

**AANVULLING BIJ
BASISINFORMATIE VOOR
RISICO-EVALUATIES**

Trimethylbenzenen

Juni 2003

Inhoudsopgave

1	<u>Technische fiche trimethylbenzenen</u>	3
1.1	<u>Overzicht gebruikte gegevens trimethylbenzenen voor de blootstellingsberekeningen</u>	3
1.1.1	<u>1.2.3-trimethylbenzeen</u>	4
1.1.2	<u>1.2.4-trimethylbenzeen</u>	5
1.1.3	<u>1.3.5-trimethylbenzeen</u>	6
1.2	<u>Referenties</u>	7

1 Technische fiche trimethylbenzenen

Voor details wordt verwezen naar 'Voorstel voor bodemsaneringsnormen voor 1,2,3-trimethylbenzeen, 1,2,4-trimethylbenzeen en 1,3,5-trimethylbenzeen', VITO-rapport 2003/IMS/R/027 van januari 2003 door B. De Raeymaecker, C. Cornelis, A. Maes, G. Schoeters en M.P. Goyvaerts, uitgevoerd in opdracht van de OVAM.

1.1 Overzicht gebruikte gegevens trimethylbenzenen voor de blootstellingsberekeningen

Trimethylbenzenen (TMB's) worden o.a. gebruikt in de organische synthese. Ze zijn eveneens terug te vinden als bestanddeel van benzine. TMB's zijn matig wateroplosbaar en weinig vluchtig. De adsorptie aan organisch materiaal is groot. De stoffen kunnen beschouwd worden als matig tot weinig mobiel. Aërobe microbiële afbraak van TMB's in bodem is mogelijk. In grondwater met een laag zuurstofgehalte zal deze afbraak waarschijnlijk echter slechts gedeeltelijk optreden.

Er zijn weinig toxicologische gegevens beschikbaar. De basisstudie waarop de verschillende instanties zich baseren ter afleiding van de toxicologische grenswaarden is niet altijd duidelijk gerefereerd. Tevens wordt bij de afleiding van de grenswaarden frequent geëxtrapoleerd. IARC-WHO heeft de stoffen nog niet geëvalueerd. US-EPA heeft 1,2,4-TMB en 1,3,5-TMB ondergebracht in klasse D: niet klasseerbaar als humaan carcinogeen op basis van menselijke en dierlijke data. In de IRIS-databank van de US-EPA zijn ze echter niet terug te vinden. Voor de blootstellingsberekeningen worden ze allen als niet-carcinogeen beschouwd. Voor 1,2,4-TMB kunnen 2 parametersets (US-EPA en RAIS) onderscheiden worden. A.h.v. de huidige beschikbare toxicologische data wordt de voorkeur gegeven aan de parameterset van RAIS (zie onder) ter berekening van de bodemsaneringsnormen.

Trimethylbenzeen - als mengsel van zijn isomeren - heeft een aangename aromatische geur; er is een geurdrempel in lucht gerapporteerd van 2,75 mg/m³. De gerapporteerde geurdrempels in lucht en water variëren per isomeer en per auteur.

Er moet opgemerkt worden dat, gelet op de beperkte toxicologische gegevens, de bodemsaneringsnormen provisorisch zijn en dat een herziening zich opdringt indien het toxicologisch onderzoek verder is gevorderd.

