

TAAK I.1

IDENTIFICATIE EN KWANTIFICATIE VAN DE VERSCHILLENDE FACTOREN DIE BIJDAGEN TOT DE DEGRADATIE VAN HET MARIENE MILIEU

LABORATORIUM VOOR MILIEUTOXICOLOGIE & AQUATISCHE ECOLOGIE

Universiteit Gent

Dagobert Heijerick

Prof. Dr. Colin Janssen

INHOUDSTABEL

Hoofdstuk 1. Identificatie en kwantificatie van de belangrijkste milieufactoren die bijdragen tot de degradatie van het Belgisch deel van de Noordzee

1.1	Inleiding	11
1.2	Metalen	14
1.2.1	Arseen	19
1.2.2	Cadmium	19
1.2.3	Chroom	21
1.2.4	Koper	21
1.2.5	Kwik	23
1.2.6	Lood	25
1.2.7	Nikkel	26
1.2.8	Zink	27
1.2.9	Bereikte reducties in 1995 voor water en lucht t.o.v. 1985	27
1.2.10	Totale emissie-hoeveelheden	28
1.2.11	Evaluatie emissie-hoeveelheden vs. Toxiciteit	29

1.3	Organische verbindingen	33
1.3.1	Algemeen	33
1.3.2	Polycyclische Aromatische Koolwaterstoffen (PAK's)	34
1.3.3	Dioxines	37
1.3.4	Overige chloorhoudende organische verbindingen	38
1.4	Pesticiden	40
1.4.1	Pesticiden – algemeen	40
1.4.2	Voorkomen van andere stoffen	42
1.5	Radioactieve stoffen	44
1.5.1	Artificiële radionucliden	44
1.5.2	Natuurlijke radionucliden (gegevens uit North Sea Subregion 4 Assessment Report 1993)	45
1.6	Nutriënten	47
1.7	Olieverontreiniging van het marien milieu	50
1.7.1	Determinatie van de belangrijkste contaminanten bij olieverontreiniging	50
1.7.2	Dispersanten	52

Hoofdstuk 2. Partitionering van de belangrijkste verontreinigende stoffen van het marien milieu over de verschillende milieucompartimenten van een standaard milieu

2.1	Inleiding	54
2.2	Verdeling van contaminanten in de Noordzee	58
2.2.1	Definiëring van het milieu	59
2.2.2	Acenafteen	63
2.2.3	Acenafyleen	64
2.2.4	Anthraceen	65
2.2.5	Benzeen	66
2.2.6	Benzo(a)anthraceen	68
2.2.7	Benzo(b)fluorantheen	69
2.2.8	Benzo(k)fluorantheen	70
2.2.9	Benzo(ghi)peryleen	71
2.2.10	Benzo(a)pyreen	72
2.2.11	Chryseen	74
2.2.12	Cyclohexaan	76
2.2.13	Cyclopentaan	77
2.2.14	Dibenzo(ah)anthraceen	78
2.2.15	Dibenzothiopheen	79
2.2.16	Dimethylnaftaleen (1,3; 2,3;2,6)	80
2.2.17	2,4-Dimethylpentaan	80
2.2.18	Difenyl	81
2.2.19	Ethylbenzeen	82
2.2.20	Fenanthreen	83
2.2.21	Fluorantheen	85
2.2.22	Fluoreen	86
2.2.23	Heptaan	88
2.2.24	Hexaan	89
2.2.25	Indeno (123, cd) pyreen	91
2.2.26	Methylfenanthreen	92
2.2.27	Methylnaftaleen	93
2.2.28	2-Meethylpentaan	94

2.2.29	Naftaleen	95
2.2.30	Nonaan	96
2.2.31	Octaan	98
2.2.32	Peryleen	99
2.2.33	n-Propylbenzeen	100
2.2.34	Pyreen	101
2.2.35	Tolueen	103
2.2.36	o-Xyleen	104
2.2.37	m-Xyleen	105
2.2.38	p-Xyleen	106

2.3	Algemene bespreking van de verdeling van de besproken verbindingen over de verschillende milieucapartimenten	108
-----	--	-----

2.4	Bruikbaarheid van de berekende partitioneringscoëfficiënten als inputdata voor het voorspellen van korte- en langetermijn effecten	112
-----	--	-----

Hoofdstuk 3. Inschatting van lange termijn effecten van contaminanten in het marien milieu

3.1	Inleiding	117
3.1.1	Processen die de inwendige concentratie van een organisme bepalen	118
3.1.2	Empirische modellen	119
3.1.3	Mechanistische modellen	121

3.2	Het Lange-Termijn Effecten Model (LTEM) voor de Noordzee	123
3.2.1	STAP 1: Berekening van de interne concentratie van een contaminant	123
3.2.1.1	Opname via het water: BCF_{water}	123
3.2.1.2	Opname via het voedsel	125
3.2.1.2.1	Definiëren van een representatief voedselweb voor de Noordzee	125
3.2.1.2.2	Berekenen van de bijdrage door voedselopname tot de totale interne concentratie van een contaminant in de verschillende trofische niveaus	127
3.2.2	STAP 2: Inschatten van lange-termijn effecten op basis van de interne lichaamsconcentratie	131

3.3	Bepaling van bioconcentratiefactoren (BCF) van de belangrijkste Oliecomponenten	134
3.3.1	Extrapolatiemethodes voor het berekenen van de BCF	134
3.3.2	Extrapolatiemethode voor het berekenen van de K_{ow}	138
3.3.3	Berekening van BCFs voor 32 organische verbindingen	140
3.4	Bepaling van ICL-curves voor 32 organische verbindingen	146

Hoofdstuk 4. Ecotoxiciteitsdata van 23 organische verbindingen: bepaling van ILC_{50} -InT-relaties

4.1	Inleiding	151
4.2	Foto-inductie	152
4.2.1	Algemeen	152
4.2.2	Incorporatie van fototoxiciteit voor het voorspellen van lange-termijn effecten	155

4.3	Bruikbaarheid van toxiciteitsdata van zoetwaterspecies voor de lange-termijn evaluatie van toxicanten in het marien milieu	156
4.4	Incorporatie van toxiciteitsdata van niet-gevoelige species op de ILC ₅₀ -InT helling	159
4.5	Bruikbaarheid van <24h-toxiciteitsdata voor de bepaling van ILC ₅₀ -InT Relaties	160
4.6	Overzicht van de gebruikte toxiciteitsdata en afgeleide ILC ₅₀ -InT –hellingen	162
4.6.1	Acenaptheen	162
4.6.2	Anthraceen	164
4.6.3	Benzeen	166
4.6.4	Benzo(a)anthraceen	169
4.6.5	Benzo(a)pyreen	170
4.6.6	Chryseen	171
4.6.7	Cyclohexaan	172
4.6.8	Dimethylnaftaleen	173
4.6.9	Ethylbenzeen	174
4.6.10	Fluorantheen	175
4.6.11	Fluoreen	177
4.6.12	Heptaan	178
4.6.13	Hexaan	179
4.6.14	1-Methylnaftaleen	180
4.6.15	2-Methylnaftaleen	181
4.6.16	Fenanthreen	182
4.6.17	Naftaleen	183
4.6.18	n-Propylbenzeen	187
4.6.19	Pyreen	188
4.6.20	Tolueen	190
4.6.21	o-Xyleen	193
4.6.22	m-Xyleen	195
4.6.23	p-Xyleen	196

Hoofdstuk 5. Voorspellen van lange-termijn effecten van olieverontreiniging: hypothetische casestudies

5.1	Gebruik van het LTEM voor het voorspellen van lange-termijn effecten	198
5.1.1	Algemeen Model voor drie contaminanten	198
5.1.2	Species-specifieke Model	199
5.1.2.1	Beschrijving van de specifieke voedselketen	199
5.1.2.2	Species-specifieke fysiologische gegevens	201
5.2	Case studie met Fuel No2 olie: lange termijn effecten van de belangrijkste contaminanten	201
	Bibliografie	204

HOOFDSTUK 1

IDENTIFICATIE EN KWANTIFICATIE VAN DE BELANGRIJKSTE MILIEUFACTOREN DIE BIJDAGEN TOT DE DEGRADATIE VAN HET BELGISCH DEEL VAN DE NOORDZEE

1.1 Inleiding

In het kader van de Derde Noordzeeconferentie, die in 1990 in Den Haag werd gehouden, werden er door de ‘Noordzeelanden’ (België, Denemarken, Duitsland, Frankrijk, Groot-Brittannië, Nederland, Noorwegen, Zweden en Zwitserland) een aantal afspraken vastgelegd met betrekking tot de reductie van de totale vracht aan gevaarlijke stoffen die in de Noordzee terecht komen. Hierbij werd een lijst van 36 stoffen opgesteld (Tabel 1.1) waarvoor er tegen 1995 een 50 tot 70% reductie van de emissie naar water en lucht ten opzichte van 1985 werd afgesproken. Het bereiken van een nulinbreng van deze stoffen in de Noordzee werd als doel gesteld. De doelstellingen van deze conferentie werden in 1995 tijdens de Vierde Noordzeeconferentie in Esbjerg herbevestigd.

Hiernaast trad in 1998 het Verdrag inzake de bescherming van het mariene milieu in het noordoostelijk deel van de Atlantische Oceaan (OSPAR Conventie, Parijs 1992) in werking (België, Denemarken, De Europese Unie, Finland, Frankrijk, Duitsland, IJsland, Ierland, Nederland, Noorwegen, Portugal, Spanje, Zweden, Groot-Brittannië, Luxemburg en Zwitserland). In 1998 (Sintra) werd de OSPAR-strategie Gevaarlijke Stoffen goedgekeurd: deze strategie heeft tot doel een nulemissie van gevaarlijke stoffen voor 2020 te verwezenlijken (Tabel 1.1). Voor deze 15 stoffen/stofgroepen dienen er tegen 2003 reductieprogramma's opgesteld te worden.

Voor de identificatie en kwantificatie van de belangrijkste verontreinigende stoffen die bijdragen tot de degradatie van het mariene milieu, werd gebruik gemaakt van de volgende bronnen:

- Dossier: Stofstromen naar de Noordzee: dit dossier bevat 36 stofstroomfiches, opgesteld door de Technische Commissie Noordzee (MNZ), die de Belgische emissies naar water en lucht kwantificeren. De 36 stoffen werden opgenomen in de Slotverklaring van de Derde Noordzeeconferentie (Den Haag, 1990) (zie Tabel 1.1). Hiernaast werden ook stofstroomfiches van de nutriënten stikstof en fosfor in dit dossier opgenomen.
- Quality Status Report 2000; Region II: Greater North Sea (OSPAR Commission, 2000)
- North Sea Subregion 4 Assessment Report 1993 (North Sea Task Force).

Het MNZ-Dossier heeft de emissie van de beschouwde stoffen naar de Noordzee beoordeeld op het niveau van totale primaire emissies naar de lucht en naar het water. Hierbij werd ook een onderscheid gemaakt tussen puntbronnen en diffuse bronnen.

Tabel 1.1: Lijst van gevaarlijke stoffen waarvoor op middel-lange termijn (1 generatie; voor 2020) een nulmissie naar de Noordzee wordt voorop gesteld

	3 ^{de} NZC, Den Haag, 1990	4 ^{de} NZC, Esbjerg, 1995	OSPAR, 1998
aromatische KWS		X	X
dioxines	X	XX	X
furanen	X	XX	X
ftalaten		X	
dibutylftalaat (DBP)			X
diethylhexylftalaat (DEHP)			X
DDT	X	X	
drins	X	X	
drins aldrin	X	X	
drins dieldrin	X	X	
drins endrin	X	X	
drins isodrin	X	X	
endosulfan	X	X	
hexachloorbenzeen (HCB)	X	X	
hexachloorbutadieen (HCBd)	X	X	
hexachloorcyclohexaan (HCH, alfa)			X
hexachloorcyclohexaan (HCH, beta)			X
hexachloorcyclohexaan	X	X	X
lindaan (HCH, gamma)			X
pentachloorfenol (PCP)	X	X	X
trichloorbenzeen (technisch)	X	X	
chloorparaffines (C10-C13) SCCP		X	X
1,2,3-trichloorbenzeen	X	X	
1,2,4-trichloorbenzeen	X	X	
1,3,5-trichloorbenzeen	X	X	

Tabel 1.1: vervolg.

chloroform (trichloormethaan)	X	X	
tetrachloorkoolstof (tetrachloormethaan)	X	X	
1,1,1-trichloorethaan	X	X	
1,2-dichloorethaan (EDC)	X	X	
tetrachlooretheen (PER)	X	X	
trichlooretheen (TRI)	X	XX	
azinfos-ethyl	X	X	
azinfos-methyl	X	X	
dichloorvos	X	XX	
fenitrothion	X	XX	
fenthion	X	X	
malathion	X	X	
parathion (parathion-ethyl)	X	X	
parathion-methyl	X	X	
gebromeerde vlamvertragers		X	X
organotinverbindingen			X
trifenyyltin-verbindingen	X	XX	
tributyyltinverbindingen	X	XX	
muskxylenen		X	X
nonylfenol		X	X
nonylfenoethoxylaten		X	X
organische kwikverbindingen			X
organische loodsverbindingen			X
polychloorbifenylen			X
arseen	X	X	
cadmium	X	XX	X
chromium	X	X	
koper	X	XX	
kwik	X	XX	X
lood	X	XX	X
nikkel	X	XX	
zink	X	XX	

X = opgenomen in de lijst van prioritaire ‘gevaarlijke stoffen’

XX= stoffen waarvoor de vooropgestelde reducties niet werden gehaald

1.2 Metalen

Op basis van gegevens, weergegeven in de de MNZ-stofstroomfiches voor metalen (arseen, cadmium, chroom, koper, kwik, lood, nikkel en zink) werd een overzicht van de emissie naar water (Tabel 1.2a, 1.2b) en lucht (Tabel 1.3) opgesteld. Voor de elementen waar data voorhanden waren, werd de totale emissie opgesplitst in diffuse (landbouw, overige) en puntbronnen (huishoudens, industrie). Tabellen 1.4 en 1.5 geven een overzicht van het procentueel aandeel van verschillende bronnen voor de emissie naar water en lucht, en dit voor 1995. Tabel 1.6 geeft een algemeen overzicht van de emissies naar water en lucht.

Tabel 1.2a: Overzicht van de Belgische emissies (Ton/jaar) naar water: metalen (1985 – 1995) (Bron: MNZ, 1995). Reductie (in %) t.o.v. 1985.

Stof	1985	1990		1995	
Arseen – algemeen totaal	12.2	9.9	-19%	4.9	-59%
Arseen – fosfaatproductie	7.7	7.7	+1%	4.3	-45%
Arseen – overige bronnen	4.5	2.2	-52%	0.6	-84%
Cadmium – algemeen totaal	14.2	2.7	-81%	2.0	-86%
Cadmium – fosfaatproductie	12.4	1.8	-85%	1.3	-90%
Cadmium – overige bronnen	1.8	0.9	-49%	0.7	-59%
Chroom – algemeen totaal	157.1	91.1	-42%	44.4	-72%
Chroom – fosfaatproductie	6.0	4.3	-28%	3.6	-39%
Chroom – landbouw	2.8	2.8	-3%	2.4	-13%
Chroom – overige industrie	148.3	84	-43%	38.4	-74%
Koper – algemeen totaal	172	169	-2%	153	-11%
Koper – diffuse bronnen	43	43	-0%	43	-0 %
Koper – landbouw	7	6	-14%	6	-14%
Koper – huishoudens	80	81	+1%	83	*4%
Koper – industrie	42	39	-7%	21	-50%
Koper – totaal naar opp.water	148	143	-3%	123	-17%
Kwik – algemeen totaal	2.3	2.1	-11%	2.1	-12%

Tabel 1.2a: vervolg

Lood – totaal aan de bron	126.2	119.2	-7%	97.2	-23%
Lood – diffuse bronnen	55	55	-0%	55	-0%
Lood – landbouw	1.2	1.2	-0%	1.2	-0%
Lood – huishoudens	12	13	+8%	12	-0%
Lood – overige industrie	44.8	35.8	-20%	15.8	-65%
Lood – totaal naar opp.water	103	96	-7%	73	-29%
Nikkel – algemeen totaal	89.9	75.6	-16%	49.4	-45%
Nikkel – fosfaatproductie	10.0	7.6	-24%	3.4	-66%
Nikkel – landbouw	1.9	1.9	-2%	1.7	-11%
Nikkel – huishoudens	1.9	1.9	-1%	1.8	-3%
Nikkel – overige industrie	76.1	64.2	-16%	43.5	-43%
Zink – totaal aan de bron	902	832	-8%	651	-28%
Zink – diffuse bronnen	500	454	-9%	408	-18%
Zink - landbouw	11	11	-0%	11	-0%
Zink – huishoudens	107	109	+2%	105	-2%
Zink – overige industrie	273	247	-10%	115.7	-58%
Zink – totaal naar opp.water	771	698	-10%	527	-32%

Tabel 1.2b: Input van zware metalen in de Noordzee vanuit België (Ton/jaar). (Bron: OSPAR, 1998c; in OSPAR QSR 2000).

Weergegeven waarden zijn de 'lower and upper estimate'.

Stof	Input via rivieren		Directe input	
	1990	1996	1990	1996
Cadmium	3.7 – 4.9	0.8 – 5.0	--	-
Koper	39 - 51	28 - 61	--	0.002
Kwik	3.6 – 4.5	0.02 – 0.03	--	0.00
Lood	24 - 31	29 - 60	--	0.009

Tabel 1.3a: Overzicht van de Belgische emissies (Ton/jaar) naar lucht: metalen (1985 – 1995) (Bron: MNZ, 1995). Reductie (in %) t.o.v. 1985.

Stof	1985	1990		1995	
Arseen – algemeen totaal	54.9	7.12	-87%	3.42	-94%
verbranding huishoud. afval	.10	.11	+13%	.11	+10%
overige	54.8	7.01	+87%	3.31	-94%
Cadmium – algemeen totaal	>16.8	>11.0	-34%	>8.68	-48%
verbranding huishoud. afval	2.17	2.60	+20%	1.34	-38%
overige	>14.6	>8.4	-42%	>7.34	-50%
Chroom – algemeen totaal	82.7	79.7	-4%	76.5	-8%
verbranding huishoud. afval	20.4	28.5	+40%	32.4	+59%
overige	62.3	51.2	-18%	44.1	-29%
Koper – algemeen totaal	153.7	91.8	-40%	78.7	-49%
verbranding huishoud. afval	4.26	5.39	+27%	5.55	+30%
overige	149.4	86.4	-42%	73.1	-51%
Kwik – algemeen totaal	> 13.3	> 9.09	-32%	> 7.95	-40%
verbranding huishoud. afval	6.33	3.78	-40%	3.48	-45%
overige	> 6.97	> 5.29	-24%	> 4.47	-36%
Lood – algemeen totaal	1742	785.6	-55%	591.5	-66%
verbranding huishoud. afval	91.8	96.9	+5%	105.6	+18%
overige	1651	688.7	-58%	485.9	-71%
Nikkel – algemeen totaal	150.0	111.9	-25%	118.7	-21%
verbranding huishoud. afval	15.5	22.5	+45%	23.8	+53%
overige	134.5	89.4	-34%	94.9	-29%
Zink – algemeen totaal	534.3	500.8	-6%	440.5	-18%
verbranding huishoud. afval	64.0	70.5	+10%	72.3	+13%
overige	470.3	430.3	-9%	368.2	-22%

Tabel 1.3b: Atmosferische emissies in België van vier zware metalen (Ton/jaar) naar de lucht. (Bron: 4NSC,1995; in OSPAR QSR, 2000).

Stof	1985	1990	1995*
Cadmium	12.8	6.8	5.4
Koper	157	99	87
Kwik	14.1	9.5	8.0
Lood	1707	794	605

* voorspelde waarden

Tabel 1.4: Procentueel belang van verschillende bronnen voor de emissie naar lucht voor 1995 (Bron: MNZ, 1995).

	As	Cd	Cr	Cu	Hg	Pb	Ni	Zn
Wegtransport met diesel en benzine				32%		54%		10%
Transport		28%						
Verbranding van residuele (zware) stookolie							62%	
IJzer- en staalindustrie	31%	18%	37%	21%	12%	20%	12%	51%
Non-ferro industrie	30%	12%		36%	4%	7%	0.8%	18%
Chlooralkali industrie					18%			
Verbranding van huishoudelijk afval	3%	15%	42%	7%	43%	18%	20%	16%
Werktuigbouw, opp. behandeling van metalen			13%					
Electriciteit uit steenkool	19%	0.2%	1%	1%	8%	0.1%	1%	1%
Glasindustrie			2%				0.4%	3%
Som overige energie en wegtransport	8%	27%	5%	3%	15%	0.6%	1%	
Slijtage van remschoenen							2%	
Slijtage aan autobanden								1%
Houtverduurzaming	6%							
Grootte-orde van de som van de overige bronnen	3%							

Tabel 1.5: Procentueel belang van verschillende bronnen voor de emissie naar water voor 1995 (Bron: MNZ, 1995).

	As	Cd	Cr	Cu	Hg	Pb	Ni	Zn
Huishoudens				54%		12%	4%	16%
IJzer- en staalindustrie		17%	34%	2%		15%	24%	8%
Non-ferro industrie	7%	16%		2%	0.4%	3%	5%	2%
Chlooralkali industrie					3.6%			
Cokesfabrieken	7%							
Fosfaatproductie (+toepassing van fosfaten)	85%	64%	8%				7%	
Landbouw			5%	4%		1%	3.5%	2%
Diffuse bronnen (excl. landbouw)				28%		57%		63%
Petrochemie			5%				3.5%	
Textielindustrie			7%					
Werktuigbouw, (opp.) behandeling van metalen			27%				29%	
Leerlooierijen			14%					
Cadmiumverwerking		3%						
Tandartsen					96%			
Grootte-orde van de som van de overige industrie	1%					12%	24%	9%

Tabel 1.6: Algemeen totaal (in Ton/jaar) en procentueel aandeel van metaal-emissie naar lucht en water voor 1995 (Bron: MNZ, 1995).

	As	Cd	Cr	Cu	Hg	Pb	Ni	Zn
som lucht & water	8.32	>10.68	120.9	231.7	>10.05	688.7	168.1	1091.5
lucht	3.42	>8.68	76.5	78.7	>7.95	591.5	118.7	440.5
	41%	85%	63%	34%	79%	86%	71%	40%
water	4.9	2.0	44.4	153	2.1	97.2	49.4	651
	59%	15%	37%	66%	21%	14%	29%	60%

1.2.1 Arseen

Voor As bleken er geen gegevens voorhanden te zijn in de OSPAR QSR. Op basis van de MNZ-stofstroomfiche blijkt dat tussen 1985 en 1995 een sterke reductie van de emissie naar de lucht werd verwezenlijkt (94%). Tijdens deze periode werd een reductie van 59% van de emissie naar het water vastgesteld. In 1995 bedroeg de emissie naar water 59 % van de totale emissie in België.

Water (MNZ-1995)

De belangrijkste bron van As-emissie is de productie en toepassing van fosfaten. Deze activiteit is verantwoordelijk voor 85% van de totale emissie naar water in 1995. Minder belangrijke bronnen zijn de non-ferro industrie en cokesfabrieken, beiden verantwoordelijk voor 7% van de totale emissie naar water.

Lucht (MNZ-1995)

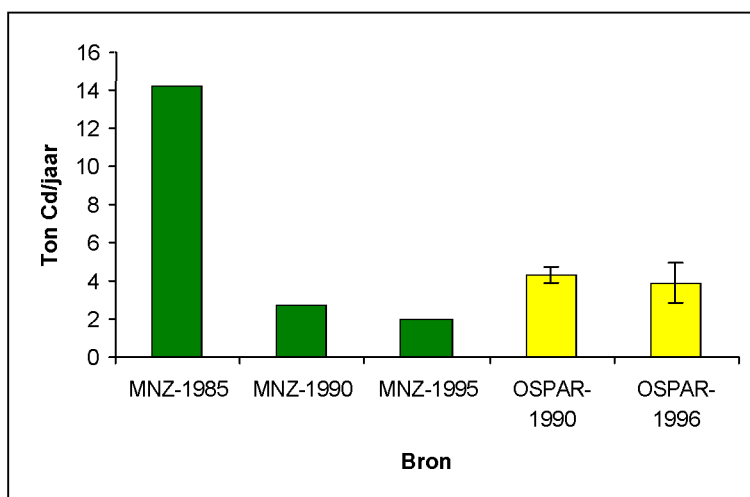
Voor de emissie van As naar lucht zijn voornamelijk de ijzer-en staalindustrie (31%), de non-ferro-industrie (30%) en de opwekking van electriciteit uit steenkool (19%) verantwoordelijk.

Activiteiten zoals houtverduurzaming, verbranding van huishoudelijk afval en wegtransport leveren kleinere bijdragen aan de totale emissie van As (3 - 9%).

1.2.2 Cadmium

Voor Cd werd tussen 1985 en 1995 een reductie van 86% van de emissie naar water vastgesteld (Tabel 1.2a). Deze afname was voornamelijk te danken aan een verminderde Cd-emissie bij de fosfaatproductie. De reductie naar de lucht tijdens deze periode bedroeg echter 48%. Voor 1995 bedroeg de emissie van Cd naar de lucht 85% van de totale emissie.

Figuren 1.1 en 1.2 vergelijken de emissies van cadmium naar lucht en water zoals gerapporteerd in de MNZ-stofstroomfiche en de OSPAR QSR (2000), en geven een overzicht weer van de cadmiumemissie naar lucht en water. Hieruit blijkt een goede overeenkomst tussen de weergegeven emissiewaarden voor de vergeleken jaren. In beide figuren is ook duidelijk de afname van Cd-emissie naar water en lucht vast te stellen.



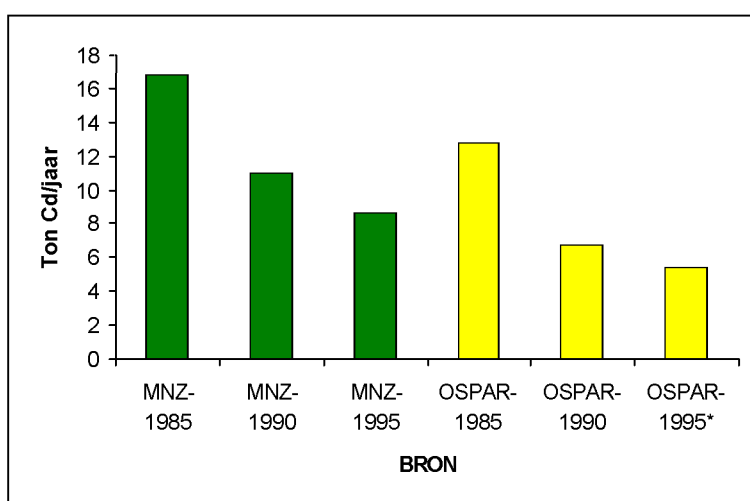
Figuur 1.1: Emissie van Cd in België naar het oppervlaktewater

Water (MNZ-1995)

Net zoals bij As is de productie (en toepassing) van fosfaten de belangrijkste bron van Cd-emissie naar oppervlaktewaters (64%). Andere bronnen die bijdragen tot de emissie van Cd zijn de IJzer- en staalindustrie (17%) en de non-ferro industrie (16%). Hoewel de Cd-emissie als gevolg van reductiemaatregelen tussen 1985 en 1995 met 90% is afgenomen, blijkt dit nog steeds veruit de belangrijkste bron van Cd-verontreiniging naar het water toe.

Lucht (MNZ-1995)

Verontreiniging van de atmosfeer met Cd is voornamelijk het gevolg van transport, verkeer en energie-opwekking (55%). IJzer- en staalindustrie en de non-ferro industrie waren in 1995 verantwoordelijk voor 30% van de Cd-emissie. Verbranding van huishoudelijk afval droeg 15% bij tot de totale emissie van Cd.



Figuur 1.2: Emissie van Cd in België naar de lucht

1.2.3 Chroom

Voor Cr bleken er geen gegevens voorhanden te zijn in de OSPAR QSR. Op basis van de MNZ-stofstroomfiche blijkt dat tussen 1985 en 1995 slechts een beperkte reductie van de emissie naar de lucht werd verwezenlijkt (-8%). De toename van Cr-emissie bij de verbranding van huishoudelijk afval was hier voornamelijk voor verantwoordelijk (+59%). Tijdens deze periode werd wel een reductie van 72% van de emissie naar het water vastgesteld. In 1995 bedroeg de emissie naar lucht 63% van de totale emissie in België.

Water (MNZ-1995)

De emissie van Cr in het oppervlaktewater is een gevolg van diverse activiteiten, waarvan de IJzer- en staalindustrie (34%) en werktuigbouw/oppervlaktebehandeling van metalen (27%) de belangrijkste zijn. Andere activiteiten die een bijdrage leveren aan de Cr-vervuiling zijn om. leerlooierijen (14%), textielindustrie (7%) en productie en toepassing van fosfaten (8%). De waargenomen reductie van Cr-emissies naar het water tussen 1985 en 1995 zijn voornamelijk het gevolg van een reductie bij industriële activiteiten (-72%), en minder bij landbouw (-13%) en fosfaatproductie (-39%).

Lucht (MNZ-1995)

Voor emissie van Cr naar de lucht zijn voornamelijk verbranding van huishoudelijk afval (42%) en de ijzer- en staalindustrie (37%) verantwoordelijk, en in mindere mate werktuigbouw/oppervlaktebehandeling van metalen (13%). Zoals eerder vermeld is de beperkte reductie van Cr-emissie tussen 1985 en 1995 het gevolg van een verhoogde uitstoot bij de verbranding van huishoudelijk afval. Desalniettemin werden bij de andere sectoren ook slechts een gemiddelde reductie van 29% vastgesteld in plaats van de vooropgestelde 50% volgens de Derde NoordzeeConferentie (Den Haag, 1990).

1.2.4 Koper

Voor Cu werd tussen 1985 en 1995 een reductie van 17% van de emissie naar oppervlakte water vastgesteld. De resterende hoeveelheid bedroeg 66% van de totale emissie van Cu in België. De reductie naar lucht bedroeg 49% tijdens deze periode.

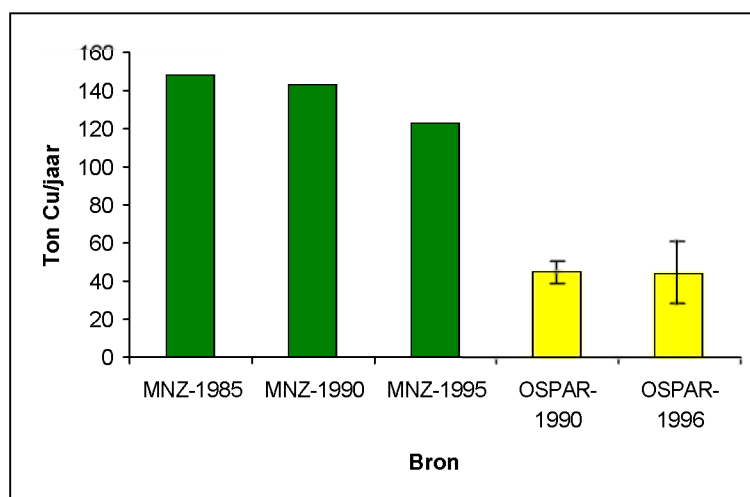
Figuren 1.3 en 1.4 vergelijken de emissies van Cu naar water en lucht in België zoals weergegeven in OSPAR QSR (2000) en MNZ (1995). Voor de emissie naar lucht blijken beide bronnen vergelijkbare totale emissiewaarden weer te geven, en wordt een analoge dalende trend tussen 1985 en 1995 teruggevonden. Voor de gerapporteerde emissiewaarden naar water geeft OSPAR beduidend lagere emissiewaarden voor 1990 en 1996. Deze verschillen bedragen zelfs meer dan een factor 3. Merk op

dat de weergegeven emissiewaardes voor Cu bij OSPAR steeds een gemiddelde is van de laagste en hoogste schatting van de totale emissie voor dat jaar. Een mogelijke verklaring van de lagere Cu-emissies bij OSPAR is dat het Maaswater – dat uitmondt in de Waal (Nederland) niet is meegerekend bij de Belgische emissie van Cu naar de Noordzee. De verdere bespreking van koper-emissie is dan ook gebaseerd op de gegevens uit de MNZ-stofstroomfiche voor Cu.

Water (MNZ-1995).

De belangrijkste bron van Cu-emissie naar oppervlaktewater zijn huishoudens, welke verantwoordelijk zijn voor 54% van de totale emissie naar water. De beperkte gerealiseerde reductie van Cu, vooropgesteld in de Derde NoordzeeConferentie (Den Haag, 1990), is dan ook te wijten aan het feit dat tussen 1985 en 1995 De emissie van Cu door huishoudens met 4% is toegenomen. Tijdens deze periode werd door de industrie (ijzer- en staalindustrie, non-ferro) wel een reductie van 50% gehaald, maar deze emissies dragen slechts voor 4 % bij tot de totale emissie naar het oppervlaktewater. Landbouw draagt eveneens voor 4% bij aan de totale emissie. De overige 28% is een gevolg van diverse diffuse, niet-gespecificeerde bronnen.

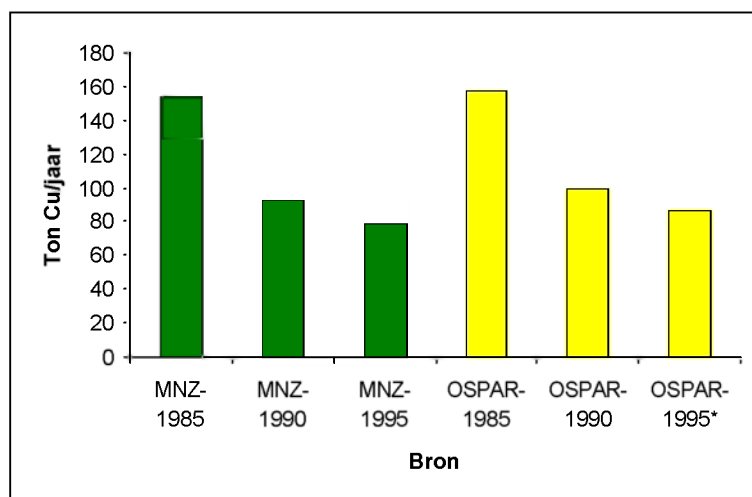
Vermits de emissie van Cu naar het milieu voornamelijk via het water plaatsvindt (66%), is het duidelijk dat maatregelen voor een reductie van Cu-uitstoot zich voornamelijk op de huishoudens moet richten.



