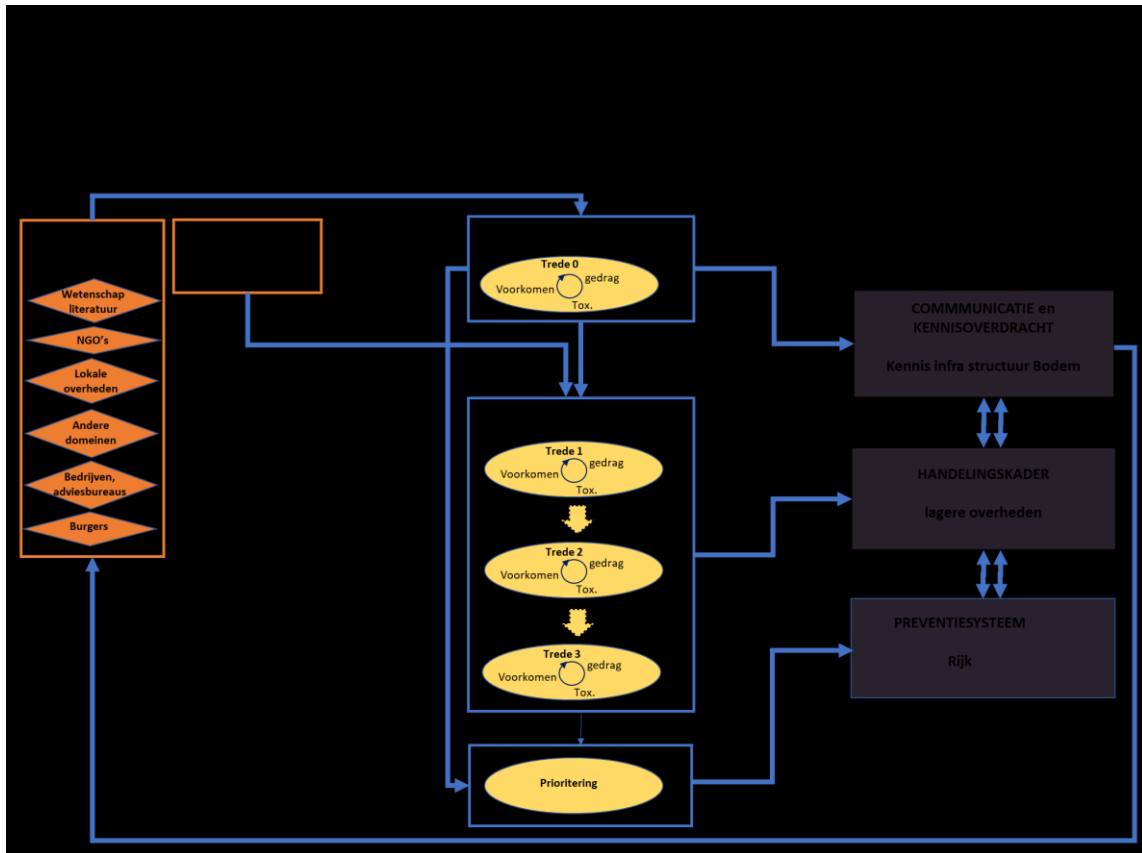
Onder een signaleringssysteem verstaan we een (regionale en landelijke) organisatiestructuur/financiering die borgt dat de veelheid en diversiteit aan **signalen** van eventuele schade aan het bodemsysteem adequaat en efficiënt worden **verzameld** en efficiënt en effectief worden **beoordeeld**. Daartoe wordt daar waar mogelijk de 'bodembezwaarlijkheid' van stoffen **geprioriteerd**.

Het signaleringssysteem dat we voorstellen is dan ook meer dan het 'oppikken' van mogelijke 'bodembezwaarlijkheid'. Het is ook een permanent onderzoeksprogramma waarbinnen actief gezocht wordt welke stoffen een mogelijke bedreiging voor het bodemsysteem in Nederland vormen. Het is het creëren van een attitude waarbinnen professionals signalen van schade aan het bodemsysteem laten beoordelen. En bovenal, het is een organisatie/attitude die borgt dat (de resultaten van) de beoordeling effectief worden geïmplementeerd in landelijk en lokaal beleid.

Bij deze aanzet tot een signaleringssysteem komen achtereenvolgens de 3 hoofdonderdelen aan de orde: Signalen verzamelen, signalen beoordelen/prioriteren en signalen toepassen. Deze elementen en hun onderlinge samenhang is schematisch weergegeven in afbeelding 1.1.

In deel twee van deze rapportage gaat het RIVM uitgebreid in op de technische aspecten van het beoordelen of die signalen daadwerkelijk gerelateerd zijn aan de 'bodembezwaarlijkheid' en het prioriteren van stoffen naar 'bodembezwaarlijkheid' gericht op het initiëren van acties om (toekomstige) schade te voorkomen of te beperken.

Afbeelding 1.1 Elementen en samenhang van een signaleringssysteem

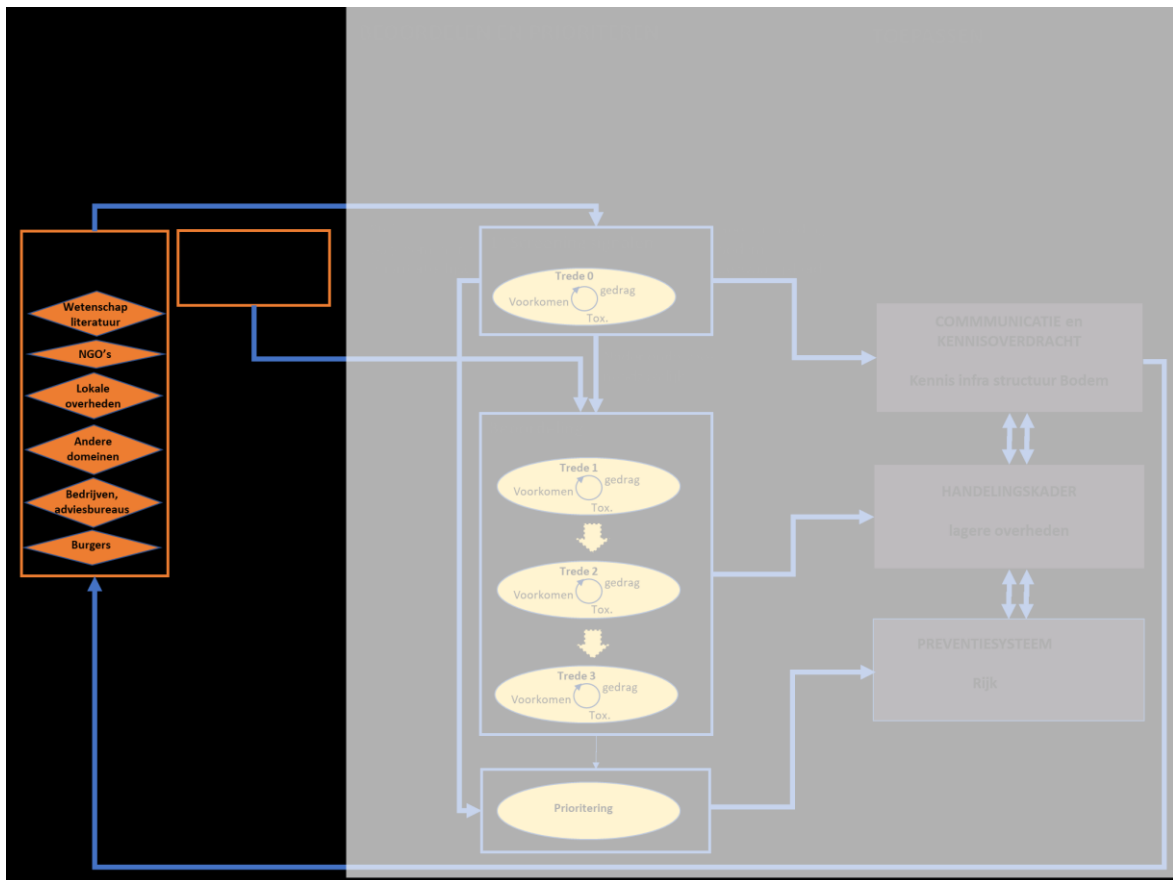


2

SIGNALEREN

De essentie van signaleren is enerzijds het realiseren van een attitude waarbij mogelijke signalen worden herkend en serieus worden genomen. Daarnaast is het van belang dat er een toegankelijk loket wordt geopend waar deze signalen makkelijk en 'veilig' kunnen worden gemeld. Waarbij veilig staat voor het vertrouwen dat een melding niet automatisch leidt tot stagnatie van gewenste ontwikkelingen of tot hogere kosten door het moeten nemen van maatregelen.

Afbeelding 2.1 Onderdeel signaleren



Er zijn verschillende signalen die kunnen wijzen op een bedreiging van het bodemsysteem. Daarbij worden twee aanvliegroutes gehanteerd:

- een route waarin zeer diverse **signalen vanuit de maatschappij** die kunnen wijzen op een bedreiging van het bodemsysteem worden verzameld en gedocumenteerd, en
- een **onderzoeksroute** waarin actief wordt gezocht naar stoffen die op basis van geschatte concentraties in bodem/grondwater en de geschatte eigenschappen van stoffen een mogelijke bedreiging voor het bodemsysteem vormen. Deze tweede route wordt in meer detail besproken in deel twee van het voorliggende rapport.

Bij de beoordeling raken de aanvliegroutes elkaar: het minder functioneren van een bodem in een bepaalde situatie kan de aanleiding zijn om te gaan zoeken naar een nog onbekende stof. En bij het bepalen van de mogelijke schadelijkheid van een stof moet rekening gehouden worden met zaken als andere (milieu)factoren of combinatietoxicologie.

2.1 Signalen uit de maatschappij

Er wordt voortdurend en in zeer diverse gremia bericht over stoffen of stofgroepen die schadelijk zijn voor mens en/of milieu. Deze signalen zijn soms gekleurd door de overtuiging van de boodschapper en soms alleen toegankelijk voor de direct betrokken wetenschappers of producent. Andere signalen en observaties (minder insecten, lagere gewasopbrengsten enz.) zal men vaak niet direct relateren aan een 'opkomende stof' maar kunnen wel betekenen dat onbekende stoffen een rol spelen. Juist door de veelheid en diversiteit aan signaleren kan de ratio verdwijnen: signalen worden gebagatelliseerd om gewenste ontwikkelingen niet te frustreren, of juist uitvergroot om de discussie te sturen. Het is de taak van het signaleringssysteem om hier het kaf van het koren te scheiden.

Toevalsvondsten

Soms worden 'opkomende' of 'niet genormeerde' stoffen bij toeval in grond of grondwater aangetroffen. De gebruikers willen dan weten of de stof in hun specifieke situatie een risico kan opleveren. Indien uit de beoordeling blijkt dat er sprake is van een in potentie schadelijke stof moet het signaleringssysteem borgen dat het lokaal aantreffen de aanleiding vormt voor een landelijke studie naar het voorkomen en de oorzaak daarvan (communicatie, kennisoverdracht en handreiking). Is sprake van een lokaal probleem, of is het breder? Is het een regionaal of landelijk vraagstuk?

Brede screening

Lokale of regionale overheden kunnen bijvoorbeeld door een 'toevalsvondst' bij een brede screening op stoffen in grond/bagger/grondwater geconfronteerd worden met een opkomende stof. Ook een vergunningaanvraag voor het lozen en/of verwerken van de stof in een product kan de aanleiding vormen. De betreffende overheid moet dan een besluit nemen hoe hiermee om te gaan en onderzoeken in hoeverre sprake kan zijn van een 'bodembezwaarlijke' stof.

(Inter)nationale overheden

Soms worden andere landen eerder of sterker geconfronteerd met knelpunten rond een opkomende stof dan Nederland. Lang voordat Nederland in 2008 voor het eerst met PFAS (PFOS) te maken kreeg stond de stof in Scandinavië, Australië en de Verenigde Staten ook beleidsmatig al volop in de belangstelling. De constatering dat andere landen specifiek beleid voor een bepaalde stof(groep) ontwikkelen is een niet te negeren signaal dat die stof ook het bodemsysteem in Nederland kán schaden. Het verdient dan aanbeveling om te onderzoeken of, en zo ja waar, de stof ook in Nederland is gebruikt, of op welke wijze die stof in het buitenland in het milieu is beland, en of dat ook in Nederland het geval kan zijn.

(Internationale) wetenschappelijke literatuur, symposia etc.

Er wordt internationaal op grote schaal onderzoek gedaan naar (de schadelijke effecten van) chemicaliën. Vaak gaat het in publicaties dan om zeer specifieke, moeilijk naar de praktijk van alledag te vertalen effecten op celniveau. Ook voor wetenschappers moet het aantrekkelijk gemaakt worden om inzichten die zij opdoen over de schadelijkheid van een stof te melden bij de signaleringsinstantie.

'Lobby's' door niet-gouvernementele organisaties (NGO's)

Veel van de signalen rond 'opkomende stoffen' komen van NGO's. Het bijhouden en interpreteren van wetenschappelijke literatuur is een manier om de relevantie van hun maatschappelijke doelen te onderbouwen. Ook NGO's zijn niet altijd neutraal, maar feit is dat veel 'nieuwe bedreigingen' door NGO's op de kaart zijn gezet. Het is van belang dat de signalen objectief worden beoordeeld en acties vanuit overheidswege worden gecoördineerd.

Lokale actiegroepen/ individuen

De eerste signalen dat er iets mis kan zijn komen vaak van burgers en lokale actiegroepen. Deze signalen zijn vaak (nog) niet goed onderbouwd en/of gekleurd door emoties. Juist daarom is het van belang deze signalen tijdig objectief te beoordelen om paniek te voorkomen en de juiste maatregelen te kunnen nemen.

Bedrijven/adviesbureaus

In veel situaties vormen adviesbureaus het eerste aanspreekpunt voor (overheids)partijen die geconfronteerd worden met een mogelijk 'opkomende stof gerelateerd probleem'. Een gedeelde publiek-private benadering sluit aan bij de in de Omgevingswet verankerde maatschappelijke ontwikkeling. Ook deze signalen zullen vanuit het publieke belang objectief beoordeeld moeten worden.

Informatie uit de praktijk

Als een stof al binnen een ander domein of andere regelgeving is geïdentificeerd als mogelijk schadelijk (denk aan Arbo-regelgeving, landbouw of non-targetscreening van drinkwaterproductie) is een belangrijke stap al gezet: de stof is bekend. De opgedane kennis kan vervolgens gebruikt worden om te bepalen of de stof ook voor het bodemsysteem schadelijk kan zijn. In een gedecentraliseerd speelveld is het echter niet vanzelfsprekend dat andere (overheden) tijdig worden geïnformeerd. Een belangrijk aandachtspunt voor de beleidsmakers is de vraag hoe kan worden geborgd dat data überhaupt gedeeld worden. In het Solutions project bijvoorbeeld is veel moeite gedaan om de exacte emissietonnages voor REACH-stoffen te mogen gebruiken, maar dat is slechts zeer ten dele gelukt.

Functie

De nuttige eigenschappen van een stof en de schadelijkheid voor het milieu vormen vaak twee kanten van dezelfde medaille. Als een stof fungeert als vervanger van een bekende schadelijke stof, is het zinvol te onderzoeken in hoeverre de vervanger ook een aantal schadelijke eigenschappen deelt.

2.2 Onderzoek stoffen

De passieve signalering loopt achter de feiten aan: iets wordt gesignaleerd wanneer er echt iets aan de hand is. Dat kan deels voorkomen worden door gericht te zoeken naar stoffen die de Nederlandse bodem (of meer algemeen het Nederlandse milieu) bedreigen.

De door het RIVM voorgestelde 'Risicotoolbox opkomende stoffen in bodem' (zie deel 2) heeft tot doel zo veel mogelijk potentieel schadelijke stoffen te identificeren en de schadelijkheid van stoffen in te schatten voordat men in de praktijk met problemen wordt geconfronteerd. Daarbij wordt opgemerkt dat de 'bodembeveiligheid' bepaald wordt door een combinatie van toxiciteit, voorkomen en verblijftijd (in het milieu), blootstelling en specifieke omstandigheden (een stof kan bijvoorbeeld pas echt schadelijk zijn als een plant last heeft van droogtestress). In deel 2 (Beoordelen en prioriteren) wordt in detail op deze aspecten ingegaan

QSAR

Van een aantal stoffen is de toxiciteit al vastgesteld. Van vele andere is deze niet, of slechts in zeer beperkte mate bekend. Toxicologisch onderzoek is kostbaar en tijdrovend. Een eerste indicatie kan verkregen worden op basis van QSAR (quantitative structure-activity relationship). Hierbij wordt middels statistische analyses naar verbanden gezocht tussen de moleculaire structuur van een stof en eigenschappen van die stof.

Deze techniek is in principe geschikt voor alle verbindingen, maar geeft geen directe relatie tot specifieke bodemrisico's. Het is meer een aanvullende test om de eventuele schadelijkheid van in de bodem aangetroffen stoffen nader te onderbouwen.

Om vast te stellen of een stof(groep) schadelijk kan zijn wordt de 'bron-pad-effect benadering' gehanteerd. In de binnen POP-UP opgestelde 'Handreiking voor decentrale overheden' is daarvoor de systeemanalyse gepresenteerd. Daarvoor zijn de volgende gegevens van belang:

- emissie (al dan niet gekoppeld aan tonnage) via lucht of water naar de bodem (lastig te kwantificeren);
- volume gebruik als element van de 'kans op blootstelling' (hoe meer er van een stof gebruikt is, hoe groter de kans dat deze in substantiële hoeveelheden is vrijgekomen);
- milieugedrag op basis van stoffeigenschappen, als element van de 'kans op blootstelling' (met name persistentie, mobiliteit en bio-accumulatie);
- toepassing(en) van de stof, als element van de 'kans op blootstelling';
- de intrinsieke giftigheid van de stof (voor veel opkomende stoffen nog beperkt onderbouwd).