1.1.1 1,2,3-trimethylbenzeen

Parameter	eenheid	waarde	Bron
Molmassa	g/mol	120,2	geometrisch gemiddelde
Oplosbaarheid	g/m ³	67,4 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Dampdruk	Pa	225 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	401 bij 25°C	berekend uit S en P
Kow	g/g	3,6 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Koc	dm ³ /kg	687	geometrisch gemiddelde
Kd	dm ³ /kg	7,97	berekend m.b.v. Vlier-Excel
BCF _{st}	(mg/kg vs)/(mg/kg ds)	0,60	berekend m.b.v. Vlier-Excel
BCF _{wo}	(mg/kg vs)/(mg/kg ds)	2,28	berekend m.b.v. Vlier-Excel
D _{pe}	m ² /d	6,4.10 ⁻⁶	van den Berg, 1997
D _{pvc}	m ² /d	6,4.10 ⁻⁹	berekend uit D _{pe}
Diffusiecoëfficiënt lucht	m ² /h	0,029 bij 25°C	berekend m.b.v. Vlier-Excel
Diffusiecoëfficiënt water	m ² /h	2,86.10 ⁻⁶ bij 25°C	berekend m.b.v. Vlier-Excel
facing (vee)	-	1	standaard
facinh (vee)	-	1	standaard
fexcr (vee)	-	0	standaard
DARvolw	1/h	0,005	standaard
DARkind	1/h	0,01	standaard
TDI _{oraal} (1/10 ⁵)	mg/kg d	0,05	CEHT, 2001
TDI _{inhalatoir} (1/10 ⁵)	mg/kg d	0,017	CEHT, 2001
TCL (1/10 ⁹)	g/m ³	5,83.10 ⁻⁶	CEHT, 2001
Limiet drinkwater	g/m ³	0,15	berekend uit TDlor (CEHT, 2001)
Limiet plant toxisch	mg/kg ds	-	
Gewasnorm	mg/kg vs	-	
Vleesnorm	mg/kg vs	-	
Achtergrond lucht	g/m ³	4,25.10 ⁻⁷	berekend uit VMM, 1999, 2000
Achtergrond voeding	mg/kg dag	-	
Achtergrond inhalatoir	mg/kg dag	1,21.10 ⁻⁴	berekend uit VMM, 1999, 2000
Carcinogeniteit	-	niet-carcinogeen	

1.1.2 1,2,4-trimethylbenzeen

Parameter	eenheid	waarde	bron
Molmassa	g/mol	120,2	geometrisch gemiddelde
Oplosbaarheid	g/m ³	62,2 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Dampdruk	Pa	225 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	631 bij 25°C	berekend uit S en P
Kow	g/g	3,6 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Koc	dm ³ /kg	1.279	geometrisch gemiddelde
Kd	dm ³ /kg	14,84	berekend m.b.v. Vlier-Excel
BCFst	(mg/kg vs)/(mg/kg ds)	0,32	berekend m.b.v. Vlier-Excel
BCFwo	(mg/kg vs)/(mg/kg ds)	1,22	berekend m.b.v. Vlier-Excel
Dpe	m ² /d	6,4.10 ⁻⁶	van den Berg, 1997
Dpvc	m ² /d	6,4.10 ⁻⁹	berekend uit Dpe
Diffusiecoëfficiënt lucht	m ² /h	0,0286 bij 25°C	berekend m.b.v. Vlier-Excel
Diffusiecoëfficiënt water	m ² /h	2,8610 ⁻⁶ bij 25°C	berekend m.b.v. Vlier-Excel
facing (vee)	-	1	standaard
facinh (vee)	-	1	standaard
fexcr (vee)	-	0	standaard
DARvolw	1/h	0,005	standaard
DARkind	1/h	0,01	standaard
TDloraal (1/10 ⁵)	mg/kg d	0,05	RAIS, 2002 en CEHT, 2001
TDlinhalatoir (1/10 ⁵)	mg/kg d	1,7.10 ⁻³	RAIS, 2002 en CEHT, 2001
TCL (1/10 ⁹)	g/m ³	5,83.10 ⁻⁶	US-EPA, 1997 en RAIS, 2002
Limiet drinkwater (1/10 ⁶)	g/m ³	1,5.10 ⁻¹	berekend uit TDlor (RAIS, 2002)
Limiet plant toxisch	mg/kg ds	-	
Gewasnorm	mg/kg vs	-	
Vleesnorm	mg/kg vs	-	
Achtergrond lucht	g/m ³	1,53.10 ⁻⁶	berekend uit VMM, 1999, 2000
Achtergrond voeding	mg/kg dag	1,67.10 ⁻⁴	schatting
Achtergrond inhalatoir	mg/kg dag	4,36.10 ⁻⁴	berekend uit VMM, 1999, 2000
Carcinogeniteit	-	D	US-EPA, 2000