Figuur 1.3: Emissie van Cu in België naar het oppervlaktewater

Lucht (MNZ-1995).

De belangrijkste bronnen van Cu-verontreiniging via de lucht zijn de ijzer- en staalindustrie (21%), de non-ferro-industrie (36%) en wegverkeer met diesel/benzine (32%). De waargenomen reductie van 49% tussen 1985 en 1995 is voornamelijk het gevolg van maatregelen bij de verschillende industriële activiteiten (-51%).



Figuur 1.4: Emissie van Cu in België naar de lucht

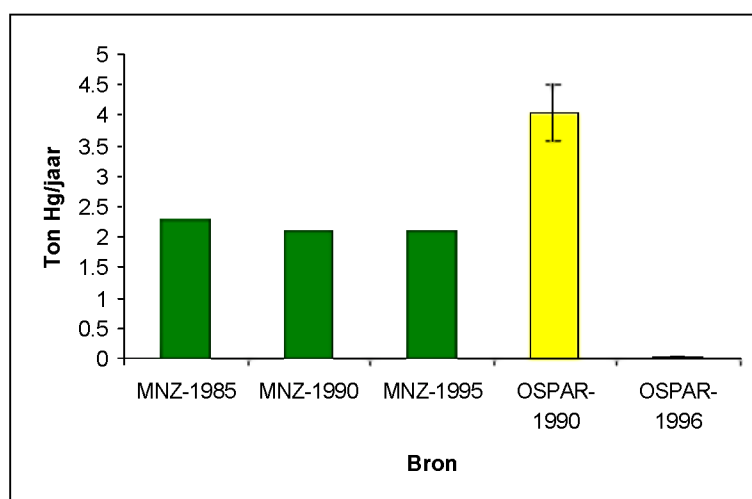
1.2.5 Kwik

Voor Hg werd tussen 1985 en 1995 slechts een reductie van 12% van de emissie naar oppervlakte water vastgesteld. De reductie naar lucht bedroeg 40% tijdens deze periode. De emissie via lucht is het grootste aandeel van de totale emissie (79%).

Figuren 1.5 en 1.6 vergelijken de emissies van Hg naar water en lucht in België zoals weergegeven in OSPAR QSR (2000) en MNZ (1995). Voor de emissie naar lucht blijken beide bronnen vergelijkbare totale emisiewaarden weer te geven, en wordt een analoge dalende trend tussen 1985 en 1995 teruggevonden. Voor de gerapporteerde emisiewaarden naar water geeft OSPAR een beduidend hogere emisiewaarde voor 1990 (factor 1.9). Voor 1996 daarentegen wordt slechts een totale emissie via water van 25 kg vooropgesteld, daar waar de MNZ-stofstroomfiche voor 1995 een totale emissie van 2100 kg weergeeft (factor 84). Uit de data blijkt echter dat de emissie-route via lucht veruit de belangrijkste is (97%), zelfs indien de waarden van de Hg-stofstroomfiche in beschouwing worden genomen. Voor de bespreking worden de MNZ-data (1995) dan ook aangenomen als een ‘worst case’.

Water (MNZ-1995)

De emissie van Hg naar oppervlaktewater is voornamelijk te wijten aan lozingen van tandtechnisch amalgaam (96%). Vermits tussen 1985 en 1995 geen emissiebeperkende maatregelen werden genomen, is de waargenomen reductie van Hg naar het water toe te schrijven aan emissiereducties bij de non-ferro industrie (-93%) en de chlooralkali industrie (-67%).

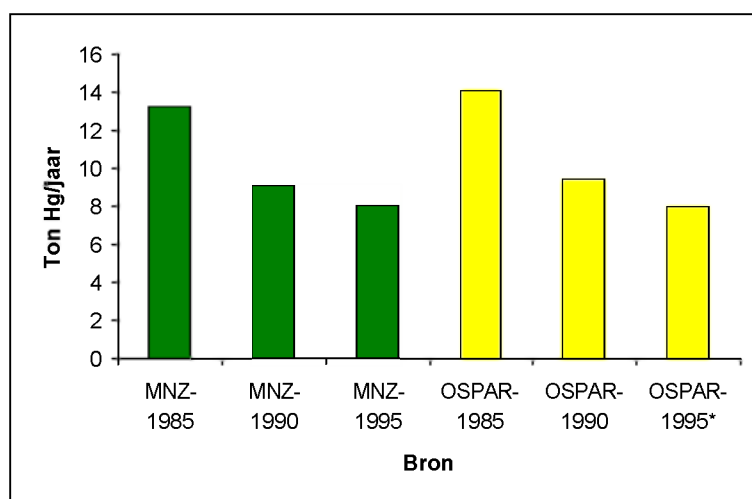


Figuur 1.5: Emissie van Hg in België naar het oppervlaktewater

Lucht (MNZ-1995)

Emissie van Hg bij huisvuilverbranding draagt voor 43% bij tot de totale emissie van Hg in de atmosfeer. Ten opzichte van 1985 was deze hoeveelheid met 45% gereduceerd in 1995, voornamelijk door een dalende aanvoer van kwikhoudende batterijen en koortsthermometers in huishoudelijk afval. Andere belangrijke bronnen van Hg-emissie naar de lucht zijn de chlooralkali industrie (18%), ijzer- en staalindustrie (12%) en energie-opwekking (23%).

Hierbij werd tijdens de periode 1985-1995 een sterke reductie (-60%) vastgesteld bij de chlooralkali industrie.



Figuur 1.6: Emissie van Hg in België naar de lucht

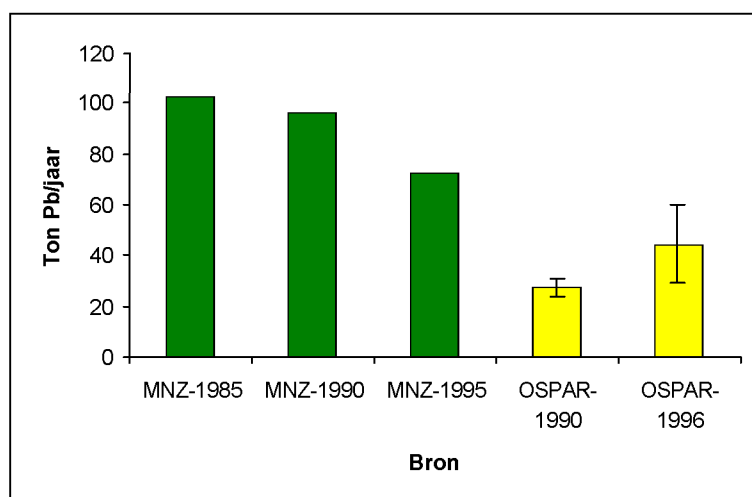
1.2.6 Lood

Voor Pb werd tussen 1985 en 1995 slechts een reductie van 29% van de emissie naar oppervlakte water vastgesteld. De reductie naar lucht bedroeg 66% tijdens deze periode. Niettemin bleef emissie naar lucht de belangrijkste bron van Pb naar de omgeving (86%).

Figuren 1.7 en 1.8 vergelijken de emissies van Pb naar water en lucht in België zoals weergegeven in OSPAR QSR (2000) en MNZ (1995). Voor de emissie naar lucht blijken beide bronnen, net zoals voor de andere metalen waarvoor in beide bronnen gegevens voorhanden waren, vergelijkbare totale emissiewaarden weer te geven. Ook hier wordt, als gevolg van emissiebeperkende maatregelen, dalende trend tussen 1985 en 1995 waargenomen. Voor de gerapporteerde emissiewaarden naar water geeft OSPAR enigszins lagere emissiewaarden, voornamelijk voor 1990. Het verschil tussen OSPAR-1996 (gemiddelde tussen de hoogste en laagste schatting) en MNZ-1995 voor de totale emissie naar het water daarentegen bedroeg slechts een factor 1.6. Ook hier kan de emissie via de Maas aan de basis van het waargenomen verschil liggen.

Water (MNZ-1995)

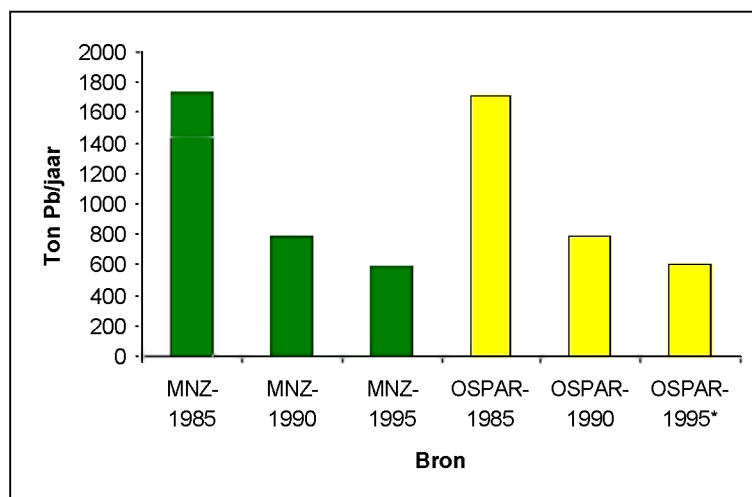
Niet-gespecificeerde diffuse bronnen (excl. landbouw) zijn verantwoordelijk voor meer dan de helft van de totale emissie naar water (57%). Er werd echter aangenomen dat deze constant zijn gebleven tussen 1985-1995. Industriële activiteiten (ijzer- en staalindustrie, overige) zijn samen verantwoordelijk voor 24% van de emissie naar water. Emissiebeperkende maatregelen bij deze bronnen waren verantwoordelijk voor de waargenomen reductie (-23%) van Pb naar oppervlaktewater.



Figuur 1.7: Emissie van Pb in België naar het oppervlaktewater

Lucht (MNZ-1995)

Wegtransport met diesel en benzine was in 1995 nog steeds verantwoordelijk voor 54% van de Pb-emissie naar de atmosfeer. Verlaging van loodgehalte in benzine en het gebruik van loodvrije benzine is geleid tot een aanzienlijke reductie van deze bron (-77%) ten opzichte van 1985. Pb-emissie door verbranding van huishoudelijk afval daarentegen nam tijdens deze periode toe met 18% en bedroeg in 1995 18% van de totale Pb-emissie naar de lucht. Een derde belangrijke bron van Pb-uitstoot naar oppervlaktewater is de ijzer- en staalindustrie (20% van het totaal in 1995).



Figuur 1.8: Emissie van Pb in België naar de lucht

1.2.7 Nikkel

Voor Ni bleken er geen gegevens voorhanden te zijn in de OSPAR QSR. Op basis van de MNZ-stofstroomfiche blijkt dat tussen 1985 en 1995 een reductie van 44% in de emissie naar water werd vastgesteld. Voor lucht daarentegen bedroeg deze reductie slechts 21%. Emissie naar lucht zorgt in 1995 voor de 71% van de totale Ni-emissie.

Water (MNZ-1995)

De belangrijkste bronnen van Ni-emissie zijn de ijzer- en staalindustrie (24%), werktuigbouw (oppervlaktebehandeling van metalen) (29%) en overige industrietakken (24). De belangrijkste reducties tussen 1985 en 1995 werden waargenomen voor fosfaatproductie (-66%; slechts 7% van totale Ni-emissie naar water in 1995) en de industrie (-43%).

Lucht (MNZ-1995)

Verbranding van residuele stookolie (62%) en verbranding van huishoudelijk afval (20%) zijn de belangrijkste bronnen voor Ni-emissie naar de atmosfeer. IJzer- en staalindustrie is verantwoordelijk

voor 12% van de totale emissie. Tussen 1985 en 1995 werd een sterke toename van de Ni-emissie door verbranding van huishoudelijk afval (+53%) waargenomen. Deze toename is mede verantwoordelijk voor de beperkte reductie van Ni-uitstoot naar de atmosfeer tijdens deze periode. Bij de overige bronnen werd echter slechts een gemiddelde reductie van 29% vastgesteld.

1.2.8 Zink

Voor Zi bleken er eveneens geen gegevens voorhanden te zijn in de OSPAR QSR. Op basis van de MNZ-stofstroomfiche blijkt dat tussen 1985 en 1995 een reductie van 32% in de emissie naar het oppervlaktewater werd vastgesteld. Voor lucht bedroeg de reductie over deze periode slechts 18%. Voor 1995 werd gevonden dat 60% van de totale emissie van Zn (651 Ton/jaar) via het water verloopt.

Water (MNZ-1995)

Niet-gespecificeerde diffuse bronnen zijn verantwoordelijk voor 63% van de waargenomen Zn-emissie naar het water. De beperkte reductie van deze uitstoot tussen 1985 en 1995 (-18%) ligt aan de basis voor de beperkte total Zn-emissie naar oppervlaktewaters. De reductie van uitstoot bij industriële activiteiten (excl. landbouw) over deze periode bedroeg 58%. Deze activiteiten zijn verantwoordelijk voor $\pm 16\%$ van de totale Zn-emissie naar water. Huishoudens dragen voor 16% bij tot deze emissie, doch de totale hoeveelheid bleef de laatste 10 jaar quasi constant (-2%).

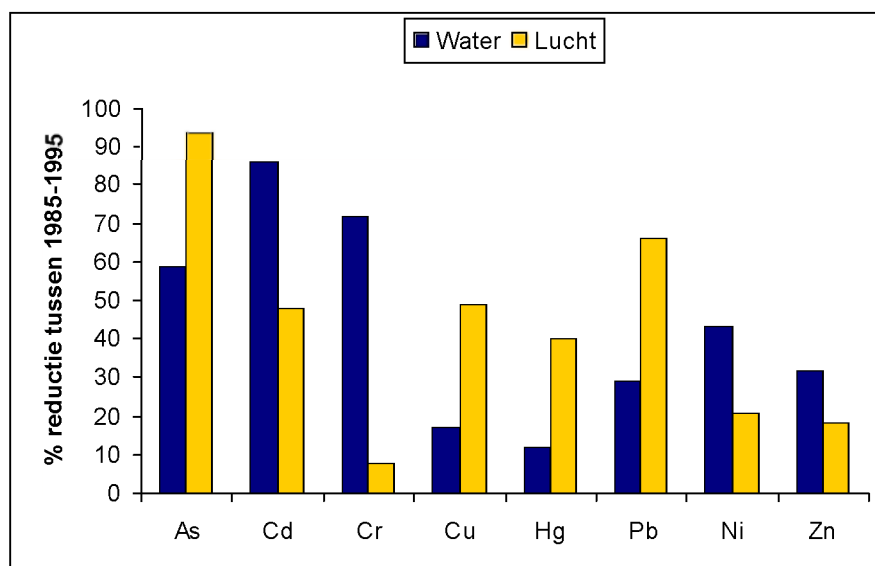
Lucht (MNZ-1995)

IJzer- en staalindustrie en de non-ferro industrie zijn voor 51% en 18% verantwoordelijk voor de emissie van Zn naar de lucht, en dit voor 1995. Kleinere bijdragen zijn toe te schrijven aan wegtransport met diesel/benziene (10%) en verbranding van huishoudelijk afval (16%). De emissie van Zn door deze laatste bron is tussen 1985 en 1995 toegenomen met 13%. Samen met de bereikte reductiepercentages bij de overige activiteiten (gemidd. -22%) leidde dit tot een beperkte reductie van de totale Zn-emissie met 18%.

1.2.9 Bereikte reducties in 1995 voor water en lucht t.o.v. 1985

In Figuur 1.9 worden de reducties van metaalemissies naar water en lucht, voor de periode 1985-1995, weergegeven. Enkel voor As werden de doelstellingen zoals geformuleerd tijdens de Derde Noordzeeconferentie (Den Haag, 1990) - een 50 tot 70% reductie van de emissie naar water en lucht ten opzichte van 1985 - duidelijk bereikt (-59% en -94%, resp.). Voor Cd werd dit wel gehaald voor emissie-reductie naar water (-86%), maar net niet voor lucht (-48%). Ook voor Cr werd de doelstelling enkel verwezenlijkt voor emissiereductie naar water (-72%). Voor Pb en Cu werd ($\pm$) een 50%-

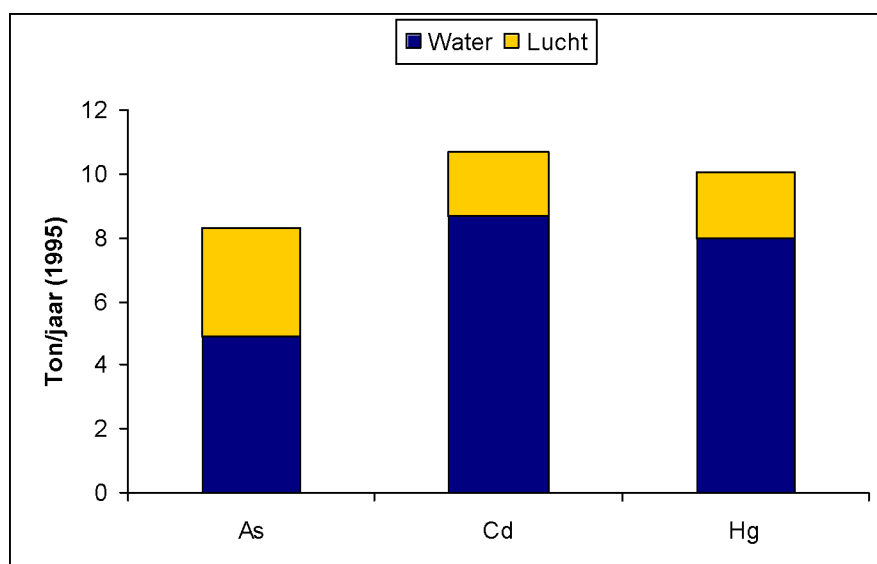
reductie voor luchtmissie gerealiseerd (-66% en -49%, resp.). Voor Zn, Ni en Hg daarentegen werd voor geen van beide emissie-types de vooropgestelde doelstelling gehaald. Voor luchtmissie is dit voornamelijk te wijten aan een verhoogde emissie ten gevolge van huivuilverbranding. Voor water is de reden dat de emissiereductie niet werd gehaald verschillende voor de verschillende metalen (zie hiervoor).



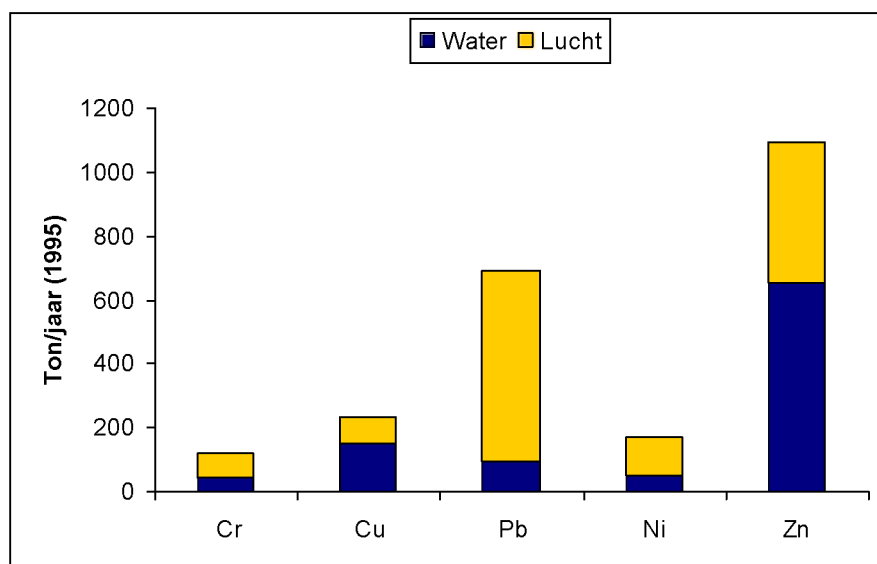
Figuur 1.9: Bereikte emissie-reducties in België van metalen naar water en lucht en opzichte van 1985.

1.2.10 Totale emissie-hoeveelheden

In Figuren 1.10 en 1.11 worden de totale emissie-hoeveelheden in 1995 (bron: MNZ, 1995) met elkaar vergeleken. Hieruit blijkt dat Zn en Pb de metalen zijn waarvan de grootste hoeveelheid in het milieu terechtkomt. En hoewel voor Pb de reductie van 50% naar de lucht werd verwezenlijkt (in tegenstelling tot de emissie naar water), blijft dit toch nog de belangrijkste bron van Pb-emissie. In vergelijking met de andere metalen worden er jaarlijks slechts kleine hoeveelheden As, Cd en Hg in het milieu gebracht, en dit voornamelijk via het water.



Figuur 1.10: Totale emissie in 1995 van As, Cd en Hg in België naar het oppervlaktewater.



Figuur 1.11: Totale emissie in 1995 van Cr, Cu, Pb, Ni en Zn in België naar de lucht

1.2.11 Evaluatie emissie-hoeveelheden vs. toxiciteit

Om een duidelijk beeld te krijgen omtrent het belang van de verschillende metaalemissies voor het marien milieu, moet de totale hoeveelheid die in de Noordzee terecht kan komen, worden vergeleken met de toxiciteit van het desbetreffende metaal. Hiervoor werd gebruik gemaakt van de gegevens uit Tabel 1.7 (OSPAR, 1997b, 2000). Deze tabel bevat voor de acht onderzochte metalen een EAC (Ecotoxicologisch Assessment Criterium). De EAC geeft de concentratie van een metaal in zeewater (of sediment) weer waaronder geen schade aan het milieu of biota wordt verwacht. Voor een eerste evaluatie van de mogelijk verontreinigende impact van metalen wordt enkel gebruik gemaakt van de EAC voor water.

Tabel 1.7: Overzicht van EAC's voor metalen (Bron: OSPAR, 1997b)

Metaal	Water (mg/L)	Sediment (mg/kg DW)*
As	1 –10	1-10
Cd	0.01-0.1	0.1-1
Cr	1-10	10-100
Cu	0.005-0.05	5-50
Hg	0.005-0.05	0.05-0.5
Ni	0.1-1*	5-50
Pb	0.5-5	5-50
Zn	0.5-5	50-500

* voorlopige EAC's

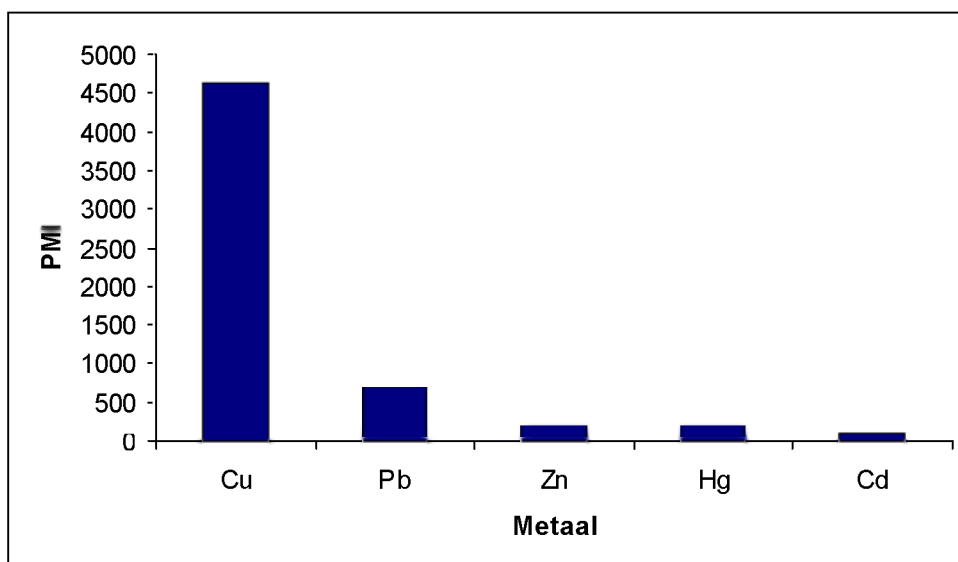
Op basis van de gegevens in Tabellen 1.2a, 1.3a en 1.7 werd een PMI-index (Potentiele Metaal Impact) voor de emissie in 1995 berekend:

$$PMI = \frac{\text{Totale emissie / jaar (in Ton)}}{EAC \text{ (in mg / L)}}$$

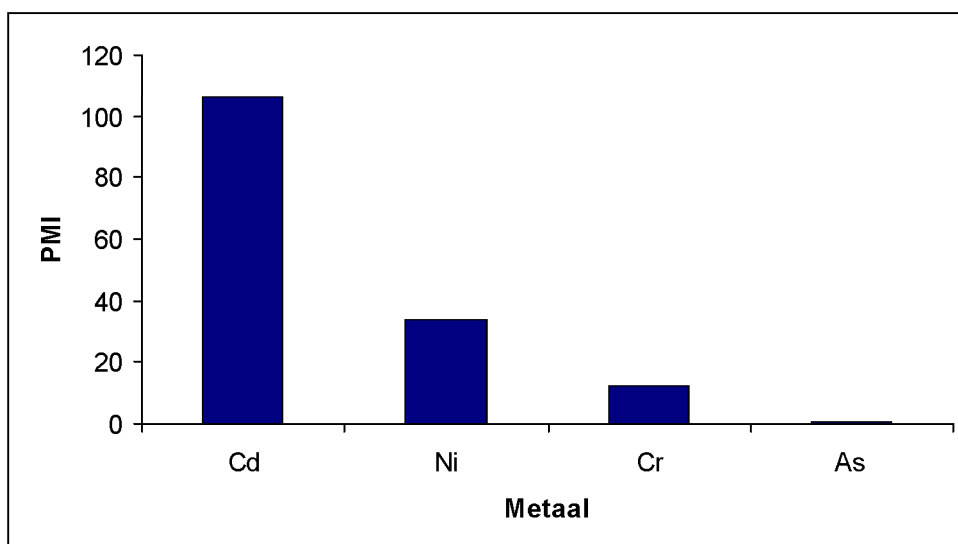
waarbij een grotere PMI wijst op een grotere potentiele impact in het marien milieu.

Voor de berekening van de PMI's werd er vanuit gegaan dat de totale emissie via lucht en water in de Noordzee terecht kwam. Ook werd steeds de bovenwaarde van de EAC (Tabel 1.7) als referentie gebruikt. Figuren 1.12 en 1.13 geven de PMI voor de verschillende metalen weer.

Uit deze figuren blijkt dat Cu veruit de grootste potentiele impact op het marien milieu heeft. Uit deze analyse blijkt ook dat Pb de tweede belangrijkste contaminant van het marien milieu is. Hierbij moet echter wel worden opgemerkt dat Pb voor 86% via de lucht wordt uitgestoten en er in deze analyse vanuit wordt gegaan dat alle metaal-emissies in het marien milieu terecht komen. De huidige emissiehoeveelheden van Zn, Hg en Cd hebben elk een vergelijkbare impact op het marien milieu, maar deze is reeds een factor 20 (±) lager dan de potentiele impact van Cu. De laagste potentiele impact werd vastgesteld bij Ni, Cr en As.



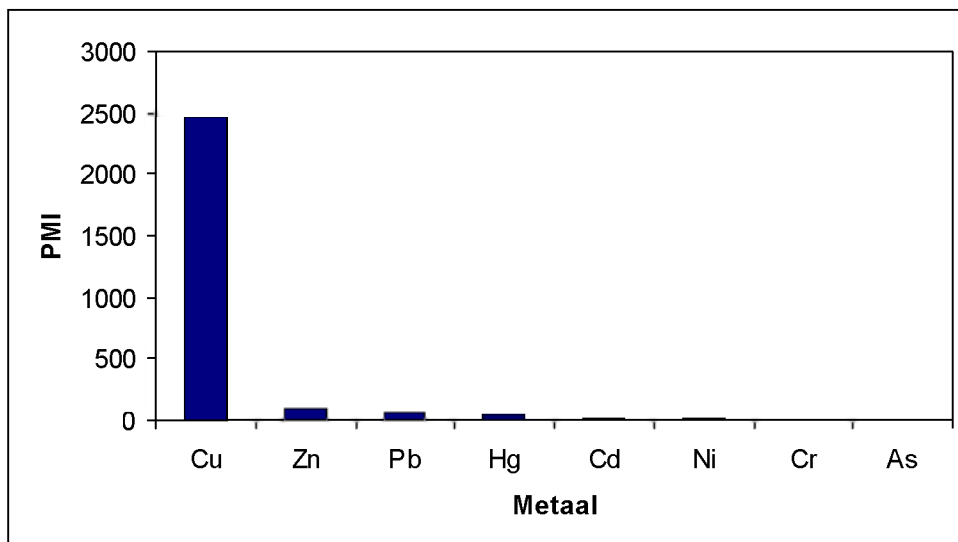
Figuur 1.12: Potentieel Metaal impact (MPI) van Cu, Pb, Zn, Hg en Cd op basis van totale emissies.



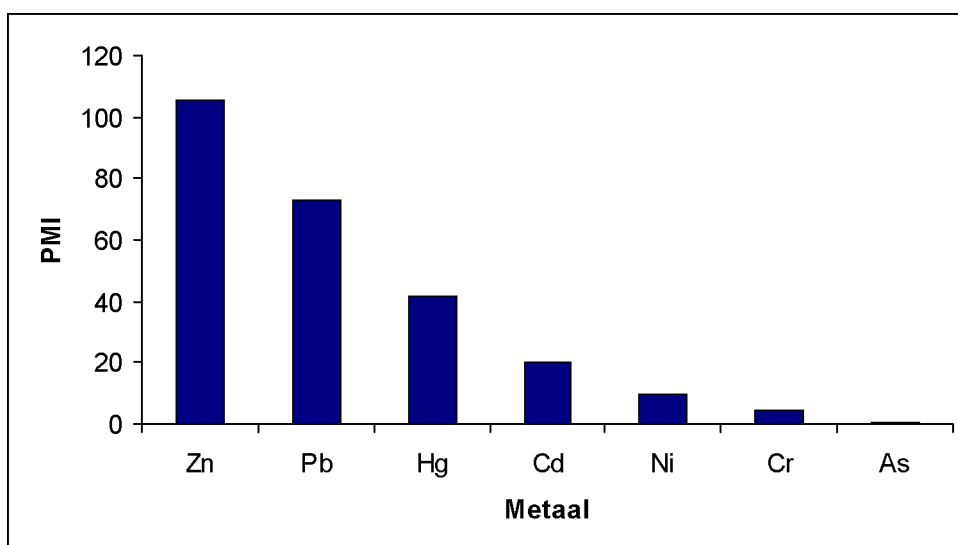
Figuur 1.13: Potentieel Metaal impact (MPI) van Cd, Ni, Cr en As op basis van totale emissies.

In Figuren 1.14 en 1.15 wordt enkel de potentiële impact berekend op basis van de emissie via het water. Op basis van deze analyse blijkt opnieuw het belang van Cu als ‘belangrijkste’ contaminerend metaal voor België. Algemeen bleef de volgorde in potentiële impact voor de verschillende metalen gelijk, met uitzondering van Pb en Zn die met elkaar van plaats verwisselden: op basis van emissie van water werd voor Zn de tweede hoogste PMI gevonden.

Op basis van de huidige beschikbare data kan worden geconcludeerd dat de uitstoot van Cu, en in mindere mate Zn, Pb, Hg en Cd, de belangrijkste emissies van metalen in België vertegenwoordigen. Hoewel ook jaarlijks aanzienlijke hoeveelheden van Ni, Cr en As worden vrijgesteld, lijkt de potentiële impact van deze stoffen op het marien milieu toch beduidend lager te zijn.



Figuur 1.14: Potentiële Metaal impact (MPI) van Cu, Zn, Zn, Hg en Cd op basis van emissies naar het oppervlaktewater.



Figuur 1.15: Potentiële Metaal impact (MPI) van Zn, Zn, Hg, Cd, Ni, Cr en As op basis van emissies naar het oppervlaktewater.

1.3 Organische verbindingen

1.3.1 Algemeen

In Tabellen 1.8, 1.9 en 1.10 wordt een algemeen overzicht gegeven van de emissie van verschillende organische verbindingen naar lucht en water. De weergegeven emissiehoeveelheden zijn afkomstig uit de MNZ-stofstroomfiches. Bepaalde groepen (PAKs, dioxines,..) worden hierna verder in detail besproken en, in indien beschikbaar, vergeleken met data uit het OSPAR QSR 2000.

Tabel 1.8: Overzicht van de Belgische emissies (Ton/jaar) naar water: organische verbindingen (1985 – 1995) (MNZ, 1995).
Reductie (in %) t.o.v. 1985.

Stof	1985	1990	1995
Tetrachloorkoolstof (CCl ₄)	2.19	1.78 19%	0.32 -86%
Trichloorethyleen (TRI)	<49	<41 -16%	?<25 -49%
Tetrachloorethyleen (PER)	<30	<20 -33%	<13 -57%
Trichloorbenzeen (TCB)	geen geïdentificeerde lozingen naar het water bekend		
1,2-dichloorethaan (EDC)	72	12.6 -83%	<5 -93%
Trichloorethaan (T111)	<55	<45 -18%	0 -100%
PAK's	19.7	14.6 -26%	12.0 -39%
Dioxines (in gram TEQ)	6.21	6.87 -11%	3.77 -39%

Tabel 1.9: Overzicht van de Belgische emissies (Ton/jaar) naar lucht: organische verbindingen (1985 – 1995) (MNZ, 1995).
Reductie (in %) t.o.v. 1985.