3

BEOORDELEN EN PRIORITEREN

In essentie is het vaststellen van de potentiële bedreiging van een stof in de bodem het combineren van de intrinsieke toxiciteit (stofeigenschap) met de kans dat die stof in Nederland schade oplevert. In de bron-pad-receptor keten wordt het risico bepaald door de belasting van de receptor (zie de systeemanalyse in de handreiking):

$$\text{Risico (bodembezwaarlijkheid)} = \text{Functie van: toxiciteit} * \text{kans op blootstelling}$$

Waarbij de kans op blootstelling bepaald wordt door onder andere de belasting van het milieu (hoeveel komt er jaarlijks vrij), de verblijftijd in het milieu (biologische en abiotische afbraak) en de wijze van blootstelling. De bodem is daarbij niet zozeer de receptor als een pad dat bijvoorbeeld via de voedselproductie of doorvergiftiging leidt naar de werkelijk bedreigde receptoren. Bij de beoordeling van de 'bodembezwaarlijkheid' van stoffen wordt het voorkomen (fate) en de (eco)toxiciteit van stoffen in een aantal treden van toenemend detailniveau uitgewerkt (zie paragraaf 3.2 en deel 2 van het voorliggende rapport).

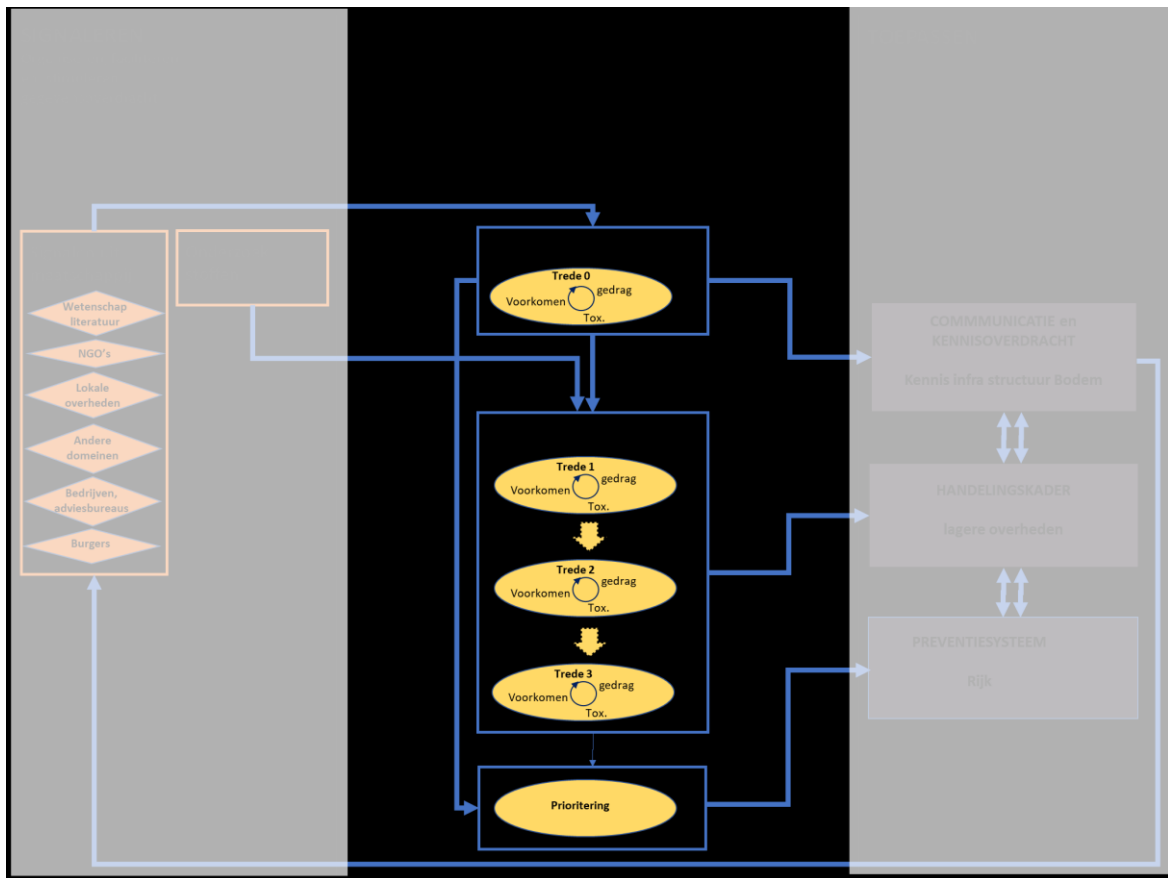
3.1 1^e screening signalen

Het is ondoenlijk om alle signalen, afkomstig van zeer diverse partijen en sterk variërend in onderbouwing, volledig te analyseren en te beoordelen. Om te zorgen dat alleen de relevante signalen in detail worden onderzocht, worden de signalen vanuit de maatschappij in een aantal stappen gescreend voorafgaand aan de daadwerkelijke beoordeling. De elementen van deze screening komen overeen met de modelmatige beoordeling zoals beschreven in deel 2 maar worden uitsluitend op basis van snel toegankelijke informatie doorlopen. Omdat de signalen sterk van karakter en onderbouwing verschillen moet bepaald worden of een signaal daadwerkelijk gerelateerd kan zijn aan een opkomende stof, en of die stof in de gegeven situatie daadwerkelijk de oorzaak kan zijn.

Indien één van de vragen met 'ja' of 'misschien' wordt beantwoord is dat de aanleiding voor een nadere beoordeling.

Om te voorkomen dat een onterecht gevoel van veiligheid wordt gecreëerd, staat het voorkomen van 'vals negatief' (onterecht beoordeeld als niet relevant) centraal in het proces: bij twijfel wordt verder onderzocht.

Afbeelding 3.1 De feitelijke beoordeling van de signalen start met een grove screening om de belasting van het beoordelingssysteem te beperken



1^e Vaststellen kans op voorkomen in Nederland

Op basis van de systeemanalyse wordt vastgesteld of de stof in Nederland schade aan het bodemsysteem kan veroorzaken. Indien mogelijk, wordt vastgesteld of er in Nederland productiefaciliteiten of toepassingen zijn waarbij de stof in het milieu vrij kan komen. Uit eerdere ervaringen blijkt dat productiegegevens lastig te verkrijgen zijn. In deze stap zit ook een omgekeerde benadering: als de gemeten concentraties of gehalten van een stof hoger zijn dan de (middels het 'fate'-model) geschatte waarden is mogelijk sprake van een nog onbekende bron of nog onbekende toepassingen (zie ook deel 2 van deze rapportage).

Voorkomen bekend of onzeker: naar beoordeling

2^e Kan de betreffende stof (uitsluitend vanuit de stoffeigenschaften beredeneerd) een risico vormen voor het bodemsysteem?

Vastgesteld wordt of er bij de (aangetroffen) stof, op basis van de in de toolbox opkomende stoffen beschikbare gegevens, sprake is van 'bodembeswaarlijkheid'. Daarbij wordt opgemerkt dat de relevante informatie lang niet voor alle stoffen bekend is. Het signaleren van een stof kan de aanleiding vormen om deze versneld te onderzoeken.

Risico aanwezig of niet bekend: naar beoordeling

3^e Vaststellen of de stof in de bodem schade kan opleveren

Aan de hand van de systeemanalyse (zie de handreiking) wordt op basis van het bekende gebruik van de stof en de stoffeigenschaften (verdelingscoëfficiënt, vluchtigheid, afbraaksnelheid, etc.) vastgesteld of en in hoeverre de stof daadwerkelijk een belasting voor de bodem in Nederland kan vormen. Deze stap sluit direct aan bij het 'Tox' onderdeel van het prioriteringssysteem dat in deel 2 wordt uitgewerkt.

4^e Grond(water) onderzoek

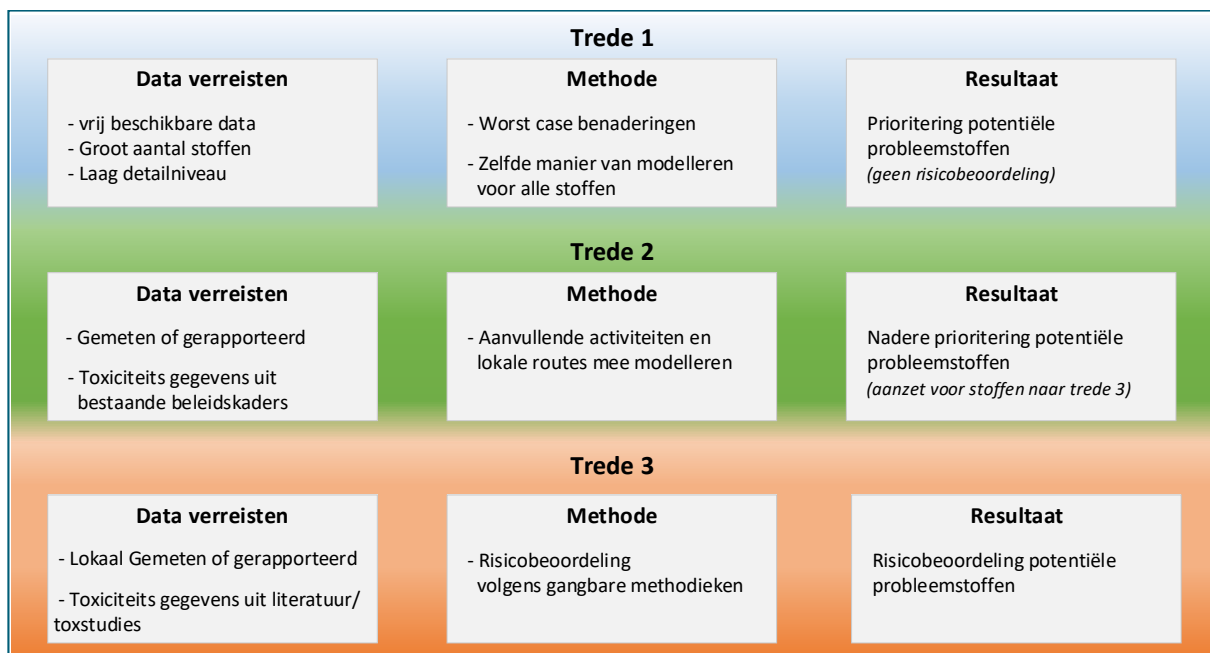
Indien het signaal gerelateerd is aan de situatie op een specifieke locatie is het aan te bevelen om de grond en/of het grondwater op de locatie te onderzoeken op de aanwezigheid van de stof. Indien de stof wordt aangetroffen is een nader onderzoek op vergelijkbare locaties in Nederland wenselijk.

Indien alle vragen met 'nee' beantwoord kunnen worden, wordt aan de melder aangegeven dat er geen sprake is van een probleem (met opkomende stoffen).

3.2 Stapsgewijze beoordeling

Indien de screening daar aanleiding toe geeft moet de 'bodembezwaarlijkheid' van stoffen nader onderzocht worden. Hiertoe worden het gedrag en het voorkomen in Nederland (fate) en de (eco)toxiciteit in een drietal treden van in toenemend detailniveau uitgewerkt (zie afbeelding 3.2 en deel 2).

Afbeelding 3.2 De opbouw van de verschillende treden voor de beoordeling van stoffen middels de 'Risicotoolbox opkomende stoffen in bodem' zoals die door het RIVM wordt voorgesteld in deel 2 van dit rapport



4

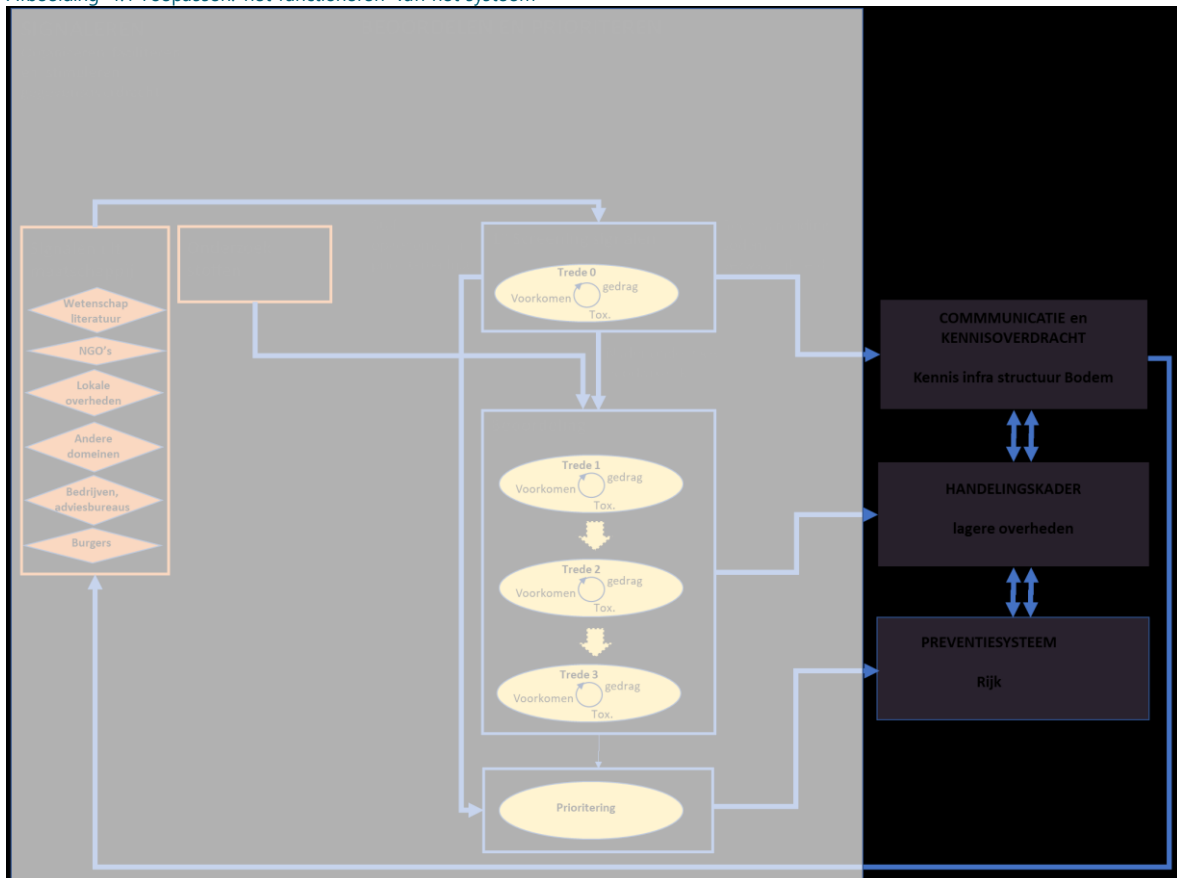
TOEPASSEN: HET FUNCTIONEREN VAN HET SYSTEEM

Om de diverse signalen te kunnen verzamelen, te beoordelen en de resultaten daarvan breed te communiceren en toe te kunnen passen in een handreiking en een preventiesysteem, moet het signaleringssysteem worden georganiseerd. De randvoorwaarden moeten gecreëerd en geborgd worden.

Organiseren signalering

Voor het effectief functioneren van een signaleringssysteem is het essentieel dat alle betrokken partijen zich bewust zijn van het belang van de signalen rond opkomende stoffen die zij mogelijk ontvangen. En, minstens zo belangrijk, dat zij deze signalen gemakkelijk en zonder (financieel) risico kunnen laten beoordelen. Om een 'wat niet weet, wat niet deert' redenatie te voorkomen ligt hier een centrale regie en financiering voor de hand. Wat betreft het beperken van de risico's voor de melder kan men wellicht leren van de bestaande 'klokkenluiders' regelingen.

Afbeelding 4.1 Toepassen: het functioneren van het systeem



Wat betreft de toegankelijkheid is het wenselijk dat het signaleringssysteem zowel een centrale als een decentrale aanpak kent. Om laagdrempelige meldingen mogelijk te maken zijn decentrale signaleringscentra wenselijk. Mogelijk kan dit als een (onafhankelijk gefinancierde) taak van de omgevingsdiensten worden uitgewerkt. Hier kan ook de eerste screening worden uitgevoerd. Daarnaast moet de signalering centraal (landelijk) worden georganiseerd. Daar worden de decentrale signalen beoordeeld en verwerkt richting acties gericht op preventie en aanpak etc.

Organiseren beoordeling

Het beoordelen van de signalen moet zo efficiënt mogelijk gebeuren. De screening hoeft niet noodzakelijkerwijs centraal te worden uitgevoerd, hier kunnen adviesbureaus of milieudiensten worden ingezet. Belangrijk is wel dat de meldingen eenduidig worden geregistreerd en dat de uitkomsten (kunnen worden) getoetst.

Organiseren kennisoverdracht

De knelpunten rond opkomende of niet genormeerde stoffen zijn voor een groot deel terug te voeren op onzekerheid en onbekendheid met de problematiek, vermengd met de overtuiging dat 'wat niet weet niet deert'. De ervaringen en conclusies vanuit het signaleringssysteem dienen in dit kader effectief en snel bij alle relevante actoren bekend te worden gemaakt. Enerzijds omdat zij naar aanleiding van de informatie moeten handelen (zie de handreiking), maar ook omdat de (nieuwe) kennis en bewustzijn m.b.t. de problematiek in belangrijke mate kan bijdragen aan het tijdig signaleren en melden van reële bedreigingen.

Onderzoek en beleid

Daar waar de beoordeling of screening aangeeft dat sprake kan zijn van een concrete belasting van het bodemsysteem wordt een beperkt veldonderzoek gericht op verdachte locaties of gebieden uitgevoerd om vast te stellen of sprake is van een lokaal geïsoleerde situatie of van een meer algemeen (regionaal of landelijk) probleem. Op basis van de resultaten (zie de handreiking) wordt besloten of lokaal, regionaal of landelijk beleid en regelgeving wenselijk zijn.