1.1.3 1,3,5-trimethylbenzeen

Parameter	eenheid	waarde	bron
Molmassa	g/mol	120,2	geometrisch gemiddelde
Oplosbaarheid	g/m ³	67,6 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Dampdruk	Pa	326 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Henry-coëfficiënt	Pa m ³ /mol	774 bij 25°C	berekend
Kow	g/g	3,7 bij 25°C	geometrisch gemiddelde
Koc	dm ³ /kg	680	geometrisch gemiddelde
Kd	dm ³ /kg	7,89	berekend m.b.v. Vlier-Excel
BCFst	(mg/kg vs)/(mg/kg ds)	0,64	berekend m.b.v. Vlier-Excel
BCFwo	(mg/kg vs)/(mg/kg ds)	2,64	berekend m.b.v. Vlier-Excel
Dpe	m ² /d	6,4.10 ⁻⁶	van den Berg, 1997
Dpvc	m ² /d	6,4.10 ⁻⁹	berekend uit Dpe
Diffusiecoëfficiënt lucht	m ² /h	0,0286 bij 25°C	berekend m.b.v. Vlier-Excel
Diffusiecoëfficiënt water	m ² /h	2,86.10 ⁻⁶ bij 25°C	berekend m.b.v. Vlier-Excel
facing (vee)	-	1	standaard
facinh (vee)	-	1	Hassauer et al., 1993
fexcr (vee)	-	0	standaard
DARvolw	1/h	0,005	standaard
DARkind	1/h	0,01	standaard
TDIoraal	mg/kg d	0,05	RAIS, 2002 en CEHT, 2001
TDIinhalatoir	mg/kg d	1,67.10 ⁻³	RAIS, 2002
TCL	g/m ³	5,83.10 ⁻⁶	RAIS, 2002
Limiet drinkwater	g/m ³	1,5.10 ⁻¹	berekend uit TDlor (RAIS, 2002)
Limiet plant toxisch	mg/kg ds	-	
Gewasnorm	mg/kg vs	-	
Vleesnorm	mg/kg vs	-	
Achtergrond lucht	g/m ³	5.10 ⁻⁷	berekend uit VMM, 1999, 2000
Achtergrond voeding	mg/kg dag	-	
Achtergrond inhalatoir	mg/kg dag	1,43.10 ⁻⁴	berekend uit VMM, 1999, 2000
Carcinogeniteit	-	D	US-EPA, 2000

1.2 Referenties

CEHT (2001). Center for Environmental & Human Toxicology, University of Florida. Technical Report: Development of Cleanup Target Levels (CTLs) for Chapter 62-777, F.A.C. – Draft.

Hassauer, M., Kalberlah, F., Oltmanns, J., Schneider, K. (1993). Berichte 4/93. Basisdaten Toxikologie für umweltrelevante Stoffe zur Gefahrenbeurteilung bei Altlasten. Erich Schmidt Verlag, Berlin, Duitsland.

RAIS (2002). Risk Assessment Information System. <http://risk.lsd.ornl.gov/tox/>

US-EPA (1997). Toxics Release Inventory. Relative risk-based environmental indicators. Interim toxicity weighting summary document. June 1997. US Environmental Protection Agency.

US-EPA (2000). Office of Water. Drinking Water Standards and Health Advisories. US Environmental Protection Agency, 822-B-00-001.

van den Berg, R. (1997). Verantwoording van gegevens en procedures voor de 1e tranch interventiewaarden: van RIVM-rapporten naar de Notitie Interventiewaarden bodemsanering. RIVM, rapportnr. 715810012, Bilthoven, Nederland.

VMM (1999). Luchtkwaliteit in het Vlaamse gewest 1998. Vlaamse MilieuMaatschappij, Erembodegem, België.

VMM (2000). Luchtkwaliteit in het Vlaamse gewest 1999. Vlaamse MilieuMaatschappij, Erembodegem, België.