Stof	1985	1990	1995
Tetrachloorkoolstof (CCl ₄)	310.0	310.7 +0.2%	29.6 -90%
Trichloorethyleen (TRI)	3360	2450 -27%	1905 -43%
Tetrachloorethyleen (PER)	6793	5096 -25%	2391 -65%
Trichloorbenzeen (TCB)	<3	<3 ---	<<3 ?-32%
1,2-dichloorethaan (EDC)	114	80.5 -29%	55.5 -51%
Trichloorethaan (T111)	5445	4237 -22%	0 -100%
PAK's (10 VROM)	935.6	870.6 -7%	648.7 -31%
Dioxines (in gram TEQ)	850	892 +5%	642 -24%

Tabel 1.10: Algemeen totaal (in Ton/jaar) en procentueel aandeel van de emissie van organische verbindingen naar lucht en water voor 1995 (MNZ, 1995).

Stof	Som lucht & water	Lucht	% aandeel	Water	% aandeel
Tetrachloorkoolstof (CCl ₄)	29.92	29.6	99%	0.32	1%
Trichloorethyleen (TRI)	<1930	1905	99%	?<25	1%
Tetrachloorethyleen (PER)	<2404	2391	99.5%	<13	0.5%
Trichloorbenzeen (TCB)	<<3	<<3	100%	---	---
1,2-dichloorethaan (EDC)	<60.5	55.5	92%	<5	8%
Trichloorethaan (T111)	0	0	---	0	---
PAK's (10 VROM)	660.7	648.7	98%	12.0	2%
Dioxines (in gram TEQ)	645.77	642	99.4%	3.77	0.6%

1.3.2 Polycyclische Aromatische Koolwaterstoffen (PAK's)

PAK is een verzamelnaam voor verschillende organische verbindingen. Wanneer er wordt gesproken van Totale PAKs, is het dan ook van belang te weten welke verbindingen er in rekening worden gebracht. Tabel 1.11 geeft een overzicht van verschillende PAK-verbindingen en de groepen waarin zij werden opgenomen.

De gemeten PAK's zoals weergegeven in de stofstroomfiches van het MNZ (1995) zijn deze van de VROM (Nederlands Instituut van Leefmilieu). In het OSPAR QSR werd echter voor een andere groep gekozen; beide groepen verschillen onderling in het al dat niet meerekenen van naftaleen, pyreen en benzo[k]fluorantheen. Ondanks de verschillen in opgenomen PAKs zijn de voor 1990 gerapporteerde emissiehoeveelheden in de stofstroomfiches (MNZ, 1995) en in het OSPAR QSR weinig verschillend (resp. 870.6 en 818 Ton/jaar).

Tabel 1.11 Overzicht van verschillende groepen PAKs.

	EPA	Borneff	OSPAR	VROM	Int.Noordzee Conf.
	16	6	10	10	10
benzo[b]fluorantheen	x	x			
indeno[1,2,3-c,d]pyreen	x	x	x	x	
benzo[k]fluorantheen	x	x		x	
benzo[a]pyreen (Bap)	x	x	x	x	
benzo[g,h,i]peryleen	x	x	x	x	
fluorantheen	x	x	x	x	x
naftaleen	x			x	x
anthraceen	x		x	x	x
fenantreen	x		x	x	x
acenafteen	x				x
chryseen	x		x	x	
benzo[a]anthraceen	x		x	x	
fluoreen	x				
pyreen	x		x		
acenaftyleen	x				
dibenzo[a,h]anthraceen	x				
bifenyI					x
2-chloroanthraquinon					x
chloronaphtaleen					x
hexachloronaftaleen					x
1,2,3,4,7,7-hexachloro- norbomadien					x

Tabellen 1.12 en 1.13 geven de belangrijkste bronnen van de emissie van PAKs naar water en lucht weer, en dit op basis van de data in de MNZ-stofstroomfiches. De emissie naar water is voornamelijk te wijten aan riviervtransport dat voor 83% van de totale emissie in water verantwoordelijk was. Wat de emissie naar lucht betreft wordt in het OSPAR QSR (2000) houtbescherming en wegtransport als de voornaamste bronnen weergegeven. Dit blijkt ook uit de MNZ-data (Tabel 1.13): beide activiteiten zijn samen voor 79% van de totale emissie van PAK's naar de lucht verantwoordelijk. Bij de OSPAR QSR wordt wel geen rekening gehouden met emissies als gevolg van wegconstructies.

Tabel 1.12: Procentueel belang van verschillende bronnen voor de emissie van PAK's naar water voor 1995 (MNZ, 1995).

	Ton in 1993	% aandeel
Riviertransport	9.96	83%
Scheepswerven	1.11	9%
Sinter- en cokesfabrieken	0.96	8%
Algemeen Totaal	12.0	

Tabel 1.13: Procentueel belang van verschillende bronnen voor de emissie van PAK's naar lucht voor 1995 (MNZ, 1995).

	Ton in 1993	% aandeel
Houtbescherming	255.8	39%
Wegtransport	260	40%
Asfaltering van wegen	108.2	17%
Huishoudelijke, commerciële en administratieve verwarming	9.0	1.4%
Sinter- en cokesfabrieken	3.5	0.5%
Industriële verwarming	7.6	1%
Scheepswerven	3.9	0.6%
Verbranding van huishoudelijk afval en thermische installaties	0.88	0.1%
Algemeen Totaal	648.7	

Wanneer een onderscheid wordt gemaakt tussen punt- en diffuse bronnen, blijkt dat wegtransport, asfaltering van de wegen en verwarming (industrie, huishoudens) de belangrijkste diffuse bronnen naar de lucht zijn, en riviertransport de enige belangrijke diffuse bron naar water (slijtage van scheepsrompen bedekt met teerhoudende verf).

1.3.3 Dioxines

In het OSPAR QSR werden geen emissiedata met betrekking tot dioxines opgenomen. Uit de stofstroomfiche voor dioxines blijkt dat emissie naar de lucht (99.4%) kwantitatief veruit belangrijker is dan de emissie naar water (Tabel 1.14). Zoals blijkt uit Tabel 1.15 is het duidelijk dat verbranding van verschillende types afval/steenkool voor meer dan de helft van de emissie naar lucht in 1995 verantwoordelijk zijn. Daarnaast dragen diverse industrie-activiteiten ook voor 33.5% bij tot de emissie naar de lucht.

De (weliswaar beperkte) emissie naar water is voornamelijk te wijten aan industriële activiteiten (90% door de ijzer- en staalindustrie).

Tabel 1.14: Procentueel belang van verschillende bronnen voor de emissie van dioxines naar water voor 1995 (MNZ, 1995).

	gram TEQ 1995	% aandeel
IJzer- en staalindustrie	3.4	90.2%
Kraftpulpproductie (bleking)	0	---
Vinylchloride industrie	0.22	5.9%
Verbranding van huishoudelijk afval	0.06	1.5%
Chlooralkali industrie	0.03	0.8%
Branden	0.02	0.4%
Verbranding van industrieel afval	0.02	0.6%
Algemeen Totaal	3.77	

Tabel 1.15: Procentueel belang van verschillende bronnen voor de emissie van dioxines naar lucht voor 1995 (MNZ, 1995).

	gram TEQ 1995	% aandeel
Verbranding van huishoudelijk afval	187	29%
Gebouwenverwarming	122	19%
Verbranding van ziekenhuisafval	79.2	12%
Non-ferro industrie	107	16.5%
IJzer- en staalindustrie	60.7	9%
Cementindustrie, kalkindustrie	54.2	8%
Industriële stookinstallaties, electriciteit uit steenkool	9.3	1.4%
Verbranding van industrieel afval, slibverbranding, stortgasverbranding	18.4	3%
Wegverkeer	1.7	0.2%
Branden	2.6	0.4%
Algemeen Totaal	642	

1.3.4 Overige chloorhoudende organische verbindingen

Emissiedata naar de lucht uit het OSPAR QSR worden in Tabel 1.16 vergeleken met de emissiegegevens uit de stofstroomfiches (MNZ, 1995). Enkel voor Trichloorethyleen wordt een significant verschil in uitgestoten hoeveelheid waargenomen. Voor de overige stoffen wordt voor 1995 een vergelijkbare emissie-hoeveelheid (of totale reductie) waargenomen.

Tabel 1.16: Emissie van chloorhoudende organische verbindingen (in ton/jaar) in België naar de lucht in 1995.

	OSPAR QSR (2000)	MNZ (1995)
Tetrachloorkoolstof	29.6	29.6
Trichloorethyleen	1300	1905
Tetrachloorethyleen	2390	2391
Trichloorbenzeen	3	< 3
1,2 dichloorethaan		55.5
Trichloorethaan	0	0

De belangrijkste verspreidingsroute van deze verbindingen in het milieu gebeurt via de atmosfeer (data voor 1995). Met uitzondering van 1,2-dichloorethaan (92%) wordt meer dan 99% van de totale

geëmitteerde hoeveelheid van deze chloorhoudende verbindingen via de lucht in het milieu gebracht. De belangrijkste activiteiten die hiervoor verantwoordelijk zijn, zijn de textielindustrie (TCB, PER), de organische chemische nijverheid (EDC), vinylchloride-industrie (CCl₄), laboratoriumactiviteiten (CCl₄) en metaalbehandeling (TRI, PER). Het gebruik/productie van trichloorethaan is bijna volledig stopgezet als gevolg van de opgelegde internationale maatregelen ter bescherming van de ozonlaag (verbod op het gebruik in Europa sinds 1996).

Verdere sanering bij de productie van monovinylchloride zou moeten ertoe geleid hebben dat de emissie van CCl₄ naar de lucht toe in 1998 is afgenomen van 29 Ton/jaar tot ± 5 Ton/jaar (MNZ, 1995).

1.4 Pesticiden

1.4.1 Pesticiden – algemeen

Gezien het diffuus karakter van de pesticidenemissies, is de evaluatie van deze stoffen in de stofstroomfiches (MNZ, 1995) gebaseerd op de totale gebruik- of verkoopcijfers voor België, die op federaal vlak worden verzameld. De schattingen worden schuin weergegeven. Ook in het OSPAR QSR zijn voor een beperkt aantal pesticiden emissiehoeveelheden naar de lucht (voor 1995) en de bereikte reductie t.o.v. 1990 weergegeven. Hierin wordt gesteld dat voor zowel lindaan als voor pentachloorfenol een volledige reductie van de de emissie naar de lucht toe is bereikt. Voor de overige pesticiden werden geen verkochte, gebruikte of emissie-hoeveelheden weergegeven.

Tabel 1.17: Verkoopcijfers van verschillende pesticiden (in Ton/jaar). Reducties t.o.v. verkoopcijfers in 1985.

Stof	1985	1990		1995	
Lindaan – totaal	100.1	66.6	-34%	<50	-50%
buiten de landbouw	0.85	0.83	-2%	0.50	-41%
landbouw	99.2	65.8	-34%	<50	-50%

Pentachloorfenol (PCF)					
buiten de landbouw	?	?	---	0	-100%

Trifluralin					
landbouw	17.2	6.6	-62%	<4.3	-75%

Endosulfan – totaal	28.3	29.3	+4%	17.0	-40%
buiten de landbouw	0.21	0.19	-10%	<0.19	-10%
landbouw	28.1	29.1	+4%	17.0	-40%

Simazine – totaal	58.5	57.2	-2%	<29.0	-50%
buiten de landbouw	<0.01	<0.01	0%	<0.005%	-50%
landbouw	58.5	57.2	-2%	<29.0	-50%

Atrazine					
landbouw	283.5	244.4	-14%	<142.0	-50%

Tributyltin					
buiten de landbouw	?	15.0 – 24.0	?	14.4 – 23.0	?

Trifenyyltin					
landbouw	60.5	44.0	-27%	35.7	-40%

Azinfos-methyl					
landbouw	7.48	3.11	-58%	<3.0	-59%

Tabel 1.17 (vervolg)

Stof	1985	1990		1995	
Fenitrothion – totaal	1.16	0.81	-30%	0.70	-40%
buiten de landbouw	0.87	0.39	-56%	0.10	-89%
landbouw	0.29	0.43	+49%	0.60	+109%

Fenthion					
landbouw	5.78	4.62	-20%	<2.9	-50%

Malathion – totaal	18.3	11.1	-40%	<9.0	-50%
buiten de landbouw	1.21	4.95	+309%	<4.0	+230%
landbouw	17.1	6.19	-64%	<5.0	-71%

Parathion					
landbouw	46.8	38.3	-18%	<21.0	-55%

Dichloorvos – totaal	17.4	28.8	+66%	30.9	+78%
buiten de landbouw	16.9	27.9	+65%	27.9	+65%
landbouw	0.47	0.90	+91%	3.0	+538%

Uit Tabel 1.17 kan worden besloten dat vooral atrazine een zeer hoog gebruik kent (1995: <142 ton). Dit triazine-herbicide wordt hoofdzakelijk aangewend in de maïsteelt. De overige pesticiden kunnen als volgt worden gerangschikt (Figuur 1.16):

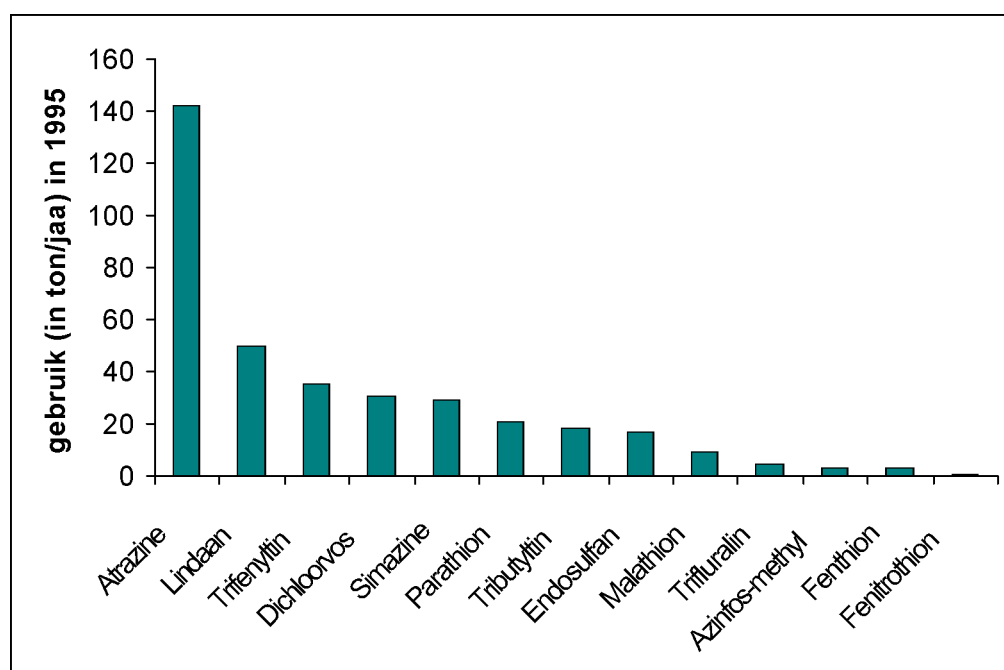


Fig 1.16: Gebruik van pesticiden in België (in Ton/jaar) voor 1995.

Hieruit blijkt dat in 1995 voor bijna alle pesticiden reducties van 40-50% worden gehaald t.o.v. het referentiejaar 1985 (uitz. tributyltin: -4%). Voor dichloorvos is een sterke stijging van de verkoopcijfers waar te nemen, vooral te wijten aan het verhoogde niet-landbouwkundig gebruik (o.a. in vliegenstrips). Voor pentachloorfenol werd een volledige reductie bereikt door het stopzetten van de erkenningen voor alle toepassingen sinds 1990.

Voor trifluralin, endosulfan, trifenyltin, azinfos-methyl, fenthion, malathion en parathion werden de verwezenlijkte reducties binnen de landbouw vooral bereikt door spontane marktverschuivingen enerzijds, en door het stimuleren van het toepassen van de beste milieuveilige handelswijze in de landbouw anderzijds. Voor simazine werd de reductie bereikt door de beperking van maximale toepassingsdosis. Voor malathion wordt echter een verhoogd gebruik buiten de landbouw vastgesteld. Bij fenitrothion daarentegen wordt een reductie in gebruik buiten de landbouw vastgesteld onder invloed van spontane marktverschuivingen, maar tegelijkertijd wordt een toenemend gebruik binnen de landbouw vastgesteld. De beperkte reductie voor tributyltin is te wijten aan het ontbreken van efficiënte milieuvriendelijke alternatieven.

De detectie van pesticiden in het milieu is sterk afhankelijk van de fysisch-chemische eigenschappen: trifluralin, azinfos-methyl, fenitrothion, fenthion, malathion en parathion hebben een lage wateroplosbaarheid en sterke adsorptie. Hierdoor kunnen deze stoffen slechts in zeer geringe mate het aquatisch milieu bereiken via afspoeling of uitloging. Simazine en atrazine hebben vergelijkbare fysisch-chemische eigenschappen, maar door veelvuldig gebruik worden toch soms hoge concentraties van deze pesticiden in oppervlaktewater gedetecteerd (7.6 µg/L e, 28 µg/L in 1994 voor simazine en atrazine, respectievelijk).

Door het hoge gebruik van dichloorvos wordt deze pesticide, ondanks snelle afbraak, toch regelmatig gedetecteerd in aquatisch milieu (1.47 µg/L in 1992) en dit door de hoge oplosbaarheid.

1.4.2 Voorkomen van andere stoffen

In het OSPAR QSR worden voor een aantal stoffen de gemeten concentraties in riviersediment (Schelde) of in de waterkolom weergegeven. Voor deze stoffen zijn geen kwantitatieve emissiedata voorhanden, deels omdat het gebruik van sommige van deze verbindingen reeds verboden is (vb. DDT, dieldrin,...). Niettemin kan de aanwezigheid van deze stoffen een mogelijk risico inhouden voor sommige organismen. Tabel 1.18 geeft een overzicht weer van deze stoffen, samen met de gerapporteerde concentratie in het sediment en/of de waterkolom.

Tabel 1.18: Milieuconcentraties van een aantal potentieel schadelijke stoffen

Stof		Concentratie	Opmerking
Gebromeerde	vlamvertragende	0.2 mg/kg	Sediment van de Schelde
verbindingen (BRFs)			
Gechlorineerde parafinnes (CPs)		0.006 mg/kg	Sediment van de Schelde
Lindaan		0.004 mg/kg	Sediment van het Schelde-estuarium (1992)
Hexachloorbenzeen		0.3-5.3 µg/kg	Sediment van het Schelde-estuarium
Totaal DDT (DDE, DDD, DDT)		1-13 µg/kg	Sediment van het Schelde-estuarium
Dieldrin		1-2 µg/kg	Sediment van het Schelde-estuarium
Octylphenol (OPE)		20 µg/kg	Sediment van de Schelde
Nonylphenol ethoxylaet (NPE)		300 µg/kg	Sediment van de Schelde

1.5 Radioactieve stoffen

Voor radioactieve nucliden werd er geen stofstroomfiche opgesteld door de Technische Commissie Noordzee (MNZ, 1995). Voor de kwantificatie van de input van radionucliden naar het BCP werden de beschikbare data uit het OSPAR QSR (2000) en het ‘North Sea Subregion 4 Assessment Report’ (1994).

1.5.1 Artificiele radionucliden

De belangrijkste emissiebronnen van artificiele radionucliden naar de Noordzee toe, en het BCP in het bijzonder, zijn de nucleaire opwerkingsinstallaties in Cap de La Hague (Fr.) en in mindere mate Sellafield (UK): de lozingen vanuit Cap de la Hague worden met instromend water, afkomstig uit de Atlantische Oceaan, doorheen het Kanaal langs de continentale kusten getransporteerd (Salomon *et al.*, 1995, in OSPAR QSR 2000). In de periode 1993-1999 zijn de hoeveelheden radionucliden aanwezig in de effluënten van bovenvermelde installaties ver onder de vastgelegde emissie-normen (OSPAR, 1998), en zijn deze nog significant gereduceerd. De totale input van alfa-emittors naar de Noordzee is tussen 1993 en 1996 afgenomen van 3 tot 0.32 TBq/jaar. Eenzelfde evolutie werd waargenomen bij bèta-emittors wanneer tritium en ^{99}Tc niet in beschouwing werden genomen (van 250 TBq/jaar in 1993 naar 182 TBq/jaar in 1996). Tritium (^3H) – een laag-energetische bèta-emittor die op radiologisch vlak vrij onbelangrijk is – is de enige radionuclide die nog steeds in relatief grote hoeveelheden wordt geloosd door de nucleaire opwerkingsinstallaties en waarvan de emissie (in activiteit) tussen 1993 en 1996 is toegenomen van 11.000 tot 16.000 TBq/jaar. Andere bronnen van ^3H zijn kosmische straling en om. fall-out van kernproeven.

Tritium-concentratie in de Noordzee varieerde tijdens de periode 1983-1990 tussen 1600 en 2300 Bq/m³, waarbij geen stijgende of dalende trend werd waargenomen (North Sea Subregion 4 Assessment Report 1993). In Tabel 1.19 wordt de input van tritium in de Noordzee uit verschillende stroomgebieden (per land) van de Noordzee-Subregio 3 weergegeven. Uit deze tabel blijkt dat in 1989 bijna een kwart (24%) van de input van ^3H afkomstig was uit België.

Tabel 1.19: Emissie van ^3H (in TBq) naar de Noordzee-Subregio 3 voor 1989.

	TBq/jaar
Frankrijk	209
België	106
Nederland	5.9
Duitsland	119

In 1986 werd een belangrijke input van ^{137}Cs via de Rijn en Maas vastgesteld (25tBq/jaar), en dit als gevolg van het accident met de Reactor4 van de kerncentrale in Tsjernobyl. Er zijn geen meetwaarden voorhanden voor de periode na 1986, maar algemeen wordt aangenomen dat de input van ^{137}Cs momenteel veel lager ligt.

Algemeen kan worden gesteld dat de emissie van artificiele radionucliden van uit de OSPAR-landen (en België in het bijzonder) naar de Noordzee te verwaarlozen in vergelijking met de input afkomstig van nucleaire opwerkingsinstallaties buiten deze regio (Van Weers, 1989).

1.5.2 Natuurlijke radionucliden (gegevens uit North Sea Subregion 4 Assessment Report 1993)

Wat de emissie van natuurlijke radionucliden betreft, zijn industriële activiteiten zoals ertswinning en –verwerking, verbranding van steenkool of aardgas voor de electriciteitsproductie en de productie van fosfaat-meststoffen de belangrijkste anthropogene bronnen. Hiervan blijkt de laatste industriële activiteit de belangrijkste bron van natuurlijke radionucliden te zijn. Volgens het OSPAR QSR (2000) werd in 1993, als gevolg van de productie van deze fosfaatmeststoffen, hoeveelheden van 1.3 TB/jaar ^{226}Ra , 1.12TBq/jaar ^{210}Po en 0.1 TBq/jaar ^{238}U vanuit de OSPAR-landen in het marien milieu geloosd. De belangrijkste bedrijven waar fosfaten worden verwerkt zijn gelegen in Rotterdam (Ned.), nabij Vlissingen aan de Westerschelde (Ned.) en aan de Schelde bij Antwerpen (Bel.).

Tabel 1.20 geeft een overzicht van de (geschatte) achtergrond- en gemeten concentraties van de isotopen die bij deze industriële activiteit vrijkomen. In deze tabel is ook de indicatieve jaarlijkse input van deze componenten als gevolg van industriële lozingen in België weergegeven.

Uit deze gegevens blijkt dat de waargenomen concentraties in de Westerschelde een factor 3-9 hoger liggen dan de geschatte achtergrondwaarden. Deze verhoogde concentratie wordt dan ook weerspiegeld in de totale activiteit van de alfa-emitters tussen 1975 en 1990, welke resp. 250 en 450 Bq/m³ bedroeg. Deze waarden zijn beduidend hoger dan de in Nederland beoogde maximaal toegelaten activiteit van 100 Bq/m³ vanaf het jaar 2000.

Tabel 1.20: Gemeten en (geschatte) achtergrondconcentraties (opgelost, in Bq/m³) van radionucliden in de Noordzee en in de Westerschelde.

	²¹⁰ Po	²¹⁰ Pb	²²⁶ Ra
¹ Gemeten concentraties (Bq/m ³)			
Noordzee (30 km uit de kust)	0.7	0.8	5.3
Oosterschelde	0.8	0.9	4.3
Westerschelde	2.1-2.2	2.6-3.3	9-28
² Geschatte achtergrondconcentratie (Bq/m ³)			
Noordzee	0.5	0.5	1
Westerschelde	0.5	0.5	3
Industriële lozingen (Antwerpen) (MBq/jaar)	180	4	180

¹= Köster, 1990

²= Köster, 1990,1991; Laane, 1992

De gemeten waarden in de Westerschelde voor ²¹⁰Po en ²¹⁰Pb (Tabel 1.20) zijn van dezelfde grootte-orde als de in het OSPAR QSR gerapporteerde meetwaarde van 3.2 Bq/m³ in het Schelde-estuarium voor deze radionucliden.

Algemeen kan worden gesteld dat in het marien milieu blootstelling aan radioactieve straling afkomstig van artificiele radionucliden meestal lager is dan deze afkomstig van natuurlijke radionucliden. Wanneer de maximaal toegelaten dosis/jaar voor artificiele radionucliden van 1mSv/jaar in beschouwing wordt genomen, zoals aanbevolen door het ICRP (International Commission for Radiological Protection), blijkt dat de emissies van radionucliden bij de fosfaatindustrie slechts een bijdrage levert van 100 tot 380 µSv/jaar per consument van vissen en zeevruchten. Hoewel uit de beschikbare data geconcludeerd kan worden dat de milieuconcentraties van artificiele radionucliden normaal geen gevaar inhouden voor de volksgezondheid, zijn er momenteel geen data beschikbaar die toelaten om de invloed van natuurlijke en artificiele radionucliden op de verschillende trofische niveau's van het marien milieu te evalueren.

1.6 Nutriënten

De emissie van nutriënten naar het water en naar de atmosfeer kent voornamelijk een antropogene oorsprong. Uitloging van landbouwgronden en rioolwater zijn de belangrijkste N-bronnen voor het aquatisch milieu, daar waar de emissie van N naar de atmosfeer (onder de vorm van ammonium en NO_x) te wijten is aan huishoudelijke en industriële verbrandingsprocessen, verkeer en landbouwactiviteiten (stallen, spreiden van mest,...). De emissie van fosfaten daarentegen kent vooral zijn oorsprong in stedelijk afvalwater en landbouwactiviteiten.

De belangrijkste bijdrage van N en P in de Noordzee wordt geleverd door de input via rivieren: 65-80% van de totale N-input en 80-85% van de totale P-input (OSPAR QSR, 2000). Deze waarden zijn in overeenstemming met verschillende literatuurwaarden: 70% van de totale stikstof-influx in het Duitse deel van de Noordzee (German Bight) is afkomstig uit rivieren en slechts 30% komt in het marien milieu terecht via de atmosfeer (Beddige et al., 1997). Dergelijke waarden werden eveneens weergevonden voor het totale opgeloste stikstofbudget in het Schelde-estuarium. Deze waarden zijn weergegeven in Tabel 1.21, en werden berekend met het CONTRASTE-model (Regnier et al., 1997).

Tabel 1.21: Totale opgeloste anorganische stikstofbudget voor het Schelde-estuarium tijdens de winter/vroege lente van 1995, berekend met het CONTRASTE-model (uit: Regnier & Steefel, 1999).

Input	Flux (Ton/dag)	Fractie van de totale hoeveelheid N
Input via de rivier	+ 140	70.6 %
Laterale inputs	+ 45	22.7%
Degradatie van organisch materiaal	+6	3.0%
Nitrificatie	-1	0.5%
Primaire productie	+0.2	0.1%
Input uit het sediment (max. waarde)	+8	4.0%

De overige bijdragen worden geleverd door directe input (N, P) en atmosferische depositie (N). Wat de situatie in België betreft, wordt in de MNZ-stofstroomfiche (1995) enkel data weergegeven met betrekking tot de input van nutriënten naar het water (Tabel 1.22, 1.23). Hieruit blijkt dat de totale emissie van stikstof tussen 1985 en 1990 nauwelijks is afgenomen, en dat in 1995 slechts een reductie van 19% werd bereikt. Voor P werd tussen 1985-1995 een reductie van 45% gerealiseerd. Deze reducties worden niet weerspiegeld in de input van nutriënten in de Noordzee via rivieren uit de verschillende OSPAR-landen, waarbij er tot en met 1995 een stijging van de N- en P-concentraties werd waargenomen (OSPAR QSR, 2000).

Wat de Belgische bijdrage van de atmosferische N-depositie in de Noordzee betreft, zijn er geen kwantitatieve data beschikbaar. Uit het OPSPAR QSR (2000) blijkt dat tussen 1990 en 1995 de N-depositie varieert tussen de 300 en 370 kT/jaar. Hiebij werd voor deze periode geen stijgende of dalende trend waargenomen.

Tabel 1.22: Overzicht van de Belgische emissies (Ton/jaar) van N en P naar water (1985 – 1995) (MNZ, 1995). Reductie (in %) t.o.v. 1985.

Stof	1985	1990		1995	
Stikstof – algemeen totaal	100.8	87.3	-4%	<81.6	-19%
huishoudens	32.0	30.1	-6%	28.3	-12%
industrie	29.3	19.9	-32%	18.0	-38%
landbouw	39.6	37.2	-6%	35.4	-11%
Fosfor – algemeen totaal	17.8	13.5	-24%	<9.9	-45%
huishoudens	9.9	6.5	-34%	4.8	-52%
industrie	5.4	5.3	-3%	3.4	-38%
landbouw	2.5	1.7	-31%	<1.7	-32%

Tabel 1.23: Procentueel belang van verschillende bronnen voor de emissie naar water voor 1995 (MNZ, 1995).

	Huishoudens	Industrie	Landbouw
Fosfor	35%	22%	43%
Stikstof	49%	34%	17%

Wat de directe input van N en P betreft, zijn er in het OPSPAR QSR (2000) enkel gegevens voor de ganse Noordzee beschikbaar. Hieruit blijkt dat voor de periode 1990-1995 de directe input van N naar de Noordzee met $\pm 25\%$ is afgenomen. De directe input van P werd tijdens deze periode met $\pm 20\%$ gereduceerd. Doordat beide bronnen slechts een zeer beperkt aandeel vormen van de N- en P-input, worden deze significante reducties niet vertaald naar een dalende trend bij de totale N- en P-input.

De aanwezigheid van verhoogde nutrient-concentraties in het marien milieu leidt tot lokale eutrofiering van de kustwateren die onder directe invloed staan van rivieren en de daarmee gepaarde toevoer van stikstof en fosfaten (Billen et al., 1991; Smith & Hitchcock, 1994). De gevolgen van eutrofiëring zijn schadelijke algenbloei, O₂-afname, versnelde afbraak van organisch materiaal, en sterfte van vissen en benthische organismen als gevolg van deze processen.

De algenbloei die frequent in de kustwateren van de Noordzee wordt waargenomen, is deze van de kolonie-vormende flagellaat *Phaeocystis* (Smetacek et al., 1991; Lancelot, 1995; Lancelot et al., 1998). De bloei van deze soort wordt waargenomen wanneer niet langer fosfaten maar stikstof de

limiterende factor wordt. Deze soort wordt ondermeer door de grootte van de kolonies (tot 1 cm diameter) beperkt of niet begraasd door micro-zooplankton (Ducrottoy, 1999). Eutroficatie leidt dan ook meestal tot een dominantie van minderwaardige algensoorten (Davies et al., 1992). De effecten van *Phaeocystis*-algenbloei zijn schuimvorming op de stranden langs de rand van het *Phaeocystis*-gedomineerd ecosysteem en de productie van de precursor van DMS (dimethylsulfide). DMS is een stof waarvan wordt aangenomen dat zij een invloed uitoefent op 1) de atmosferische scheikundige processen en 2) de klimaatregeling (Lancelot et al., 1994; Liss et al., 1994). Algenbloei van andere soorten kan leiden tot toxiciteit bij de mens: zo liggen *Alexandrium* spp. en *Dinophysis* spp. aan de basis van PSP en DSP (paralytic/diarrheic shellfish poisoning) (Ducrottoy, 1999).

De effecten van een algenbloei zijn echter niet steeds negatief. Albrecht & Reise (1994) onderzochten de invloed van de alg *Fucus vesiculosus* op de mosselbedden in de Waddenzee en stelden vast dat, hoewel de mossel (*Mytilus edulis*) negatief werd beïnvloed door deze alg, een aantal andere herbivore species door de aanwezigheid van deze algensoort werden bevoordeeld en dat de globale diversiteit toenam.

Door de complexiteit en interacties tussen verschillende processen, is het echter momenteel niet mogelijk om de effecten van verhoogde nutriëntentoevoer en de daarmee gepaard gaande eutrofiëring van kustwateren op het ecosysteem en/of individuele species in te schatten en te voorspellen. Er zijn reeds een aantal eutrofiëerings-modellen ontwikkeld die de algen-nutriënten cyclus beschrijven, maar geen van deze modellen is gekoppeld aan een realistisch voedselweb en/of effectenmodel (Koelmans et al., 2001).