De conclusies van de beoordeling zijn technisch inhoudelijk en zijn niet politiek of financieel beïnvloed. Op basis van de beoordeling kunnen in via de 'Handreiking voor decentrale overheden' en het preventiesysteem beleidsmatige keuzes worden gemaakt. Voor een advies daaromtrent zou de heroprichting van een technische commissie bodem zeer welkom zijn.

DEEL 2: BEOORDELEN EN PRIORITEREN OPKOMENDE STOFFEN IN DE BODEM



Rijksinstituut voor Volksgezondheid
en Milieu
*Ministerie van Volksgezondheid,
Welzijn en Sport*

Deel 2 is uitgewerkt door de volgende medewerkers van het RIVM:

Peter van Breemen

Johannes Lijzen

Theo Traas

Patrick van Beelen

Emiel Rorije

Eric Verbruggen

Leo Posthuma

5

INLEIDING

Dit deel van het rapport geeft de opzet en eerste uitwerking van een instrument waarmee opkomende stoffen in het compartiment bodem geïdentificeerd en beoordeeld kunnen worden. Het vormt een belangrijk onderdeel van het signaleringssysteem zoals dat in deel 1 is beschreven. Niet genormeerde, ofwel opkomende stoffen zijn in toenemende mate een uitdaging voor de maatschappij. Voor deze stoffen is vaak weinig informatie beschikbaar over het vóórkomen van de stof en de risico's voor mens en milieu. Voor een klein honderdtal aan stoffen zijn normen vastgelegd in het Nederlandse bodembeleid, terwijl duizenden stoffen geregistreerd staan in het REACH beleid waar productie en import van chemicaliën wordt bijgehouden. Het is niet haalbaar om voor deze grote aantallen niet genormeerde stoffen deze informatie aan te vullen. Met de informatie die wel beschikbaar is over deze niet genormeerde stoffen en hun mogelijke verspreiding, kan een prioritering- en beoordelingssystematiek worden ontwikkeld. Hiermee kan een prioritering voor verder onderzoek worden uitgevoerd die een basis kan zijn voor beleidsmatige acties. Het verzoek is het instrument voor twee doelen te kunnen inzetten:

- 1 een prioriteringssysteem voor onderzoek naar mogelijke aanwezigheid van opkomende stoffen, op basis van verwachte concentraties in combinatie met een inschatting van de milieubezwaarlijkheid in bodem en grondwater;
- 2 een beoordelingssysteem waarmee de 'bodembezwaarlijkheid' van een stof in het bodemsysteem wordt ingeschat wanneer deze in de bodem of ondergrond wordt aangetroffen.

De prioritering- en beoordelingssystematiek voor opkomende stoffen heeft een gelaagde benadering (in Engels: 'tiered approach'), waarbij de eerste trede via een conservatieve benadering een prioritering in stoffen aanbrengt op basis van verwachte relevantie voor het bodemcompartiment. Hierbij wordt gebruik gemaakt van beschikbare informatie over stofeigenschappen, chemische structuren en productiedata. Voor de stoffen die hoog in de prioritering eindigen én wanneer meer en betere informatie over de (eco)toxicologische risico's en het vóórkomen van de stof beschikbaar is, kan een volgende (meer gedetailleerde) trede van de prioritering- en beoordelingssystematiek worden uitgevoerd. Voor trede 2 zijn aanvullende data over vóórkomen en toxiciteit nodig. Door het hogere detailniveau kunnen de tweede en hogere treden in het model ook lokaalrelevante emissieroutes bevatten.

Voor een goede prioritering van opkomende stoffen is zowel informatie nodig over het vóórkomen van de stoffen in het milieu (lotgevallen of 'fate') als over de toxiciteit van de stoffen voor mens en milieu. De combinatie van beide leidt tot een eerste inschatting van de risico's voor mens en milieu, de 'bodembezwaarlijkheid'. In de prioritering- en beoordelingssystematiek worden deze onderwerpen daarom opgesplitst in twee onderdelen: een fate onderdeel en een (eco)tox onderdeel. De splitsing van de fate en toxiciteit van de stoffen heeft als voordeel dat de onderdelen los van elkaar kunnen opereren. In de hogere trede kunnen zo ook gemeten concentraties in het toxiciteit onderdeel ingevoerd worden.

Signalering

De prioritering- en beoordelingssystematiek staat op zichzelf en levert op verschillende punten de inhoudelijke input voor de in het eerste deel van dit rapport beschreven signaleringssystematiek.

Signalen verzamelen: De signaleringssystematiek benoemt onder 'signalen verzamelen' de eerste trede van de prioritering- en beoordelingssystematiek.

Signalen beoordelen: Het tweede deel van de signaleringssystematiek 'signalen beoordelen' sluit aan op de vervolg tredes van de prioritering- en beoordelingssystematiek. Hierin wordt een meer gedetailleerde schatting van het vóórkomen van, blootstelling aan, en de toxiciteit van stoffen gemaakt. Ook kunnen hier eventueel gemeten concentraties worden gebruikt voor prioritering en risicoschatting.

In dit deel van het rapport wordt eerst de opbouw van het opkomende stoffen model uitgewerkt (hoofdstuk 6). Vervolgens worden de fate (zie hoofdstuk 7) en (eco) toxicologie (zie hoofdstuk 8) onderdelen in aparte hoofdstukken in meer detail besproken. Hierbij wordt ook aandacht besteed aan de beschikbaarheid van data en modellen en de haalbaarheid.

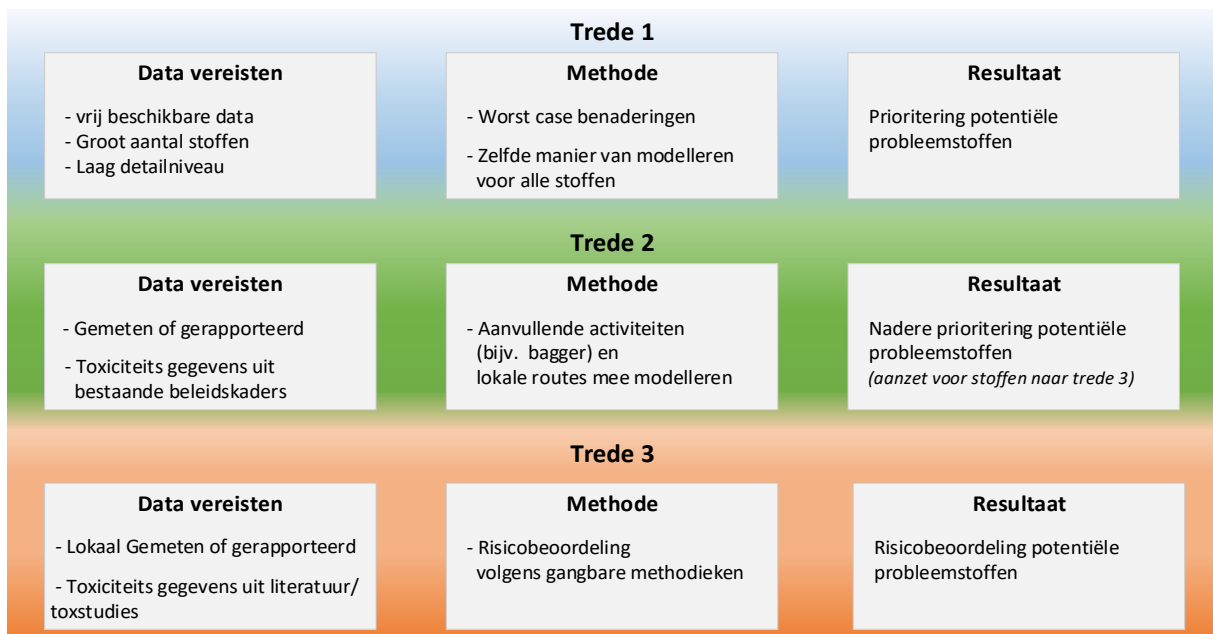
6

OPBOUW MODEL

Zoals hiervoor beschreven bestaat de prioritering- en beoordelingssystematiek uit verschillende treden, waarin met een toenemend detailniveau een fate onderdeel en een (eco)toxicologisch onderdeel uitgewerkt worden (zie afbeelding 6.1).

Met de eerste trede van het systeem wordt op basis van vrij beschikbare data over emissies van stoffen en stofeigenschappen, een prioritering aangebracht van mogelijke probleemstoffen voor bodem. Door de gemodelleerde milieuconcentratie uit het fate onderdeel te combineren met informatie over toxiciteit, kunnen opkomende stoffen worden gerangschikt op basis van hun 'bodembezwaarlijkheid'. Dit is een generieke, worst case benadering die voor veel stoffen tegelijk kan worden uitgevoerd. Daarnaast wordt in deze rangschikking een attendering meegegeven wanneer stoffen (mogelijk) persistent, bioaccumulerend en mobiel zijn. Voor stoffen die hoog eindigen, kan vervolgens in trede 2 een nadere prioritering aangebracht worden door middel van meer gedetailleerde en betere informatie, bijvoorbeeld over lokaal gebruik of specifieke categorieën zorgstoffen. Stoffen die niet of nauwelijks in Nederland worden gebruikt, zullen dan mogelijk niet meer als potentiële probleemstof aangemerkt worden. Voor de resterende stoffen kan in een derde trede een gedetailleerde risicobeoordeling worden uitgevoerd, met gemeten of geschatte lokale concentraties en aanvullende toxiciteitsgegevens.

Afbeelding 6.1 Opbouw van de verschillende treden in het opkomende stoffen model

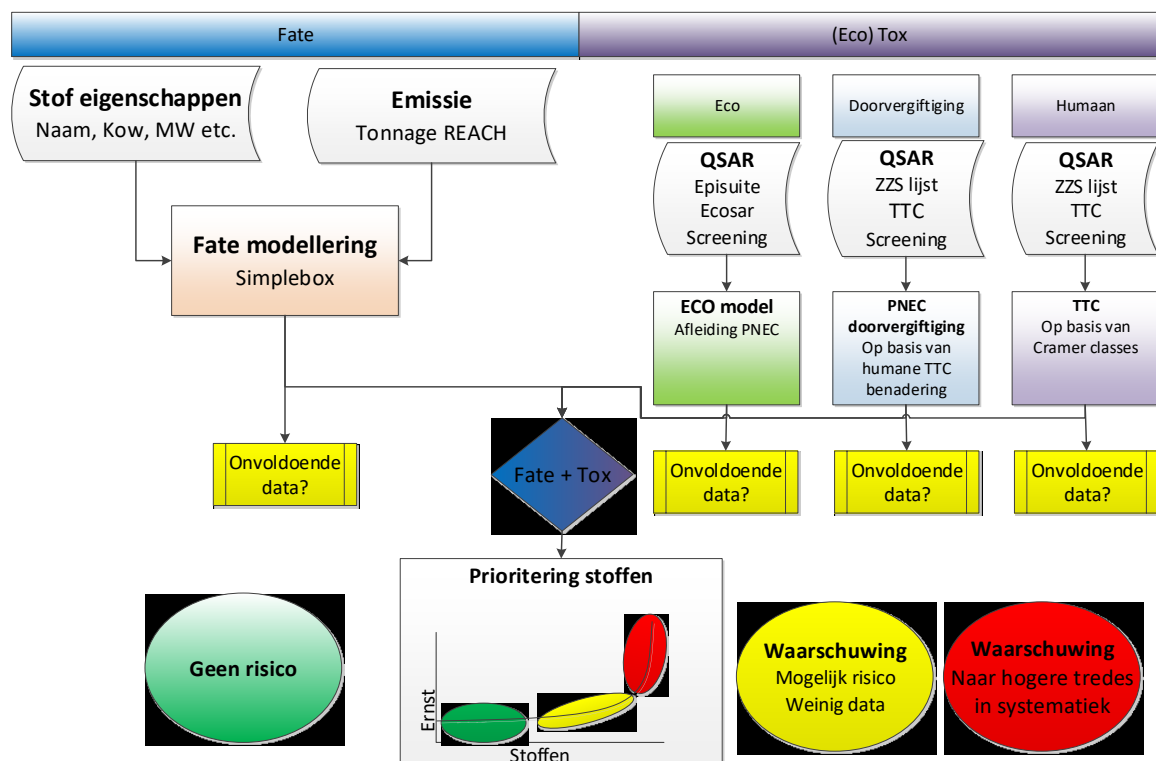


In alle drie de treden worden een fate onderdeel en een (eco)tox onderdeel doorlopen (zie afbeelding 6.2). De structuur van deze onderdelen en hun samenhang is in sterke mate afgeleid van het Solutions model dat ontwikkeld is voor stoffen in de Europese oppervlaktewateren (European Union, 2020).

Het fate onderdeel schat de in het milieu aanwezige concentraties van een stof aan de hand van de beschikbare emissiedata en stofeigenschappen. Hierbij wordt gebruik gemaakt van verschillende al bestaande databronnen en modellen voor de stofeigenschappen en emissies, zoals modellen voor de beoordeling van pesticiden. Door iedere stof waar emissiegegevens en stofeigenschappen van beschikbaar zijn op eenzelfde manier te modelleren ontstaat een eenduidige, robuuste prioritering. Trede 2 kan gestart worden wanneer op basis van trede 1 (of direct) behoefte is om in meer detail naar bepaalde bronnen, stoffen, of een bepaald gebied te kijken.

Voor het eco- en humaan-toxicologisch onderdeel wordt met bestaande systematieken een schatting gemaakt van de giftigheid van de stoffen via een vergelijking met al bekende stoffen (via Quantitative structure-activity relationships, QSARs). Hierbij wordt voor de mens uitgegaan van directe toxiciteit en voor het milieu van directe toxiciteit en doorvergiftiging naar vogels en zoogdieren. Voor een deel van de stoffen, zoals stoffen op de zeer zorgwekkende stoffenlijst (ZZS), is meer gedetailleerde informatie beschikbaar. Deze informatie heeft in trede 1 geen invloed op de prioritering om zo de prioritering eenduidig en robuust te houden. Echter wordt voor de stoffen op de ZZS lijst wel een attentie meegegeven en wordt deze meer gedetailleerde informatie wel gebruikt wanneer een tweede trede benadering uitgevoerd wordt.

Afbeelding 6.2 Overzicht opzet trede 1 prioritering- en beoordelingssystematiek met een fate onderdeel (links) en een toxicologie onderdeel (rechts)



7

UITWERKING FATE ONDERDEEL

In het fate onderdeel worden de emissies van stoffen geschat of ingevoerd, waarna de milieuconcentraties in de verschillende compartimenten gemodelleerd worden. Voor veel stoffen zijn al toelatingskaders aanwezig. Ook de toegelaten stoffen worden meegenomen in de prioritering. Voor de emissies worden 3 stofgroepen aangehouden namelijk:

- 1 geneesmiddelen (humaan en dierlijke);
- 2 bestrijdingsmiddelen (gewasbeschermingsmiddelen en biociden);
- 3 overige chemische stoffen (onder REACH geregistreerd, 'REACH-stoffen').

Voor humane geneesmiddelen geldt dat dit stoffen zijn die veelal via rioolwaterzuiveringsinstallaties in het oppervlaktewater terecht komen en minder relevant zullen zijn voor de bodem (behalve bij op de kant zetten van baggerspecie. Dit geldt ook voor een groot deel van de biociden.

Diergeneesmiddelen en biociden die in stallen worden gebruikt, kunnen op de bodem komen via toepassing van dierlijke mest (injectie/uitrijden). Ook veel gewasbeschermingsmiddelen worden direct op de bodem toegepast. De emissies en fate van deze groep stoffen en ook andere meer lokale activiteiten zoals bagger worden niet meegenomen in trede 1 en zullen te zijner tijd worden uitgewerkt in trede 2 (zie paragraaf 7.2).

Voor de overige chemische stoffen ('REACH-stoffen') zal in de eerste trede van het fate onderdeel Simplebox worden gebruikt (Schoorl et al., 2015). Simplebox is een computerprogramma dat de verdeling van stoffen over verschillende milieucompartimenten modelleert. Voor deze modellering zijn aannames over de evenwichtssituatie tussen de milieucompartimenten van belang, d.w.z. of aangenomen wordt dat het evenwicht zich al ingesteld heeft (steady-state) of dat deze situatie pas na enkele jaren bereikt wordt. Bij de benadering van de prioritering- en beoordelingssystematiek wordt Simplebox in steady state gebruikt waarbij uitgegaan wordt van emissies op Europees niveau. Tijdens het ontwikkelproces kan de afweging gemaakt worden om in plaats van steady state een tijdsafhankelijk model te gebruiken. Hierbij dient wel gelet te worden op de tijdschaal tot evenwicht waar bijvoorbeeld 10 jaar of 30 jaar voor gekozen kan worden. Vooral nog gaat de voorkeur uit naar de steady state benadering.

De stoffen die hoog scoren in de uiteindelijke prioritering kunnen in trede 2 van de systematiek verder beoordeeld worden. Daarbij kunnen lokale emissieroutes worden verkend en nauwkeuriger emissiedata worden gebruikt. Afbeelding 7.1 geeft een schematische weergave van het fate onderdeel van de prioritering- en beoordelingssystematiek. De cijfers in de tekst hierna verwijzen naar de cijfers in deze afbeelding.