1.7 Olieverontreiniging van het marien milieu.

1.7.1 Determinatie van de belangrijkste contaminanten bij olieverontreiniging

Ruwe olie en afgeleide producten zijn zeer complexe en variabele mengsels, en het is dan ook moeilijk om de toxiciteit van deze mengsels te evalueren (Singer et al., 2000). Het betreft hier immers honderden chemicaliën, elk met hun specifieke fysische en toxicologische karakteristieken. Deze verbindingen kunnen worden onderverdeeld in verschillende groepen (n-alkanen, n-alkenen, cyclo-alkanen, alkylbenzenen, alkylnaftalenen, PAK's met laag moleculair gewicht, PAKs met hoog moleculair gewicht), waarbij het potentiële risico van een specifieke verbinding afhankelijk is van de persistentie, bioaccumulatie en toxiciteit. Algemeen wordt gesteld dat de alifatische koolwaterstofmengsels minder toxisch zijn dan de aromatische componenten, en meer bepaald de PAK's (Anderson, 1977; Connell & Miller, 1981; Spies, 1987; French, 1991; Neff & Stubblefield, 1995; Pelletier et al., 1997). Onderzoek door Riis et al. (1995, 1996) gaf ook aan dat de niet-degradeerbare fractie van minerale olie voornamelijk bestaat inerte componenten met een hoge moleculaire massa die niet door bacteriën kunnen worden afgebroken en daardoor waarschijnlijk niet toxisch zal zijn. Barron et al. (1999) vond daarentegen dat olie met lage gehalten aan aromatische verbindingen zeer toxisch waren voor de aasgarnaal *Americamysis bahia* en dat PAKs niet altijd de belangrijkste bijdrage tot de waargenomen toxiciteit leverde.

Door het specifieke, accidentele karakter van olieverontreiniging enerzijds, en de grote variabiliteit in compositie tussen verschillende soorten olie (ruwe olie, distillaten,...) anderzijds, is het niet mogelijk om de hoeveelheden van deze contaminanten die in de Noordzee terecht kunnen komen, te kwantificeren. In het kader van deze studie werd er wel een lijst opgemaakt van de oliecomponenten waarvan wordt aangenomen dat zij een potentieel risico vormen wanneer zij in het marien milieu terecht komen.

In Tabel 1.24 wordt er een overzicht gegeven van PAK die worden aanbevolen in monitoring studies enerzijds en PAKs die werden gemeten in studies naar olieverontreiniging (water, sediment) anderzijds. Op basis van deze gegevens, in combinatie met beschikbare fysico-chemische en toxiciteitsdata, werd een lijst opgesteld van verbindingen in in deze studie verder werden onderzocht. Stoffen waarover te weinig gegevens in de literatuur beschikbaar waren, werden uit deze lijst weggelaten. In totaal werden er 35 stoffen weerhouden waarvoor, indien mogelijk, de partitionering in het marien milieu werd berekend (zie Hoofdstuk 2). Voor 23 van deze stoffen was het eveneens mogelijk om – op basis van beschikbare toxiciteitsdata – de lange-termijn effecten van één of meerdere trofische niveau's te voorspellen met behulp van het ontwikkelde LTEM (Lange-termijn Effecten Model; zie Hoofdstuk 3).

Tabel 1.24: Overzicht van PAKs gerelateerd met olieverontreiniging

Component	(1)	(2)	(3)	(4)	Onderzochte stoffen in de huidige studie
Acenafteen					
Acenaftyleen					
Anthraceen					
Benzeen					
Benzo(e)acefenanthrileen					
Benzo(a)anthraceen					
Benzo(b)fluorantheen					
Benzo(k)fluorantheen					
Benzo(ghi)peryleen					
Benzo(a)pyreen					
Benzo(e)pyreen					
Chryseen					
Cycloheptaan					
Cyclohexaan					
Cyclopentaan					
Dibenzo(ac)anthraceen					
Dibenzo(ah)anthraceen					
Dibenzothiopheen					
Difenyl					
Dimethylantracene					
Dimethylfenanthreen					
Dimethylnaftaleen					
2,4 Dimethylpentaan					
Ethylbenzeen					
Fenanthreen					
Fluorantheen					
Fluoreen					
Heptaan					
Hexaan					
Indeno(123,cd)pyreen					
Methylantracene					

Tabel 1.24: Vervolg

Component	(1)	(2)	(3)	(4)	Onderzochte stoffen in de huidige studie
Methylfenanthreen					
Methylnaftaleen					
2-Methylpentaan					
Methylpyreen					
Naftaleen					
Nonaan					
Octaan					
Peryleen					
Propylbenzeen					
Pyreen					
Retene					
Tolueen					
Xyleen (o,m,p)					

(1) Risk assessment for Humans Cleaning the oil spillage and cleaning the birds on the coast of Brittany (France) following the wreckage of the Maltese Oil Tanker "ERIKA" in December 1999.

(2) Singer et al. (2000)

(3) Notar et al. (2001)

(4) Peña-Méndez et al. (2001)

Een aantal van deze stoffen zijn zeer vluchtig en zullen dus slechts in zeer beperkte mate aanwezig zijn in de waterkolom (benzeen, cyclohexaan, ethylbenzeen, tolueen, xylenen). Desalniettemin worden deze stoffen in deze studie verder onderzocht.

1.7.2 Dispersanten

Om de schade te beperken ten gevolge van een olieverontreiniging, bestaan er verschillende mechanische en chemische methodes: fysisch verwijderen, verbranden, concentreren met behulp van absorberende stoffen of het toevoegen van cleaners/dispersanten (Pezeshki et al., 2001). De eerste dispersanten waren voornamelijk detergents (oppervlakte-actieve stof in een 'carrier'-solvent), maar bleken vaak zelf een toxisch effect op het milieu uit te oefenen (Smith, 1968). De dispersanten die de laatste jaren werden ontwikkeld, zijn echter beduidend minder toxisch (Singer et al., 1993, 1994). Voorts werd reeds in verschillende studies het effect van deze dispersanten op olietoxiciteit nagegaan. Uit de resultaten blijkt echter dat - afhankelijk van het gebruikte testorganisme, dispersant en type olie

– een afname of een toename van de toxiciteit werd waargenomen (Getter & Baca, 1984, Swedmark et al., 1973; Doe & Wells, 1978).

Het toevoegen van dispersanten bij een olieverontreiniging heeft verschillende effecten (Tiehm, 1994; Wolfe et al., 1998, 1999)

- verlaagd risico voor het aanspoelen van olie op de stranden
- verhoogde degradatie van PAKs door een toename van de concentratie PAKs in oplossing (opgeloste fractie + emulsie)
- verhoogde biobeschikbare fractie PAKs (en hieruit volgend een verhoogde toxiciteit door directe opname of bioaccumulatie via de voedselketen) door de toegenomen oplosbaarheid en de gewijzigde interacties tussen olie, dispersant en biologische membranen.

Een verhoogde biobeschikbaarheid en transfer doorheen de voedselketen werd door Wolfe et al. (1999) vastgesteld in een experiment met de dispersant Corexit 9527® waarbij de alg *Isochrysis galbana* en de rotifeer *Brachionus plicatilis* werden blootgesteld aan fenanthreen. Tegelijkertijd werd echter ook een verhoging van de eliminatiesnelheid vastgesteld.

Uit de beschikbare literatuur blijkt dus dat het toevoegen van dispersanten op olie effecten kan hebben op biobeschikbaarheid en toxiciteit van oliecomponenten: de huidige kennis hieromtrent en de zeer beperkte informatie met betrekking tot de specifieke effecten van dispersanten op de toxiciteit van de individuele verbindingen laat niet toe om de effecten van dispersanten op de toxiciteit te incorporeren in het LTEM dat in deze studie werd ontwikkeld.

HOOFDSTUK 2

PARTITIONERING VAN DE BELANGRIJKSTE VERONTREINIGENDE STOFFEN VAN HET MARIEN MILIEU OVER DE VERSCHILLENDE MILIEUCOMPARTIMENTEN VAN EEN STANDAARD MILIEU

2.1 Inleiding

De verdeling van een stof over de verschillende milieucompartmenten (multi-media milieu) wordt grotendeels bepaald door de fysische, chemische en biologische processen waaraan een stof of verbinding wordt blootgesteld. Hierbij bepalen ook de fysico-chemische eigenschappen van een verbinding in belangrijke mate mee in hoeverre de desbetreffende stof al dan niet aanwezig zal zijn in een specifiek compartiment (lucht, water, sediment,...). Voor een aantal verbindingen die in Hoofdstuk 1 werden gedefinieerd als zijnde belangrijke potentiële contaminanten van het marien milieu, werd hun aanwezigheid reeds in verschillende milieucompartmenten gedetecteerd: benzeen (Duarte-Davidson et al., 2001), PAKs, (Yaffe et al., 2001; Fiah et al., 2001) en metalen zoals lood en kwik (Chadha et al., 1998; Stein et al., 1996). Omdat het bepalen en opvolgen van de concentratie van tal van potentieel schadelijke verbindingen in de verschillende milieucompartmenten niet haalbaar is, zijn er een aantal multi-media modellen ontwikkeld die in staat zijn om de distributie van een stof in het milieu te gaan voorspellen op basis van de fysico-chemische eigenschappen van de desbetreffende stof. Tabel 2.1 geeft een overzicht van de verschillende niveau's van multi-media modellen zoals weergegeven door Mackay et al. (1996).

Modelniveau's II, III en IV vergen een zeer grondige kennis van de desbetreffende stof, zowel qua fysico-chemie als van alle mogelijke processen die de aanwezigheid van de stof beïnvloeden (advectief transport, (bio)degradatie,...). Hoe meer informatie er beschikbaar is, hoe beter het gedrag van een stof in het milieu kan worden begrepen en voorspeld.

Tabel 2.1: Niveau's van multimedia 'fate' modellen.

Model niveau	Milieu condities	Informatie die met deze modellen wordt bekomen
Niveau I (Level I)	Evenwichtsverdeling onder 'steady-state' condities	De verdeling van de stof over de primaire compartimenten en de benaderende relatieve concentratie in deze compartimenten + informatie met betrekking tot bioaccumulatie
Niveau II (Level II)	Idem als Niveau I, maar incorporatie van verliezen door advectioneel transport en transformatieprocessen	De benaderende verbijftijd en persistentie van de stof in het milieu, de belangrijkste verlies-processen (door reacties en/of advection) en de tendensen voor transport vanuit het generisch milieu naar lucht of water
Niveau III (Level III)	Niet-evenwicht door incorporatie van intermediaire transportprocessen onder 'steady state' condities	De invloed van het lozingsmilieu op de uiteindelijke bestemming van een stof, welke intermediaire transportmechanismen de belangrijkste zijn, en welke processen bijdragen aan de verspreiding van een stof naar de milieucompartimenten waar de initiële lozing niet in plaatsvindt + informatie over persistentie van de stof
Niveau IV (Level IV)	Idem als Niveau III, maar niet onder 'steady state' condities	Benodigde tijd voor accumulatie en herstel ten gevolge van een blootstelling aan een stof

Door de relatief beperkte kennis omtrent het gedrag en eigenschappen van de in Hoofdstuk 1 geïdentificeerde stoffen in het marien milieu, werd voor de evaluatie van deze stoffen gekozen voor het Equilibrium Criterion Model (EQC-Model) - Niveau I dat ontwikkeld werd door Mackay et al. (1996). Het EQC-Model is gebaseerd op het evaluatie-multimedia model dat werd beschreven door Mackay et al. (1992). Het model is zodanig opgebouwd dat de gebruiker, afhankelijk van de hoeveelheid beschikbare data over de stof en met milieu, kan kiezen tussen een Niveau I, II, III (en mogelijks IV) benadering. Het voordeel van dit model ten opzichte van andere, meer conventionele, modellen is dat het EQC-Model in staat is om een grote variëteit aan chemische verbindingen te evalueren.

Het milieu dat door Mackay standaard in het EQC-Model wordt gebruikt voor de evaluatie en partitionering van een stof, is beschreven in Tabel 2.2. Deze Tabel is enkel geldig voor Niveau I en II – Modellen omdat deze geen rekening houden met een aantal parameters die wel bij een Niveau III-evaluatie in rekening worden gebracht zoals interstitiele lucht of water. Het beschouwde gebied kan qua grootte worden vergeleken met de staat Ohio in de Verenigde Staten of met Griekenland (Makay et al., 1996)

Tabel 2.2 : Eigenschappen van het Standaard Milieu in het EQC-Model.

Compartment	Lucht	Water	Bodem	Sediment	Zwevend stof/sediment	Vissen
Volume (m ³)	10 ¹⁴	2 x 10 ¹¹	9 x 10 ⁹	10 ⁸	10 ⁶	2 x 10 ⁵
Diepte (m)	1000	20	0.1	0.01	---	---
Oppervlakte (m ²)	10 ¹¹	10 ¹⁰	9 x 10 ¹⁰	10 ¹⁰	---	---
% organisch koolstof	---	---	0.02	0.04	0.2	---
Dichtheid (kg/m ³)	1.2	1000	2400	2400	1500	1000
Advectie verblijftijd (h)	100	1000	---	50000	--	---
Advectie debiet (m ³ /h)	10 ¹²	2 x 10 ⁸	---	2000	---	---

Het EQC-Model maakt ook een onderscheid tussen verschillende types van stoffen en de daarbij nodige informatie voor het evalueren van de verdeling over de verschillende milieucompartimenten.

Type 1 stoffen

Deze verbindingen verdelen zich over al de verschillende compartimenten. De gegevens die nodig zijn voor het berekenen van de partitionering in het milieu zijn het moleculair gewicht, de octanol-water partitioneringscoëfficiënt, de dampspanning, en de oplosbaarheid in water. Het dient te worden opgemerkt dat de laatste 3 constanten temperatuursafhankelijk zijn. Voorbeelden van dergelijke stoffen zijn de meeste organische verbindingen zoals chlorobenzeen, hexachlorobenzeen, PCB's,...

Type 2 stoffen

De stoffen die tot deze groep behoren zijn niet-vluchtig en het transport naar de lucht kan dan ook worden verwaarloosd. De dampdruk van deze verbindingen ligt lager dan 10^{-7} Pa, of de lucht-water partiticoëfficiënt is lager dan 10^{-5} . Tot deze groep van stoffen behoren kationen, anionen en niet-vluchtige organische verbindingen die wel oplosbaar zijn in water (metalen, lineaire alkylbenzeensulfonaten,...)

Type 3 stoffen

Stoffen die niet oplosbaar zijn in water (onoplosbare/sterk hydrofobe verbindingen) worden als Type 3 stoffen geklasseerd. Deze stoffen zijn echter meetbaar in de andere compartimenten van het milieu. Als grens wordt een oplosbaarheid van 10^{-6} g/m³ voorgesteld door Mackay et al. (1996a). Deze lage oplosbaarheid vertaald zich ook in een K_{OW} waarde van hoger dan 10^8 . Voorbeelden van dergelijke stoffen zijn sommige siliconen en polymeren, en 'long-chain' koolwaterstoffen.

Type 4 stoffen

Deze categorie omvat alle stoffen die zowel onoplosbaar zijn in water en niet vluchtig zijn. Zij komen dus quasi enkel voor in de vaste fase of geadsorbeerd aan bodem, sediment of aerosolen (stofdeeltjes). Het modelleren van transport en partitionering van deze stoffen in het milieu is vrij moeilijk. Een voorbeeld van een dergelijke stof is polyethyleen.

Type 5 stoffen

De laatste groep bevat die stoffen die in de natuur onder verschillende vormen voorkomen en die in elkaar kunnen transformeren, waarbij de partitioneringscoëfficiënten van elke vorm van die stof onderling verschillend zijn. In de praktijk blijkt dat het modelleren van de verdeling van een dergelijke stof in het milieu momenteel zeer moeilijk tot onmogelijk blijkt te zijn wegens het ontbreken van essentiële informatie. Voorbeelden van Type 5 stoffen zijn kwik en pentachlorofenol.

Tabel 2.3 geeft een beknopt overzicht van de vijf chemische klassen en de partitioneringsdata die nodig zijn voor het berekenen van een betrouwbare voorspelling van de verdeling van een stof over de verschillende milieucompartimenten.

Tabel 2.3: Klassificatie van verbindingen

Chemische klasse	Partitioneringsdata die nodig zijn voor het voorspellen van de verdeling van een stof in het milieu	Voorbeeld
Type 1	Oplosbaarheid in water en vet, dampdruk, Henry constante, octanol-water partiticoëfficiënt	Chlorobenzeen
Type 2	Partiticoëfficiënt naar de vaste fase en naar organisch koolstof, oplosbaarheid in water en vet	Lood,
Type 3	Partiticoëfficiënt van de lucht of pure stof naar de vaste fase	Eicosaan
Type 4	Sorptie-eigenschappen van de pure fase naar verschillende vaste fases	Polyethyleen
Type 5	Partitioneringsdata voor al de species van de stof	Kwik, Pentachlorofenol

2.2 Verdeling van contaminanten in de Noordzee

Met uitzondering van de metalen, behoren de verbindingen die in Hoofdstuk 1 werden gedefinieerd als zijnde de belangrijkste (potentiele) contaminanten voor het Belgische deel van de Noordzee, allemaal tot de Type I verbindingen en kan hun verdeling over de verschillende milieucompartimenten worden geschat op basis van een beperkt aantal fysicochemische parameters.

Voor het berekenen van de verspreiding over de verschillende milieucompartimenten, werd gebruik gemaakt van 2 verschillende modellen: het EQC- model van Mackay et al. (1996b) en een Fugacity Niveau 1 model dat werd ontwikkeld door Di Guardo & Calamari (1991) waarbij plantenbiomassa als extra milieucompartiment werd bijgevoegd.

Bij het EQC-model werd gebruik gemaakt van de Niveau I-benadering: bij het verzamelen van de nodige fysicochemische data bleek immers dat voor de meeste stoffen die in deze studie worden geëvalueerd er niet genoeg informatie beschikbaar met betrekking tot het gedrag en processen (biodegradatie, transformatie) van organische verbindingen in het marien milieu. Deze beperkte kennis blijkt ook uit de schaarse gegevens met betrekking tot de oplosbaarheid en dampdruk van deze stoffen in een marien milieu: beide parameters worden beïnvloed door de fysicochemie van het medium waarin zij aanwezig zijn (saliniteit, temperatuur,...), maar zijn wel essentieel voor het voorspellen van de verdeling van deze componenten in het milieu. De assumpties – en de daarmee gepaard gaande onzekerheid – die in vele gevallen moeten worden gemaakt, maken het gebruik van Niveau II modellen overbodig, te meer dat de extra informatie vaak eveneens moet worden geschat. Bij het Niveau I Model wordt tot slot ook aangenomen dat het compartiment waarin een stof eerst terecht

komt, onbelangrijk is omdat het model veronderstelt dat de stof onmiddellijk over de verschillende compartimenten wordt verdeeld zodat er een evenwichtssituatie ontstaat.

2.2.1 Definiering van het milieu

Voor het inschatten van de partitionering van de belangrijkste contaminanten in de Noordzee, werden de karakteristieken van het milieu, zoals standaard voorgesteld in het EQC-model van Mackay en in het Fugacity Niveau I Model van Di Guardo & Calamari (1991), aangepast aan de specifieke eigenschappen van een olievlék in de Noordzee.

Tabel 2.4 vergelijkt het standaard milieu van het EQC-model en het standaard milieu van het Fugacity Niveau I Model met het Standaard Marien Milieu (SMM) dat in het kader van deze studie werd gedefinieerd en gebruikt. Dit SMM werd vervolgens gebruikt als input voor de voorspellingen met beide modellen.

Tabel 2.4: Eigenschappen van het EQC-standaard milieu en het marien milieu zoals gebruikt in deze studie

	EQC-Standaard Milieu	Fugacity Niveau I Standaard Milieu	Standaard Marien Milieu (SMM)
lucht	1.10^{14} m^3	6.10^9 m^3	6.10^9 m^3
water	2.10^{11} m^3	7.10^6 m^3	7.10^6 m^3
bodem	9.10^9 m^3	$4.5.10^6 \text{ m}^3$	---
sediment	1.10^8 m^3	$2.1.10^4 \text{ m}^3$	$2.1.10^4 \text{ m}^3$
zwevend stof (suspended sediment)	1.10^6 m^3	$3.5.10^1 \text{ m}^3$	$2.1.10^2 \text{ m}^3$
vissen – biomassa in het aquatisch milieu	2.10^5 m^3	7 m^3	7.10^1 m^3
aerosol	2.10^4 m^3	---	1.2 m^3
wortel biomassa	---	$3.68.10^3 \text{ m}^3$	---
stengel biomassa	---	$4.6.10^3 \text{ m}^3$	---
blad biomassa	---	$9.2.10^2 \text{ m}^3$	---

Uit een eerste vergelijking van beide bestaande standaard milieu's blijkt dat het EQC-milieu beduidend groter gedimensioneerd is: de watermassa in het EQC-model kan worden vergeleken met een waterkolom van 100 m diepte en een oppervlakte van 10000 km². Het is weinig waarschijnlijk dat een dergelijk wateroppervlak wordt gecontamineerd door een accidentele lozing. Daarom werd gekozen voor een dimensionering van het watercompartiment op basis van de gebruikte waarde in het Fugacity Niveau I Model (7.10^6 m^3), wat overeenkomt met een waterkolom van 100 m diep en een

oppervlak van 7 km². Ook voor de dimensionering van het luchtcompartiment werd gekozen voor de waarde van het Fugacity Niveau I model. Dit komt ± overeen met een luchtkolom van 1 km boven het wateroppervlak.

Omdat in dit hoofdstuk de partitionering in de Noordzee werd onderzocht, werd het bodemcompartiment weggelaten in het SMM. Voor de sediment fractie werd weerop gesteund op de waarde zoals gebruikt bij het Fugacity Niveau I Model. Een dergelijke hoeveelheid sediment komt overeen met een sedimentlaag van ± 3 cm onder het wateroppervlak. Voor het zwevend stof in de watermassa werd, naar analogie met het EQC-standaard milieu, gekozen voor 1% van de sedimentfractie. Wat de aerosolfractie betreft, werd eenzelfde verhouding als in het EQC-Model genomen tussen lucht en aerosol, wat leidde tot een aerosolvolume van 1.2 m³.

De hoeveelheid aanwezige dierlijke biomassa in het standaardmilieu van beide modellen slechts 0.0001% van de totale waterhoeveelheid. Deze waarde ligt zeer laag, en er werd dan ook besloten om deze waarde met een factor 10 te verhogen. Hierbij werd tegelijkertijd aangenomen dat zowel het fyto- en zooplankton, invertebraten en vertebraten deel uitmaken van de aquatische biomassa. Tot slot werd er in het SMM geen rekening gehouden met plantaardige biomassa.

Naast het dimensioneren van een realistisch marien milieu moeten er ook een aantal andere parameters worden gedefinieerd die de partitionering van een stof mee beïnvloeden. De parameters en de waarden die worden gebruikt in de verschillende standaard milieus worden samengevat in Tabel 2.5.

Omdat er in het marien milieu geen rekening wordt gehouden met bodem of vegetatie, worden de waarden voor deze compartimenten gelijk gesteld aan 0 (of 0.01 indien er een waarde moet worden ingegeven bij de input data). Wat het organisch gehalte in het sediment betreft, wordt de gemiddelde waarde van 4% aangenomen die in beide modellen wordt voorop gesteld. Deze waarde is representatief voor gerapporteerde koolstofgehaltes in mariene sedimenten. Lu & Chen (1977) geven gehalten van 0.53%, 1.90% en 2.12% in respectievelijk lemig zand, zandig leem en lemige klei sedimenten. Krizek en Raphaelian (1977) daarentegen vonden in 4 mariene sedimenten koolstofgehaltes die varieerden tussen 3.6 en 10.5%. Op basis van deze data werd dan ook besloten om het gehalte organisch koolstof in het sediment van het SMM op 4% in te stellen.

Voor de dichtheden van de verschillende componenten in het milieu werden de waarden van het EQC-Model weerhouden. Deze waarden kunnen niet in het Fugacity Niveau I Model door de gebruiker worden aangepast.

Tot slot zijn in het Mackay model de dichtheid van water en lucht standaard waarden die door de gebruiker niet kunnen worden gecorrigeerd: de dichtheid van zeewater bedraagt immers 1035 kg/m³ ten opzichte van de $\pm$ 1000 kg/m³ voor zoetwater.

Tabel 2.5: Fysicochemische input-parameters in het EQC en het Fugacity Niveau I – model

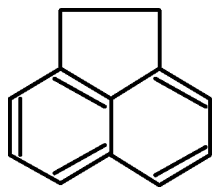
Parameter	EQC-Model (Standaard)	Fugacity Niveau I model (Standaard)	Gebruikte waarde in het Standaard Marien Milieu
Dichtheid van de vegetatie (Kg/dmc)	---	0.80	---
Organisch koolstof in de bodem (% drooggewicht)	2.0	2.0	---
Organisch koostof in het sediment (% drooggewicht)	4.0	4.0	4.0
Organisch koolstof in het zwevend stof (% drooggewicht)	20	---	---
Dichtheid (in kg/m ³) van:			
water	1000	---	1000
lucht	0.673	---	0.673
bodem	2400	---	2400
sediment	2400	---	2400
zwevend stof	1500	---	1500
aquatische biomassa	1000	---	1000
aerosolen	2000	---	2000
Vetgehalte in aquatische biomassa	0.05	---	0.05
Temperatuur		25	20

Met de gegevens die in Tabellen 2.4 en 2.5 zijn weergegeven, werd voor 27 stoffen de partitionering in een Standaard Marien Milieu berekend. Hieronder worden de behandelde stoffen individueel besproken en worden de resultaten die met het Mackay Niveau I Model en met het Fugacity Niveau I Model werden bekomen, met elkaar vergeleken. Ook wordt voor elke stof de gebruikte fysicochemische dataset weergegeven die in de modellen werden ingevoerd. De fysico-chemische data werden bekomen uit Verschueren (1996), tenzij anders vermeld

Merk op dat de verdeling wordt berekend voor een gesloten systeem en er dus geen rekening wordt gehouden met een aantal processen die in realiteit de verdeling van een stof over de verschillende compartimenten kunnen beïnvloeden: stromingen in lucht en water (afvoer van gecontamineerd medium en toevoer van niet gecontamineerd medium), ongelijke verdeling over de waterkolom, ontwijkingsgedrag van vissen en andere mariene organismen,...

2.2.2 Acenafteen

Chemische formule en structuur:



Tabel 2.6: Fysisch-chemische eigenschappen van acenafteen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{ow} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater		90 / 95	0.0035 – 0.0074	0.27 bij 20°C	3.98
	154.21		bij 25°C		
in marien milieu		--	--	--	

Voor de evaluatie van de partitionering van acenafteen werd aangenomen dat 0.0035 g/L en goede benadering is voor de oplosbaarheid bij 20°C. Het een smeltpunt van 92.5 °C werd gebruikt in met Mackay-model. Voor het marien milieu werden geen data weergevonden in de literatuur.

Tabel 4.7 geeft de partitionering van acenafteen weer volgens de twee gebruikte modellen. De resultaten van beide modellen zijn zeer vergelijkbaar, en geven aan dat acenafteen zich over de drie belangrijkste compartimenten (water, lucht sediment) zal verdelen waarbij de grootste fractie ($\pm 66\%$) zich in de waterige fase zal bevinden. De fractie acenafteen die zich over de lucht en sediment zal verdelen, bedraagt $\pm 16\%$. De log K waarde van 3.98 leidt ertoe dat acenafteen toch in zekere mate in de aquatische biomassa zal accumuleren.

Tabel 2.7: Partitionering van acenafteen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Fugacity-model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	65.8	66.9
% aan aerosolen	< 0.1	---
% in het water	15.7	16.0
% in het sediment	17.7	16.7
% aan zwevend stof (sediment)	0.55	0.17
% in de aquatische biomassa	0.08	0.08

2.2.3 Acenaftyleen

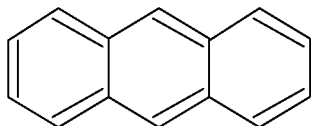
Tabel 2.8: Fysisch-chemische eigenschappen van acenaftyleen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	152.2	80 / 83	0.00393 bij 25°C	??	4.07
in marien milieu		--	--	--	

Voor acenaftyleen werd geen informatie omtrent de dampdruk in zoetwater of zeewater weergevonden. Het was dan ook niet mogelijk de distributie over de verschillende milieucompartimenten te berekenen

2.2.4 Anthraceen

Chemische formule en structuur:



Tabel 2.9: Fysisch-chemische eigenschappen van anthraceen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{ow} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater		216.3	1.29 x 10 ⁻³ bij 25°C	0.0196 bij	4.5
	178.23		7.5 x 10 ⁻⁵ bij 15°C	25°C	
in marien milieu		---	6.0 x 10 ⁻⁴ bij 25°C	---	

De partitionering van anthraceen werd, in tegenstelling tot bij de meeste andere stoffen, berekend bij een temperatuur van 25°C in plaats van bij 20°C: voor deze laatste temperatuur werden immers geen waarden voor oplosbaarheid en dampdruk gevonden. De gebruikte oplosbaarheid en dampdruk in het zoetwatermilieu waren respectievelijk 1.29 x 10⁻³ g/L en 1.96 x 10⁻² Pa. Voor het marien milieu werd een oplosbaarheid van 6.0 x 10⁻⁴ g/L gebruikt. Wegens het ontbreken van de dampdrukwaarde van anthraceen in zeewater, werd de waarde van 1.96 x 10⁻² Pa gebruikt voor beide milieu's.

Uit Tabellen 2.10 en 2.11 blijkt dat anthraceen zich in belangrijke mate zal accumuleren in het sediment en aan zwevende sedimentdeeltjes (± 54 – 64 %). De lagere oplosbaarheid in zeewater (bij een gelijke dampdruk) leidt ertoe dat in het marien milieu de fractie naar de lucht toe wordt verdubbeld tot ongeveer 30%. Het percentage dat naar de waterige fase gaat, ligt in beide milieu's rond de 15%. De extra hoeveelheid die dus in de lucht terecht komt bij het marien milieu, gaat onder zoetwatercondities naar het sediment.

Beide modellen geven vergelijkbare resultaten, met uitzondering van de fractie gebonden aan het zwevend stof, dat bij het Mackay-model een factor 3 hoger ligt (2.0% t.o.v. 0.64%).

Tabel 2.10: Partitionering van anthraceen in een zoetwater standaard milieu bij 25°C

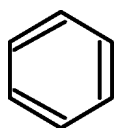
	Mackay-model	Fugacity-model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	16.1	17.0
% aan aerosolen	0.01	---
% in het water	17.2	18.2
% in het sediment	64.3	63.9
% aan zwevend stof (sediment)	2.0	0.64
% in de aquatische biomassa	0.27	0.24

Tabel 2.11: Partitionering van anthraceen in een zeewater standaard milieu bij 25°C

	Mackay-model	Fugacity-model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	29.2	30.7
% aan aerosolen	0.02	---
% in het water	14.5	15.2
% in het sediment	54.3	53.4
% aan zwevend stof (sediment)	1.70	0.53
% in de aquatische biomassa	0.23	0.20

2.2.5 Benzeen

Chemische formule en structuur:



In de modellen werd, op basis van de fysisch-chemische data, een gemiddelde dampdruk van 8865 Pa bij 20°C gebruikt. De oplosbaarheid was 1.78 g/L. Er werden geen specifieke mariene data gevonden voor benzeen.

Tabel 2.12: Fysisch-chemische eigenschappen van benzeen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater		5.5	1.8	10130 bij 20°C	2.42
	78.11		1.78 bij 20°C	7600 bij 20°C	
			1.62 bij 20° ¹	6000 bij 15°C	
				11800 bij 30°C	
in marien milieu		---	---	---	

¹: uit Riis et al. (1996)

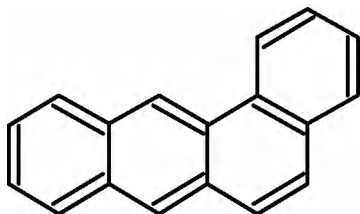
Met beide modellen werd een vrijwel identieke partitionering gevonden, waarbij benzeen bijna volledig naar de lucht zal gaan, en slechts voor een beperkte fractie (0.70%) naar het water (Tabel 2.13). De fractie die in aquatische organismen zal bioaccumuleren, is verwaarloosbaar klein, wat te verwachten is op basis van de lage log K_{OW} waarde (2.42).

Tabel 2.13: Partitionering van benzeen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Fugacity-model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.3	99.3
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.73	0.70
% in het sediment	0.02	0.02
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

2.2.6 Benzo(a)anthraceen

Chemische formule en structuur:



Tabel 2.14: Fysisch-chemische eigenschappen van benzo(a)anthraceen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater		158	$1.0 - 4.4 \times 10^{-5}$	5.0×10^{-7} bij	5.74
	228		bij 24°C	20°C	
			1.4×10^{-5}		
in marien milieu		---	---	---	

Voor de partitionering werd aangenomen dat de oplosbaarheid van benzo(a)anthraceen bij 20°C 1.4×10^{-5} bedroeg. Voor deze stof werden geen specifieke mariene data gevonden

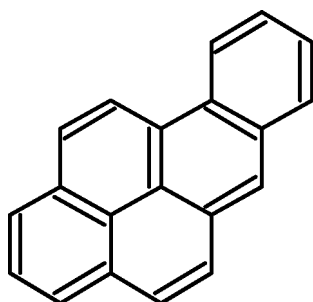
Benzo(a)anthraceen zal voornamelijk accumuleren in het sediment (95-97%). Hierbij is in het Mackay-model de fractie in het sediment lichtjes kleiner (2.4%) dan bij het Fugacity-Model. Dit verschil wordt in het eerste model verdeeld over de aerosolen en zwevend stof. Bijna een half procent van de stof komt terecht in de aquatische biomassa, wat zal resulteren in een grote bioaccumulatiefactor.