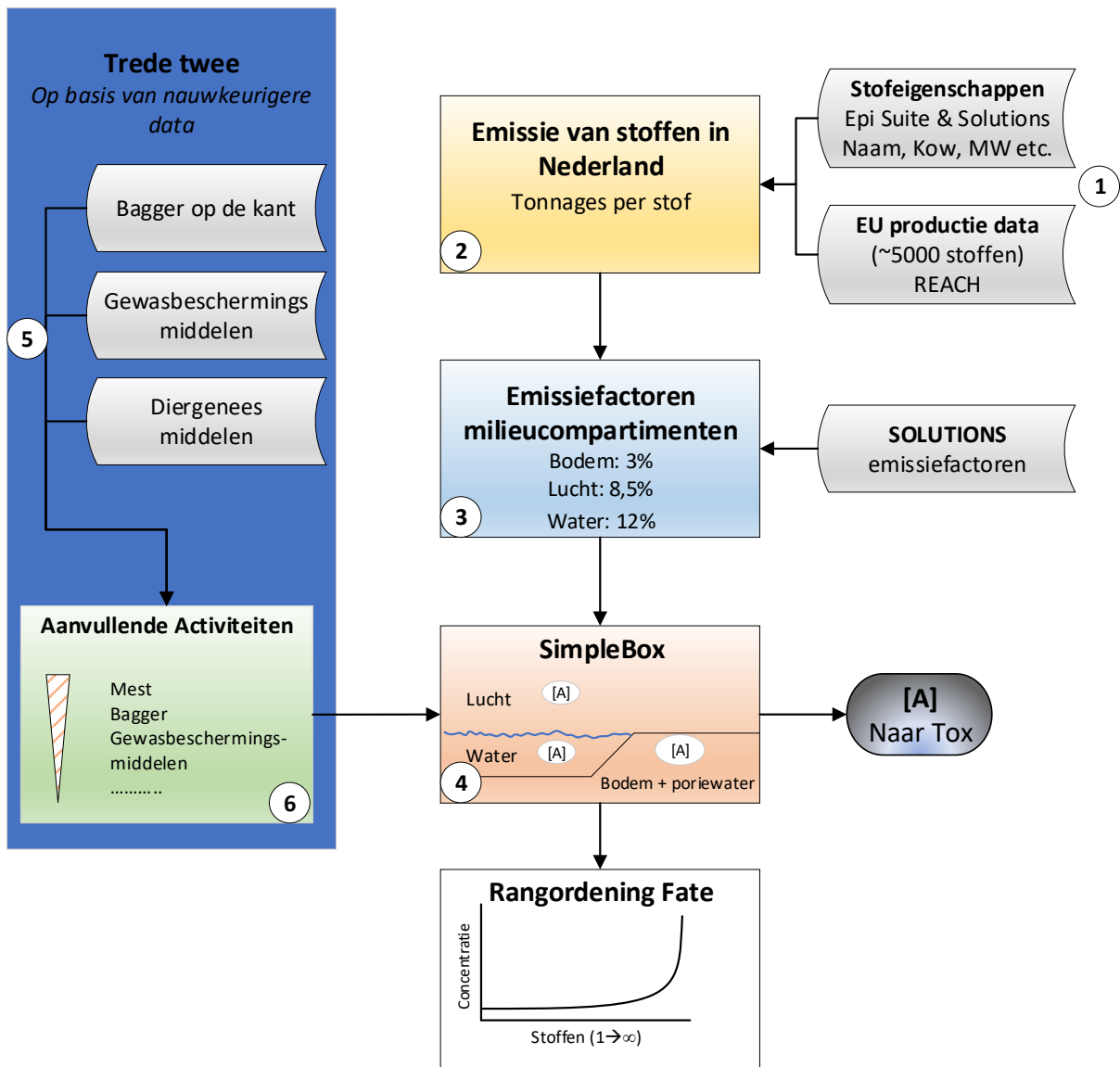
Vaststellen van de emissie naar milieucompartimenten

Het fate onderdeel volgt eenzelfde systematiek als Solutions (European Union, 2020). Dit houdt in dat gestart wordt vanuit de stoffen onder REACH en de tonnages op basis van hun productie, import en export in Europa (1) (van Gils et al., In Prep.). De Europese tonnages worden vervolgens naar een Nederlandse schaal vertaald met behulp van inwoneraantallen en een maat voor de welvaart (in dit geval het BNP) (2) (Van Gils, 2018). Vanuit deze geregionaliseerde tonnages worden emissiefactoren naar milieucompartimenten bepaald met behulp van de in Solutions ontwikkelde systematiek.

Vaststellen van bodemconcentratie

Op basis van de emissie naar de milieucompartimenten berekent Simplebox (Schoorl et al., 2015) de concentratie in de toplaag (20 cm) van de bodem en in het poriewater (4). Ten behoeve van trede 2 kunnen naast de Europese emissies in deze Simplebox berekening ook emissies voor aanvullende activiteiten zoals het opbrengen van mest of bagger toegevoegd worden (5, 6). Dit leidt uiteindelijk tot een concentratie van een stof in de bodem. Deze bodemconcentratie kan gecombineerd worden met de uitkomsten van het (eco)toxiciteit onderdeel van de prioritering- en beoordelingssystematiek. Ook wanneer er gemeten concentraties beschikbaar zijn, is het modelleren van een verwachte concentratie op basis van Europese emissies nuttig. Wanneer de gemeten concentratie namelijk veel hoger ligt dan de verwachte concentratie, kan dit een indicatie zijn voor de aanwezigheid van een lokale bron. De benoemde punten worden in het onderstaande paragrafen verder uitgewerkt.

Afbeelding 7.1 Overzicht fate onderdeel van de prioritering- en beoordelingssystematiek. Trede 1 rechts en trede 2 links in blauw



7.1 Uitwerking fate onderdeel trede 1

7.1.1 Tonnagegegevens en stoffeigenschappen

Voor de tonnage gegevens wordt gebruik gemaakt van de bestaande data in het Solutions model (European Union, 2020). Dit model maakt gebruik van tonnage gegevens van ongeveer 5000 REACH stoffen. De exacte tonnages zijn vertrouwelijk. Voor de prioritering - en beoordelingssystematiek wordt de gegeven productie bandbreedte gebruikt (deze zijn openbaar). Deze productie bandbreedte wordt gegeven in een orde grootte zoals 1 tot 10 ton per jaar. In het fate onderdeel wordt de bovenkant van de bandbreedte gebruikt als tonnage van de stof in Europa. Dit zal dus vaak een overschatting zijn, te meer omdat fabrikanten soms meer ruimte aanvragen dan ze uiteindelijk produceren of importeren. Om deze reden kan tijdens de ontwikkeling overwogen worden om het geometrisch gemiddelde van de bandbreedtes te nemen. Dit leidt dan tot een minder conservatieve benadering.

De stoffeigenschappen kunnen met behulp van EPI Suite gemodelleerd worden (US EPA, 2012). Voor de REACH stoffen zijn vaak al stoffeigenschappen bekend, echter omdat deze eigenschappen zowel een experimentele als een gemodelleerde basis kunnen hebben is besloten om de stoffeigenschappen uit REACH niet te gebruiken. Op deze manier zijn de eigenschappen van iedere stof op dezelfde datakwaliteit gebaseerd.

Voor de afleiding van de stoffeigenschappen is informatie nodig over de chemische structuur van de stof. Op basis van CAS-nummers (een uniek stofnummer) kunnen SMILES codes (een unieke code welke de structuur van de stof beschrijft) worden opgezocht of afgeleid. De SMILES code dient als basis voor de QSAR benaderingen in EPI Suite en de programma's die gebruikt worden in het toxiciteit onderdeel (hoofdstuk 8). Ook staat in hoofdstuk 4 beschreven hoe om te gaan met mengsels. Hoewel sommige software ook CAS -nummers of zelfs chemische namen accepteert als input, levert dit een bron van mogelijke fouten en variabiliteit op. De software koppelt (op de achtergrond) ook een chemische structuur aan het CAS -nummer of de naam, en dat is niet altijd de meest representatieve structuur.

7.1.2 Tonnage van Europese schaal naar Nederlandse schaal

Vervolgens worden de Europese tonnages naar de Nederlandse schaal vertaald. Bestaande methoden hiervoor brengen echter een grote onzekerheid met zich mee. In Solutions NL wordt een regionalisatie toegepast op basis van inwoneraantal en bruto nationaal product. Op basis van het bruto nationaal product is een welvaartsniveau berekend. Een grotere welvaart betekent een groter gebruik van chemicaliën, maar ook een beter ontwikkelde afvalverwerking. In Solutions NL is uitgegaan van een regionalisatie van 4 % naar Nederland op basis van genoemde factoren (van Gils et al., In Prep.). Dit percentage wordt in trede 1 gebruikt.

7.1.3 Emissiefactoren naar de milieucompartimenten

In eerste instantie is gekeken of een uitgangskoncentratie in milieucompartimenten bepaald kon worden aan de hand van SpERCs (Specific Environmental Release Categories). De SpERCs beschrijven de geschatte emissie (als fractie van de productie in tonnage) van een bepaald industrieel gebruik naar milieucompartimenten (lucht, water, bodem). Op dit moment zijn 169 SpERCs bekend die bij verschillende industriële organisaties ontwikkeld en beheerd worden (Cefic, 2012, van de Meent et al., 2018). Echter om direct van een SpERC gebruik te kunnen maken dient ook bekend te zijn welke fractie van het tonnage van een stof onder welke SpERC valt. Omdat deze verdeling van de tonnages over de SpERCs onduidelijk is en het overzicht van de SpERCs lastig te verkrijgen en te onderhouden is, is besloten om niet verder te gaan met de directe implementatie van SpERCs in de prioritering - en beoordelingssystematiek.

In het Solutions project zijn emissiefactoren afgeleid via een methode die indirect gebruik maakt van de SpERCs. Via een Monte Carlo simulatie zijn de onzekerheden in de verdeling van de stoffen en tonnages over de SpERCs onderzocht.

Het resultaat hiervan zijn enkele algemene emissiefactoren voor alle stoffen naar bodem, lucht en water. In het geval van bodem is een emissiefactor van 3 % aangenomen (van de Meent et al., 2018). Deze emissiefactor kan gebruikt worden in trede 1. Emissiefactoren uit lucht en water worden ook in Simplebox ingevoerd.

In het Solutions NL project is gepoogd om tot betere emissiefactoren te komen, echter is dit niet succesvol gebleken wegens het eerder benoemde gebrek aan data over de verdeling van stoffen over de mogelijke gebruiken.

7.1.4 Modelleren van milieuconcentratie met behulp van SimpleBox

Milieuconcentraties van stoffen kunnen gemodelleerd worden met een environmental fate model, zoals SimpleBox (Schoorl et al., 2015). SimpleBox neemt het tonnage en de emissiefactoren van een stof als start situatie (bron termen) en modelleert hiermee de milieuconcentratie in verschillende compartimenten in steady state. SimpleBox kan op verschillende schalen (regionaal, nationaal, EU) tot een milieuconcentratie komen. In eerste instantie (trede 1) bepaalt SimpleBox een concentratie op landelijk niveau op basis van de geregionaliseerde tonnagegegevens. Lokale emissieroutes zoals bagger, diergeneesmiddelen en gewasbeschermingsmiddelen, kunnen in trede 2 worden toegevoegd aan SimpleBox (zie paragraaf 4.2).

Naast brontermen in de vorm van tonnages en emissiefactoren, maakt SimpleBox ook gebruik van afbraaktermen. Het meenemen van afbraak van stoffen in het model voorkomt dat de milieuconcentratie onrealistisch hoog wordt door continue oplading van het milieu via emissie. Er moet nog goed gekeken worden naar de beschikbaarheid van gegevens over de afbraak van stoffen in de bodem (als halfwaardetijd DT50 in bodem). Wanneer er geen DT50 waarden beschikbaar zijn, dan kunnen deze geschat worden met behulp van QSAR's uit de SMILES notatie van de stof (US EPA, 2012). Het programma EPIWEB 4.1 van US EPA bevat een BioWin3 module waarin de totale afbreekbaarheid berekend wordt en weergegeven als een getal voor een schatting. Dit getal is een heel grove maat voor de bioafbreekbaarheid en wordt door de schrijvers van het programma niet gebruikt om een halfwaardetijd DT50 te berekenen. Toch wordt dit door Arnot et al. (2005) wel gedaan en ook wordt het gebruikt in een EFSA milieuriscoschatting over additieven in diervoeder (Bampidis et al., 2019)

7.2 Voorzet Fate trede 2

In de tweede trede van het beoordeling- en prioriteringssysteem moeten enkele extra stappen gezet worden. Ten eerste zijn de data vereisten in deze trede scherper. Voor de stoffeigenschappen zou nu de experimentele data uit REACH gebruikt kunnen worden. Ook dienen de emissiegegevens van stoffen op lokale schaal bekend te zijn. Vanuit deze meer lokale emissiegegevens kan vervolgens met het SimpleBox model wederom de concentraties in de verschillende milieucompartimenten berekend worden. Ook kan SimpleBox aangepast worden, zodat gerekend kan worden met de aanvullende activiteiten zoals het baggeren van oppervlaktewateren en het toepassen van mest (met diergeneesmiddelen) en gewasbeschermingsmiddelen. Voor deze aanvullende activiteiten zijn vaak al bestaande gedetailleerde modellen waarmee de activiteit getoetst wordt aan wettelijke normen. In de beoordeling van gewasbeschermingsmiddelen wordt bijvoorbeeld al op perceelniveau gerekend.

7.2.1 Aanvullende activiteiten

Een belangrijk onderdeel van prioritering en beoordelingssysteem is dat het ook verschillende routes ten gevolge van aanvullende activiteiten kan doorrekenen. Voor veel bronnen en stoffen die hierna genoemd worden zal het gaan om een belasting op kleiner schaalniveau of om betere of meer specifieke emissiedata die zich goed lenen voor de tweede trede. Op deze manier kan het model een bijdrage leveren aan oplossingen voor lokale stofproblematiek in de bodem.

Om de lokale routes overzichtelijk te houden zijn deze in vier groepen opgesplitst. Deze lijst kan tijdens de ontwikkeling van het model nog veranderen op basis van de haalbaarheid en beschikbaarheid van kennis:

- 1 landbouw gerelateerde routes:
 - 1 additieven diervoeder (via mest naar bodem);
 - 2 diergeneesmiddelen (via mest naar bodem);
 - 3 schoonmaakmiddelen en biociden in de stal (mogelijk lokale lozing of naar rwzi);
 - 4 gewasbeschermingsmiddelen (directe toepassing op land);
 - 5 kunstmest (directe toepassing op land);
- 2 landelijke routes:
 - 1 bagger (opbrengen op aangrenzend perceel of naar een depot);
 - 2 toepassen van bouwstoffen in infra, bijvoorbeeld bodemmassen, staalslakken, thermisch gereinigde grond (TGG);
- 3 stedelijke routes:
 - 1 afspoeling van wegen en betegelde gebieden (met name bron verkeer);
 - 2 bouwmaterialen en biociden daarin (afspoeling naar bodem en riool);
 - 3 open toepassingen (gebruiksartikelen, zoals spuitbussen ed.);
- 4 routes omtrent grondverzet:
 - 1 verzet van landelijk naar stedelijk gebied en andersom.

7.2.2 Integratie aanvullende activiteiten in SimpleBox

De aanvullende activiteiten brengen een eigen emissie van een stof met zich mee welke in het SimpleBox model ingevoerd kunnen worden. Deze integratie zal voor de activiteiten op verschillende manieren moeten gebeuren. Daarnaast dient rekening gehouden te worden met realistische scenario's. Bijvoorbeeld, landbouw gerelateerde activiteiten kunnen niet tegelijk met stedelijke activiteiten doorgerekend worden. Bij de integratie van extra bronnen in het SimpleBox model moet ook gelet worden op de mogelijkheid om vanuit een stoffen-insteek te rekenen. Dat wil zeggen dat het model voor één stof enkele belangrijke (lokale) activiteiten kan identificeren.

Aanvullende activiteiten en routes kunnen op enkele manieren in het SimpleBox model geïmplementeerd worden. Wanneer de aanvullende activiteit een emissie naar een al bestaand SimpleBox compartiment betreft (zoals diergeneesmiddelen via dier en mest in landbouwgrond) kan de emissie van deze activiteit direct in het model ingevoerd worden. Eventueel kunnen verplaatsingen van het ene naar het andere compartiment aangemaakt worden (zoals sediment dat in de vorm van bagger op de landbodem terecht komt). Wanneer de activiteit een compartiment betreft dat nog niet in SimpleBox zit, moet een nieuwe lokale 'box' ontworpen te worden. Hier kunnen vervolgens nieuwe evenwichten tussen de activiteit 'box' en de regionale 'box' opgesteld worden. Wanneer dit niet mogelijk is kan gekozen worden om milieuconcentraties te sommeren

7.3 Databeschikbaarheid fate onderdeel

In bovenstaande paragrafen zijn enkele databases en bronnen genoemd. Een voorlopig overzicht van mogelijke databronnen en beschikbaarheid wordt gegeven in de tabel op de volgende pagina. Dit overzicht dient als startpunt voor de ontwikkeling van het fate onderdeel.

Tabel 7.1. Data beschikbaarheid voor het fate onderdeel

Stap	Beschrijving	Invoer	Bron
1	Emissiedata en stofeigenschappen	Overzicht van REACH chemicaliën SMILES code voor Epi Suite	REACH public database (ECHA, 2020) Epi Suite (US EPA, 2012)
2	Emissie van EU naar NL schaal	Solutions project stelt dat 4 % van de EU emissies naar Nederland gaan	(van Gils et al., In Prep.)
3	Verdeling van emissies over milieucompartimenten	Solutions: 3 % naar bodem, 8,5 % naar lucht, 12 % naar water	(van de Meent et al., 2018, van Gils et al., In Prep.)
4	Gebruik van SimpleBox	Het SimpleBox model is in beheer van het RIVM Stofeigenschappen en afbraakparameters kunnen uit REACH of Epiwin gehaald worden	(Schoorl et al., 2015) (EC, 2020) (US EPA, 2012)
5	Aanvullende activiteiten	De emissies van aanvullende activiteiten dienen achterhaald te worden Diergeneesmiddelen Gewasbeschermingsmiddelen Bagger: mogelijk gebruik van Bagger op de kant	NVWA – afzetgegevens gewasbeschermings-middelen ¹ (NVWA, 2018) STOWA synthese diergeneesmiddelen (2019) ¹ (Lahr et al., 2019) Bestrijdingsmiddelen-atlas (Deltares, 2017, Royal HaskoningDHV, 2020) RIVM rapport Beslissen over bagger op de bodem ¹ (van Noort et al., 2006)

¹ Gebruik van deze bronnen in trede 2 moet nog uitgewerkt worden in vervolgstappen.



UITWERKING TOXICITEIT MODEL

Het toxiciteit onderdeel van het beoordeling en prioriteringssysteem bestaat uit een humaan toxicologische lijn, een ecotoxicologische lijn en een ecologische doorvergiftigingslijn. Voor elk van deze lijnen wordt de informatie over de toxiciteit van de stof gecombineerd met de geschatte milieu concentraties uit het fate onderdeel. Dit levert voor iedere lijn een prioritering van stoffen. De prioritering - en beoordelingssystematiek zal daarom uiteindelijk tot drie risicogetallen (en prioriteringen) leiden. Voor de vervolgstappen kan bijvoorbeeld de top tien van elke lijst worden gebruikt, maar er kan ook een prioritering op basis van de hoogst scorende stoffen uit alle drie de lijsten gemaakt worden.

8.1 Screening voor ZZS en mogelijke ZZS

In de trede 1 benadering in het toxiciteit onderdeel wordt een prioritering gemaakt op basis van een risico schatting (zie paragrafen 5.2, 5.3, en 5.4). Om ook informatie mee te nemen of een stof mogelijk een Zeer Zorgwekkende Stof (ZZS) is wordt in elk toxiciteitsonderdeel voor ZZS een attentering gegeven. ZZS zijn stoffen die zijn geïdentificeerd als: CMR (carcinogeen, mutageen, reprotoxisch), PBT/vPvB (persistent, bioaccumulerend en toxisch, of zeer persistent en zeer bioaccumulerend), of ED (endocrine disruptie, ofwel hormoon versturende stoffen). Deze attentering wordt meegegeven omdat ZZS-stoffen lastig te modelleren zijn en vaak op lange termijn ophopen of sterk verspreiden in het milieu. De attenteringen hebben geen invloed op de prioritering.

Naast de hierboven beschreven ZZS-categorieën zijn er gevorderde plannen van de Europese Commissie om ook persistente, toxische en mobiele (PMT/vPvM) verbindingen in de REACH-wetgeving op te nemen, als reden voor 'zeer ernstige zorgstof' (SVHC). Dit type verbindingen verplaatst zich makkelijk door verschillende compartimenten in het milieu, waardoor ze zowel in bodem, water als grondwater aan te tonen zijn. Door deze eigenschappen kunnen deze stoffen de kwaliteit van grond- en drinkwater nadelig beïnvloeden. Een recent voorbeeld van verbindingen die geclassificeerd zijn als SVHC op basis van hun PMT-eigenschappen. Sommige PFAS-verbindingen behoren tot deze lijst. De PFAS-verbindingen die gebruikt worden in de GenX technologie zijn in juni 2019 door de European Chemicals Agency (ECHA) unaniem geclassificeerd als SVHC vanwege hun PMT-eigenschappen. De overheid wil ZZS zoveel mogelijk uit de leefomgeving weren. Het Activiteitenbesluit (2019) verplicht bedrijven hun lozingen en uitstoot van ZZS naar lucht en water te voorkomen. Als dat niet haalbaar is, dan moeten de emissies zoveel mogelijk worden beperkt (minimalisatieverplichting) (RIVM, 2020).

Naast de lijst van ZZS, is er ook een lijst van potentiële ZZS (pZZS). Dit is een hulpmiddel voor bedrijven en vergunningverleners. Potentiële ZZS zijn stoffen die mogelijk voldoen aan de ZZS-criteria, maar nog niet als ZZS zijn geïdentificeerd. Dit kan zijn omdat bepaalde gegevens ontbreken, of omdat de evaluatie van de beschikbare gegevens nog moet plaatsvinden. Het doel is de uitstoot van potentiële ZZS uit voorzorg te beperken.

8.1.1 Methoden voor screening ZZS en mogelijke ZZS

Er zijn verschillende mogelijkheden om ZZS en mogelijke ZZS te beoordelen. Deze paragraaf stelt twee methoden voor waarop in trede 1 de screening uitgevoerd kan worden. Bij deze eerste screening zal op basis van enkele afkapwaarden een ZZS of mogelijke ZZS attentie krijgen aan de stof toegevoegd worden. Dit betekent echter dat stoffen die net onder deze afkapwaarden liggen geen attentie krijgen. Enkele van de benoemde tools bieden voor trede 2 de mogelijkheid voor een meer verfijnde screening door een score toe te kennen aan een stof. Met deze score kunnen stoffen op de ZZS en mogelijke ZZS-eigenschappen geprioriteerd worden.

Screening op basis van Epi Suite

De vaststelling of een stof onder de PBT of vPvB categorieën valt wordt door middel van QSARs gedaan. Voor deze vaststelling is een specifiek beoordelingskader beschikbaar (EC, 2020). Dit kader toetst of de stof als PBT of vPvB stof beschouwd kan worden volgens de REACH-richtlijnen. In eerste instantie wordt beoordeeld of de stof de persistentiecriteria overschrijdt. Wanneer dit het geval is moeten de criteria voor bioaccumulatie en toxiciteit beoordeeld worden.

Voor de beoordeling van mobiliteit voor PMT of vPvM stoffen zijn nog geen geharmoniseerde Europese criteria opgesteld, maar er is onder andere in de REACH-wetgeving en de herziene Europese Drinkwaterrichtlijn veel aandacht voor. De door RIVM ontwikkelde screening tool kan hier na afronding worden toegevoegd (Hartmann et al., In preparation). Hierin wordt in navolging van andere nationale kaders een $\log K_{oc}$ van 3 gebruikt als bovengrens voor mobiele stoffen. Deze waarde wijkt af van de door het Duitse Umwelt Bundesamt (UBA) voorgestelde waarde van 4 en beschouwd dus minder stoffen als mobiel. Totdat criteria zijn vastgelegd op Europees niveau moeten deze waarden als voorlopige waarden worden beschouwd.

Voor een groot aantal organische stoffen kan voor de beoordeling aan deze PBT/PMT criteria een QSAR benadering van EPI Suite (US EPA, 2012) gebruikt worden. Op basis van de chemische structuur kunnen afbreekbaarheid en $\log K_{ow}$, $\log K_{oa}$ en $\log K_{oc}$ bepaald worden. Onderstaande tabel geeft een overzicht weer van mogelijke criteria van PBT waaraan getoetst kan worden. Deze tabel is gebaseerd op appendix E van de EFSA guidance on environmental risk assessment of feed additives.

Tabel 8.1 Overzicht van criteria voor Persistent Bioaccumulerende toxische stoffen

PBT/PMT	Criterium	Waarde
waarschijnlijk Persistent	score ¹	$P < 2,25$
mogelijk Persistent	score ¹	$2,25 < P < 2,75$
Bioaccumulerend aquatisch	$\log K_{ow}$	$> 4,5$
Bioaccumulerend lucht-ademend	$\log K_{ow}$	> 2
	$\log K_{oa}$	> 5
mobiel	$\log K_{oc}$	< 3

¹ gebruikmakend van BLOWIN 3.

Screening op basis van chemical similarity

Bij RIVM-VSP is recent een eenvoudige screening methode ontwikkeld voor het identificeren van additionele stoffen die lijken op ZZS (Wassenaar et al., 2019). Deze methodologie is geautomatiseerd en via het internet beschikbaar: <https://www.rivm.nl/publicaties/chemical-similarity-to-identify-potential-substances-of-very-high-concern-effective>. Voor elke stof wordt een chemical similarity coëfficiënt (waarde tussen de 0-1, of 0-100 %) berekend ten opzichte van alle ~1500 bestaande Nederlandse ZZS-stoffen. Als de stof boven een vaststaande threshold (bijvoorbeeld 95 %) uitkomt is het mogelijk een ZZS.

Op deze wijze kunnen bestaande ZZS worden geïdentificeerd met een nauwkeurigheid van ~80 % juiste identificatie voor de zorgstoffen die CMR zijn, en tot ~95 % juiste identificatie voor stoffen met een PBT/vPvB zorg voor het milieu (Wassenaar et al., 2019).

Recent is door het RIVM een PMT/vPvM screeningstool ontwikkeld (Hartmann et al., In preparation), naar analogie van de eerder ontwikkelde PBT/POP screening tool (Rorije et al., 2011) In deze screeningstool wordt onder andere gebruik gemaakt van de functionaliteit van de OECD QSAR Toolbox om verbindingen op basis van hun molecuulstructuur te classificeren als mogelijk 1) genotoxisch, 2) kankerverwekkend, 3) schadelijk voor de voortplanting of 4) hormoonverstoring. Wanneer de similarity tool hiermee wordt uitgebreid, kan in 1 stap de categorie pZZS gescreend worden.

In een eerste screening stap kunnen ZZS, pZZS of stoffen die lijken op bestaande ZZS gemarkeerd worden; dit is in de prioritering terug te zien als een attentie op de (mogelijke) ZZS status. In paragraaf 8.2.2 wordt beschreven hoe de chemical similarity tool gebruikt kan worden in een tweede benadering.

8.1.2 Databeschikbaarheid ZZS-screening

Tabel 8.2 geeft een overzicht van de in bovenstaande paragrafen benoemde data en bronnen.

Tabel 8.2 Databeschikbaarheid ZZS-screening

Type data	Bron
QSAR modellen gebaseerd op smiles notatie	OECD QSAR Toolbox (freeware) Lhasa Derek Nexus (licentie, RIVM) ToxTree (freeware) VEGA (freeware)
Screening tools	(Rorije et al., 2011) (Hartmann et al., In preparation)
Similarity tool	In R-code te programmeren. Hier is al veel voorwerk verricht voor de ZZS-similarity tool (VSP, RIVM). (Wassenaar et al., 2019) Similarity ten opzichte van een specifieke stof kan ook voor een dataset binnen de OECD QSAR Toolbox gegenereerd worden, en geëxporteerd naar tekst/Excel bestanden.

8.2 Uitwerking humane toxiciteit trede 1

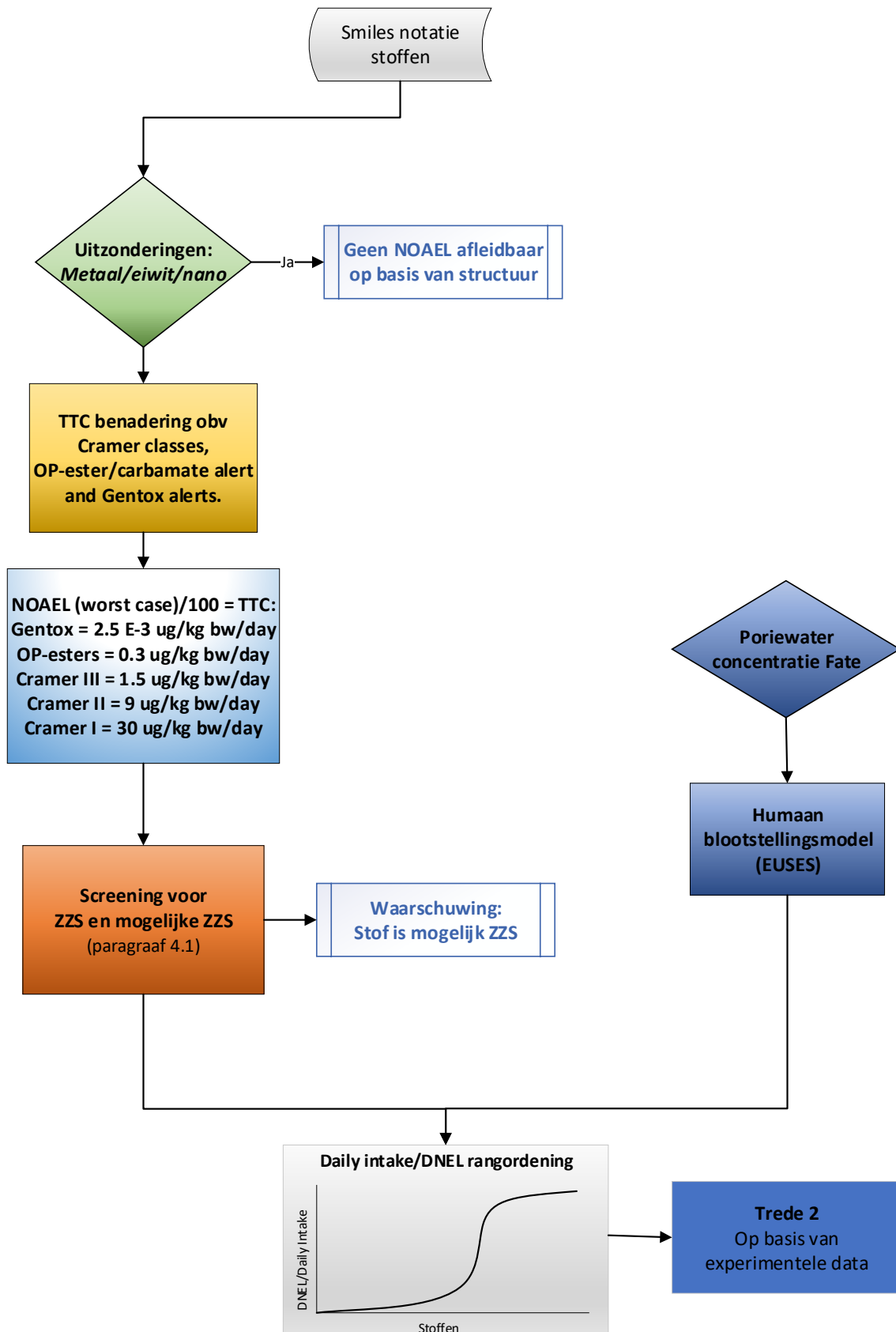
8.2.1 Prioritering op basis van het humaan gezondheidsrisico

Voor het prioriteren op basis van de humane toxicologie is naast de (humane) blootstellingsschatting uit het fate deel, ook een gezondheidskundige risicogrenswaarde vereist. De gezondheidskundige risicogrenswaarde is de hoeveelheid van een stof die mensen dagelijks levenslang mogen binnenkrijgen zonder negatieve gezondheidseffecten. Deze risicogrenswaarden worden gebaseerd op in vivo toxiciteitsdata, zoals een Lowest Observed Adverse Effect Level (LOAEL) of No Observed Adverse Effect level (NOAEL) uit proefdierstudies. Deze NOAEL of LOAEL waarop een aantal assessment factoren worden toegepast, gecombineerd met de dagelijkse blootstelling leiden tot een inschatting van het risico. Omdat dit voor een prioritering van een groot aantal stoffen te hoge eisen stelt aan de beschikbaarheid van data en expertkennis, kan deze methodiek binnen dit prioriteringssysteem niet op individueel stofniveau worden toegepast. Om deze reden wordt in trede 1 van het prioriteringssysteem een inschatting van de toxiciteit gemaakt op basis van de chemische structuur.

Op deze manier kan de toxiciteit van de grote hoeveelheid stoffen worden vergeleken om zo tot een worst case risico inschatting, en daarmee tot een prioritering te komen. De risico-inschatting uit de eerste twee tredes moet expliciet niet gezien worden als een echte (individuele stof) risicobeoordeling.

Voor de inschatting van de toxiciteit op basis van chemische structuur zijn meerdere opties beschikbaar. In trede 1 is om redenen van algemene toepasbaarheid gekozen voor toepassen van de Threshold of Toxicological Concern (TTC). De TTC-benadering is een methode om op basis van chemische structuur een veilige dagelijkse inname voor mensen te schatten (EFSA, 2016). Er is gekozen voor de TTC-benadering, omdat andere methoden voor het schatten van een LOAEL of NOAEL erg beperkt zijn. Vergeleken met de (berekende) blootstelling. De ratio van blootstelling en TTC levert een risicoquotiënt, hier aangeduid als 'risk characterisation ratio' ($R_{CR\text{humaaan}}^1$). Stoffen met een hoge $R_{CR\text{humaaan}}^1$ eindigen hoog in de prioritering. Daarnaast kunnen attenteringen voor individuele stoffen meegenomen worden op basis van de ZZS status (Zeer Zorgwekkende Stoffen) zoals beschreven in paragraaf 8.1. Afbeelding 8.1 geeft een overzicht van het onderdeel humane toxiciteit in trede 1. De verschillende stappen worden hieronder toegelicht.

Afbeelding 8.1 Opbouw beoordeling humane toxiciteit van stoffen. De stappen die doorlopen worden voor een trede 1 prioritering. In blauw staat aangegeven waar trede twee aanhaakt



1 - Bepalen van een (representatieve) chemische structuur

Zoals in paragraaf 4.1.1 beschreven is kan vanuit een CAS-nummer een SMILES-code worden opgezocht welke de chemische structuur van een stof beschrijft. Deze SMILES-code dient dan ook als startpunt voor QSAR-benaderingen welke op basis van de structuur chemische eigenschappen kunnen afleiden. SMILES-codes beschrijven echter alleen zuivere stoffen. In het geval van (technische, biologische, variabele) mengsels (UVCBs) zullen één of meerdere representatieve chemische structuren moeten worden gekozen. Als niet bekend is wat het aandeel van de verschillende componenten in het mengsel is, wordt gekozen om uiteindelijk de worst-case component (met de laagste TTC) voor 100 % te gebruiken voor de prioritering. Als de componenten niet (of niet allemaal) chemisch gekarakteriseerd kunnen worden kan er geen schatting gemaakt worden van de toxiciteit op basis van de structuur, maar ook de blootstellingsschatting zal dan niet mogelijk zijn. Voor zulke onbekende mengsels kan in trede 1 geen (geautomatiseerde) prioritering/risicoschatting uitgevoerd worden.

Als de componenten niet of niet allemaal chemisch gekarakteriseerd kunnen worden, kan er geen schatting gemaakt worden van de toxiciteit op basis van de structuur, maar ook de blootstellingsschatting zal dan niet mogelijk zijn. Voor zulke onbekende mengsels kan in trede 1 geen (geautomatiseerde) prioritering uitgevoerd worden.