Tabel 2.15: Partitionering van benzo(a)anthraceen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Fugacity-model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	< 0.01	< 0.01
% aan aerosolen	0.41	---
% in het water	1.46	1.6
% in het sediment	94.8	97.2
% aan zwevend stof (sediment)	2.96	0.97
% in de aquatische biomassa	0.40	0.24

2.2.7 Benzo(b)fluorantheen

Chemische formule en structuur:



Tabel 2.16: Fysisch-chemische eigenschappen van benzo(b)fluorantheen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater		167	1.2×10^{-6}	5.0×10^{-5} bij 20°C	6.26
in marien milieu	252	---	---	---	---

Voor het voorspellen van de partitionering (Tabel 2.17) werd aangenomen dat de oplosbaarheid van benzo(b)fluorantheen bij 20°C 1.2×10^{-6} bedroeg. Voor deze stof werden geen specifieke mariene data gevonden

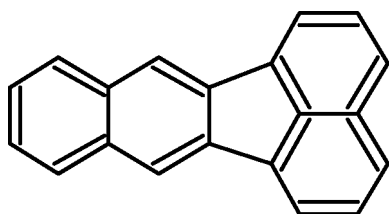
Ook deze stof bioaccumuleert in het sediment (93-97%), maar in tegenstelling tot bij benzo(a)anthraceen zal een beperkte fractie (1.6-18.%) zich bevinden in de waterige fase. Naar analogie met anthraceen en benzo(a)anthraceen ligt bij het Mackay-model de fractie benzo(b)fluorantheen in het zwevend stof een factor 3 hoger dan in het fugacity-model. Benzo(b)fluorantheen blijkt ook te accumuleren in de biomassa (fractie van 0.20-0.40 % in de aquatische biomassa).

Tabel 2.17: Partitionering van benzo(b)fluorantheen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Fugacity-model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	1.6	1.8
% aan aerosolen	1.28	---
% in het water	0.43	0.48
% in het sediment	93.4	96.6
% aan zwevend stof (sediment)	2.92	0.97
% in de aquatische biomassa	0.40	0.20

2.2.8 Benzo(k)fluorantheen

Chemische formule en structuur:



Tabel 2.18: Fysisch-chemische eigenschappen van benzo(k)fluorantheen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{ow} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater		217	5.5×10^{-7}	5.0×10^{-5} bij	6.60
	252			20°C	
in marien milieu		---	---	---	

Voor de partitionering werd aangenomen dat de oplosbaarheid van benzo(k)fluorantheen bij 20°C 5.5×10^{-7} bedroeg. Voor deze stof werden geen specifieke mariene data gevonden.

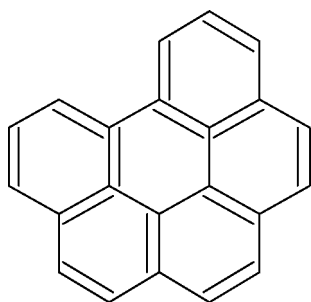
De partitionering van benzo(k)fluorantheen is bijna identiek aan deze van benzo(a)fluorantheen, waarbij de stof voornamelijk terecht komt in de sediment fase. Door de lagere oplosbaarheid en hogere log K_{OW} waarde is de fractie van benzo(k)fluorantheen in het water en aan aerosolen afgenomen met respectievelijk een factor 2 en 3, wat resulteert in een kleine stijging van aanwezige fractie in het sediment.

Tabel 2.19: Partitionering van benzo(k)fluorantheen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Fugacity-model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	1.62	1.8
% aan aerosolen	0.41	---
% in het water	0.20	0.22
% in het sediment	94.4	96.9
% aan zwevend stof (sediment)	2.95	0.97
% in de aquatische biomassa	0.40	0.18

2.2.9 Benzo(ghi)perveen

Chemische formule en structuur:



Tabel 2.20: Fysisch-chemische eigenschappen van benzo(ghi)peryleen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater		222	2.6×10^{-7} bij	1.0×10^{-8} bij	6.94
	276		25°C	20°C	
in marien milieu		---	---	---	

De partitionering van benzo(ghi)peryleen werd berekend bij een temperatuur van 25°C, maar gebruik makend van de gekende dampdrukwaarde bij 20°C. Voor deze stof werden geen specifieke mariene data gevonden.

Hoewel de dampdruk bij 25°C iets hoger zal liggen dan de dampdruk bij 20°C, kan, op basis van de zeer lage waarde (1.0×10^{-8} Pa), worden verondersteld dat de fractie die naar de lucht zal partitioneren zeer klein zal blijven (<0.1 - 0.01). De grootste fractie wordt teruggevonden in de sedimentfase (96-99 %). Net zoals bij de hiervoor besproken benzeen-gesubstitueerde PAKs, wordt volgens het Mackay-model een grotere fractie gebonden aan zwevend stof (factor 3) en opgeslagen in de biomassa (factor 2) dan bij het model van Di Guardo & Calamari.

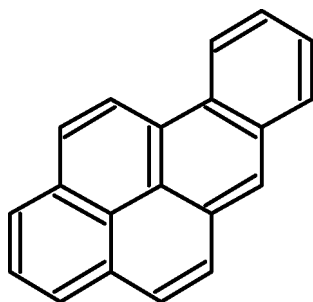
Tabel 2.21: Partitionering van benzo(ghi)peryleen in een zoetwater standaard milieu bij 25°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	< 0.01	< 0.01
% aan aerosolen	0.46	---
% in het water	0.09	0.10
% in het sediment	96.0	98.7
% aan zwevend stof (sediment)	3.00	0.99
% in de aquatische biomassa	0.41	0.16

2.2.10 Benzo(a)pyreen

Chemische formule en structuur





Tabellen 2.23 en 2.24 geven de partitionering van benzo(a)pyreen in zoetwater en zeewater weer. Omdat er voor het mariene milieu geen waarde voor de dampdruk van benzo(a)pyreen beschikbaar is, werd de waarde voor het zoetwater overgenomen. Voor de oplosbaarheid van deze stof in zeewater werd de gemiddelde waarde van 7.5×10^{-3} g/L aangenomen

Tabel 2.22: Fysisch-chemische eigenschappen van benzo(a)pyreen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	252.3	179	3.0×10^{-3}	5×10^{-5} bij 20°C	6.04
in marien milieu		---	$5.0-10 \times 10^{-3}$	---	

Identieke partitioneringspercentages voor de verschillende milieucompartimenten werden weergevonden voor het zoetwater en marien milieu. Het verschil in oplosbaarheid (factor 2.5; zie Tabel 2.22) blijkt dus geen enkel effect te hebben op de verspreiding van deze stof. Wel werden weer kleine verschillen gevonden tussen de twee modellen, waarbij volgens het Mackay-model de fractie in de sedimentfase $\pm 2\%$ lager ligt door een grotere partitionering naar het zwevend stof (2%, factor 3) en naar de biomassa (0.2%, factor 2). Benzo(a)pyreen zal zich echter voornamelijk naar de sedimentfase partitioneren.

Tabel 2.23: Partitionering van benzo(a)pyreen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

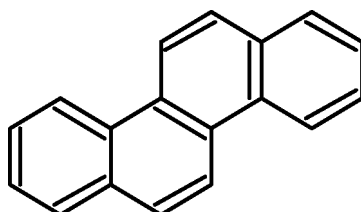
	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	< 0.01	< 0.01
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.74	0.81
% in het sediment	95.9	98.0
% aan zwevend stof (sediment)	3.00	0.98
% in de aquatische biomassa	0.41	0.22

Tabel 2.24: Partitionering van benzo(a) pyreen in een zeewater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	< 0.01	< 0.01
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.74	0.81
% in het sediment	95.9	98.0
% aan zwevend stof (sediment)	3.00	0.98
% in de aquatische biomassa	0.41	0.22

2.2.11 Chryseen

Chemische formule en structuur:



Tabel 2.25: Fysisch-chemische eigenschappen van chryseen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{ow} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater		254	1.5 x 10 ⁻⁶ bij 15°C	6.3 x 10 ⁻³ bij	6.05
	228.2		6 x 10 ⁻⁶ bij 25°C	20°C	
in marien milieu		---	1-50 x 10 ⁻⁶	---	
			17 x 10 ⁻⁶ bij 17°C		

De berekening van de verdeling van chryseen over de verschillende milieucompartmenten werd uitgevoerd voor een temperatuur van 20°C. Er werd aangenomen dat de oplosbaarheid van chryseen bij 20°C in zoetwater gelijk was aan 375 x 10⁻⁶ g/L (gemiddelde van de oplosbaarheid bij 15 en 25°C). Voor het marien milieu werd een gemiddelde oplosbaarheid bij 20°C gebruikt van 25 x 10⁻⁶ g/L. In het marien standaard milieu werd eveneens verondersteld dat de dampdruk van chryseen in zeewater gelijk was aan die in een zoetwater milieu (6.3 x 10⁻⁵ Pa).

De grootste fractie chryseen zal accumuleren in het sediment (95 - 98%). In beide milieus zal ± 0.75% van de totale hoeveelheid terecht komen in de waterkolom. De fractie naar de lucht toe is echter ongeveer een factor 6 groter in het zoetwatermilieu dan in het zeewatermilieu. De verschillende oplosbaarheid van chryseen (± 1 grootte-orde) ligt aan de basis van de waargenomen gewijzigde partitionering. In beide milieus zal chryseen ook accumuleren in de aquatische biomassa (0.20-0.40% van de totale hoeveelheid in het standaard milieu).

Tabel 2.26: Partitionering van chryseen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

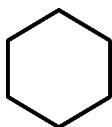
	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	0.97	1.05
% aan aerosolen	0.08	---
% in het water	0.72	0.78
% in het sediment	94.9	97.0
% aan zwevend stof (sediment)	2.96	0.97
% in de aquatische biomassa	0.40	0.22

Tabel 2.27: Partitionering van chryseen in een zeewater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	0.15	0.16
% aan aerosolen	0.01	--
% in het water	0.72	0.79
% in het sediment	95.7	97.9
% aan zwevend stof (sediment)	2.99	0.98
% in de aquatische biomassa	0.41	0.22

2.2.12 Cyclohexaan

Chemische formule en structuur:



De partitionering van cyclohexaan werd berekend op basis van een oplosbaarheid van 5.5×10^{-2} g/L en een dampdruk van 7700 Pa. Voor deze stof werden geen specifieke mariene data gevonden.

Beide partitioneringsmodellen voorspellen dat cyclohexaan zich bijna volledig in de lucht fase zal bevinden (meer dan 99.9%), en dat slechts een zeer beperkte hoeveelheid (0.02%) zich naar de waterige fase zal verdelen.

Tabel 2.28: Fysisch-chemische eigenschappen van cyclohexaan

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater		6.3	5.5 x 10 ⁻² bij 20°C 4.5 x 10 ⁻² bij 15°C	10 397 7700 bij 20°C 12000 bij 30°C	3.44
	84.18				
in marien milieu		---	---	---	

Tabel 2.29: Partitionering van cyclohexaan in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.9	99.9
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.02	0.02
% in het sediment	< 0.01	< 0.01
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

2.2.13 Cyclopentaan

Chemische formule en structuur:



Voor cyclopentaan werd geen informatie omtrent de log K_{OW} en de oplosbaarheid in zoetwater of zeewater weergevonden. Hierdoor was het niet mogelijk om de distributie van deze verbinding over de verschillende compartimenten van het standaard milieu te berekenen. De zeer hoge dampdruk wijst er echter op dat deze verbinding, net zoals cyclohexaan, zich bijna volledig naar de lucht toe zal verdelen.

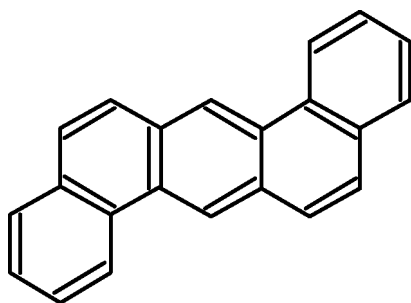
Tabel 2.30: Fysisch-chemische eigenschappen van cyclopentaan

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K _{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	70.14	-94	---	40000 bij 31°C	--
in marien milieu	---	---	---	---	---

2.2.14 Dibenzo(ah)anthraceen

Chemische formule en structuur

C₂₂H₁₄



Tabel 2.31: Fysisch-chemische eigenschappen van dibenzo(ah)anthraceen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K _{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	278.35	266 / 267	5 x 10 ⁻⁷	1.0 x 10 ⁻⁸ bij 20°C	6.61
in marien milieu	---	---	---	---	---

Er werd aangenomen dat de oplosbaarheid van dibenzo(ah)anthraceen 5 x 10⁻⁷ bedraagt bij 20°C (geen informatie met betrekking tot de temperatuur waarvoor de oplosbaarheid vermeld in Tabel 2.31 geldig is). Voor deze stof werden geen specifieke mariene data gevonden.

Uit Tabel 2.32 blijkt dat de verdeling van benzo(ah)anthraceen over de verschillende compartimenten vrij gelijkend is met de verdeling die werd berekend voor benzo(a)anthraceen. Het percentage

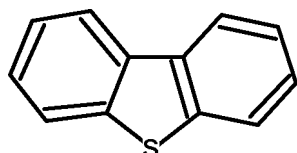
dibenzo(ah)anthraceen in de waterige fase is wel sterk afgenomen: $\pm 0.20\%$ ten opzichte van $1.5 - 1.6\%$ voor benzo(a)anthraceen. De belangrijkste verschillen tussen beide modellen situeren zich weerom bij de zwevende stof fase en bij de accumulatie in aquatische organismen (factor 2 tot 3).

Tabel 2.32: Partitionering van benzo(ah)anthraceen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	< 0.01	< 0.01
% aan aerosolen	0.16	--
% in het water	0.20	0.22
% in het sediment	96.2	98.6
% aan zwevend stof (sediment)	3.00	0.99
% in de aquatische biomassa	0.41	0.18

2.2.15 Dibenzothiopheen

Chemische formule en structuur



Tabel 2.33: Fysisch-chemische eigenschappen van dibenzothiopheen

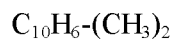
	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	184.26	97	---	---	---
in marien milieu	---	---	---	---	---

Voor dibenzothiopheen werden in de beschikbare literatuur geen specifieke data met betrekking tot de oplosbaarheid, dampdruk of the octanol-water waterpartiticoëfficiënt weergevonden. Het was dan

ook niet mogelijk om de partitionering van deze stof over de verschillende milieucompartimenten te berekenen.

2.2.16 Dimethylnaftaleen (1.3; 2.3; 2.6)

Chemische formule:



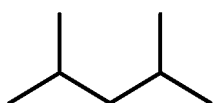
Tabel 2.34: Fysisch-chemische eigenschappen van dimethylnaftaleen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater		156.23	---	---	4.42
in marien milieu					

Voor dimethylnaftaleen werd in de beschikbare literatuur geen specifieke data met betrekking tot de oplosbaarheid en dampdruk weergevonden. Het was dan ook niet mogelijk om de partitionering van deze stof over de verschillende milieucompartimenten te berekenen.

2.2.17 2,4-Dimethylpentaan

Chemische formule en structuur:



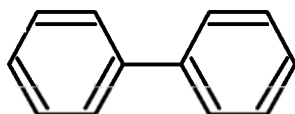
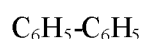
Tabel 2.35: Fysisch-chemische eigenschappen van 2,4-dimethylpentaan

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K _{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	100.20	-123			
in marien milieu					

Voor 2,4-dimethylpentaan werd in de beschikbare literatuur geen specifieke data met betrekking tot de oplosbaarheid, dampdruk en octanol-water partitiecoëfficiënt weergevonden. Het was dan ook niet mogelijk om de partitionering van deze stof over de verschillende milieucompartimenten te berekenen.

2.2.18 Difenyyl

Chemische formule en structuur



Tabel 2.36: Fysisch-chemische eigenschappen van difenyyl

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K _{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	154.2	70	7.5 x 10 ⁻³ bij 25°C 8.5 x 10 ⁻³ bij 24°C	0.7	3.83
in marien milieu		---	---	---	

De berekening van de verdeling van difenyyl over de verschillende milieucompartimenten werd uitgevoerd voor een temperatuur van 25°C. Er werd aangenomen dat de dampdruk van difenyyl bij 25°C gelijk was aan de dampdruk bij 20°C (0.7 Pa). Voor deze stof werden geen specifieke mariene data gevonden.

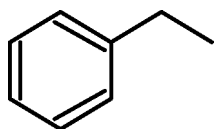
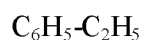
Uit Tabel 2.37 blijkt dat difenyl zich voornamelijk zal partitioneren naar de luchtfase (73%). Beperkte hoeveelheden zullen naar de waterfase en het sediment gaan (respectievelijk $\pm 15\%$ en 11%). Beide modellen voorspellen ook dat slechts 0.05% van de totale hoeveelheid difenyl zal bioaccumuleren in aquatische organismen.

Tabel 2.37: Partitionering van difenyl in een zoetwater standaard milieu bij $25\text{ }^{\circ}\text{C}$

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	73.1	73.7
% aan aerosolen	0.05	---
% in het water	14.7	14.8
% in het sediment	11.7	11.1
% aan zwevend stof (sediment)	0.37	0.11
% in de aquatische biomassa	0.05	0.05

2.2.19 Ethylbenzeen

Chemische formule en structuur:



Tabel 2.38: Fysisch-chemische eigenschappen van ethylbenzeen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt ($^{\circ}\text{C}$)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	106.14	-94.97	niet - 0.15 0.14-0.21 bij 15°C 0.152 bij 20°C	930 700 bij 20°C 1200 bij 30°C	3.15
in marien milieu	---	---	---	---	---

Voor de verdeling van ethylbenzeen werd voor de dampdruk bij 20°C de waarde van 700 Pa gebruikt. Voor deze stof werden geen specifieke mariene data gevonden.

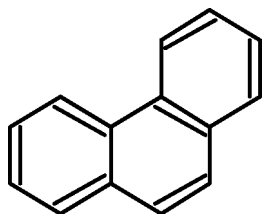
De verdeling van ethylbenzeen is vrijwel identiek aan deze die voor benzeen werd berekend: 99.3% van de hoeveelheid ethylbenzeen komt terecht in de lucht en slechts 0.58% zal zich in de waterkolom bevinden. De fractie die in aquatische organismen zal bioaccumuleren, is verwaarloosbaar klein (< 0.01%).

Tabel 2.39: Partitionering van ethylbenzeen in een zoetwater standaard milieu bij 20 °C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.3	99.3
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.58	0.58
% in het sediment	0.10	0.05
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

2.2.20 Fenanthreen

Chemische formule en structuur:



Tabel 2.40: Fysisch-chemische eigenschappen van fenanthreen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	178.22	100	4.2 x 10 ⁻⁴ bij 8.5°C 1.6 x 10 ⁻³ bij 15°C 8.2 x 10 ⁻⁴ bij 21°C 1.3 x 10 ⁻³ bij 30°C	6.8 x 10 ⁻² bij 20°C	4.46
in marien milieu	---	---	6.0 x 10 ⁻⁴ bij 22°C	---	---

Voor fenanthreen werd in de literatuur waarden met betrekking tot de oplosbaarheid in zoetwater van deze stof bij verschillende temperaturen (8.5 tot 30°C) weergevonden. Ook de oplosbaarheid van fenanthreen in zeewater is in Tabel 2.40 weergegeven. De verschillende temperaturen van de gerapporteerde oplosbaarheden stemmen echter niet overeen met de temperatuur waarbij een dampdruk van 6.8×10^{-2} Pa voor fenanthreen werd gevonden. Voor de partitionering werd daarom aangenomen dat de dampdruk bij 21°C in zoetwater en bij 22°C in zeewater gelijk is aan deze waarde. In beide media werd een gelijkaardige verdeling met beide modellen weergevonden: iets meer dan de helft van de totale hoeveelheid fenanthreen zal zich in de lucht bevinden (53.3 tot 62.4%). Een belangrijke fractie bevindt zich ook in het sediment (28.3 tot 35%), en een beperkte hoeveelheid zal zich in de waterkolom bevinden (8.6 – 10.6%). Net als bij een aantal reeds besproken verbindingen is de hoeveelheid van de stof die gebonden zich aan het zwevend stof ongeveer 3 keer hoger bij het Mackay-model dan bij het Model van Di Guardo & Calamari. Het betreft hier echter maximaal 1% van de totale hoeveelheid fenanthreen in het milieu.

Tabel 2.41: Partitionering van fenanthreen in een zoetwater standaard milieu bij 21°C

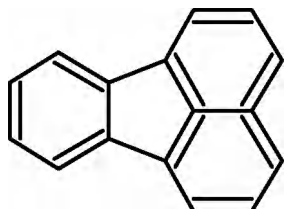
	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	53.3	55.0
% aan aerosolen	0.15	---
% in het water	10.3	10.6
% in het sediment	35.0	34.0
% aan zwevend stof (sediment)	1.09	0.34
% in de aquatische biomassa	0.15	0.13

Tabel 2.42: Partitionering van fenanthreen in een zeewater standaard milieu bij 22°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	60.8	62.4
% aan aerosolen	0.18	---
% in het water	8.62	8.8
% in het sediment	29.4	28.3
% aan zwevend stof (sediment)	0.92	0.28
% in de aquatische biomassa	0.12	0.11

2.2.21 Fluorantheen

Chemische formule en structuur



Tabel 2.43: Fysisch-chemische eigenschappen van fluorantheen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K _{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	202	107	2.65 x 10 ⁻⁴ bij 25°C	6 x 10 ⁻⁴ bij 20°C	5.18
in marien milieu		---	1.0 x 10 ⁻⁴ bij 22°C 1.2 x 10 ⁻⁴ bij 24°C	---	

Net als bij fenanthreen zijn de temperaturen bij de verschillende gerapporteerde oplosbaarheden voor fluorantheen in zoet- en zeewater niet in overeenstemming met de temperatuur waarvoor de weergegeven dampdruk geldig is. Ook hier werd voor de berekening van de verdeling over de verschillende milieucompartimenten aangenomen dat de dampdruk van 6 x 10⁻⁴ Pa representatief is voor de dampdruk van fluorantheen bij 25°C (in zoetwater) en 22°C (in zeewater).

Weinig verschillen werden waargenomen tussen de verschillende modellen en media: in elk van de vier gevallen werd gevonden dat ± 90% van de aanwezige fluorantheen zich accumuleert in het sediment. Een kleine fractie (± 5%) bevindt zich in de waterkolom en een nog beperktere hoeveelheid zal zich verdelen naar de lucht. De verschillen die voor dit compartiment worden waargenomen tussen het zoetwater en marien milieu zijn te wijten aan het feit dat dezelfde dampdruk bij verschillende temperaturen werd gebruikt: de gebruikte waarde (geldig bij 20°C) voor de dampdruk van fluorantheen bij 25°C is hoogstwaarschijnlijk te laag (stijgende dampdruk bij stijgende temperatuur), wat tot gevolg heeft dat de gevonden fracties van ± 0.85 een onderschatting ten opzichte van de fracties die werden berekend bij 22°C.

De hogere log K_{OW} waarde leidt tot een grotere bioaccumulatie van deze verbinding in aquatische organismen (0.3-0.4% van de totale hoeveelheid fluorantheen in het standaard milieu).

Tabel 2.44: Partitionering van fluorantheen in een zoetwater standaard milieu bij 25 °C

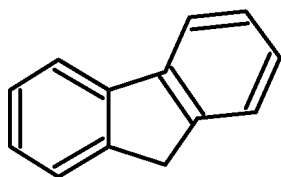
	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	0.80	0.87
% aan aerosolen	0.25	---
% in het water	5.07	5.5
% in het sediment	90.7	92.4
% aan zwevend stof (sediment)	2.83	0.92
% in de aquatische biomassa	0.38	0.28

Tabel 2.45: Partitionering van fluorantheen in een zeewater standaard milieu bij 22 °C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	2.11	2.3
% aan aerosolen	0.60	---
% in het water	4.99	5.4
% in het sediment	89.1	91.1
% aan zwevend stof (sediment)	2.79	0.91
% in de aquatische biomassa	0.38	0.27

2.2.22 Fluoreen

Chemische formule en structuur:



De berekening van de verdeling van fluoreen in een zoetwatermilieu werd uitgevoerd voor een temperatuur van 20°C met een oplosbaarheid van 1.98×10^{-3} g/L en een dampdruk van 1.3 Pa. Voor het marien milieu werd de verdeling berekend voor 22°C, waarbij eenzelfde dampdruk werd verondersteld, maar waarbij een oplosbaarheid van 8.0×10^{-4} werd gebruikt.

Tabel 2.46: Fysisch-chemische eigenschappen van fluoreen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{ow} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	166.22	116	1.98 x 10 ⁻³ 1.9 x 10 ⁻³ bij 25°C	1.3 bij 20°C	4.18
in marien milieu		---	8.0 x 10 ⁻⁴ bij 22°C	---	

Hoewel fluoreen en fluorantheen een vergelijkbare structuur hebben (substitutie van een extra aromatische ringstructuur op de centrale cyclopentaanstructuur van fluoreen), wordt een compleet verschillende verdeling gevonden. Fluoreen zal zich immers voornamelijk in de luchtfase bevinden, daar waar fluorantheen accumuleert in het sediment. Dit is voornamelijk te wijten aan het feit dat de dampdruk van fluorantheen 4 grootte-orde kleiner is dan die van fluoreen. In het marien milieu is de fractie naar de lucht ± 4% groter door de lagere oplosbaarheid van fluoreen in zeewater (Tabel 2.47). Deze extra fractie bevindt zich in het zoetwatermilieu in de sedimentfase en, in mindere mate, in de waterfase. Fluoreen zal zich ook nauwelijks accumuleren in aquatische organismen (± factor 20 lager dan fluorantheen).

Tabel 2.47: Partitionering van fluoreen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

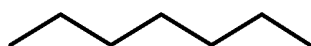
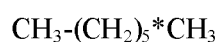
	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	93.1	93.4
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	2.42	2.4
% in het sediment	4.33	4.1
% aan zwevend stof (sediment)	0.14	0.04
% in de aquatische biomassa	0.02	0.02

Tabel 2.48: Partitionering van fluoreen in een zeewater standaard milieu bij 22°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	97.1	97.2
% aan aerosolen	0.01	---
% in het water	1.03	1.0
% in het sediment	1.84	1.7
% aan zwevend stof (sediment)	0.06	0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

2.2.23 Heptaan

Chemische formule en structuur



Tabel 2.49: Fysisch-chemische eigenschappen van heptaan

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{ow} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	100.23	-91	3 x 10 ⁻³ bij 20°C (gedistilleerd H ₂ O) 2.4 x 10 ⁻³ bij 20°C	4799 3500-4600 bij 20°C 5800 bij 30°C	4.66
in marien milieu			1.05 x 10 ⁻³ bij 20°C		

De berekening van de verdeling van heptaan in het zoetwatermilieu werd uitgevoerd voor een temperatuur van 20°C met een oplosbaarheid van 2.4 x 10⁻³ g/L en een gemiddelde dampdruk van 4050 Pa. Voor het marien milieu werd de verdeling eveneens berekend (voor 20°C) met deze dampdruk, maar met de oplosbaarheid in het marien milieu zoals gegeven in Tabel 2.49.

Als gevolg van de hoge dampdruk en de relatief beperkte oplosbaarheid werd voor beide modellen en milieu's gevonden dat heptaan zich quasi volledig zal partitioneren naar de lucht (99.9%) en dat de fracties in de andere milieucompartmenten verwaarloosbaar klein zijn (< 0.01%). Enkel in in het

sediment van het marien milieu zal zich een beperkte hoeveelheid heptaan accumuleren (0.03 - 0.04% van de totale hoeveelheid in het standaard milieu).

Tabel 2.50: Partitionering van heptaan in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.9	99.9
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	<0.01	< 0.01
% in het sediment	0.01	< 0.01
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

Tabel 2.51: Partitionering van heptaan in een zeewater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.9	99.9
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	<0.01	< 0.01
% in het sediment	0.04	0.03
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

2.2.24 Hexaan

Chemische formule en structuur:



De berekening van de verdeling van hexaan in het zoetwatermilieu werd uitgevoerd voor een temperatuur van 20°C met een gemiddelde oplosbaarheid van 11.25×10^{-3} g/L en een gemiddelde dampdruk van 15500 Pa. Voor het marien milieu werd de verdeling berekend (voor 20°C) met dezelfde dampdruk, maar met de oplosbaarheid in het marien milieu zoals gegeven in Tabel 2.52.

Tabel 2.52: Fysisch-chemische eigenschappen van hexaan

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	86.17	-94.3	9.5-13 x 10 ⁻⁵ in gedistilleerd H ₂ O	16000 12000-19000 bij 20°C 19000 bij 30°C	3.85
in marien milieu		---	7.55 x 10 ⁻⁵ bij 20°C	---	

Net als bij heptaan partitioneert hexaan zich bijna uitsluitend naar de lucht. Enkel in het marien milieu zijn de fracties aanwezig in water en sediment groter dan (0.02%) of gelijk aan 0.01% van de totale hoeveelheid hexaan in het standaard milieu.

Tabel 2.53: Partitionering van hexaan in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

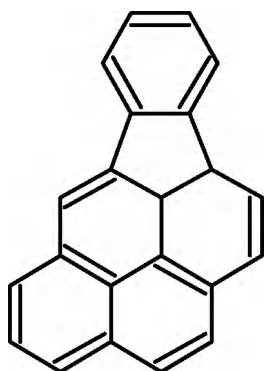
	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.9	99.9
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	< 0.01	< 0.01
% in het sediment	< 0.01	< 0.01
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

Tabel 2.54: Partitionering van hexaan in een zeewater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.9	99.9
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.02	< 0.01
% in het sediment	0.01	< 0.01
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

2.2.25 Indeno(123,cd)pyreen

Chemische formule en structuur



Tabel 2.55: Fysisch-chemische eigenschappen van indeno(123,cd)pyreen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	276.34	160-163	6.2×10^{-3}	1×10^{-8}	7.66
in marien milieu	---	---	---	---	---

Voor de berekening van de verdeling van indeno(123,cd)pyreen werd aangenomen dat de gerapporteerde fysicochemische data uit Tabel 2.55 geldig zijn voor een temperatuur van 20°C. voor deze stof werden geen specifieke mariene data weergevonden.

Indeno(123,cd)pyreen zal zich voornamelijk accumuleren in de sedimentfase (96.6 – 98.9 %), waarbij de resterende fractie zich hoofdzakelijk zal binden aan het zwevend stof. Als gevolg van de hoge log K_{OW} (7.66) zal indeno(123,cd) sterk bioaccumuleren in aquatische organismen (0.13 – 0.41% van de totale hoeveelheid indeno(123,cd)pyreen in het standaard milieu).

Tabel 2.56: Partitionering van indeno(123,cd)pyreen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	< 0.01	< 0.01
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.02	0.02
% in het sediment	96.6	98.9
% aan zwevend stof (sediment)	3.02	0.99
% in de aquatische biomassa	0.41	0.13

2.2.26 Methylfenanthreen

Chemische formule:



Tabel 2.57: Fysisch-chemische eigenschappen van 1-methylfenanthreen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	300.36	--	7.3 x 10 ⁻⁶ bij 25°C	---	4.86
in marien milieu		---	3 x 10 ⁻⁴ bij 22°C	---	

Tabel 2.58: Fysisch-chemische eigenschappen van 2-methylfenanthreen

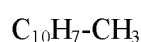
	Moleculair Gewicht	Smeltpunt	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	300.36	---	---	---	4.86
in marien milieu		---	---	---	

Zowel voor 1-methylfenanthreen als voor 2-methylfenanthreen werden er te weinig fysicochemische data in de literatuur gevonden om een verdeling van deze stoffen in het standaard milieu te berekenen

met de modellen die in deze studie worden gebruikt. In de veronderstelling dat de oplosbaarheid en dampdruk van methylfenanthreen vergelijkbaar is met deze van fenanthreen, kan - op basis van de iets hogere $\log K_{OW}$ van methylfenanthreen ten opzichte van deze van fenanthreen (4.86 vs. 4.46) – worden verondersteld dat methylfenanthreen zich meer zal partitioneren naar het sediment en de aquatische biomassa, en minder naar de andere milieucompartimenten. Dit wordt ook bevestigd door de resultaten van het Fugacity-Model waarbij gebruik werd gemaakt van bovenvermelde veronderstellingen.

2.2.27 Methylnaftaleen

Chemische formule:



Tabel 2.59: Fysisch-chemische eigenschappen van 1-methylnaftaleen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	$\log K_{OW}$ (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	142.2	-22	2.6-2.8 x 10 ⁻² bij 25°C	---	3.85
in marien milieu		---	---	---	

Tabel 2.60: Fysisch-chemische eigenschappen van 2-methylnaftaleen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	$\log K_{OW}$ (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	142.2	34 / 36	---	---	3.85
in marien milieu		---	---	---	

Net als bij methylfenanthreen zijn de beschikbare fysicochemische data voor methylnaftaleen onvoldoende voor het berekenen van een betrouwbare partitionering van deze verbinding in het standaard milieu. De oplosbaarheid van 1-methylnaftaleen (2.7 x 10⁻² g/L bij 25°C) is vrij goed vergelijkbaar met deze van naftaleen (3.25 x 10⁻² g/L bij 25°C), maar het gerapporteerde smeltpunt voor 1-methylnaftaleen (-22°C) ligt beduidend lager dan dat van naftaleen (80.2). Om het effect van

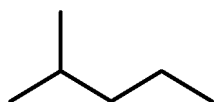
dit verschil te evalueren, werd dan ook besloten om de partitionering van 1-methylnaftaleen te berekenen met het Mackay-model, waarbij werd verondersteld dat de dampdruk van 1-methylnaftaleen gelijk is aan deze van naftaleen (gemiddelde dampdruk van 67 Pa; zie Tabel 2.63).

Uit deze berekening blijkt dat de verdeling van 1-methylnaftaleen over de verschillende milieucompartimenten vrijwel identiek is aan deze van naftaleen, waarbij enkel de fractie 1-methylnaftaleen in het sediment licht gestegen is (van 0.20 naar 0.67% van de totale hoeveelheid in het standaardmilieu).

Op basis van deze resultaten wordt verondersteld dat 1- en 2-methylnaftaleen en naftaleen zich analoog verdelen over de verschillende milieucompartimenten.