2 - Uitzonderingen

Er zijn vele chemische stoffen waarvoor het niet goed mogelijk is om op basis van het TTC-concept een schatting te maken van de toxiciteit. Dit geldt voor de volgende typen stoffen: metalen, metaal-organische verbindingen, enzymen, nano-materialen, polymeren, anorganische stoffen, radioactieve stoffen en stoffen met hormoon-werking. Dit komt omdat zulke stoffen niet, of nauwelijks voorkomen in de database die voor de TTC zijn gebruikt. In dit geval kan de geautomatiseerde risicoschatting met behulp van TTC's niet worden toegepast, dit is weergegeven in de tweede stap in het flow-schema: Uitzonderingen.

3 - Afleiden van Threshold of Toxicological Concern (TTC)

Het TTC-concept wordt veel toegepast bijvoorbeeld in de risicobeoordeling van voedingsmiddelen. Een voorbeeld is de beoordeling van verpakkingsmaterialen waaruit sporen van chemische stoffen zouden kunnen migreren (voedselcontactmaterialen). TTC's worden ook gebruikt om iets te zeggen over (planten)metabolieten van bestrijdingsmiddelen residuen waarvoor geen toxiciteitsdata beschikbaar zijn. Er worden 5 klassen van stoffen onderscheiden met daaraan gekoppeld een grens van blootstelling waaronder geen effecten verwacht worden (zie appendix A). Is de blootstelling lager dan deze ondergrens, dan wordt de kans op blijvende schadelijke effecten bij chronische (levenslange) blootstelling bijzonder klein geacht. Het indelen in de Cramer klassen kan ook geautomatiseerd worden gedaan met behulp van de OECD QSAR Toolbox software of de ToxTree software.

4- Screening voor ZZS en mogelijke ZZS

Een ZZS-screening wordt in het humane toxiciteit onderdeel uitgevoerd om attenteringen voor ZZS toe te voegen. Deze screening staat beschreven in paragraaf 8.1.

5 - Risico characterisation ratio op basis van TTC (trede 1)

Als prioriterings-indicator kan de risk characterisation ratio humaan voor trede 1 (RCR_{humaan}^1) gebruikt worden, analoog aan de PEC/PNEC-benadering in de ecotoxicologische risicobenadering (paragraaf 8.3.1).

$$RCR_{\text{humaan}}^1 = \text{Dagelijkse inname} / \text{TTC}$$

Als een (totale) dagelijkse inname onder de TTC blijft wordt er geen risico verwacht, erboven is er *mogelijk* een risico. De waarde van de RCR_{humaan}^1 geeft aan hoe groot de mate van overschrijding van de TTC is en kan daarmee niet als een echte risico-coëfficiënt geïnterpreteerd worden.

Om tot een RCR_{humaan}^1 te komen dient een inschatting gemaakt te worden van de blootstelling. Deze blootstelling kan geschat worden met behulp van een humaan blootstellingsmodel als EUSES (Lijzen and Rikken, 2004). Dit model bepaalt de totale blootstelling aan stoffen in de bodem via verschillende blootstellingsroutes. Bodemrelevante blootstellingsroutes in EUSES zijn de directe consumptie van grondwater als drinkwater en de consumptie van gewassen en veeproducten (tabel 8.3).

De blootstellingsroutes tellen op tot een totale blootstelling (ofwel dagelijkse inname) welke met de afgeleide TTC-waarde vergeleken kunnen worden.

Tabel 8.3. Overzicht bodemrelevante blootstellingsroutes EUSES

Geaggregeerde blootstellingsroutes	Blootstellingsroute
drinkwater	directe consumptie grondwater
consumptie gewas	consumptie bladgewas
	consumptie wortelgewas
consumptie veeproducten	consumptie vlees
	consumptie melkproducten

Wanneer de gehele TTC opgevuld wordt door blootstelling aan stoffen vanuit de bodem, wordt geen rekening gehouden met mogelijke blootstelling vanuit andere compartimenten. Deze additionele blootstelling uit andere compartimenten kan meegenomen worden door niet de gehele TTC mee te nemen voor de blootstelling aan bodem, maar een fractie hiervan te gebruiken. Dit wordt bijvoorbeeld gedaan in het kader van risicoschattingen voor de directe consumptie van grondwater als drinkwater, waar bij gebrek aan kennis over andere routes gesteld wordt dat 20 % van de TTC gereserveerd is voor deze drinkwater route (van der Aa et al., 2017).

Wanneer echter een blootstellingsmodel als EUSES gebruikt wordt kan deze directe consumptie van drinkwater t.o.v. 20 % van de TTC niet zomaar bij de overige blootstellingsroutes opgeteld worden. Om deze reden kunnen de overige EUSES routes ook afzonderlijk aan 20 % van de TTC getoetst worden. Wanneer iedere route afzonderlijk aan 20 % van de TTC getoetst wordt dient ook gekeken te worden of de routes gezamenlijk niet boven 100 % van de TTC uitkomen.

Tijdens de ontwikkeling van het humane toxiciteit onderdeel dient de aggregatie van de afzonderlijke routes ten opzichte van de 20 % van de TTC nog verder onderzocht te worden. Wanneer bijvoorbeeld de blootstellingsroutes consumptie bladgewas en consumptie wortelgewas eerst geaggregeerd worden alvorens deze aan de TTC getoetst worden, leidt dit tot een meer conservatieve RCR_{humaaan}^1 waarde dan wanneer de blootstellingsroutes afzonderlijk aan de TTC getoetst worden. Daarnaast dient tijdens de ontwikkeling van het humane toxiciteit onderdeel ook geëvalueerd worden of nog andere blootstellingsroutes in het EUSES-model meegenomen moeten worden. De toets aan 100 % van de TTC kan tijdens de ontwikkelfase bijgesteld worden naar een lager percentage als wordt gevonden dat hiermee toch niet genoeg rekening gehouden wordt met blootstelling vanuit andere compartimenten. Bovenstaande overwegingen zou leiden tot een volgende systematiek:

De hoogste van de volgende twee opties wordt als RCR_{humaaan}^1 genomen:

- 1 blootstelling via afzonderlijke routes vergeleken met 20 % van de TTC. De hoogste RCR wordt meegenomen;
- 2 blootstelling van alle gekozen blootstellingsroutes vergeleken met 100 % van de TTC.

8.2.2 Trede 2 humane toxiciteit

Op basis van de prioritering uit trede 1 kan de humane toxiciteit van stoffen in trede 2 verder beoordeeld worden. Hierbij wordt zoveel mogelijk gebruik gemaakt van experimentele data. Deze data is vaak sterk versnipperd en specialistisch en daarom lastig om in een geautomatiseerd proces te verwerken. Daarom moet tijdens de ontwikkeling van trede 1 ook aandacht besteed worden aan de haalbaarheid van de stappen in trede 2. De volgende paragraaf geeft een mogelijke structuur voor trede 2 weer.

Geautomatiseerde read-across DNEL (Derived No Effect Level) bepaling voor directe vergelijking met blootstelling

Voor een tweede trede benadering is er de mogelijkheid om de chemical similarity tool (Wassenaar et al., 2019), en de mogelijkheid tot read-across op basis van chemical similarity te combineren met een database met Point of Departure data voor een groter aantal stoffen dan de 1500 ZZS. De database met Point of Departure data kan gebaseerd zijn op TDI en RfD databases zoals IRIS en ATSDR-databases, of op MTR-gegevens van eerder uitgevoerde ad hoc beoordelingen door het RIVM. Ook zouden DNELs uit de REACH IUCLIDdatabase gebruikt kunnen worden, hoewel de kwaliteit van deze DNELs ter discussie gesteld is door het RIVM (Bodar et al., 2013). Op deze manier kan gebruik gemaakt worden van de beschikbare hogere kwaliteit toxiciteitsgegevens dan in Trede 1. Echter bestaat er nog geen alomvattende Point of Departure database en door de versnipperdheid van de toxiciteitsdata is deze database ook moeilijk aan te leggen en te onderhouden. Een voorgestelde structuur voor trede twee is weergegeven in afbeelding 8.2.

De volgende stappen zijn nodig voor een geautomatiseerde aanpak:

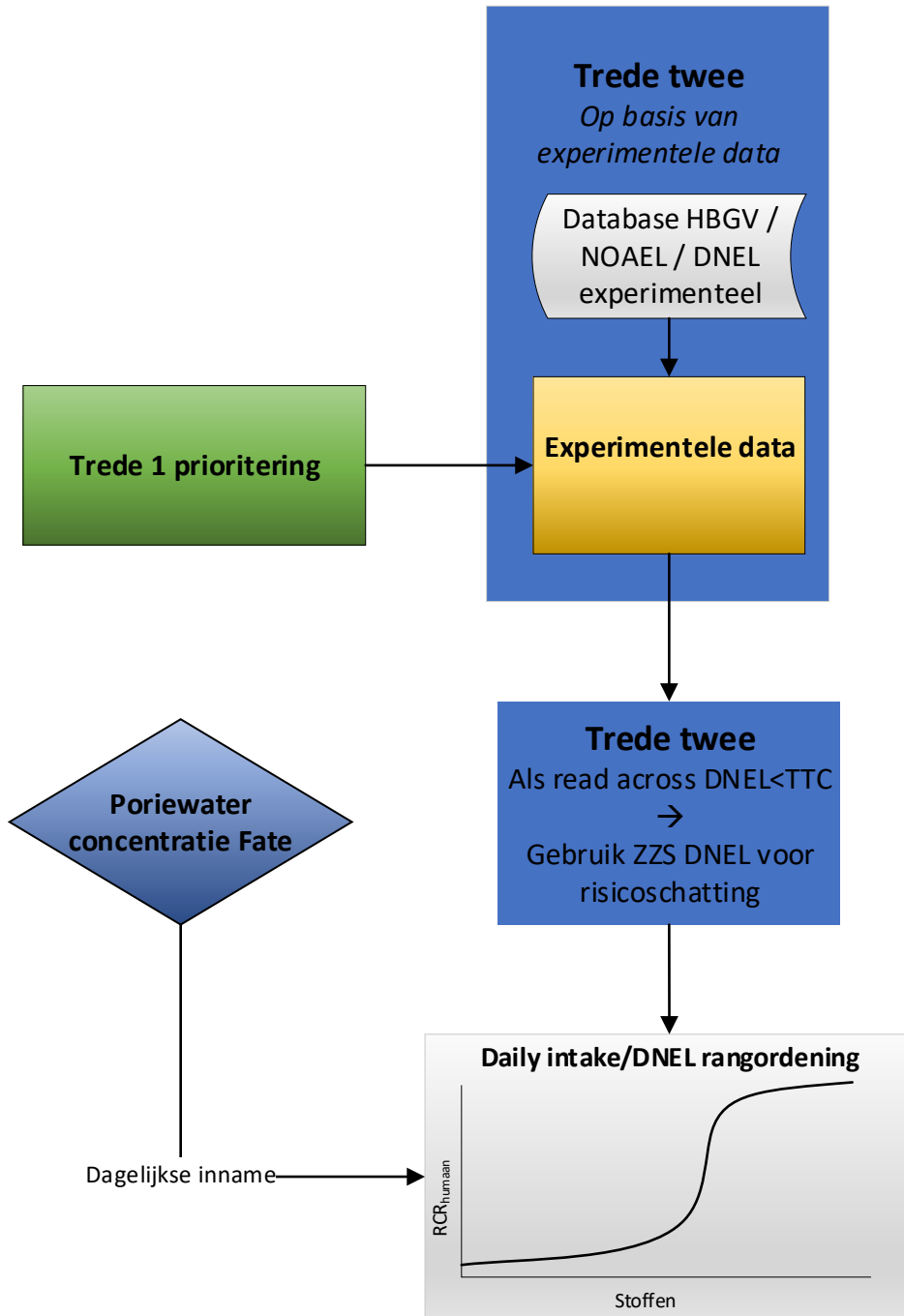
- 1 database van Points-of-Departure en bijbehorende chemische structuren;
- 2 chemical similarity berekening (similarity tool) van nieuwe stof ten opzichte van alle stoffen in de database;
- 3 op basis van de similarity coëfficiënt een read-across uitvoeren. Deze similarity coëfficiënt kan vervolgens kwantitatief gebruikt worden voor een (extra) assessment factor. Tabel 8.4 geeft een voorbeeld van mogelijke assessment factoren bij de similarity coëfficiënt. Op basis van casestudies zou een praktische invulling gegeven moeten worden aan de specifieke getallen voor similarity en assessment factoren.

Tabel 8.4. Mogelijke assessment factoren bij similarity coëfficiënten

Similarity to substance in database [%]	Assessment factor
100	DNEL
90 – 100	DNEL / 2
80 – 90	DNEL / 5
70 – 80	DNEL / 10
<70	geen read across mogelijk

Een nadeel van deze aanpak is echter dat erg veel werk nodig is voor het maken van een database met Point of Departure data van waaruit een read-across kan plaatsvinden. De vervolgstappen (similarity berekeningen en toepassing van hierop gebaseerde extra assessment factor kan vervolgens geautomatiseerd worden (analoog aan de RIVM ZZS Similarity tool online). Deze automatisering zal echter nog wel geprogrammeerd moeten worden.

Afbeelding 8.2 Schematische weergave van voorgestelde stappen in trede 2 van het humane toxiciteit onderdeel



8.2.3 Data beschikbaarheid humane toxiciteit

Onderstaande tabel geeft een overzicht van de in bovenstaande paragrafen benoemde data en bronnen.

Tabel 8.5 Overzicht van databronnen voor het humane toxiciteit onderdeel

Type data	Bron
Smiles notatie en of cas-nummer van stoffen	Internet: PubChem database (10 ⁷ stoffen), EPA ToxCAST dashboard database (850.000 structuren/CAS nummers)
EUSES	Excel versie van EUSES? (niet bekend)
overige bronnen	Toxicologische DNEL/Point of Departure: zou uit IUCLID database (via ECHA te benaderen) kunnen komen voor de onder REACH geregistreerde chemicaliën en ZZS stoffen. Hier moet nog veel (hand)werk voor verricht worden

8.3 Uitwerking ecotoxicologisch onderdeel

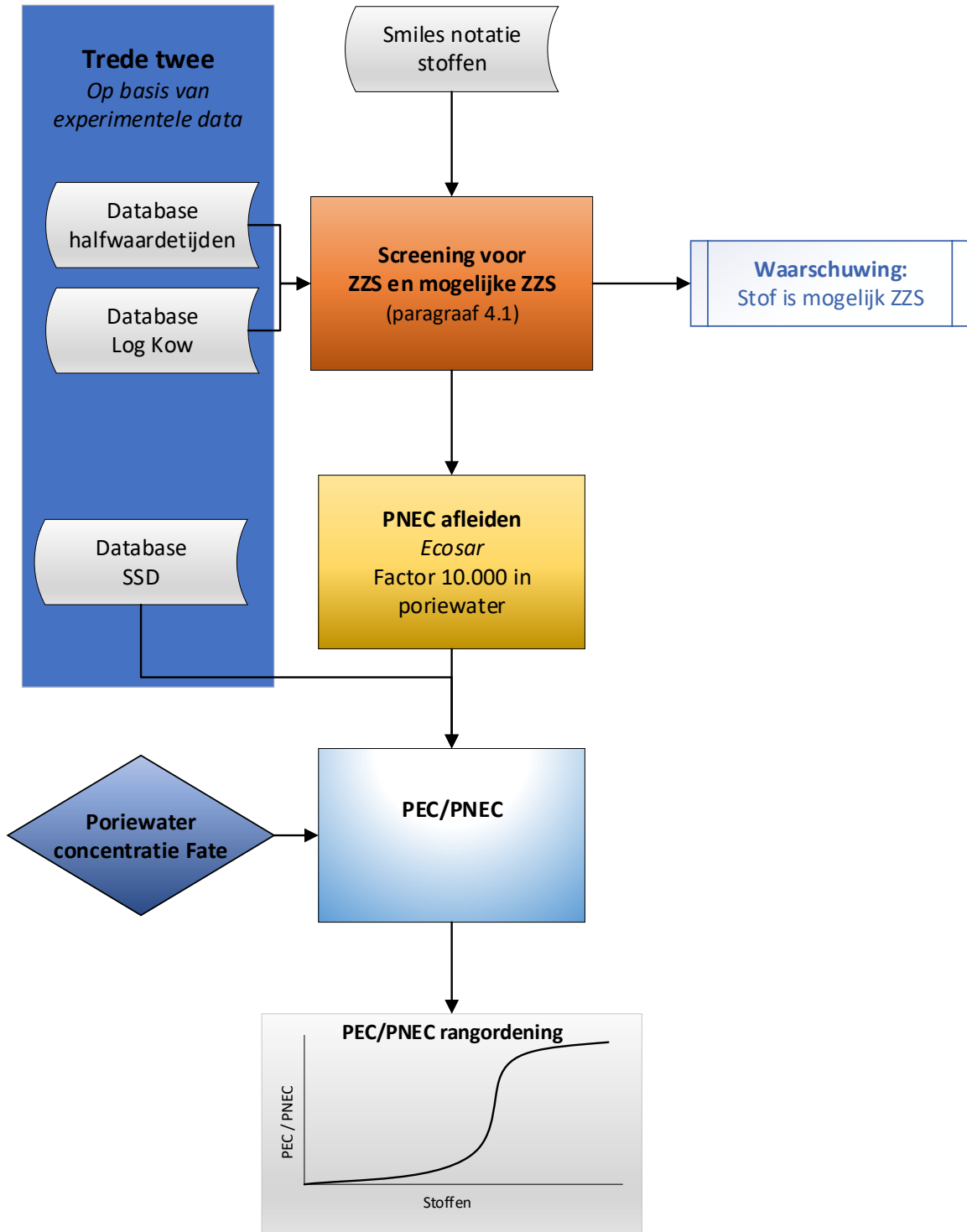
8.3.1 Ecotoxicologisch onderdeel trede 1

Voor het schatten van de ecotoxicologische risico's is zowel een geschatte milieuconcentratie als een milieukundige risicogrenswaarde gebaseerd op ecotoxicologische effecten, vereist. De geschatte milieuconcentratie volgt uit het fate onderdeel van de prioritering - en beoordelingssystematiek en wordt gegeven als een Predicted Environmental Concentration (PEC). De toxiciteitsinschatting geeft een concentratie waarbij geen effect optreedt in de vorm van een Predicted No Effect Concentration (PNEC_{trede 1}). Deze PNEC_{trede 1} is een eerste benadering van de PNEC op basis van QSARs. Door de PEC te delen door de PNEC_{trede 1} kan een relatieve inschatting van het risico gemaakt worden. De PEC/PNEC_{trede 1} verhouding kan ook gezien worden als de RCR_{eco}¹. Deze inschatting is bedoeld om de stoffen te prioriteren en op een rij te zetten voor de noodzaak tot nader onderzoek. Net zoals voor de humane risico inschatting, stellen bestaande systemen voor de inschatting van ecotoxicologische risico's hogere eisen aan de data dan bij trede 1 haalbaar. Daarom wordt de berekende RCR_{eco}¹ alleen relatief gebruikt voor een voorlopige eerste prioritering.

Zoals ook bij het onderdeel humane toxiciteit beschreven staat, zijn voor veel stoffen geen ecotoxiciteitsdata beschikbaar. Om toch tot een voorlopige prioritering te komen wordt daarom in de eerste trede van de ecotoxicologische module gebruik gemaakt van een QSAR-benadering die op basis van chemische structuur tot een inschatting van de ecotoxiciteit komt. Het gaat hier meestal om aquatische EC50 en LC50 waarden. De aanname is dat bodemorganismen worden blootgesteld via het poriewater en dat de intrinsieke gevoeligheid van bodemorganismen vergelijkbaar is met die van verwante soorten in oppervlaktewater. Een vergelijking van de PEC in poriewater met de PNEC voor waterorganismen levert dus ook informatie voor de prioritering van stoffen voor bodem. Omdat voor veel stoffen geen terrestrische QSAR beschikbaar is wordt omwille van de eenduidigheid van de prioritering geen gebruik gemaakt van terrestrische QSAR's. Voor deze QSAR-benadering is het van belang dat de stoffen uit chemisch eenduidig gedefinieerde verbindingen bestaan. Voor nano materialen is dit niet het geval. Voor mengsels zoals PFAS, PAK's, minerale oliën en kunnen enkele voorbeeldstoffen met een bekende chemische structuur als proxy voor het mengsel genomen worden. Met een screening wordt vervolgens bepaald of een stof ZZS of mogelijke ZZS is en worden hier attenties voor toegevoegd welke geen invloed hebben op de prioritering. Deze screening staat beschreven in paragraaf 8.1. Vervolgens wordt op basis van de structuur een PNEC afgeleid. Als basis voor deze QSAR-benadering wordt de SMILES-code van stoffen gebruikt.

De afbeelding op de volgende pagina geeft een schematische weergave van de QSAR-benadering in het ecotoxicologisch onderdeel.

Afbeelding 8.3 Opbouw beoordeling ecologische risico's van stoffen



Bepaling van de PNEC_{trede 1}

EPI Suite kan gebruikt worden voor de afleiding van de PNEC_{trede 1} in bodem. Hiervoor wordt gebruik gemaakt van de geschatte lethale concentratie voor 50 % van de dieren (LC50) of de concentratie met 50 % effect (EC50) voor algen, watervlooien en vissen. Voor de vertaling van ecotoxiciteitswaarden voor individuele taxa naar een veilige concentratie voor het ecosysteem worden doorgaans veiligheidsfactoren toegepast. De systematiek voor oppervlaktewater onder REACH en de Kaderrichtlijn water, gebruikt een veiligheidsfactor van 1000 op een acute L(E)C50. Omdat gebruik wordt gemaakt van QSAR's, wordt een extra factor 10 toegepast. De PNEC_{trede 1}, uitgedrukt als een concentratie in poriewater, wordt dus berekend op basis van de laagste L(E)C50 met een veiligheidsfactor van 10.000.

Omdat de in trede 1 gebruikte data schattingen zijn en hoge veiligheidsfactoren vereist kan de bepaalde RCR_{eco}¹ ook niet gebruikt worden voor een individuele risicobeoordeling. Wanneer experimentele data beschikbaar komen in de hogere trede van het ecotoxicologisch onderdeel, kan met behulp van veiligheidsfactoren een veilige concentratie voor het ecosysteem worden afgeleid.

8.3.2 Ecotoxicologisch onderdeel trede 2

Stoffen die hoog in de prioritering van trede 1 terecht komen kunnen in trede twee verder beoordeeld worden. Wanneer er experimentele gegevens beschikbaar zijn dan kunnen deze gebruikt worden met lagere veiligheidsfactoren. Daarnaast kan in trede 2 voor stoffen die van nature voorkomen beoordeeld worden of de natuurlijke concentratie in het milieu niet toe gaat nemen bij de te verwachten emissies. Wanneer dit niet het geval is dan is een ecotoxicologische beoordeling overbodig. Waar de grens voor toename in natuurlijke achtergrondconcentratie ligt kan in het ontwikkelproces van het ecotoxicologisch onderdeel verder uitgewerkt worden.

Voor stoffen met een specifiek werkingsmechanisme zoals farmaceutische middelen en bestrijdingsmiddelen is een aangepaste ecotoxicologische benadering noodzakelijk. Dit kan tijdens de ontwikkelen van trede 2 verder uitgewerkt worden. Voor bestrijdingsmiddelen is een apart beoordelingskader aanwezig, evenals voor farmaceutische middelen. Dit geeft aan dat trede 1 grote veiligheidsmarges moet gebruiken omdat daar nog geen kennis is over specifieke werkingsmechanismen van een stof. In principe moet het zo zijn dat het toevoegen van gegevens in trede 2 moet leiden tot kleinere veiligheidsmarges en dus meestal tot hogere PNEC-waarden.

In trede 1 wordt een RCR_{eco}¹ berekend waarna er voor de stoffen met een hoge ratio gezocht kan worden naar extra gegevens. Door de extra gegevens is er meer zekerheid over de ecotoxiciteit en kunnen er daardoor lagere veiligheidsmarges gebruikt worden. Op deze manier geeft trede 2 ook een verfijnde RCR_{eco}.

De berekende RCR_{eco} kan gebruikt worden voor het prioriteren van de stoffen. Deze procedure staat beschreven in een recente EFSA richtlijn (EFSA Panel on Additives et al., 2019). Voor enkele stoffen zullen er meerdere toxiciteitsgegevens beschikbaar zijn. Wanneer er meer dan drie toxiciteitsgegevens beschikbaar zijn (bijvoorbeeld in de ECOTOX-database), kan een SSD benadering gebruikt worden om een veilige norm af te leiden. Deze SSD-benadering heeft meestal een kleinere veiligheidsmarge omdat er meer data beschikbaar zijn. Het gebruik van SSD's is in bepaalde wettelijke kaders aan minimum data vereisten gebonden, in de prioriteringsystematiek kan hier anders mee omgegaan worden.

8.3.3 Databeschikbaarheid ecotoxicologisch onderdeel

Uiteindelijk wordt van alle opkomende stoffen een signaleringslijst gemaakt op grond van de RCR_{eco}¹ en andere criteria zoals persistentie, bioaccumulatie en achtergrondconcentratie. Stoffen waar weinig gegevens over beschikbaar zijn zullen door de grotere veiligheidsfactoren bij de schattingen van emissie, milieugedrag en ecologische toxiciteit al snel een hoge ratio krijgen. Deze hoge ratio geeft geen goede indicatie van het milieurisico maar wel een prioritering van stoffen waarvoor betere data gezocht zouden kunnen worden. Tabel 8.6 geeft een overzicht van de in bovenstaande paragrafen benoemde data en bronnen

Tabel 8.6 Data beschikbaarheid ecologische toxiciteit

Beschrijving	Invoer	Bron
EPI-Win	SMILES-notatie en emissieschatting	Default emissie tonnage REACH emissie data
experimentele data	uit REACH of wetenschappelijke literatuur	REACH stofeigenschappen Literatuuronderzoek Stofeigenschappen en achtergrondconcentraties
SSD's	Solutions bevat 1800 SSD's	(Posthuma et al., 2019)
bestaande normen	risico's van Stoffen website	www.rvs.rivm.nl

8.4 Uitwerking doorvergiftiging

8.4.1 Doorvergiftiging trede 1

Stap 1 schatting NOAEL en PNEC

Om een prioritering voor doorvergiftiging naar vogels en zoogdieren te maken moet een NOAEL voor vogels en zoogdieren geschat worden. De prioritering voor doorvergiftiging naar vogels en zoogdieren maakt gebruik van dezelfde gegevens waarop de TTC is gebaseerd (zie paragraaf 8.2.1). Een schematische weergave van de uitwerking van doorvergiftiging is te vinden in afbeelding 8.4.

Op basis van de structuur en QSARs worden de stoffen in vijf klassen verdeeld (Cramer Classes I-III, organofosfaat en carbamaat groep en de genotoxische carcinogeen groep). De TTC's die daarbij horen zijn gebaseerd op de 5^e percentielen van NOAELs uit chronische proefdierstudies voor elk van de 5 groepen. Hierop is een assessment factor van 100 toegepast voor de vertaling naar gevoelige mensen. Om de TTC weer terug te rekenen naar een 5^e percentiel van de NOAEL's is de TTC vermenigvuldigd met 100.

Het 5^e percentiel van de NOAEL's is in principe een conservatief uitgangspunt. Allereerst gaat het om het 5^e percentiel voor stoffen in de stofgroep (en dus niet voor soorten zoals in de soortgevoelighedsverdelingen). Dit betekent dat de waarde is gebaseerd op relatief toxische stoffen. Daarnaast zijn de NOAEL's gebaseerd op eindpunten die relevant zijn voor humane toxiciteit. Deze zijn meestal gevoeliger dan de populatierelevante eindpunten die worden gebruikt voor doorvergiftiging naar vogels en zoogdieren.

Omdat de meeste toxiciteitsstudies waarop de TTC-waarden zijn gebaseerd zijn uitgevoerd met ratten, is er in de verdere berekening uitgegaan van een rat van 250 g. Met behulp van een allometrische vergelijking (zie onder andere WFD guidance, (EC, 2018)) kan worden geschat dat een rat van 250 g een energiebehoefte van 337 kJ per dag heeft. Met deze gegevens kunnen de 5^e percentiel NOAEL's worden omgerekend naar een energie-genormaliseerde concentratie in het dieet.

$$\text{NOEC [mg/kJ dieet]} = \text{NOAEL [mg/kg}_{\text{bw}}/\text{d]} * 0.25 [\text{kg}_{\text{bw}}] / 337 [\text{kJ/d}]$$

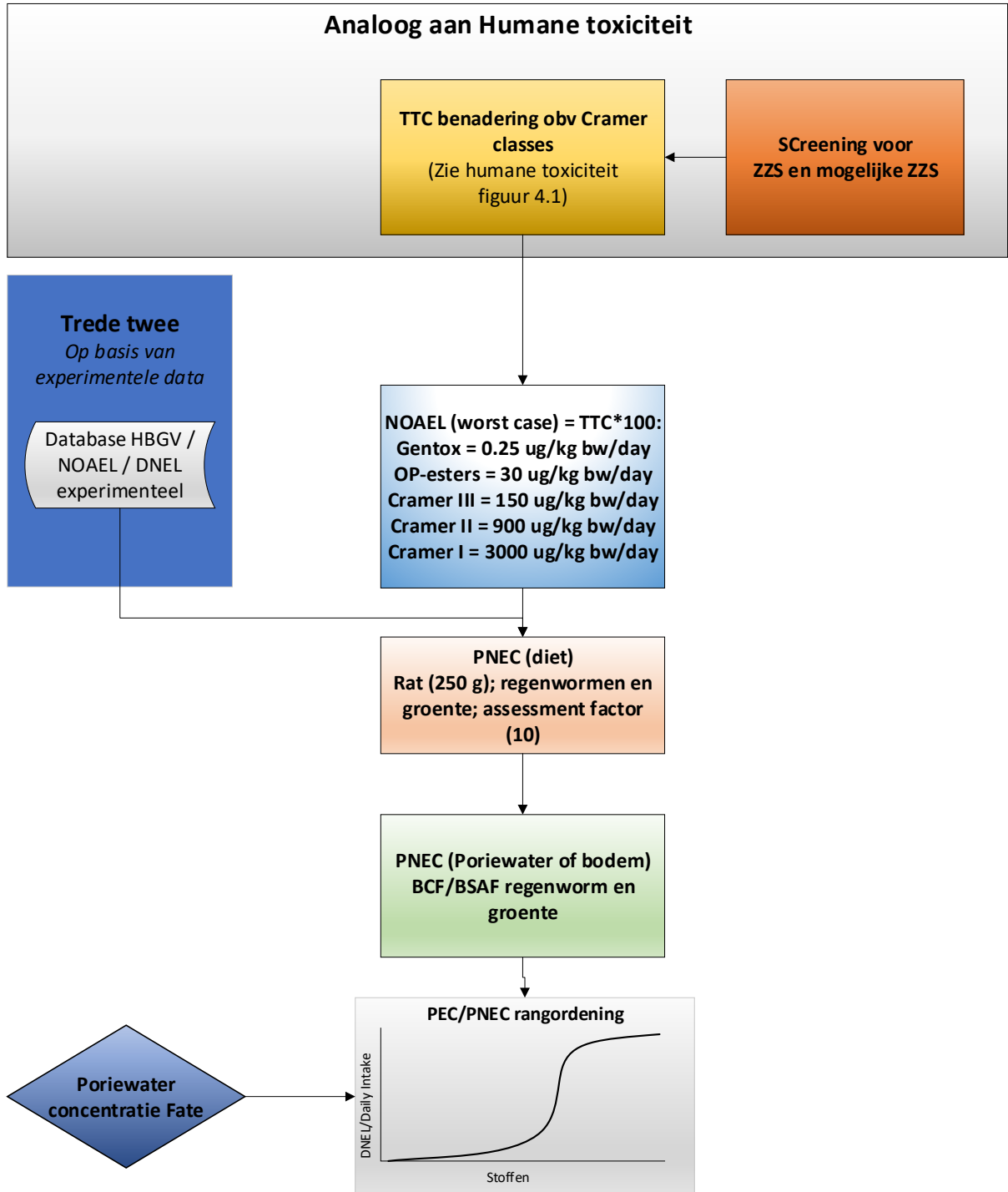
Vervolgens wordt deze waarde naar concentraties in bladgroenten en in wormen (wwt) omgerekend met de standaard energiegehalten voor bladgroenten en wormen (1311 en 1346 kJ/kg uit EFSA (2009)). Voor slakken is geen QSAR beschikbaar om de concentratie in de slak te berekenen, om deze reden worden slakken niet meegenomen. Als laatste wordt er een factor 10 op deze NOECs in wormen en planten gezet. De NOAEL is namelijk bepaald voor ratten, terwijl de PNEC voor doorvergiftiging voor alle soorten vogels en zoogdieren geldt. De procedure levert zo een PNEC voor vogels en zoogdieren die is uitgedrukt als gehalte in regenwormen en in planten. De resulterende PNEC's voor regenwormen en bladgroenten zijn weergegeven in de onderstaande tabel.

Tabel 8.7 Indicatieve PNECs doorvergiftiging voor regenwormen en bladgroenten

Indicatieve PNECs doorvergiftiging		
-	Soil invertebrates (earthworms and slugs)	Dicot crop leaves
Cramer Class I	0.68	0.29
Cramer Class II	0.20	0.087
Cramer Class III	0.034	0.015
OP and carbamates	0.0068	0.0029
Genotoxic carcinogens	5.6E-05	2.4E-05

Stap 2 Omrekening via voedsel naar concentratie bodem en grondwater

De PNECs in regenwormen en planten kunnen niet direct vergeleken worden met concentraties in bodem of poriewater. Met behulp van Biota to Soil or Sediment Accumulation Factor (BSAF) of Bio Concentration Factor (BCF) vallen deze PNECs weer door te rekenen naar bodemconcentraties of poriewaterconcentraties. BSAF en BCF voor regenwormen en planten kunnen geschat worden op basis van QSARs (ECHA, 2010). Voor regenwormen is de enige benodigde input de $\log K_{ow}$. Voor opname in planten zijn de QSARs iets gecompliceerder (analoog aan humane toxiciteit 8.2.1). De uiteindelijke getallen zijn PNECs in bodem en grondwater voor plantenetende dieren en voor wormetende dieren, die kunnen worden vergeleken met de PECs. Afhankelijk van de stoffeigenschappen zal een van de twee routes kritisch zijn. Over het algemeen zal dit de route via wormen zijn voor hydrofobe stoffen en de route via planten voor meer hydrofiele stoffen. Voor biomagnificerende stoffen is de route via de wormen het meest kritisch maar in dat geval moet ook nog een (geschatte) BMF meegenomen worden in de berekeningen. De uiteindelijke prioritering volgt uit de combinatie van de afgeleide PNEC-waarden in de bodem met de poriewater concentratie uit het fate onderdeel.



8.4.2 Databeschikbaarheid doorvergiftiging

Een voorlopig overzicht van mogelijke bronnen voor het doorvergiftiging onderdeel worden gegeven in onderstaande tabel.