2.2.28 2-Methylpentaan

Chemische formule en structuur



Tabel 2.61: Fysisch-chemische eigenschappen van 2-methylpentaan

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	86.18	-154	1.4×10^{-2} ⁽¹⁾	40000	2.77
in marien milieu		---	---	---	

⁽¹⁾ Guidelines for Assessing and Managing Petroleum Hydrocarbon Contaminated Sites in New Zealand; Appendix 4A: Identification of Contaminants of Concern

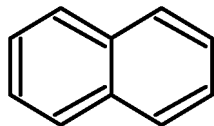
Tabel 2.62: Partitionering van 2-methylpentaan in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99,9	99,9
% aan aerosolen	<0.01	---
% in het water	<0.01	<0.01
% in het sediment	<0.01	<0.01
% aan zwevend stof (sediment)	<0.01	<0.01
% in de aquatische biomassa	<0.01	<0.01

Uit de bekomen resultaten met beide modellen blijkt dat 2-methylpentaan zich bijna uitsluitend zal partitioneren naar de luchtfase (99.99 %), en dit ten gevolge van de zeer grote dampdruk. De partitionering naar andere compartimenten is volledig verwaarloosbaar.

2.2.29 Naftaleen

Chemische formule en structuur:



Tabel 2.63: Fysisch-chemische eigenschappen van naftaleen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	128.18	80.2	3.1-3.4 x 10 ⁻² bij 25°C in gedistilleerd H ₂ O 1.9-3.8 x 10 ⁻²	4 – 130 100 bij 53°C	3.28
in marien milieu			2.0 x 10 ⁻² bij 22°C		

De verdeling van naftaleen in het zoetwater standaard milieu werd berekend met een gemiddelde oplosbaarheid van 2.7 x 10⁻² g/L en een gemiddelde dampdruk van 67 Pa, en dit voor een temperatuur van 20°C. De verdeling in zeewater (bij een temperatuur van 22°C) werd berekend met de

oplosbaarheid in zeewater zoals gegeven in Tabel 2.63 en met dezelfde gemiddelde dampdruk van 67 Pa.

Zoals reeds werd vermeld bij de bespreking van de verdeling van methylnaftaleen in het standaard milieu, zal naftaleen zich bijna uitsluitend partitioneren naar de luchtfase (98.9 – 99.2%). Slechts een kleine fractie bevindt zich het water en het sediment (respectievelijk 0.66-0.88% en 0.14-0.20%). De fractie die accumuleert aan zwevend stof/aerosolen of in organismen is vrijwel verwaarloosbaar.

Tabel 2.64: Partitionering van naftaleen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

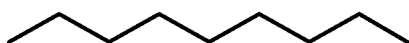
	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	98.9	98.9
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.88	0.88
% in het sediment	0.20	0.19
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

Tabel 2.65: Partitionering van naftaleen in een zeewater standaard milieu bij 22°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.2	99.2
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.66	0.66
% in het sediment	0.15	0.14
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

2.2.30 Nonaan

Chemische formule en structuur:



Voor nonaan werd in de literatuur geen octanol-water partitiecoëfficiënt gevonden. daarom werd er een log K_{OW} waarde geëxtrapoleerd op basis van de log K_{OW} van pentaan, hexaan en heptaan (respectievelijk 2.36, 4.0 en 4.66). Deze waarde bedraagt 7.12. Gebruik makend van deze geëxtrapoleerde waarde werd de verdeling van deze stof over de verschillende compartimenten van het standaard milieu berekend. Voor het marien milieu werd dezelfde dampdruk als in het zoetwater milieu gebruikt (322 Pa).

Tabel 2.66: Fysisch-chemische eigenschappen van n-nonaan

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	128.25	-54	7.0×10^{-5} bij 20°C	322 bij 20°C	---
in marien milieu			4.3×10^{-4} bij 20°C		

Op basis van deze analyse (Tabel 2.67) blijkt dat nonaan zich hoofdzakelijk (95.2 - 99.2%) naar de lucht toe zal partitioneren. In het marien milieu bevindt $\pm 4\%$ zich echter in het sediment (Tabel 2.68), en dit ten gevolge van de hogere oplosbaarheid van nonaan in zeewater in combinatie met de hoge log K_{OW} waarde. De fracties in de overige milieucompartimenten zijn verwaarloosbaar klein.

Tabel 2.67: Partitionering van nonaan in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

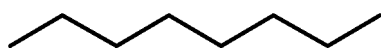
	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.2	99.3
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	< 0.01	< 0.01
% in het sediment	0.74	0.70
% aan zwevend stof (sediment)	0.02	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

Tabel 2.68: Partitionering van nonaan in een zeewater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	95.4	95.8
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	< 0.01	< 0.01
% in het sediment	4.40	4.14
% aan zwevend stof (sediment)	0.14	0.04
% in de aquatische biomassa	0.02	< 0.01

2.2.31 Octaan

Chemische formule en structuur



Tabel 2.69: Fysisch-chemische eigenschappen van n-octaan

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	114.23	-56.5	6.6 x 10 ⁻⁴ bij 20°C	1100 bij 20°C 1800 bij 30°C	---
in marien milieu			7.0 x 10 ⁻⁴ bij 20°C		

Voor octaan werd, net als bij nonaan, in de literatuur geen octanol-water partitiecöefficient gevonden. daarom werd ook hier een log K_{OW} waarde geëxtrapoleerd op basis van de log K_{OW} van pentaan, hexaan en heptaan (zie bij nonaan). Deze waarde bedraagt 5.97. Gebruik makend van deze geëxtrapoleerde waarde werd de verdeling van deze stof over de verschillende compartimenten van het standaard milieu berekend. Voor het marien milieu werd dezelfde dampdruk als in het zoetwater milieu gebruikt (1100 Pa).

Net als bij nonaan komt de grootste octaanfractie in de lucht terecht (99.8%). Omdat de oplosbaarheid weinig verschilt in beide milieu's (zoetwater, marien) enerzijds, en de log K_{OW} van octaan lager is dan

die van nonaan anderzijds, zal er slechts een zeer beperkte hoeveelheid octaan accumuleren in het zoetwater of marien sediment (0.15 - 0.17%).

Tabel 2.70: Partitionering van octaan in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

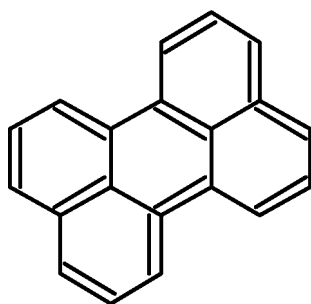
	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.8	99.8
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	< 0.01	< 0.01
% in het sediment	0.16	0.15
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

Tabel 2.71: Partitionering van octaan in een zeewater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.8	99.8
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	< 0.01	< 0.01
% in het sediment	0.17	0.16
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

2.2.32 Peryleen

Chemische formule en structuur:



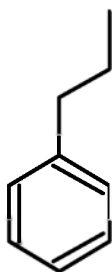
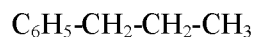
Tabel 2.72: Fysisch-chemische eigenschappen van peryleen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	252.32	277 / 279	4 x 10 ⁻⁴ bij 25°C in gedistilleerd H ₂ O	---	6.25
in marien milieu		---		---	

Voor peryleen werd er geen waarde voor de dampdruk weergevonden. op basis van de gevonden log K_{OW} waarde voor peryleen en de lage dampdruk die werd gevonden bij analoge aromatische ringstructuren (chryseen, pyreen, benzo(a-pyreen,...), kan worden verondersteld dat peryleen zich hoofdzakelijk al accumuleren in het sediment enerzijds, en dat deze stof sterk zal bioaccumuleren in aquatische organismen anderzijds.

2.2.33 n-Propylbenzeen

Chemische formule en structuur



Tabel 2.73: Fysisch-chemische eigenschappen van n-propylbenzeen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	120.19	-101 / -99	6.0 x 10 ⁻² bij 15°C	250 bij 20°C	3.60
in marien milieu		---	---	---	

De berekening van de verdeling van n-propylbenzeen werd uitgevoerd voor een temperatuur van 15°C. Er werd aangenomen dat de dampdruk bij deze temperatuur eveneens 250 Pa was. Voor deze stof werden geen specifieke mariene data weergevonden.

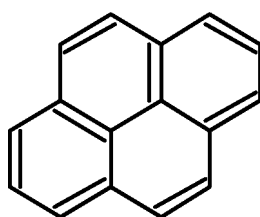
Uit Tabel 2.74 blijkt dat meer dan 99% van de totale hoeveelheid n-propylbenzeen in het standaard milieu zich in de lucht zal bevinden, en slechts beperkte fracties (respectievelijk 0.55 en 0.25 %) in het water en het sediment aanwezig zullen zijn. Bioaccumulatie in aquatische organismen is zeer beperkt.

Tabel 2.74: Partitionering van n-propylbenzeen in een zoetwater standaard milieu bij 15 °C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.2	99.2
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.55	0.55
% in het sediment	0.26	0.24
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

2.2.34 Pyreen

Chemische formule en structuur



Voor de berekening van de verdeling van pyreen in het standaard milieu werd aangenomen dat de oplosbaarheid van deze verbinding bij 20°C 3.2×10^{-5} g/L bedraagt. Voor het smeltpunt werd een waarde van -150°C aangenomen. Voor deze stof werden geen specifieke mariene data weergevonden.

Tabel 2.75: Fysisch-chemische eigenschappen van pyreen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	202.26	-149 / -151	3.2 x 10 ⁻³ 1.6 x 10 ⁻⁴ bij 26°C	6.85 x 10 ⁻³ bij 20°C	5.16
in marien milieu		---	---	---	

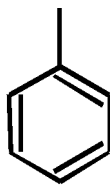
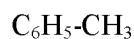
Pyreen zal zich voornamelijk accumuleren in het sediment. Voor deze verbinding wordt er echter een groot verschil waargenomen tussen beide modellen (Tabel 2.76). In het Model van Di Guardo & Calamari, dat geen rekening houdt met aerosolen, bevindt zich 92.2% van de totale hoeveelheid pyreen zich in het sediment. Bij het Mackay model bedraagt deze hoeveelheid slechts 79.4%, maar zal meer dan 12% van de totale hoeveelheid pyreen gebonden zijn aan aerosolen. De fracties in het water en in de lucht in beide modellen vrij gelijkend. Tot slot wordt ± 0.3% van de totale hoeveelheid geaccumuleerd in de aquatische biomassa.

Tabel 2.76: Partitionering van pyreen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	0.71	0.88
% aan aerosolen	12.4	---
% in het water	4.65	5.7
% in het sediment	79.4	92.2
% aan zwevend stof (sediment)	2.48	0.92
% in de aquatische biomassa	0.34	0.28

2.2.35 Tolueen

Chemische formule en structuur



Tabel 2.77: Fysisch-chemische eigenschappen van tolueen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	92.15	-95.1	4.7 x 10 ⁻¹ bij 16°C 5.15 x 10 ⁻¹ bij 20°C	2932 1000 bij 6.4 °C 2200 bij 20°C 4000 bij 31.8°C	2.70
in marien milieu		---	---	---	

De partitionering van tolueen werd berekend voor 20°C met een oplosbaarheid van 0.515 g/L en een dampdruk van 2200 Pa. Voor deze stof werden geen specifieke mariene data weergevonden.

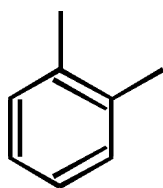
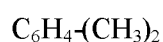
Als gevolg van de beperkte oplosbaarheid, de relatief lage log K_{OW} en de hoge dampdruk, bevindt de grootste fractie van deze stof zich in de lucht van het standaardmilieu (99.2%). De resterende fractie bevindt zich voornamelijk in de waterkolom. Tolueen accumuleert nauwelijks in het sediment of in de aquatische biomassa.

Tabel 2.78: Partitionering van toluen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.2	99.2
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.72	0.72
% in het sediment	0.04	0.04
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

2.2.36 o-Xyleen

Chemische formule en structuur



Tabel 2.79: Fysisch-chemische eigenschappen van o-xyleen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	106.18	-25	1.75 x 10 ⁻¹ bij 20°C	670 - 1 330 500 bij 20°C 900 bij 30°C	2.93
in marien milieu	---	---	---	---	---

De partitionering van o-xyleen werd berekend voor 20°C met een oplosbaarheid van 0.175 g/L en een dampdruk van 500 Pa. Voor deze stof werden geen specifieke mariene data weergevonden.

Als gevolg van de hoge dampdruk en de lage oplosbaarheid en log K_{OW} waarde, bevindt de grootste fractie van deze stof zich in de lucht van het standaard milieu. (99.0%). De resterende fractie bevindt

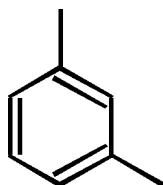
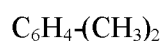
zich voornamelijk in de waterkolom (0.93%). De hoeveelheid α -xyleen dat in het sediment en in de aquatische biomassa accumuleert, is verwaarloosbaar klein (< 0.01%).

Tabel 2.80: Partitionering van o-xyleen in een zoetwater standaard milieu bij 20°C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.0	99.0
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.93	0.93
% in het sediment	0.09	0.09
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

2.2.37 m-Xvleen

Chemische formule en structuur



Tabel 2.81: Fysisch-chemische eigenschappen van m-xyleen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	106.18	---	1.61 x 10 ⁻¹ bij 25°C ⁽¹⁾	864 600 bij 20°C 1100 bij 30°C	3.20
in marien milieu			---	---	

⁽¹⁾ Guidelines for Assessing and Managing Petroleum Hydrocarbon Contaminated Sites in New Zealand; Appendix 4A: Identification of Contaminants of Concern

Voor m-xyleen werd geen waarde voor het smeltpunt gevonden. Daarom werd de partitionering enkel berekend met het model van Di Guardo & Calamari. Voor o-xyleen en p-xyleen werden quasi identieke verdelingen van deze stoffen over de verschillende milieucompartimenten weergevonden met beide modellen, wat doet veronderstellen dat dit ook geldig is voor m-xyleen. De verdeling werd berekend voor een temperatuur van 25°C en een dampdruk van 850 Pa. Voor deze stof werden geen specifieke mariene data weergevonden.

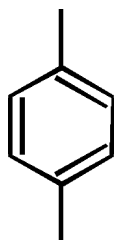
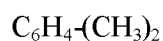
Tabel 2.82: Partitionering van m-xyleen in een zoetwater standaard milieu bij 25 °C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	---	99,4
% aan aerosolen	---	---
% in het water	---	0,51
% in het sediment	---	0,09
% aan zwevend stof (sediment)	---	< 0,01
% in de aquatische biomassa	---	< 0,01

Op basis van de waarden uit Tabel 2.82 kan worden geconcludeerd dat ook m-xyleen bijna uitsluitend in de luchtfase aanwezig is, en nauwelijks of niet in het water- en sedimentcompartiment van het standaard milieu.

2.2.38 p-xyleen

Chemische formule en structuur



Tabel 2.83: Fysisch-chemische eigenschappen van p-xyleen

	Moleculair Gewicht	Smeltpunt (°C)	Oplosbaarheid (in g/L)	Dampdruk (in Pa)	log K_{OW} (uit Tabel 3.11)
in zoetwater	106.18	13	1.98 x 10 ⁻¹ bij 25°C	870 - 1 197 650 bij 20°C 1200 bij 30°C	3.15
in marien milieu					

De partitionering van p-xyleen werd berekend voor 25°C met een oplosbaarheid van 0.198 g/L en een gemiddelde dampdruk van 925 Pa. Deze dampdruk is het gemiddelde van de twee in de literatuur gerapporteerde dampdrukken bij 20 en bij 30°C. Voor deze stof werden geen specifieke mariene data weergevonden.

Net als bij ortho- en meta-xyleen, bevindt para-xyleen zich hoofdzakelijk in de luchtfase. Enkel een beperkte hoeveelheid is terug te vinden in de waterfase (0.58%) en in de sedimentfase (0.1%). Accumulatie aan zwevend stof of aerosolen en in aquatische organismen is zeer beperkt (< 0.01%).

Tabel 2.84: Partitionering van p-xyleen in een zoetwater standaard milieu bij 25 °C

	Mackay-model	Model van Di Guardo & Calamari
% in de lucht	99.3	99.3
% aan aerosolen	< 0.01	---
% in het water	0.58	0.58
% in het sediment	0.10	0.09
% aan zwevend stof (sediment)	< 0.01	< 0.01
% in de aquatische biomassa	< 0.01	< 0.01

2.3 Algemene bespreking van de verdeling van de besproken verbindingen over de verschillende milieucompartimenten

Op basis van de fracties in de verschillende compartimenten van het standaard milieu (berekend met het Mackay Niveau 1 Model) werden de verbindingen die in dit hoofdstuk werden besproken, in drie groepen ingedeeld:

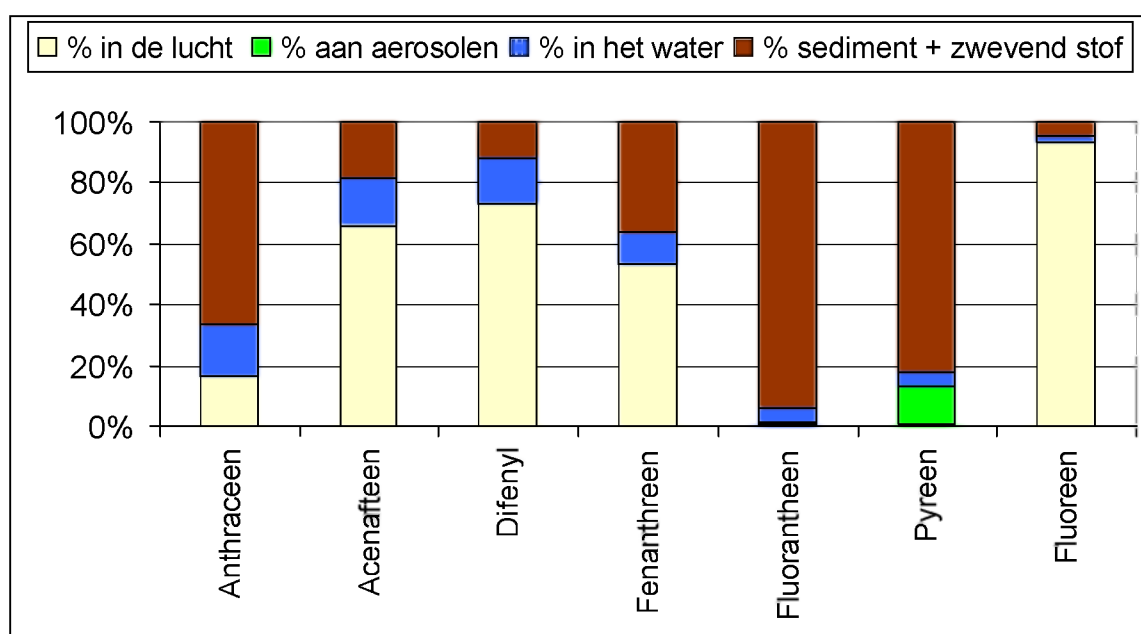
- sediment accumuleerders
- lucht accumuleerders
- overige

Een stof wordt ingedeeld bij de sediment of lucht accumuleerders wanneer meer dan 90% van de totale hoeveelheid in het standaard milieu zich in dit milieucompartiment bevindt. Tabel 2.85 geeft een overzicht van de verschillende groepen. Het percentage dat bij de sediment accumuleerders wordt weergegeven is de som van de fracties aanwezig in het sediment en in het zwevend stof. Voor deze analyse werd enkel gebruik gemaakt van de gegevens die werden bekomen op basis van fysicochemische waarden (oplosbaarheid, dampdruk) voor het zoetwatermilieu. De resultaten die eerder in dit hoofdstuk werden besproken, wijzen er immers op dat de verdeling van de verbindingen in zoet- en zeewater vrijwel identiek zijn.

Tabel 2.85: Indeling van 27 verbindingen in functie van hun milieudistributie.

Sediment accumuleerders	%	Lucht accumuleerders	%	Overige verbindingen
Indeno(123,cd)pyreen	99.6	Cyclohexaan	99.9	Anthraceen
Dibenzo(ah)anthraceen	99.2	Heptaan	99.9	Acenafteen
Benzo(ghi)peryleen	99.0	Hexaan	99.9	Difenyyl
Benzo(a)pyreen	98.9	Octaan	99.8	Fenanthreen
Chryseen	97.9	Benzeen	99.3	Fluorantheen
Benzo(a)anthraceen	97.8	Ethylbenzeen	99.3	Pyreen
Benzo(k)fluorantheen	97.4	p-xyleen	99.3	Fluoreen
Benzo(b)fluorantheen	96.3	Nonaan	99.2	
		n-propylbenzeen	99.2	
		Tolueen	99.2	
		o-xyleen	99.0	
		Naftaleen	98.9	

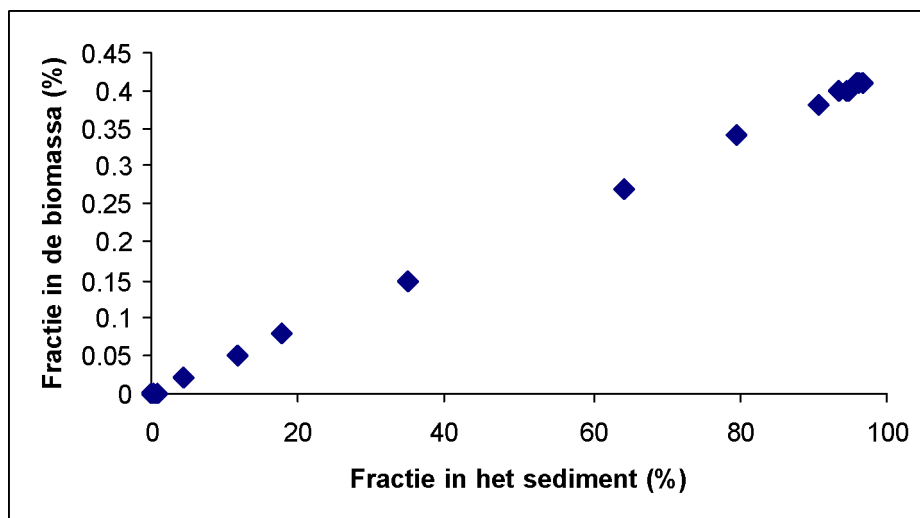
Uit Tabel 2.85 blijkt dat alle benzeen-gesubstitueerde polyaromatitsche koolwaterstoffen sterk accumuleren in het sediment of aan het zwevend stof in de waterkolom, daar waar de ‘basis’ PAK’s (fluorantheen, anthraceen, pyreen) ook over de andere compartimenten van het standaard milieu worden verdeeld. De verdeling van de niet-sediment of luchtaccumuleerders wordt weergegeven in Figuur 2.1. Uit deze figuur blijkt dat pyreen de enige onderzochte verbinding is waarvan een belangrijke fractie (12.4%) zich partitioneert naar aerosolen. Anthraceen, acenafteen, difenyl en fenanthreen zijn de vier onderzochte verbindingen waarvan meer dan 10% van de totale hoeveelheid zich in de waterkolom zal bevinden. Met uitzondering van anthraceen bevindt de grootste fractie van deze verbindingen zich in de luchtfase (53.3 – 65.8%). Fluorantheen en pyreen zullen hoofdzakelijk accumuleren in de sediment (81.9 – 93.5) en fluoreen bevindt zich voornamelijk in de lucht (93.3%).



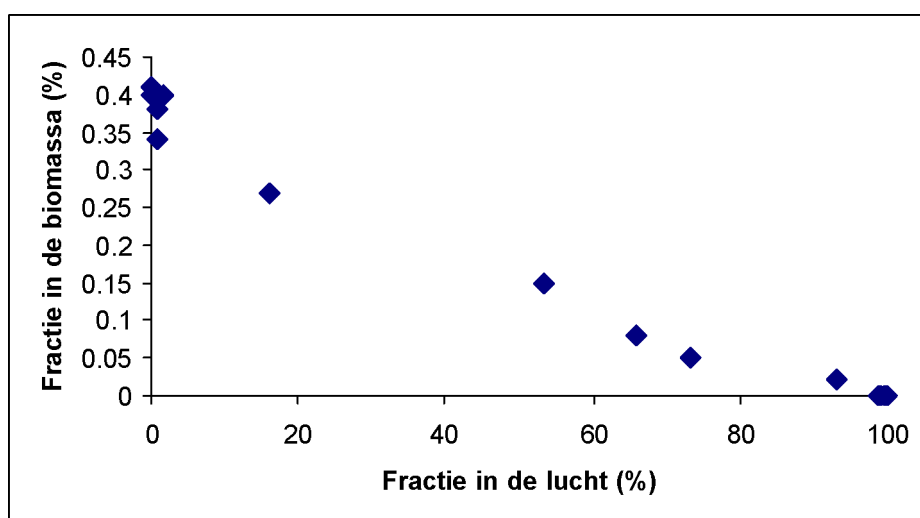
Figuur 2.1: Distributie van 7 organische verbindingen over de milieucompartimenten van het Standaard Milieu

Omdat kan worden verondersteld dat de fractie die zal accumuleren in de aquatische organismen een belangrijke rol speelt bij het veroorzaken van toxiciteit, worden de relaties tussen deze fractie en de overige fracties nagegaan (Figuren 2.2 tot 2.4).

Uit Figuur 2.2 en 2.3 blijkt enerzijds dat voor stoffen die sterk accumuleren in het sediment, een relatief grote fractie in de organismen wordt weergevonden, en dat anderzijds stoffen die zich voornamelijk naar de lucht partitioneren nauwelijks in de organismen worden teruggevonden.

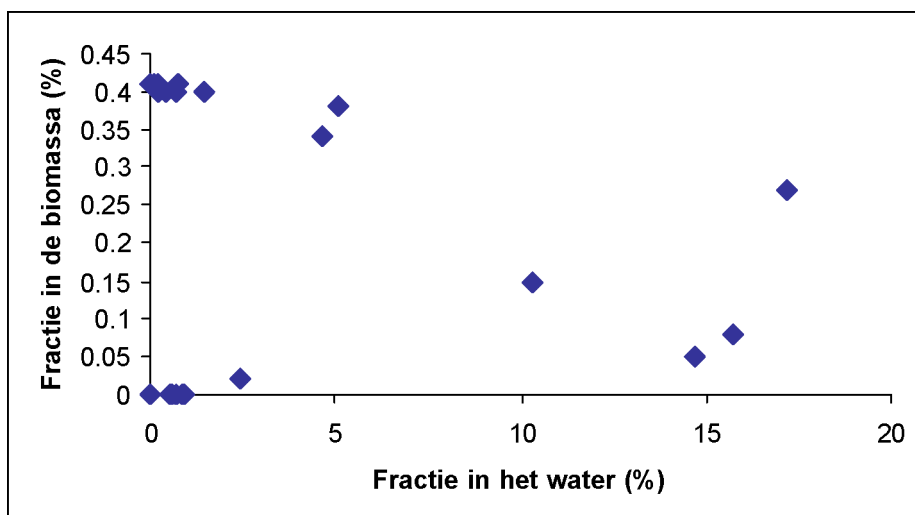


Figuur 2.2: Relatie tussen de fractie in het sediment en de fractie in de biomassa



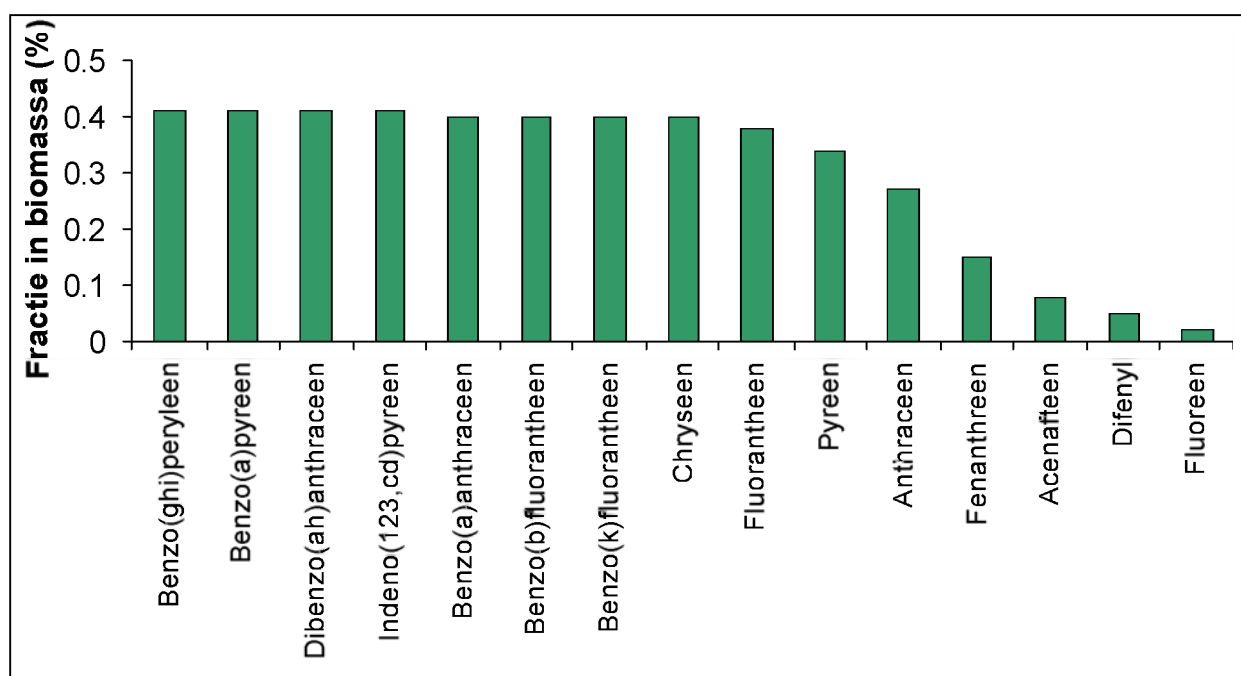
Figuur 2.3: Relatie tussen de fractie in de lucht en de fractie in de biomassa

Uit Figuur 2.4 daarentegen blijkt dat er geen duidelijke relatie kan worden weergevonden tussen de procentuele hoeveelheid van een verbinding in de waterkolom en de hoeveelheid die zich accumuleert in de aquatische organismen.



Figuur 2.4: Relatie tussen de fractie in het water en de fractie in de biomassa

Tot slot worden in Figuur 2.5 de verbindingen die in deze studie werden onderzocht, gerangschikt volgens dalende fractie in de aquatische organismen (dalende bioconcentratie). Zoals kan worden verwacht, rekening houdend met de trends die in Figuren 2.2 en 2.3 werden weergevonden, wordt de grootste fractie in de biomassa teruggevonden bij de benzeen-gesubstitueerde PAK's, gevolgd door de overige PAK's en difenyl. Al de overige onderzochte verbindingen waarvoor een milieudistributie werd bekend in deze studie, bleken nauwelijks of niet ($< 0.01\%$) in de biomassa terecht te komen.



Figuur 2.5: Overzicht van de onderzochte verbindingen met de grootste fractie in de aquatische biomassa.

2.4 Bruikbaarheid van de berekende partitioneringscoëfficiënten als inputdata voor het voorspellen van korte- en lange-termijn effecten

De partitioneringscoëfficiënten van de verschillende oliecomponenten over de verschillende milieucompartimenten die in sectie 2.2 werden berekend, zijn geldig voor case-studies en accidentele lozingen waarbij de grootte van de vlek en de diepte van de waterkolom gelijkend zijn aan het vooropgestelde standaard marien milieu (SMM) dat in Tabel 2.4 werd beschreven. Wijzigingen aan de dimensionering van het standaard marien milieu kan deze verdeling mogelijks significant doen wijzigen: de grootte van deze verschuivingen is echter afhankelijk van de fysisch-chemische eigenschappen van de desbetreffende component en van de verandering van het procentueel aandeel van de milieucompartimenten onderling.

Om deze effecten verder te onderzoeken, werd een realistische olieverontreiniging gesimuleerd op het Belgisch Continentaal Plat (BCP). De dimensionering van het milieu dat hierbij wordt onderzocht, wordt weergegeven in Tabel 2.86. De hoeveelheid zwevend stof (sediment) werd, naar analogie met het SMM, gelijkgesteld aan 1% van de hoeveelheid sediment. Voor de aquatische biomassa werd een waarde aangenomen van 0.01% van de totale waterkolom. Dit is een factor 10 hoger dan hetgeen werd gebruikt in het SMM. bij het SMM werd echter een diepere waterkolom in open zee vooropgesteld. De hoeveelheid aquatische biomassa op het BCP zal beduidend hoger liggen dan hetgeen in open zee wordt weergevonden.

In Tabel 2.86 wordt de dimensionering van het Standaard Marien Milieu eveneens weergegeven. Uit de vergelijking van de verschillende milieudimensies blijkt dat het SMM voornamelijk afwijkt wat de grootte van het luchtcompartiment betreft. Voor de simulatie van een olie verontreiniging op het BCP zijn, op uitzondering van het luchtcompartiment, alle dimensioneringen 2 tot 3 grootte-orde groter dan bij het SMM. Enkel het luchtcompartiment heeft een vergelijkbare grootte.

Er wordt nogmaals opgemerkt dat er bij de simulatie met het Mackay-Niveau 1 model wordt gewerkt met een onmiddellijke distributie van de component over de verschillende compartimenten (geen tijdslelement).

Als verontreinigingsbron gekozen voor een hoeveelheid van 10 m³ Fuel No.2 (10.000 kg). De hoeveelheden van de belangrijkste oliecomponenten die hierbij in het milieu terecht komen, worden weergegeven in Tabel 2.87 (zie hoofdstuk 3, Tabel 3.9).