Tabel 8.8 Databeschikbaarheid ecologische doorvergiftiging

Data	Bron
BSAF	Guidance document R.16 (ECHA, 2016)
Bio Concentration Factor (BCF)	Trapp & Matthies (Trapp and Matthies, 1995, Trapp, 2002)
TTC – QSAR modellen gebaseerd op SMILES-notatie	OECD QSAR Toolbox (freeware) Lhasa Derek Nexus (licentie, RIVM) ToxTree (freeware) VEGA (freeware)
Log K_{ow} – opname regenwormen	Fate onderdeel – Epi Suite (US EPA, 2012)

9

CONCLUSIES

Dit rapport biedt een blauwdruk en aanzet voor een prioritering en beoordelingssystematiek waarmee opkomende stoffen in de bodem gesignaleerd kunnen worden. Hiervoor is een structuur uitgedacht welke gebaseerd is op al bestaande beoordelingskaders. Deze structuur bestaat uit een Fate onderdeel waarmee milieuconcentraties berekend worden, en een toxiciteit onderdeel waarbij humane en ecologische toxiciteit wordt geschat. Ook is een inventarisatie gemaakt van de stappen die nodig zijn om tot een functionerende eerste trede van de prioriteringssystematiek te komen. Hierbij zijn de bronnen achter de verschillende onderdelen (Fate, humane en ecologische toxiciteit, en doorvergiftiging) in kaart gebracht. Deze inventarisatie laat zien dat voor trede 1 de meeste puzzelstukken al aanwezig zijn. Voor trede 2 en trede 3 zal specifiek uit bestaande beoordelingskaders geput moeten worden, deze zijn dan ook in mindere mate opgenomen in de inventarisatie en moeten tijdens de ontwikkeling van de systematiek verder uitgewerkt worden. Trede 2 en 3 lenen zich ook voor een beoordelingssystematiek waar met aanvullende informatie, zoals metingen in het milieu, een indicatieve beoordeling worden uitgevoerd.

Aanbevelingen voor vervolg

De ontwikkelingen van de verschillende onderdelen in trede 1 en het koppelen van de bronnen vraagt nog verdere uitwerking voordat de systematiek operationeel is. Omdat trede 1 is uitgedacht als geautomatiseerd proces zullen de softwareprogramma's die gebruikt worden voor de Fate en toxiciteit onderdelen op elkaar aangesloten moeten worden. In een eenmalige exercitie zou vanuit een stoffenlijst alle benodigde data gegenereerd kunnen worden. Ook dient in het Fate onderdeel het SimpleBox model nog aangepast te worden aan de eisen van deze systematiek. Daarnaast dient de systematiek ook getest te worden. Tijdens de ontwikkeling kan bijvoorbeeld blijken dat voor enkele onderdelen toch alternatieven gebruikt moeten worden (bijvoorbeeld een andere QSAR voor toxiciteit). Ook kan blijken dat de databeschikbaarheid in sommige aspecten ontbreekt waardoor meer tijd gestoken moet worden in het samenvoegen van meerdere kleine datasets.

Deze systematiek biedt, na doorontwikkeling, een flexibele methode aan waarmee opkomende stoffen in de bodem geprioriteerd en beoordeeld kunnen worden. Door het gebruik van meerdere treden kan de systematiek voor zowel verkennende vragen als meer specifieke beoordelingen gebruikt worden. Op deze manier geeft de systematiek invulling aan maatschappelijke vragen rondom opkomende stoffen in de bodem.

10

REFERENTIES

- 1 Activiteitenbesluit milieubeheer (2019), Rijksoverheid, BWBR0022762, <https://wetten.overheid.nl/BWBR0022762/2019-10-01>
- 2 Arnot, J., et al. (2005). Development and Application of Models of Chemical Fate in Canada. Practical methods for Estimating Environmental Biodegradation Rates, CEMN Report No. 200503. **CEMN Report No. 200503.**
- 3 Bampidis, V., et al. (2019). 'Guidance on the assessment of the safety of feed additives for the environment.' EFSA Journal **17**(4): e05648.
- 4 Bodar, C. W. M., et al. (2013). 'Validity of REACH risk limits in the Dutch policy framework on priority chemicals.' RIVM Report No. 601357013/2013 **Bilthoven, The Netherlands.**
- 5 Cefic (2012). 'Specific Environmental Release Categories (SPERCs). Chemical Safety Assessment, Supply Chain Communication and Downstream User Compliance.' Cefic Internal Document of the SPERC Core Team **Cefic, Brussels, October 2012.**
- 6 Deltares (2017). 'Landelijk Meetnet Gewasbeschermingsmiddelen Land - en Tuinbouw - Evaluatie resultaten 2017.' Deltares.
- 7 EC (2018). 'Guidance NO 27 - Deriving environmental Quality standards.'
- 8 EC (2020). 'REACH Regulation.' No. 1907/2006.
- 9 ECHA (2016). 'Guidance on information requirements and Chemical Safety Assessment - Chapter R.16.' ECHA-16-G-03-EN **Version 3.0.**
- 10 ECHA (2020). 'Geregistreerde stoffen.' Retrieved 11-06-2020, 2020, from <https://echa.europa.eu/nl/information-on-chemicals/registered-substances>.
- 11 EFSA (2009). 'Guidance document on risk assessment for birds and mammals.' EFSA journal 2009 **7**(12)(1438): 358.
- 12 EFSA Panel on Additives, et al. (2019). 'Guidance on the assessment of the safety of feed additives for the environment.' EFSA Journal **17**(4): e05648.
- 13 European Union (2020). 'Solutions.' from <https://www.solutions-project.eu/results-products/>.
- 14 Hartmann, J., et al. (In preparation). 'A model for integrated evaluation of potential chemical and microbial risks to drinking water - a multi-actor approach.'
- 15 Lahr, J., et al. (2019). Diergeenemiddelen in het milieu - een synthese van de huidige kennis, Stichting Toegepast Onderzoek Waterbeheer.
- 16 Lhasa Ltd (2020), 'Derek Nexus', <https://www.lhasalimited.org/products/derek-nexus.htm#>
- 17 Lijzen, J. P. A. and M. G. J. Rikken (2004). 'EUSES: European union System for the Evaluation of Substances.' RIVM Report No. 601900005/2004 **Bilthoven, The Netherlands.**
- 18 NVWA (2018). 'Afzetgegevens van gewasbeschermingsmiddelen in Nederland in 2018 per werkzame stof in kg.' Nederlandse Voedsel- en Warenautoriteit.
- 19 OECD (2020), 'The OECD QSAR Toolbox', <https://www.oecd.org/chemicalsafety/risk-assessment/oecd-qsar-toolbox.htm>
- 20 Posthuma, L., et al. (2019). 'Species Sensitivity Distributions for Use in Environmental Protection, Assessment, and Management of Aquatic Ecosystems for 12 386 Chemicals.' Environmental Toxicology and Chemistry **38**: 905-917.
- 21 RIVM (2020). 'Risico's van Stoffen.' Retrieved 15-6-2020, 2020, from <https://rvs.rivm.nl/stoffenlijsten/Zeer-Zorgwekkende-Stoffen>.
- 22 Rorije, E., et al. (2011). 'Identifying potential POP and PBT substances.' RIVM report No. 601356001/2011 **Bilthoven, The Netherlands.**

- 23 Royal HaskoningDHV (2020). 'Atlas Bestrijdingsmiddelen in Oppervlaktewater.' from <http://www.bestrijdingsmiddelenatlas.nl/toelichting/rapportages.aspx>.
- 24 Schoorl, M., et al. (2015). 'SimpleBox 4.0.' RIVM **Bilthoven, NL**.
- 25 Trapp, S. (2002). 'Dynamic root uptake model for neutral lipophilic organics.' Environmental Toxicology and Chemistry **21**(1): 203-206.
- 26 Trapp, S. and M. Matthies (1995). 'Generic One-Compartment Model for uptake of Organic Chemicals by Foliar Vegetation.' Environ. Sci. Technol. **29**: 2333-2338.
- 27 US EPA (2012), 'Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows', van de Meent, D., et al. (2018). 'Screening level estimation of release rates of currently used chemicals to the environment - application to solution-oriented assessment of impacts on aquatic ecosystems.' Deliverable D15.1 **Solutions**.
- 28 van der Aa, N. G. F. M., et al. (2017). 'Evaluatie signaleringsparameter nieuwe stoffen drinkwaterbeleid.' RIVM **Bilthoven, NL**.
- 29 Van Gils, J. (2018). 'Memo: Risico's van opkomende stoffen: demonstratie van model-instrumentarium aan de hand van concentratie-en risicokaarten.' Deltares.
- 30 van Gils, J., et al. (In Prep.). 'Modelling framework and model-based assessment for substance screening.' SOLUTIONS.
- 31 van Noort, P., et al. (2006). 'Beslissen over bagger op bodem.' Bilthoven, NL **RIVM**.
- 32 Wassenaar, P. N. H., et al. (2019). 'Chemical similarity to identify potential Substances of Very High Concern – An effective screening method.' Computational Toxicology **12**: 100110.

Bijlagen

BIJLAGE: INDELING VAN CRAMER CLASSES

Onderstaand een korte uitwerking van de Cramer classes en hun bijpassende TTC-waarden.

- a Genotoxisch carcinogenen:** stoffen die carcinogeen zijn door het veroorzaken van DNA-schade hebben de laagste ondergrens van veilige blootstelling van **0,0025 µg/kg bw/day**, gebaseerd op acceptatie van een extra risico op tumoren van $1:10^6$ bij levenslange blootstelling. Er zijn meerdere theoretische modellen die (geautomatiseerd) voorspellen of een stof (potentieel) genotoxisch carcinogeen is op basis van de chemische structuur, bijvoorbeeld profielen in de OECD QSAR Toolbox en structural alerts in de DEREK software, of een van de beslisbomen in de ToxTree software (in principe gelijk aan de OECD QSAR Toolbox profiles).
- b Organofosfaten en carbamaten:** worden geacht een veilige ondergrens van blootstelling te hebben van **0.3 µg/kg bw/day**. Bepalen of een stof een organofosfaat of carbamaat is kan eenvoudig op basis van structuur-regels gedaan worden. Bijvoorbeeld de LICSS add-in software voor Excel kan voor grote lijsten van chemische structuren (SMILES) eenvoudig aangeven of de stoffen een organofosfaat-esters of carbamaat ester groep bevatten.
- c-e** Alle andere organische verbindingen worden d.m.v. een beslisschema op basis van hun structuur ingedeeld in **drie** klassen **high, medium en low toxicity**, (de zogenaamde Cramer classes) met hun respectieve veilig geachte ondergrenzen van blootstelling van :
 - high: 1,5 µg/kg bw/day;
 - medium: 9 µg/kg bw/day;
 - Low: 30 µg/kg bw/day.



BIJLAGE: ANDERE MOGELIJKHEDEN TOT PRIORITERING VOOR HUMAAN RISICO

In het geval dat tijdens de ontwikkeling van trede 1 van het humane onderdeel blijkt dat een nadere prioritering noodzakelijk is kan de methode beschreven in deze appendix verder uitgewerkt en getest worden.

Als de RCR aanpak op basis van de TTC als te onzeker gezien wordt, zou voor individuele humane toxiciteits-eindpunten (mutageniteit, carcinogeniteit, reprotox, developmental tox, sensibilisatie (allergie), irritatie/corrosie) ook een vorm van een scoringssysteem in het leven geroepen kunnen worden waarbij meerdere (bestaande) QSAR-modellen voor de individuele eindpunten toegepast worden. De aanwezigheid van alerts in de chemische structuur (substructuur-elementen die gekoppeld worden aan een bepaald toxicologisch eindpunt) kunnen dan gebruikt worden om een (arbitraire) score op te stellen waarbij een stof die veel alerts laat zien in de modellen (voor dezelfde en/of verschillende eindpunten) een hoge score krijgt – en daarmee een hogere prioriteit. Deze arbitraire score kan dan samengevoegd worden met de blootstellingschatting om een risico-score te geven. **Op zo een score kan geen daadwerkelijk risico gebaseerd worden, maar wel een ranking of prioritering gebaseerd worden.** Er wordt dus geen echte risicoberekening mogelijk op deze manier. Software die zich leent voor het 'scoren' van alerts is de OECD QSAR Toolbox (OECD, 2020), die meerdere humane toxicologische-eindpunten als verschillende 'profiles' bevat, en de DEREK-software van Lhasa Ltd (Lhasa Ltd, 2020), waarvoor RIVM een licentie heeft en die een breed spectrum van humane toxicologische eindpunten bestrijkt. Onderstaande tabel geeft een overzicht van de eventueel te gebruiken modules in deze software.

Tabel II.1 QSAR-modellen die een score voor eindpunten kunnen genereren, en waarvan de mutageniciteit modellen ook in de TTC-aanpak gebruikt kunnen worden

OECD QSAR Toolbox	DEREK software – modules
Profiles – mutagenicity	Organotox/ hepatotox
Profiles – carcinogenicity	Mutatox
Profiles – ER binding	Carcinogeniteit
Profiles – DART priority scheme	Reprotox
Profiles – binding to proteins/ sensitization	Neurotox
	Endocrine tox



BIJLAGE: DEELNEMERS AAN HET PROJECT POP-UP

Kernteam consortium

Martijn van Houten, projectleider POP-UP project, Witteveen + Bos (penvoerder)
Willem Hendriks, Witteveen + Bos
Maurice Henssen, Bioclear earth
Marloes Luitwieler, Bioclear earth
Arne Alphenaar, TTE Consultants
Ko Hage, TTE Consultants
Hans Slenders, Arcadis
Ilse Vermeij, Arcadis

Projectteam consortium

Aiko Hensums, TTE Consultants
Alie Talen, Bioclear earth
Bert Baan, TTE Consultants
Corine Habraken, Bioclear earth
Dick Specht, Bioclear earth
Gerda van Wesel, Arcadis
Hannah Schutte, Witteveen + Bos
Inge van Putten, Witteveen + Bos
Jan Willem Slaa, Witteveen + Bos
Jetske Vaas, Witteveen + Bos
Kim Dieleman, Bioclear earth
Marianne Post, Witteveen + Bos
Marlea Wagelmans, Bioclear earth
Marlies Bos, Arcadis
Marloes Ruis, Witteveen + Bos
Saar Bijman - van Dungen, Witteveen + Bos
Shakti Lieten, Witteveen + Bos
Tessa Pancras, Arcadis

Begeleidingsgroep namens het Uitvoeringsprogramma Convenant Bodem en Ondergrond 2016-2020

Fred de Haan, UvW
Manja Holst-Touber, IPO
Marije Schouwstra, ministerie van IenW
Paul de Wilde, Rijkswaterstaat-WVL/Bodem+
René Smolders, VNG
Rob Mank, VNG

Betrokken kennisinstellingen

Arnaut van Loon, KWR
Emiel Rorije, RIVM
Eric Verbruggen, RIVM
Johannes Lijzen, RIVM

Joost Lahr, WEnR
Leo Posthuma, RIWM
Milou Dingemans, KWR
Patrick van Beelen, RIVM
Peter van Breemen, RIVM
Theo Traas, RIVM

Betrokkenen uit het werkveld (eindgebruikers, geïnterviewde specialisten, deelnemers pilots, etc.)

Afvalzorg	Heijo Scharff
Bodem+ / Rijkswaterstaat	Gilbert Boerekamp, Michiel Gadella,
Jos van Wersch	
Bodembeheer NL	Henri Schouten, Joep van Wee
BOOG	Astrid Slegers
Boskalis	Richard Ripping
DCMR	Anton Roeloffzen, Huub Meuvels,
Onno Bruijs,	
	Marita Herijgers
Deltares	Leonard Osté
Gemeente Amersfoort	Paul Camps
Gemeente Amsterdam	Frank van Hage, Lenka de Graaf
Gemeente Arnhem	Peter Bouter
Gemeente Enschede	Marc de Jong
Gemeente Helmond	Michiel Nass
Gemeente Utrecht	Harry Boerma
Gemeente Zaanstad	Angela van Leest, Else Niesing
K3	Thomas Nusselein
Ministerie IenW	Eline Toes, Reinoud Verweij
Omgevingsdienst Haaglanden	Pim Middeldorp
Omgevingsdienst Midden Holland	Gerrit Weerheim, Bas de Jongh, Marcel
Hilwig	
Omgevingsdienst Midden en West Brabant	Richard Welling
Omgevingsdienst Noordzeekanaalgebied	Chris Overmars
Omgevingsdienst Regio Utrecht	Ingrid Balk – Pijper
Omgevingsdienst Zuid-Holland Zuid	Ruud Hakkeling
Omgevingsdienst West-Holland	Arjen Heins, Kor van Hateren
Provincie Drenthe	Harrie Booij
Provincie Gelderland	Henk Driessen
Provincie Groningen	Alfred Huinder, Suzanne Bongers
Provincie Noord-Holland	Carl Denneman, Gerard Boks
Provincie Limburg	Theo Flapper
Provincie Overijssel	Jasper Lackin
Provincie Utrecht	Hans de Waal, Mieke de Jong
Provincie Zuid-Holland	Peter Springintveld
Radboud Universiteit	Ad Ragas
Rijkswaterstaat WVL	Anne Jans, Rob Berbee, Dorien ten
Hulscher,	
	Eva Schoenmaker, Koen van Olst,
Elmert de Boer	
RIVM	Piet Otte
RUD Drenthe	Coert Fossen
RUD Utrecht	Joop van de Wiel
SIKB	Henk Koster, Jelle de Boer
STOWA	Michelle Talsma, Cora Uijterlinde
Unie van Waterschappen	Daan Henkens
Universiteit van Amsterdam	Annemarie van Wezel

Van Schie BV
VEMW - Vereniging voor Energie Milieu en Water
Vewin
VNO-NCW werkgroep Bodem en Water
Vrije Universiteit

Radboud Universiteit Nijmegen
Wageningen Universiteit en Research
Waterschap Noorderzijlvest
WEB

Iljan Vos
Roy Tummers
Mirja Baneke, Rob Eijsink
Jan Fokkens, Willemvan der Zon
Marjorie van Duursen, Kees van Gestel,
Marja Lamoree
Ad Ragas
Saskia Visser, Maikel de Potter
Marc Bethlehem
Marcel Koelemans