Tabel 2.86: Dimensionering van een marien milieu voor een Case-study met een Fuel No.2 verontreiniging

Dimenisonering van de case-study		Input Mackay – Niveau 1	Olievlek- Case-Study	Standaard Marien Milieu
Hoogte van de luchtkolom	500 m	lucht	$7.5 \cdot 10^9 \text{ m}^3$	$6 \cdot 10^9 \text{ m}^3$
Diepte van de waterkolom	30 m	water	$4.5 \cdot 10^8 \text{ m}^3$	$7 \cdot 10^6 \text{ m}^3$
Oppervlakte van de vlek	15 km ²	sediment	$1.5 \cdot 10^6 \text{ m}^3$	$2.1 \cdot 10^4 \text{ m}^3$
Sediment top laag	10 cm	zwevend stof	$1.5 \cdot 10^4 \text{ m}^3$	$2.1 \cdot 10^2 \text{ m}^3$
		biomassa in het aquatisch milieu	$4.5 \cdot 10^4 \text{ m}^3$	$7 \cdot 10^1 \text{ m}^3$
		aerosol	1.2 m ³	1.2 m ³
		Organisch koolstof in het sediment (%)	4.0	4.0
		Organisch koolstof in het zwevend stof (%)	20	20
		vetgehalte van de aquatische biomassa	0.05	0.05

Tabel 2.87: Hoeveelheid (in kg) van de belangrijkste PAKs in 10 Ton No.2 fuel oil

Component	Hoeveelheid in 10 T No.2 fuel oil
Naftaleen	40
Fluoreen	36
Fenanthreen	4.29
Fluorantheen	0.37
Pyreen	0.41
Benzo[a]anthraceen	0.012
Chryseen	0.022
Benzo[a]pyreen	0.006
2-Methylnaftaleen	189
Dimethylnaftaleen	311

Voor 2-methylnaftaleen en dimethylnaftaleen werden onvoldoende fysisch-chemische gegevens weergevonden (dampdruk, oplosbaarheid) om een betrouwbare partitionering over de verschillende milieucompartimenten te berekenen (zie 2.2.16 en 2.2.27). Op basis van de beperkte beschikbare data (vergelijkbare Log K_{OW} en oplosbaarheid tussen naftaleen, 2-methylnaftaleen en dimethylnaftaleen)

kan echter worden verondersteld dat de partitionering van deze twee stoffen relatief goed zal overeenstemmen met de partitionering van naftaleen.

Tabellen 2.88 en 2.89 geven een overzicht van de berekende percentages van de desbetreffende stoffen die in de verschillende milieucompartimenten aanwezig zijn. Voor elke stof werden een (Tabel 2.89) of twee (Tabel 2.88) alternatieve scenario's gebruikt waardoor mogelijke verschuivingen ten opzichte van de oorspronkelijk berekende verdeling kunnen worden verklaard. In deze alternatieve scenario's worden de geschatte volumes lucht en/of aquatische biomassa van de olievlek-case study met een factor 10 verhoogd (lucht) of verlaagd (aquatische biomassa). Bij deze laatste werd zodoende een identieke volumeverhouding tussen de waterfractie en de aquatische biomassa fractie bekomen als in het oorspronkelijke Standaard Marien Milieu.

Tabel 2.88: Verdeling van drie vluchtige componenten van Fuel No.2 in functie van wijzigende dimensionering van één of meerdere milieucompartimenten.

	% in de lucht	% aan aerosolen	% in het water	% in het sediment	% aan zw.stof	% in biomassa
Naftaleen						
SSM	99.9	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01	<0.01
Case-Study-1	63.2	<0.01	29.0	7.3	0.23	0.28
Case-Study-2	63.3	<0.01	29.1	7.3	0.23	0.03
Case-Study-3	94.5	<0.01	4.3	1.1	0.03	<0.01
Fluoreen						
SSM	93.1	<0.01	2.42	4.33	0.14	0.02
Case-Study-1	19.3	<0.01	25.8	51.3	1.6	2.0
Case-Study-2	19.6	<0.01	26.3	52.2	1.6	0.2
Case-Study-3	71.0	<0.01	9.5	18.9	0.59	0.07
Fenanthreen						
SSM	53.3	0.15	10.3	35.0	1.09	0.15
Case-Study-1	2.0	<0.01	19.4	73.5	2.3	2.8
Case-Study-2	2.0	<0.01	19.9	75.4	2.4	0.29
Case-Study-3	17.0	<0.01	16.9	63.8	2.0	0.24

Case-Study-1: Dimensionering zoals weergegeven in Tabel x.x

Case-Study-2: Dimensionering zoals weergegeven in Tabel x.x, maar met 10x minder aquatische biomassa (cfr. SSM)

Case-Study-3: Dimensionering van Case-Study-2, maar met 10x meer luchtvolume

Tabel 2.89: Verdeling van Fuel No.2 componenten in functie van wijzigende dimensionering van één of meerdere milieucompartimenten.

	% in de lucht	% aan aerosolen	% in het water	% in het sediment	% aan zw.stof	% in biomassa
Benzo(a)anthraceen						
SSM	<0.01	0.41	1.5	94.8	3.0	0.40
Case-Study-1	<0.01	<0.01	1.3	92.3	2.9	3.5
Case-Study-2	<0.01	<0.01	1.3	95.3	3.0	0.36
Chryseen						
SSM	0.15	0.01	0.72	95.7	3.0	0.41
Case-Study-1	0.02	<0.01	0.63	92.9	2.9	3.5
Case-Study-2	0.02	<0.01	0.65	96.0	3.0	0.37
Benzo(a)pyreen						
SSM	<0.01	<0.01	0.74	95.9	3.0	0.41
Case-Study-1	<0.01	<0.01	0.65	92.9	2.9	3.5
Case-Study-2	<0.01	<0.01	0.67	96.0	3.0	0.37
Fluorantheen						
SSM	0.80	0.25	5.1	90.7	2.8	0.38
Case-Study-1	0.01	<0.01	4.5	89.3	2.8	3.4
Case-Study-2	0.01	<0.01	4.6	92.1	2.9	0.35
Pyreen						
SSM	0.71	12.4	4.7	79.4	2.5	0.34
Case-Study-1	0.01	0.19	4.7	88.9	2.8	3.4
Case-Study-2	0.01	0.20	4.8	91.7	2.9	0.35

Case-Study-1: Dimensionering zoals weergegeven in Tabel x.x

Case-Study-2: Dimensionering zoals weergegeven in Tabel x.x, maar met 10x minder aquatische biomassa (cfr. SSM)

Uit Tabel 2.88 blijkt dat er significante afnames worden vastgesteld in de procentuele hoeveelheden van naftaleen, fluoreen en fenanthreen die zich in de luchtfase bevinden. Afhankelijk van de fysicochemische karakteristieken van de stof, zal deze fractie zich voornamelijk naar de waterfase (naftaleen) of meer naar de sedimentfase (fluoreen, fenanthreen) verplaatsen. Reductie van de hoeveelheid biomassa resulteert enkel in een afname van het aandeel in dit compartiment tot op het niveau van de partitionering die in het SMM werd gevonden.

Zowel naftaleen, fluoreen als fenanthreen zijn zeer vluchtige stoffen met een hoge dampdruk. De grote procentuele reductie van het luchtcompartiment ten opzichte van de andere compartimenten (Olievlek-milieu vs. SMM) leidt tot een gereduceerde opslagcapaciteit van deze fase. Wanneer dit compartiment 1 grootte-orde groter wordt (Case-Study-3), leidt dit dan ook tot een belangrijke toename van de hoeveelheden van de desbetreffende stoffen die in dit compartiment aanwezig zijn.

Het Mackay model veronderstelt evenwicht tussen de verschillende fase's van een afgesloten systeem. In werkelijkheid is dit echter niet het geval: wind zorgt ervoor dat de lucht boven de olievlek continu wordt afgevoerd: het vooropgesteld volume in de case-study is dan ook geen realistische weergave van de werkelijkheid (stilstaande luchtkolom van 500m hoog tot een evenwicht wordt bereikt).

In Tabel 2.89 wordt de verdeling van de overige componenten van Fuel No.2 samengevat: ook hier wordt een grote relatieve reductie waargenomen van de hoeveelheid die zich in luchtfase bevindt. Procentueel betreft het echter steeds reductie van minder dan 1%. Ook wijzigingen van het aandeel dat zich in de waterige fase bevindt, zijn steeds kleiner dan 1% van de totale hoeveelheid.

De voornaamste toename wordt waargenomen bij de fractie die zich in de biomassa bevindt (Case-Study-1), en dit ten koste van de sedimentfractie. Wanneer de biomassa wordt teruggebracht naar de hoeveelheid die wordt gebruikt in het SMM (0.001% van het watervolume; Case-Study-2), wordt voor de niet-vluchtige stoffen een verdeling bekomen die vrij identiek is aan degene die werd berekend voor het SMM. De som van de sediment- en biomassafractie blijft echter vrij constant tussen de verschillende scenario's.

Conclusie

Voor niet-vluchtige stoffen worden een aantal beperkte verschuivingen vastgesteld wanneer de verhoudingen tussen dimensies van de verschillende milieucompartimenten worden gewijzigd: een toename van 1 grootte-orde van de aquatische biomassa leidt tot een toename van 2-3% van fractie die zich in dit compartiment bevindt. De belangrijkste trends in de verdeling blijven echter behouden.

Omdat in de case-study vooral de dimensionering van de luchtfase ten opzichte van de overige fases sterkt afwijkt van hetgeen in het SMM werd gebruikt, leidt dit wel tot belangrijke verschuivingen van de partitionering van vluchtige stoffen over de compartimenten.

Ook kan worden opgemerkt dat de hoeveelheid van een stof die in het milieu wordt gebracht, weinig tot geen invloed heeft op de procentuele verdeling van een stof: voor de verdeling van benzo(a)pyreen in het SMM werd een (standaard) input hoeveelheid van 100 kg gebruikt, daar waar bij de case-study slechts 6 g werd gebruikt (meer dan 5 grootte-orde). Desalniettemin werd een bijna identieke verdeling over de verschillende compartimenten waargenomen.

Uit deze analyse kan worden geconcludeerd dat de verdeling van de stoffen, zoals berekend en weergegeven in sectie 2.2, in grote lijnen weergeeft in welke milieucompartimenten een stof zich voornamelijk zal accumuleren.

HOOFDSTUK 3

INSCHATTING VAN LANGE TERMIJN EFFECTEN VAN CONTAMINANTEN IN HET MARIENE MILIEU

3.1 Inleiding

Voor de evaluatie en voorspelling van lange termijn effecten van vervuiling op mariene organismen wordt er, in tegenstelling tot bij het voorspellen van acute effecten, vooral gekeken naar de relatie tussen de interne concentratie van een contaminant en de daaruit volgende effecten zoals verminderde groei, reproductie en overleving. Bij acute toxiciteit is het voornamelijk de opgeloste (biobeschikbare) concentratie en de korte termijn interactie met essentiële biologische mechanismen die de effecten zullen bepalen. Voor de chronische effecten volstaat een dergelijke eenvoudige aanpak echter niet. Mede door de specifieke eigenschappen van de Noordzee (grootte, stromingen, fysische en biologische processen) zal de concentratie van een vervuilende stof relatief snel gereduceerd of geëlimineerd worden uit de waterkolom. Chronische effecten zullen zich dus voordoen op een tijdstip waarbij de opgeloste concentratie reeds is teruggebracht tot op een niveau gelijk aan dat van voor de verontreiniging. Het is daarom meer aangewezen om lange termijn effecten te relateren en te kwantificeren op basis van (permanente) inwendige concentraties.

Stoffen die op lange termijn het mariene systeem negatief beïnvloeden, moeten aan een aantal voorwaarden voldoen:

- Persistentie.

Van een stof die slechts gedurende een korte termijn aanwezig blijft in zijn toxische vorm (biotransformatie, eliminatie, biologische afbraak) kan worden verondersteld dat zij op lange termijn geen effecten zal veroorzaken. Deze hypothese houdt in dat een organisme welke een acute blootstelling overleeft, zich volledig zal kunnen herstellen en geen nadelige effecten op lange termijn zal ondervinden.

- Bioaccumulatief

Een contaminant dat niet bioaccumulatief is, zal op lange termijn geen effect kunnen veroorzaken omdat de stof noch inwendig, nog uitwendig aanwezig zal zijn.

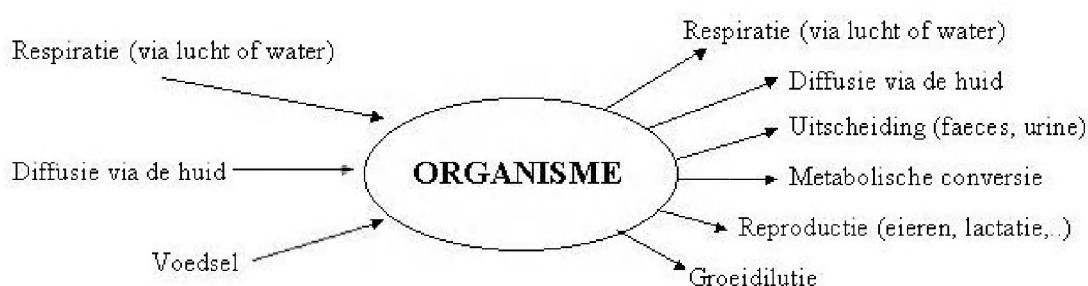
- Toxisch

Een stof die wel persistent en bioaccumulatief is maar geen toxische werking uitoefent, zal logischerwijs niet aan de basis kunnen liggen van effecten op lange termijn.

Er moet worden vastgesteld dat voor een grondige evaluatie van de lange termijn effecten van de meeste stoffen in het aquatisch milieu er te weinig monitoring of experimentele data voorhanden zijn (Mackay & Fraser, 2000).

3.1.1 Processen die de inwendige concentratie van een organisme bepalen

De inwendige concentratie van een stof, en meer specifiek een contaminant, wordt bepaald door een aantal opname- en eliminatieprocessen. Deze verschillende processen worden weergegeven in Figuur 3.1:



Figuur 3.1: Opname- en eliminatieprocessen die de inwendige concentratie van een contaminant mee bepalen (Mackay & Fraser, 2000).

Er zijn drie belangrijke opname processen. De eerste is de opname van chemicaliën als nevenproces bij de zuurstofopname (respiratie). Deze opname is meestal het gevolg van passieve diffusie, maar kan ook een actief gebeuren zijn (metalen, sommige anorganische verbindingen). Ook (passieve) diffusie via de huid kan een opnameroute van contaminanten zijn, maar dit mechanisme wordt minder belangrijk naarmate het organisme groter is. Tot slot is er de opname via het voedsel (doorvergiftiging via de voedselketen).

Diffuse processen die de opname van een stof beïnvloeden, spelen eenzelfde rol bij de eliminatie van diezelfde stof (respiratie, diffusie via de huid). Hiernaast zijn er echter nog andere processen die kunnen leiden tot een reductie van de interne concentratie: verlies via urine en feces, metabolische conversie van de stof (afbraak, biotransformatieprocessen in de maag en de lever) of een relatieve afname van de interne concentratie door groei (groeidilutie). Tot slot kan er voor vrouwelijke organismen nog een verlies van de stof optreden door reproductie. Dit laatste betekent wel een 'opname' van een contaminant door de nakomelingen.

Elk van deze processen is 1) stof-specifiek en 2) species-specifiek. Dit maakt een universele aanpak van het voorspellen van de interne concentratie uitermate moeilijk. Samengevat kan worden gesteld

dat voor het modelleren van de interne concentratie bij een organisme moet bepaald worden welk van deze processen hierbij een significante rol speelt. De beschikbaarheid van data met betrekking tot deze processen zal mee bepalen of dergelijke modellen een empirische dan wel mechanistische aanpak zullen hebben. Empirische modellen zijn voornamelijk gebaseerd op de relatie tussen de bioconcentratiefactor (BCF) of de bioaccumulatiefactor enerzijds en de K_{OW} anderzijds. Mechanistische modellen zijn massabalansen waarin al de verschillende opname- en eliminatieprocessen zijn gekwantificeerd. Hoewel deze laatste modellen het voordeel hebben dat zij effecten van groeidilutie en stofspecifieke metabolische processen kunnen incorporeren en potentieel kunnen leiden tot de beste predicties, vereist het ontwikkelen van dergelijke modellen voor een organisme een uitgebreide kennis van zowel de onderzochte stof als van het organisme (respiratiesnelheden, voedselpatronen en voedselassimilatieprocessen, absorptie-efficiënties...)

3.1.2 Empirische modellen

Empirische modellen maken gebruik van correlaties tussen de inwendige concentratie van een stof in een aquatisch organisme en de fysisch-chemische eigenschappen van een stof (Neely et al., 1974). Hierbij wordt gebruik gemaakt van een aantal begrippen die door Gobas & Morrison (2000) als volgt worden gedefinieerd:

Bioconcentratie: De opname (absorptie) van een chemische verbinding uit het water door een organisme resulteert in een inwendige concentratie die hoger is dan de concentratie in het water. Hierbij wordt enkel rekening gehouden met de opname via respiratie en de huid, en niet via voedsel. De bioconcentratiefactor (BCF) is de verhouding tussen de inwendige concentratie in een organisme (biota) C_B en de opgeloste concentratie in de waterkolom C_{WD} . Er wordt niet gerekend met de totale concentratie in de waterkolom (C_{WT}) omdat wordt verondersteld dat enkel de opgeloste fractie van een stof biobeschikbaar is voor het organisme.

$$BCF: C_B/C_{WD}$$

Bioaccumulatie: deze term wordt gedefinieerd als de toename van de inwendige concentratie ten opzichte van de uitwendige concentratie waarbij alle opnameroutes in beschouwing worden genomen. Bioaccumulatie kan dus worden beschouwd als een combinatie van bioconcentratie en opname via het voedsel. De bioaccumulatiefactor (BAF) is de verhouding tussen de inwendige concentratie in een organisme (biota) C_B en de opgeloste concentratie in de waterkolom C_{WD} (cfr. BCF):

$$BAF = C_B/C_{WD}$$

Biomagnificatie: biomagnificatie is een speciale vorm van bioaccumulatie waarbij de inwendige concentratie van een stof in een organisme hoger ligt dan de inwendige

concentratie in zijn voedsel. De biomagnificatiefactor (BMF) is de verhouding tussen de inwendige concentratie van een organisme C_B en de inwendige concentratie van zijn voedselbron C_A :

$$BMF = C_B/C_A$$

De eenheden waarin deze ratio's worden uitgedrukt zijn kg/L, maar wanneer wordt aangenomen dat de dichtheid van een organisme gelijk is aan dat van water, zijn zowel de BCF, BAF en de BMF dimensieloos.

K_{OW} : de K_{OW} is de octanol-water partiticoëfficiënt van een stof. Van hydrofobe organische verbindingen wordt verondersteld dat zij voornamelijk worden opgeslagen in de vet-fractie van het organisme. Hierbij wordt aangenomen dat de oplosbaarheid van een contaminant in vet of octanol zijn vergelijkbaar, en wordt de K_{OW} gebruikt als een maat voor de oplosbaarheid van een stof in vet (lipiden).

Conclusie

Samengevat kan worden gesteld dat de empirische bepaling van de interne concentratie van een contaminant uitgevoerd kan worden op basis van de $\log K_{OW}$. De BCF moet echter worden berekend op basis van de opgeloste concentratie in de waterkolom en niet op basis van de totale concentratie. Deze laatste brengt ook een niet-biobeschikbare fractie in rekening en leidt tot onnodige variabiliteit bij de interpretatie en predictie van de interne bioconcentratie. Een methode die toelaat een schatting van de biobeschikbare fractie te berekenen op basis van het zwevend stof gehalte en de organische koolstof concentratie wordt beschreven door Gobas & Morrison (2000).

Bij empirische methode wordt geen rekening gehouden met 'transfer' snelheden (opname, eliminatie, biotransformatie). Deze aanpak heeft tot gevolg dat predicties voor stoffen met een hoge K_{OW} -waarde minder accuraat zullen zijn als gevolg van vertraagde diffusie en verminderde biobeschikbaarheid in de waterkolom (Mackay & Fraser, 1999). Ook worden metabolische processen bij de empirische aanpak niet in rekening gebracht. Beide factoren kunnen dan ook leiden tot een overpredictie van de interne concentratie.

3.1.3 Mechanistische modellen

In de literatuur zijn er reeds een aantal mechanistische modellen beschreven die de bioconcentratie van een stof bepalen op basis van verschillende opname- en eliminatieprocessen. Een aantal van deze modellen wordt hieronder beschreven:

- Barber et al. (1991) ontwikkelden een model voor vissen waarbij de bioconcentratie van niet-metaboliseerbare organische stoffen (PCBs) werd berekend op basis van de fysisch-chemische eigenschappen van de stof, en op basis van de ecologische, morfologische en gedetailleerde fysiologische eigenschappen (structuur van de kieuwen) van de vis. Het FDETS-model (Food and Gill Exchange of Toxic Substances) werd toegepast op een aantal vissoorten in een onderzoek naar de opname van PCBs in Lake Ontario (Canada/USA).
- Thomann (1992) ontwikkelde een voedselwebmodel dat ook rekening houdt met de interactie van sedimenten op de bioaccumulatie van chemicaliën. Het model bestaat uit vijf biologische compartimenten waaronder bentische invertebraten. De hoeveelheid van een contaminant dat een organisme opneemt ook hier is afhankelijk van de octanol-water partitie coëfficiënt waarbij een stijgende K_{OW} leidt tot een toenemende assimilatie van de stof door voedselopname. In dit model leiden hoge $\log K_{OW}$ -waarden (>6.5) tot een afname in de chemische assimilatie (afname van de BCF). De eliminatie van een chemische stof (excretie) wordt bepaald door de opnamesnelheid constante en eveneens door de K_{OW} .
- Gobas (1993) ontwikkelde een steady-state model dat de bioaccumulatie in individuele organismen en eenvoudige aquatische voedselketens beschrijft. Het model berekent de bioaccumulatie van hydrofobe organische verbindingen in verschillende trofische niveaus op basis van de biobeschikbare milieuconcentraties, de opname via het voedsel (opnamesnelheid, absorptie-efficiëntie) en de excretiesnelheid welke werd vastgelegd op $\pm 25\%$ van de opnamesnelheid via het voedsel. Het model is gebaseerd op verschillende submodellen die met elkaar zijn verbonden door voedselpreferentie parameters.
- Tot slot zijn er de ‘fugacity-based’ modellen van Clark et al. (1990) en Campfens & Mackay (1997) die opname- en eliminatieprocessen beschrijven voor vissen en andere organismen. Deze modellen maken gebruik van ‘fugacity’ factoren (opnamesnelheden en D-verlieswaarden) voor het beschrijven van de verschillende processen.

Hoewel deze modellen een realistisch beeld geven van de verschillende processen, verliezen zij vaak aan nauwkeurigheid doordat de gevraagde input gegevens niet steeds voorhanden zijn en er dus gewerkt moet worden met een aantal vooropstellingen. Het model dat voorgesteld werd Gobas (1993) beschrijft de opname van een contaminant via water en voedsel op basis van de volgende parameters:

- k_1 : respiratorische opnamesnelheidsconstante
- k_2 : respiratorische eliminatiesnelheidsconstante
- k_A : voedselconsumptie snelheidsconstante
- k_M : metabolische snelheidsconstante
- k_E : excretie snelheidsconstante.

Onder een toestand van steady-state geeft dit:

$$k_1 \cdot C_{WD} + k_A \cdot C_A = C_B \cdot (k_2 + k_M + k_E)$$

Voor de meeste stoffen en organismen in het mariene milieu zijn nauwelijks of geen data voorhanden met betrekking tot deze parameters. Het voorspellen van interne concentraties op basis van een dergelijke mechanistische aanpak is dan ook niet evident. De BAF kan als volgt worden weergegeven (Mackay & Fraser, 2000):

$$BAF = CB/CWD = (k_1 + k_A \cdot C_A / C_{WD}) / (k_2 + k_M + k_E) \quad (X)$$

Deze methode houdt geen rekening met mogelijke groeidilutie of verliezen via de reproductie. Nichols et al. (1998) stelden echter vast dat bij de beekforel verliezen via voortplanting verwaarloosbaar zijn ten opzichte van andere eliminatieprocessen.

Wanneer in de hierboven beschreven Vergelijking X zowel de voedselopname als het verlies door excretie en metabolische processen wordt verwaarloosd, de volgende vereenvoudiging wordt bekomen:

$$CB = CWD \cdot (k_1/k_2)$$

en waarbij (k_1/k_2) kan worden gelijkgesteld aan de BCF.

Conclusie

Het voorspellen van de interne concentratie van een chemische verbinding in een organisme is, op basis van de huidige wetenschappelijke stand van zaken, niet evident. Empirische modellen zijn in staat om interne concentraties in organisme relatief nauwkeurig te schatten op basis van de octanol-water partitie coëfficiënt. Een dergelijke benadering voor het voorspellen van lange termijn effecten in de Noordzee houdt echter geen rekening met de additionele bijdrage via de voedselketen. Daarom wordt geopteerd voor het ontwikkelen van een model dat de interne concentratie als volgt beschrijft:

$$\text{Interne concentratie} = f(K_{OW}) + V$$

waarbij $f(K_{OW})$ staat voor de bioconcentratie op basis van de octanol/water partitie coëfficiënt en V de bijdrage via de voedselketen (doorvergiftiging) beschijft.

3.2 Het Lange-Termijn Effecten Model (LTEM) voor de Noordzee

Een model dat in staat is om lange-termijn effecten van sublethale concentraties te voorspellen, kan in twee belangrijke delen worden opgesplitst. In een eerste fase moet worden berekend wat de interne concentratie van een contaminant in een organisme is wanneer het gedurende een zekere periode wordt blootgesteld aan dit contaminant. In een tweede fase wordt deze (maximale) interne concentratie vertaald naar een lange termijn effect, en meer bepaald naar een reductie in levensverwachting.

Omdat er momenteel zeer weinig data voorhanden zijn, wordt er in de verschillende stappen van het LTEM gewerkt met assumpties die steeds een ‘worst-case’ inhouden. Met andere woorden, de voorspellingen die met het LTEM worden uitgevoerd zullen in principe niet leiden tot onderschattingen van de werkelijke effecten in het veld.

3.2.1 STAP 1: Berekening van de interne concentratie van een contaminant

Zoals vermeld in paragraaf 3.1.1 kan de opname van een contaminant worden opgesplitst in twee belangrijke routes:

- opname via het water: bioconcentratiefactor (BCF_{water}) die empirisch kan worden berekend op basis van de K_{OW} .
- opname via het voedsel

Beide opname routes en hoe deze in het LTEM worden geïncorporeerd wordt hieronder besproken.

3.2.1.1 Opname via het water: BCF_{water}

De opname van een contaminant via het water kan vrij eenvoudig worden berekend:

$$C_{\text{intern}} = C_{\text{WD}} * BCF * \%L$$

met:

C_{intern} : interne concentratie van de contaminant in een organisme

C_{WD} : de opgeloste concentratie van de contaminant

BCF: de bioconcentratiefactor

$\%L$: de vetfractie van het organisme

Voor de meeste organismen en chemische verbindingen is de exacte bioconcentratiefactor niet gekend. In de literatuur zijn er echter een aantal extrapolatiemethodes voorgesteld die toelaten op de BCF te schatten op basis van de $\log K_{OW}$. In het LTE-Model werd gekozen voor de empirische vergelijkingen die werden opgesteld door Meylan et al. (1999).

In paragraaf 3.3.1 wordt de K_{OW} , de gebruikte Meylan-vergelijking en de BCF voor de belangrijkste contaminanten die vrijkomen in het marien milieu bij accidentele olielozingen weergegeven. Ook wordt er een overzicht gegeven van verschillende andere extrapolatietechnieken voor het schatten van de BCF en/of het schatten van een log K_{OW} . Deze afgeleide BCF wordt in het model gebruikt voor zowel fytoplankton, zooplankton, epibenthos en de vissen.

Het gebruik van eenzelfde BCF voor de verschillende groepen organismen is gebaseerd op de veronderstelling dat a) de oplosbaarheid van een contaminant in octanol representatief is voor de oplosbaarheid in vetten voor alle organismen en b) dat het vetpercentage in de verschillende organismen vrij identiek zijn aan elkaar. Wanneer er echter specifieke vetpercentages gekend zijn, kan er steeds een species-specifieke BCF worden berekend.

Deze vergelijkingen laten dus toe om, op basis van een opgeloste concentratie, een interne concentratie te berekenen. Het gebruik van deze BCF veronderstelt wel dat er vrij snel een evenwicht wordt bereikt tussen de opgeloste concentratie in de waterkolom en de interne concentratie. Uit de literatuur blijkt dat er voor bepaalde stoffen inderdaad vrij snel een evenwicht wordt bereikt. Zo werd bij copepoden (*Schizopera knabeni* en *Coullana* sp.) blootgesteld aan fluorantheen in minder dan 12h een evenwicht bereikt in de weefsels (Lotufo, 1998a). Bij grotere organismen en stoffen met een log $K_{OW} > 5$ zal het bereiken van een evenwicht iets langer duren (Mackay et al., 1992). Bij de amphipood *Hyaella azteca* werd tijdens een blootstelling aan fluorantheen de maximale interne lichaamsconcentratie bereikt na 1 dag (Kane Driscoll et al., 1997).

In realiteit zal er bij een olieverontreiniging in het marien milieu de concentratie in de waterkolom voortdurend wijzigingen ondergaan onder invloed van diverse fysisch-chemische processen. Ook wordt verondersteld dat de blootgestelde organismen geen ontwikkelingsgedrag vertonen (migratie naar andere dieptes of naar niet-vervulde locaties) en dat de opnamesnelheden van de diverse contaminanten voor de verschillende biota gelijk zijn. Momenteel zijn dit soort data voor de meeste organismen en contaminanten niet voorhanden. De benadering die hier wordt voorgesteld moet dus worden aanzien als een worst-case scenario, waarbij de voorspelde interne concentraties als gevolg van opname via het water in sommige gevallen beduidend lager kunnen liggen dan de werkelijke interne concentraties.

In het huidige model (zie Tabel 3.3) wordt de vetfractie in alle mariene organismen gelijk gesteld aan 0.05 (=5% van het totale lichaamsgewicht). Dit vetgehalte werd eveneens vooropgesteld in het Mackay-model bij de berekeningen van de distributie van organische verbindingen over verschillende milieucompartimenten (Hoofdstuk 2, Tabel 2.5). Wanneer er species-specifieke vetconcentraties gegevens voorhanden zijn, kunnen deze de veronderstelde waarde van 5% vervangen. Zo rapporteerde Borga et al. (2001) gemeten vetgehalten van copepoden (1.45%), Euphaucia (6.35%), amphipoden (3.35%) de Noordse kabeljauw (7.1%) en de gewone kabeljauw (3.8%). Uit deze beperkte dataset

blijkt echter dat een algemeen vetgehalte van 5% een goede schatting is voor een algemeen gemiddelde over de verschillende trofische niveaus.

3.2.1.2 Opname via het voedsel

Voor een aantal organische verbindingen is reeds duidelijk aangetoond dat zij via het voedsel worden doorgegeven naar hogere trofische niveau's en aldus een bijdrage leveren aan de totale interne concentratie. Voorbeelden hiervan zijn de accumulatie van benzo(a)pyreen in de mossel *Mytilus edulis* afkomstig van de alg *Isochrysis galbana* (Okay et al., 2000) en de opname van fluorantheen door de rotifeer *Brachionus plicatilis* via begrazing op dezelfde algensoort (Wolfe et al. 2000).

Voor het berekenen van de bijdrage die wordt geleverd door de opname via het voedsel, wordt er gedeeltelijk gebruik gemaakt van de benadering die door Gin et al. (2001) werd voorgesteld bij het ontwikkelen van een "oil spill-food chain" interactie model.

In een eerste fase is het echter noodzakelijk op een (vereenvoudigd) representatief voedselweb voor het Noordzee-ecosysteem op te stellen.

3.2.1.2.1 Definieren van een representatief voedselweb voor de Noordzee

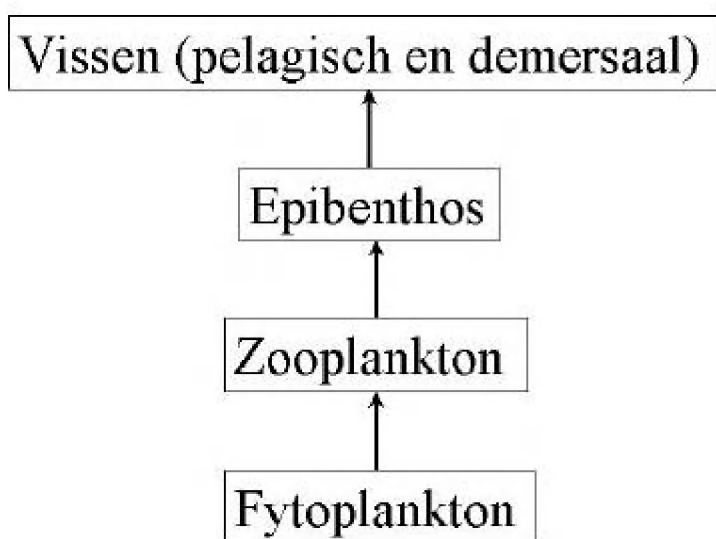
In het Biologisch SubEffecten Model (BESM; Vandenbroele et al., 1997), dat werd ontworpen voor het inschatten van de ecologische en economische korte-termijn gevolgen van accidentele olie/chemische stoflozingen, werd het mariene ecosysteem onderverdeeld in verschillende biota op basis van hun ecologisch en economisch belang. Dezelfde groepen werden behouden als basis voor het ontwerpen van een vereenvoudigd voedselmodel voor de Noordzee:

- Fytoplankton
- Zoöplankton
- Epibenthos
- Vissen (demersaal en pelagisch).

Het hoofdprincipe van een voedselketen is dat energie (onder de vorm van voedsel) wordt doorgegeven van het ene niveau naar de andere, waarbij de energieconversie (als gevolg van een groot aantal biologische processen) tussen de 10-20% bedraagt. Het aantal schakels in de voedselketen is in het algemeen dan ook klein, gewoonlijk niet meer dan 5 (De Wolf, 1990): in een dergelijke keten zal een primaire productie van 100 resulteren in een productie van 0.01 bij het hoogste niveau.

Samen met het voedsel (energie) worden er ook contaminanten - voornamelijk deze die zijn opgeslagen in de lipiden - mee doorgegeven naar de verschillende niveaus van de voedselketen. De mate waarin deze contaminanten door de predator worden opgeslagen wordt weergegeven door de assimilatiefactor a .

In Figuur 3.2 wordt een voedselketen op basis van de vijf hierboven vernoemde groepen biota voorgesteld. Deze voorstelling van een marien voedselweb is analoog aan het voedselweb dat door Gin et al. (2001) werd gebruikt voor het inschatten van de impact van olieverontreiniging in kustwateren. In dit model werd gebruik gemaakt van een eenvoudig model volgens het schema: fytoplankton → zooplankton → kleine vissen → grote vissen, en met de kleinere subketen: benthos → kleine vissen.



Figuur 3.2: Vereenvoudigd voedselmodel voor de Noordzee.

Het is evident dat de het voorgestelde voedselweb een sterke vereenvoudiging is van de realiteit en met een aantal factoren geen rekening houdt:

Diversiteit binnen de verschillende groepen biota:

Elk van de voorgestelde groepen bestaat in werkelijkheid uit een grote variatie aan verschillende species waarbij de samenstelling van elke groep als gevolg van seizoenen en locatie in de Noordzee voortdurend aan wijzigingen onderhevig is.

Wijzigingen in species-specifieke voedselpatronen:

Het bovenstaand schema houdt in dat een bepaald organisme gedurende zijn ganse leven een vergelijkbaar voedingspatroon vertoont. In realiteit kunnen er belangrijke wijzigingen optreden naarmate een organisme ouder wordt: zo zal een jonge kabeljauw zich voornamelijk voeden met zoöplankton, maar dit dieet zal op termijn verschuiven naar sedimentair levende wormen en uiteindelijk zullen andere vissen een belangrijke voedselbron worden. Deze verschillen kunnen ook

species-specifiek zijn: sommige copepoden (bv. *Calanus*) zijn planteneters, terwijl andere soorten zich voeden met algen (vb. *Acartia*) of ander zooplankton (*Oithona*).

Voedseldiversiteit:

Aansluitend bij de voorgaande bemerking moet ook worden vermeld dat het schema uit figuur 3.2 veronderstelt dat alle organismen zich voeden met organismen uit slechts 1 biotagroep: in realiteit hebben de meeste organismen verschillende voedingsbronnen uit verschillende groepen.

Sub-voedselweb binnen een biota-groep:

Een dergelijk fenomeen kan worden waargenomen wanneer een bepaalde species de juvenielen van een ander groep als voedselbron heeft, en vice versa.

Het in rekening brengen van alle bovenvermelde parameters in een voedselweb is met de huidige kennis van het Noordzee ecosysteem een onmogelijke taak: voor het beschrijven en modelleren van de voortdurende temporele en spatiale verandering die zich in een dergelijk complex ecosysteem voordoen, zijn er momenteel veel te weinig data voorhanden. Er werd dan ook besloten om bij de inschatting van lange termijn effecten van contaminanten op verschillende groepen biota gebruik te maken van het van het voedselweb zoals voorgesteld in Figuur 3.2.

3.2.1.2.2 Berekenen van de bijdrage door voedselopname tot de totale interne concentratie van een contaminant in de verschillende trofische niveaus

In de procedure die werd voorgesteld door Gin et al. (2000) wordt de opname via het voedsel berekend op basis van de interne concentratie van de prooi (C_P), de assimilatie-efficiëntie a en de vet-specifieke opnamesnelheid I_L . De vetspecifieke opnamesnelheid kan worden gedefinieerd als kg vet (lipiden) in de prooi per kg vet in de rover per seconde. De assimilatie-efficiëntie is de verhouding tussen de geabsorbeerde en ingenomen hoeveelheid van een contaminant. De tijdsdimensie in de parameter I_L laat toe om de opgenomen hoeveelheid van een contaminant te laten variëren in functie van de blootstellingsperiode (p). De verschillende parameters die de opname via het voedsel bepalen worden hieronder voorgesteld. De data die voor de verschillende parameters door Gin et al. (2000) werden gebruikt, zijn gebaseerd op literatuurdatabank van Chapra (1997), Connolly (1991), Thomann & Mueller (1987) en Thomann & Connolly (1992) :

Interne concentratie van de prooi.

Voor het fytoplankton is de interne concentratie gelijk aan $BCF \cdot C_{WD} \cdot \%L$. Voor de andere niveau's in het voedselweb komt hier nog een bijdrage via het voedsel bij: $C_P \cdot a \cdot I_L \cdot p$.

Assimilatie-efficiëntie

Zeer weinig data zijn voorhanden omtrent de assimilatie-efficiëntie van organische contaminanten voor de verschillende trofische niveaus in het marien milieu. Gin et al. (2001) gebruikten een a-waarde van 0.5 voor alle trofische niveaus bij een simulatie van hun model met anthraceen. Dit wil zeggen dat 50% van de ingenomen hoeveelheid anthraceen via het voedsel daadwerkelijk in het organisme wordt opgeslagen. Deze waarde wordt in het huidige model gebruikt als ‘default’ waarde voor de contaminanten waarvoor deze gegevens niet voorhanden zijn.

Vetspecifieke opnamesnelheid I_L

De vet-specifieke opnamesnelheid is een maat voor de transfer van lipiden tussen de verschillende trofische niveau's van het voedselweb. Op basis van literatuurgegevens (Connolly, 1991; Thomann en Connolly, 1992) werden door Gin et al. (2001) een aantal opnamesnelheden tussen de verschillende trofische niveaus gedefinieerd die in hun “oil spill-food chain” interactie model werden geïncorporeerd (Tabel 3.1).

Tabel 3.1: Vetspecifieke opnamesnelheden (I_L) tussen verschillende trofische niveaus (Gin et al., 2001).

Rover → Prooi	I_L (vetspecifieke opnamesnelheid) (s^{-1})
Zooplankton → Fytoplankton	1.782×10^{-6}
Kleine vissen → Zooplankton	1.852×10^{-7}
Grote vissen → Kleine vissen	6.713×10^{-8}
Benthische invertebraten → Fytoplankton	3.805×10^{-6}

Bij het lange-termijn effecten model (LTEM) wordt er gebruik gemaakt van een analoge voedselwebstructuur waarbij er, op basis van de literatuurgegevens vermeld in Tabel 3.1, analoge I_L -waarden worden gebruikt. De voedselrelaties tussen de verschillende trofische niveaus en de gebruikte I_L -waarden worden in Tabel 3.2 weergegeven.

Tabel 3.2: Vetspecifieke opnamesnelheden (I_L) tussen verschillende trofische niveaus in het chronische BSEM

Rover → Prooi	I_L (vetspecifieke opnamesnelheid) (s^{-1})
Zooplankton → Fytoplankton	1.782×10^{-6}
(Epi)benthos → Zooplankton	1.852×10^{-7}
Vissen → Epibenthos	6.713×10^{-8}

Voor het vastleggen van de I_L -waarden voor de verschillende relaties werd het (epi)benthos in het LTEM gelijk gesteld aan de kleine vissen in het model voorgesteld door Gin et al. (2001). Algemeen kan worden gesteld dat I_L afneemt naarmate de grootte van de rover toeneemt.

Blootstellingsperiode

Onder blootstelingsperiode wordt de periode verstaan waarin een organisme via het voedsel een contaminant zal opnemen. Omdat het fytoplankton aan de basis van de voedselketen ligt en de generatietijd vrij kort is (< 1 dag), kan worden aangenomen dat de accumulatieperiode in het fytoplankton, gelijk is aan de periode waarin de contaminant in het milieu aanwezig is. Na deze periode zal er geen accumulatie meer optreden en zal ook geen transfer van de contaminant via het voedsel naar het zooplankton of benthos optreden.

De transfer van contaminant vanuit het zooplankton naar het (epi)benthos zal worden beëindigd wanneer de ‘gecontamineerde’ populatie is geconsumeerd, en dus is vervangen werd door een niet-gecontamineerde populatie die zich heeft gevoed op niet gecontamineerd fytoplankton.

Deze periode komt overeen met de blootstellingsperiode + de generatietijd van zooplankton. Omdat tijdens de periode na de blootstellingsperiode geleidelijk aan het percentage niet-gecontamineerd zooplankton zal toenemen, wordt de uiteindelijke periode waarin gecontamineerd voedsel wordt verbruikt gelijkgesteld aan de periode waarin het contaminant aanwezig is + (generatietijd)/2.

Op basis van gekende generatietijden van verschillende soorten zooplankton wordt een gemiddelde generatietijd van 1 week vooropgesteld. Zo reproduceren sommige rotifeer soorten reeds na 1 dag terwijl de generatietijd van copepoden meer dan 10 kan bedragen. zoals eerder vermeld is het echter onmogelijk om een werkbaar voedswebmodel te modelleren dat rekening houdt met de specifieke eigenschappen (generatietijd, voedselpreferentie,...) van elke species.

Tot slot is er de transfer van contaminanten naar de vissen toe, waarbij op analoge manier als bij het zooplankton, de opnameperiode afhankelijk is van de generatietijd van het (epi)benthos. Een gemiddelde generatietijd van 2 maanden (60 dagen) wordt aangenomen voor de species in dit trofisch niveau.

Tabel 3.3 geeft een overzicht van de verschillende vergelijkingen die worden gebruikt voor de bepaling van de interne concentratie op de verschillende trofische niveau's van de voedselketen in de Noordzee.

Tabel 3.3: Bepaling van de interne concentratie van een contaminant voor verschillende trofische niveaus in het Noordzee-ecosysteem.

FYTOPLANKTON $C_{\text{fyto}} = \text{BCF} * C_{\text{WD}} * \%L$ met: BCF berekend op basis van K_{OW} (Meylan et al., 1999) C_{WD}: opgeloste (biobeschikbare) concentratie van het contaminant $\%L$ = vetfractie in het organisme : 0.05
ZOOPLANKTON $C_{\text{zoo}} = (\text{BCF} * C_{\text{WD}} * \%L) + (C_{\text{fyto}} * a * I_L * p)$ met: BCF berekend op basis van K_{OW} (Meylan et al., 1999) C_{WD}: opgeloste (biobeschikbare) concentratie van het contaminant $\%L$ = vetfractie in het organisme: 0.05 a = assimilatie-efficiëntie : 0.5 I_L = vetspecifieke opnamesnelheid: $1.782 \times 10^6 \text{ s}^{-1} = 1.540 \times 10^{-1} \text{ d}^{-1}$ p = periode waarin contaminant in het milieu aanwezig was
(EPI)BENTHOS $C_{\text{epib}} = (\%L * \text{BCF} * C_{\text{WD}}) + (C_{\text{zoo}} * a * I_L * (p + g/2))$ met: BCF berekend op basis van K_{OW} (Meylan et al., 1999) C_{WD}: opgeloste (biobeschikbare) concentratie van het contaminant $\%L$ = vetfractie in het organisme: 0.05 a = assimilatie-efficiëntie : 0.5 I_L = vetspecifieke opnamesnelheid: $1.822 \times 10^7 \text{ s}^{-1} = 1.574 \times 10^{-2} \text{ d}^{-1}$ p = periode waarin contaminant in het milieu aanwezig was g = generatietijd van het zooplankton = 7 dagen
VISSEN $C_{\text{pel.v}} = (\%L * \text{BCF} * C_{\text{WD}}) + (C_{\text{epib}} * a * I_L * (p + g/2))$ met: BCF berekend op basis van K_{OW} (Meylan et al., 1999) C_{WD}: opgeloste (biobeschikbare) concentratie van het contaminant $\%L$ = vetfractie in het organisme: 0.05 a = assimilatie-efficiëntie : 0.5 I_L = vetspecifieke opnamesnelheid: $6.713 \times 10^8 \text{ s}^{-1} = 5.800 \times 10^{-3} \text{ d}^{-1}$ p = periode waarin contaminant in het milieu aanwezig was g = generatietijd van het epibenthos = 60 dagen

Wanneer er voldoende data voor een bepaald organisme en/of contaminant beschikbaar zijn, kunnen de vooropgestelde waarden worden aangepast. De huidige aanpak maakt het ook mogelijk om, indien nodig, de bijdrage van opname via het voedsel op te splitsen in functie van verschillende

voedselbronnen Zo zal de interne concentratie van een epibenthos-species dat zich zowel voedt met algen (20%) als met zooplankton (80%) eenvoudig worden aangepast: $C_{\text{epib}} = (\%L * BCF * C_{\text{WD}}) + (0.2 * V_{\text{fyt}}) + (0.8 * V_{\text{zoo}})$, met V_{fyt} en V_{zoo} de respectievelijke bijdrage van de interne contaminant concentratie door opname van fytoplankton en zooplankton.

Een mogelijke bron van fouten is de veronderstelling dat er een snel evenwicht is tussen de externe en interne concentratie van de contaminant: indien er tijdens de blootstellingsperiode geen evenwicht wordt bereikt, zal de voorspelde BCF een overschatting zijn en dus leiden tot interne concentraties die hoger zijn dan hetgeen door het model wordt voorspeld. Mits de nodige data voorhanden zijn, is het mogelijk om in de toekomst een limiterende term in de vergelijking op te nemen die de toename van de BCF in functie stelt van de blootstellingsperiode.

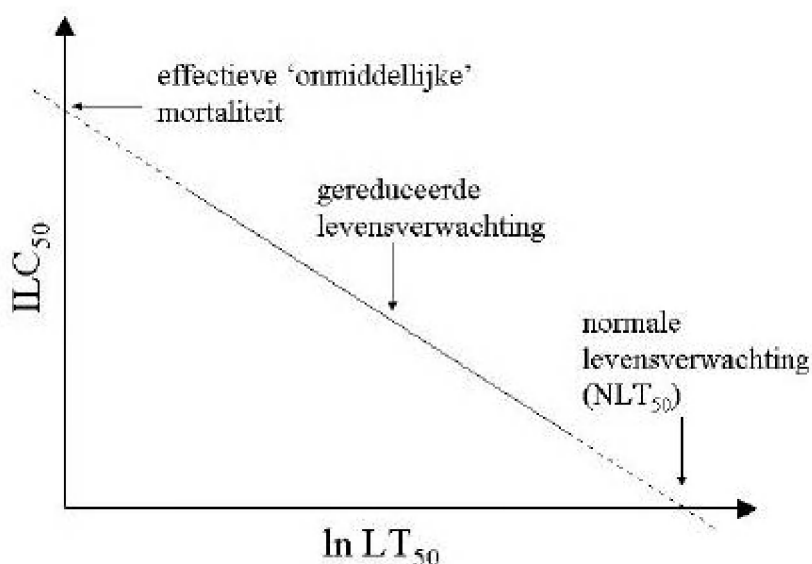
3.2.2 STAP 2: Inschatten van lange-termijn effecten op basis van de interne lichaamsconcentratie

Momenteel zijn er zeer weinig studies uitgevoerd waarbij de chronische toxiciteit (effecten op groei en reproductie) van organische verbindingen bij mariene species wordt bestudeerd en wordt gerelateerd aan de interne concentratie. Een groot aantal organische verbindingen, waaronder de gechloroerde waterstofcarbonaten, zijn niet-specifieke toxicanten voor aquatische organismen (Veith et al., 1983), waarvan de toxiciteit wordt veroorzaakt door de accumulatie van deze stoffen in de vetfractie (Connell & Markwell, 1992; McCarty et al., 1992). Door hun persistentie vormen zij dan ook een potentieel lange-termijn risico, ondermeer door mogelijke verstoring van het endocrien systeem (Berganon et al., 1994). De interne concentratie in de vetfractie kan dus worden beschouwd als één van de belangrijkste parameters voor het inschatten en voorspellen van chronische toxiciteit van niet-specifieke toxicanten, daar waar de externe concentratie meer geschikt is voor het bepalen van acute toxiciteit (McCarty & Mackay, 1993; Sijm et al., 1993). Experimentele data suggereren dat er voor persistente lipofiele verbindingen een vergelijkbare interne letale concentratie (ILC) en een letale volume fractie (LVF) bestaat (McCarty et al., 1991, 1992; Berganon et al., 1994). Dit werd ondermeer voor vissen aangetoond, waarbij een ILC van 2.0 tot 8.0 mmol/kg werd weergevonden voor verschillende organische verbindingen (Van Hoogen & Opperhuizen, 1988; Sijm et al., 1993).

Deze ILC is bovendien niet constant, maar is een functie van de blootstellingsperiode. Dit werd ondermeer aangetoond voor vissen (*Pocilia reticulata*) blootgesteld aan aromatische amines (De Wolf et al., 1991, 1992), en voor de krab *Portunus pelagicus* blootgesteld aan chlorobenzenen (Mortimer & Connell, 1994). tot slot werd door De Maagd et al. (1997) voor de vis *Pimephales promelas* een toename van de 'time-to-death' in functie van een toenemende interne concentratie van naftaleen en trichlorobenzeen waargenomen.

Op basis van deze bevindingen werd door Yu et al. (1999) onderzoek verricht naar de relatie tussen de ILC van organische verbindingen en de blootstellingsperiode bij aquatische organismen.

De relatie “blootstellingsperiode versus ILCs” die door deze onderzoekers werd gevonden, wordt in Figuur 3.3 weergegeven.



Figuur 3.3: Relatie tussen de interne lethale concentratie en de levensverwachting van een organisme.

De X-as geeft de natuurlijke logaritme weer van de blootstellingsperiode ($\ln T$). De Y-as geeft de gemiddelde interne letale concentratie voor een organisme weer. Tussen beide parameters werd door Yu et al. (1999) een lineair verband weergevonden:

$$ICL_{50} = a \cdot \ln LT_{50} + b$$

Uit figuur 3.3 blijkt dat een ILC_{50} van 0 (interne concentratie gelijk aan 0) overeenkomt met een LT_{50} die overeenkomt met de gemiddelde normale levensverwachting van een organisme (snijpunt met de X-as). De gemiddelde overleving in natuurlijke condities is gekend voor de meeste organismen en wordt aangeduid als de NLT_{50} . Deze parameter is onafhankelijk van de onderzochte organische verbinding. Het snijpunt met de Y-as geeft de interne concentratie weer die leidt tot een onmiddellijke sterfte. Deze concentratie kan experimenteel niet worden bepaald omwille van de tijdsperiode die steeds nodig is opdat de desbetreffende verbinding het ‘target’ weefsel (vetfractie) heeft bereikt. Via extrapolatie is het echter wel mogelijk om deze concentratie theoretisch te bepalen.

Wanneer voor een organische verbinding het bovenstaand lineair verband tussen de ILC_{50} en de $\ln LT_{50}$ gekend is, kan de gereduceerde levensverwachting van een organisme worden berekend op basis

van de interne concentratie van die component. Deze gereduceerde levensverwachting kan dan worden beschouwd als een indicator voor de lange-termijn-effecten van een contaminant.

De methode beschreven door Yu et al. (1999) is vergelijkbaar met CBR-methode (Critical Body Residue; kritische lichaamsconcentratie) die reeds door verschillende auteurs werd beschreven (Landrum et al., 1991, 1992, 1994; McCarty & Mackay, 1993; Van Wezel & Opperhuizen, 1995). Met deze methode wordt voorspeld dat de molaire weefselconcentratie die een toxisch effect veroorzaakt (vb. mortaliteit) gelijk is voor alle organische verbindingen met eenzelfde toxisch werkingsmechanisme, en dat deze concentratie bovendien vrij constant is voor verschillende organismen (Lotufo, 1998b). Er wordt tevens aangenomen dat de CBR-methode in staat is om sublethale effecten (verstoring van biologische functies zoals voedselopname, energiemetabolisme en reproductie) van niet-polaire organische verbindingen (bv. PAKs) te voorspellen (Donkin et al., 1989; Widdows & Donkin, 1989; Emery & Dillon, 1996). Zo is reeds aangetoond dat blootstelling aan PAKs leidt tot een afname van de voedselopnamesnelheid van aquatische invertebraten (Donkin et al., 1989; Eeertman et al., 1995; Lotufo, 1997); een effect dat kan worden gerelateerd aan de bioaccumulatie van organische verbindingen met een narcotische werking (Van Wezel & Opperhuizen, 1995).

De meeste studies met betrekking tot de effecten van verhoogde interen lichaamsconcentraties van een stof, beschouwen mortaliteit op korte of middel-lange termijn als eindpunt. De zeer beperkte hoeveelheid data voor andere eindpunten (vb. reproductie) en blootstellingsperiodes (chronische toxiciteitsdata) leiden er dan ook toe dat voorspellingen van lange-termijn effecten steeds een grote onzekerheid met zich mee hebben. Er wordt aangenomen dat de CBR die leidt tot chronische effecten $\pm$ een groote-orde lager ligt dan de CBR die leidt tot (acute) mortaliteit (McCarthy & Mackay, 1993).

3.3 Bepaling van bioconcentratiefactoren (BCF) van de belangrijkste oliecomponenten

De bioconcentratiefactor van organische verbindingen moet voor de meeste oliecomponenten worden bepaald met behulp van extrapolatietechnieken. Voor een aantal verbindingen zijn er weliswaar BCFs voorhanden die werden bepaald op basis van gemeten interne concentraties, maar het is niet steeds mogelijk om de betrouwbaarheid van deze waarden correct in te schatten. Factoren zoals blootstellingsperiode, meetmethode, de concentratie van de verbinding in de waterkolom (opgelost vs. totaal; nominaal vs. gemeten) zijn een aantal belangrijke parameters die in meer of mindere mate de gerapporteerde BCF kunnen beïnvloeden. Bovendien kan de BCF inter- en intraspecies specifiek zijn. Voor het ontwikkelen van een algemeen LTE-Model werd dan ook gekozen voor het gebruik van een ‘standaard’ BCF voor alle trofische niveaus. De BCFs werden berekend op basis van de $\log K_{OW}$.

3.3.1 Extrapolatiemethodes voor het berekenen van de BCF

Een aantal auteurs hebben een aantal lineaire regressies tussen de $\log BCF$ en de $\log K_{OW}$ voorgesteld op basis van gemeten interne en externe concentraties van verschillende chemicaliën:

$$\log BCF = 0.542 \times \log K_{OW} + 0.124$$

(Neely et al., 1974: experimenten uitgevoerd met de regenboogforel *Oncorhynchus mykiss*)

$$\log BCF = 0.854 \times \log K_{OW} - 0.70 \quad (R^2 = 0.897)$$

(Veith et al., 1979: experimenten uitgevoerd met *Pimephales promelas*)

Op basis van de laatste dataset ontwikkelde Mackay (1982) een meer eenvoudige relatie:

$$\log BCF = \log K_{OW} - 1.32$$

welke ook kan geschreven worden als

$$BCF = 0.048 \times \log K_{OW}$$

De coëfficiënt 0.048 kan worden beschouwd als de effectieve octanol concentratie in het organisme, of ook wel de effectieve vetfractie van het organisme (4.8%).

Al deze correlaties werden ontwikkeld op basis van een beperkt aantal experimenten met verschillende stoffen. De nodige voorzichtigheid moet dan ook worden gehanteerd wanneer deze correlaties worden gebruikt voor het voorspellen van interne concentraties van andere stoffen.

Recentelijk werd door Meylan et al. (1999) een meer getetailleerde methode voorgesteld voor het voorspellen van interne concentraties op basis van de K_{OW} . Deze methode houdt ondermeer rekening met het feit dat zeer hydrofobe verbindingen ($K_{OW} > 10^6$) niet meer blijken te beantwoorden aan de hierboven beschreven empirische relaties door de verlaagde biobeschikbaarheid van deze verbindingen enerzijds, en het niet in rekening brengen van metabolische conversie anderzijds. Op basis van data van 694 verschillende chemicaliën werden een algemene vergelijking weergevonden:

$$\log BCF = 0.86 \times \log K_{OW} - 0.39$$

Een verdere opsplitsing van de data in functie van de $\log K_{OW}$ en het type verbinding leidde tot verschillende empirische relaties:

Niet-ionische verbindingen:

Tabel 3.4 geeft de verschillende empirische vergelijkingen weer voor niet-ionische verbindingen, en dit in functie van hun $\log K_{OW}$.

Tabel 3.4: Empirische vergelijkingen voor het berekenen van een BCF bij niet-ionische verbindingen

$\log K_{OW} < 1$	$\log BCF = 0.50$
$\log K_{OW}$ van 1 tot 7	$\log BCF = 0.77 \cdot \log K_{OW} - 0.70 + SF_i$
$\log K_{OW} > 7$	$\log BCF = 1.37 \cdot \log K_{OW} + 14.4 + SF_i$
$\log K_{OW} > 10.5$	$\log BCF = 0.50$

Hierin vertegenwoordigt F_i een reeks van 11 correctiefactoren in functie van de structurele eigenschappen van de verbinding. De gebruikte correctiefactoren zijn weergegeven in Tabel 3.5, en worden 1 keer toegevoegd wanneer een bepaalde structuur één of meerdere keren aanwezig is in de desbetreffende verbinding..

Tabel 3.5: Correctiefactoren bij de empirische schatting van de BCF

Correctie factor	waarde
Verbindingen met een aromatische s-triazine ring	-0.32
Verbindingen met een aromatische alcohol (vb. fenol) met twee of meerdere halogenen gebonden aan de aromatische ringstructuur	-0.40
Verbindingen met een aromatische ring waarop een tert-butyl groep is gebonden in otho-positie ten opzichte van een OH-groep	-0.45
Verbindingen met een aromatische ring en een alifatisch alcohol onder de vorm van $-CH-OH$ (vb. benzylalkohol)	-0.65
Fosfaatesters, $O=P(O-R)(O-R)(O-R)$, waarbij R staat voor koolstof (); 1 R mag een waterstofatoom zijn in plaats van een koolstofatoom.	-0.78
Keton met 1 of meerdere aromatische verbindingen	-0.84
Niet-ionische verbindingen met een alkylketen met 8 of meer CH_2 -groepen	-1.00
	log K_{OW} van 4 tot 6
	-1.5
	log K_{OW} van 6 tot 10
Verbindingen die een cyclopropyl ester bevatten onder de vorm $cylcopropyl-C(=O)-O-$ (vb. permethrin)	-1.65
Verbindingen met een fenantreen ring	+0.48
Bifenyl verbindingen met meerdere halogenen en polyaromaten met enkel aromatisch koolstof en halogenen (vb. PCBs)	+0.62
Organometallische verbindingen met tin of kwik	+1.40

Ionische verbindingen (carboxyl zuren, S-zuren en zouten, sommige stikstofverbindingen):

Tabel 3.6 geeft de verschillende empirische vergelijkingen weer voor ionische verbindingen, en dit in functie van hun log K_{OW} .

Tabel 3.6: Empirische vergelijkingen voor het berekenen van een BCF bij ionische verbindingen

Log $K_{OW} < 5$	Log BCF = 0.50
Log K_{OW} van 5 tot 6	Log BCF = 0.75
Log K_{OW} van 6 tot 7	Log BCF = 1.75
Log K_{OW} van 7 tot 9	Log BCF = 1.00
Log $K_{OW} > 9$	Log BCF = 0.50

Tin- en kwikverbindingen:

Predicties van de bioconcentratiefactoren van tin- en kwikverbindingen met een log $K_{OW} < 1$ bleken steeds onderschattingen te zijn van de werkelijke BCF. Daarom werd voor deze groep van verbindingen een minimum log BCF van 2.0 vastgelegd.

Aromatische azo-verbindingen:

Op basis van waargenomen log BCFs werd de log BCF voor dit type van verbindingen vastgelegd op 1.0. Beschikbare data toonden immers aan dat de log BCF van deze verbindingen varieert tussen 0.48 en 1.82, terwijl log K_{OW} s van -0.02 tot 9.55 werden gevonden.

De voorgestelde relaties door Meylan et al. (1999) blijken een grotere R^2 te hebben dan deze gerapporteerd door andere auteurs. Deze relaties hebben ook het voordeel dat zij:

- zijn gebaseerd op een uitvoerige dataset;
- metabolische conversie toelaten;
- de afname in BCF voorspellen wanneer de log K_{OW} hoger is dan 7.

In deze studie werd eveneens nagegaan in welke mate het molecuulair gewicht of de pK_a een invloed hebben op gevonden correlaties tussen de log BCF en de log K_{OW} , maar additionele incorporatie van deze parameters leidde niet tot een significante verbetering van de gevonden correlaties.

Hoewel Meylan et al. (1999) gebruik maakte van BCFs die werden gemeten verschillende vissoorten, werden toch duidelijke relaties tussen deze BCF en de log K_{OW} weergevonden. Ook werden de data

niet gecorrigeerd in functie van de vetfractie van de verschillende organismen. Een dergelijke normalisatieprocedure zou mogelijke interspecies variabiliteit elimineren.

3.3.2 Extrapolatiemethode voor het berekenen van de K_{OW}

Voor het berekenen van een BCF op basis van de formules van Meylan et al. (1999) is het noodzakelijk om de octanol-water partitiecoëfficiënt van de desbetreffende verbinding te kennen. Voor sommige stoffen is deze waarde echter niet gekend en moet deze parameter op zijn beurt worden afgeleid op basis van andere, gekende fysisch-chemische eigenschappen.

Verschuieren (1996) heeft verschillende extrapolatiemethodes voor het berekenen van de $\log K_{OW}$ zijn weergegeven in Verschueren (1996). Een eerste methode is gebaseerd op relaties tussen de $\log K_{OW}$ en andere $\log K$ -waarden.:

$$\log K_{tolueen} = 1.135 \times \log K_{octanol} - 1.777 \quad (r=0.980)$$

$$\log K_{cyclohexaan} = 1.035 \times \log K_{octanol} + 0.896 \quad (r=0.972)$$

Een tweede extrapolatiemethode is gebaseerd op de oplosbaarheid van een verbinding in water (Chiou et al, 1977; Verschueren, 1996). Afhankelijk van de eenheid waarin de oplosbaarheid is uitgedrukt, geeft dit:

$$\log K_{octanol} = 5.00 - 0.670 \times \log S \quad (S \text{ in } \mu\text{mol/L})$$

$$\log K_{octanol} = 7.5 - 0.75 \times \log S \quad (S \text{ in } \mu\text{mol/L})$$

Tot slot kan de $\log K_{OW}$ worden afgeleid op basis van aanwezige functionele groepen. De bijdrage p van een functionele groep is relatief constant voor verschillende verbindingen en kan relatief eenvoudig worden afgeleid: $p_X = \log K_X - \log K$

Zo geldt dus voor Cl- dat

$$\pi_{Cl} = \log K_{OW, chlorobenzene} - \log K_{OW, benzeen}$$

Tabel 3.7 geeft de verschillende $\log K$ s voor benzeen en benzeenderivaten. Tabel 3.8 geeft een overzicht van de p -waarden van de belangrijkste functionele groepen bij alifatische en aromatische verbindingen.

Tabel 3.7: Invloed van functionele groepen op de log K_{OW} van benzeenderivaten (Verschuieren, 1996).

Derivaat	Functionele groep	log K_{OW}	p_x
benzeensulfonzuur	-SO ₃ H	-2.25	-4.38
benzeensulfonamide	-SO ₂ NH	0.31	-2.44
aniline	-NH ₂	0.90	-1.23
fenol	-OH	1.46	-0.67
benzaldehyde	-COH	1.48	-0.65
benzonitril	-CN	1.56	-0.57
benzoic zuur	-COOH	1.87	-0.28
nitrobenzeen	-NO ₂	1.85/1.88	-0.28
benzeen	--	2.13	--
fluorobenzeen	-F	2.27	+0.14
thiofenol	-SH	2.52	+0.39
tolueen	-CH ₃	2.80	-0.67
chlorobenzeen	-Cl	2.84	+0.71
bromobenzeen	-Br	2.99	-0.86
iodobenzeen	-I	3.25	-1.12
difenyl	-C ₆ H ₅	3.60	-1.47
difenylether	-O-C ₆ H ₅	4.21	+2.08

Tabel 3.8: p-waardes van de belangrijkste functionele groepen bij alifatische en aromatische verbindingen (Verschuieren, 1996)

Functionele groep	p-waarde bij aromatische verbindingen	p-waarde bij alifatische verbindingen
NH ₂	1.23	-1.19
I	1.12	1.00
S-CH ₃	0.61	0.45
COCH ₃	-0.55	-0.71
CONH ₂	-1.49	-1.71
Br	0.86	0.60
CN	-0.57	-0.84
F	0.14	-0.17
Cl	0.71	0.39
COOH	-0.28	-0.67
OCH ₃	-0.02	-0.47
OC ₆ H ₅	2.08	1.61
N(CH ₃) ₂	0.18	-0.30
OH	-0.67	-1.16
NO ₂	-0.28	-0.85
CH ₂	0.50	0.50

Deze drie methoden laten toe om voor de meeste stoffen een KOW-waarde te berekenen indien deze waarde niet voorhanden is. Op basis van de berekende KOW kan dan een BCF worden afgeleid.

3.3.3 Berekening van BCFs voor 32 organische verbindingen

Op basis van de hiervoor beschreven extrapolatietechnieken en relaties kunnen er voor de belangrijkste organische olie-verbindingen theoretische bioconcentratiefactoren worden berekend. Hierbij wordt gebruik gemaakt van $\log K_{OW}$ (P_{OW}) waarden en of/de oplosbaarheid in water van de desbetreffende component zoals in de literatuur is weergegeven. De naslagwerken die werden gebruikt voor het bekomen van de nodige fysisch-chemische data zijn:

- Verschueren, 1996. Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 3th edition.
- Chemiekaarten, 13^{de} Editie, 1998.
- Report: Ambient Water Quality criteria for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs). Ministry of Environment, Lands and Parks, Province of British Columbia, 1993.
- Technical Memorandum: Preliminary Selection of Candidate Petroleum Hydrocarbons as Surrogates for Ecological Risk Evaluation of THP. foster Wheeler environmental corporation. Prepared for Project Oversight Group Duwamish Brownfields/ THP Project, 1997.
- Guidelines for Assessing and Managing Petroleum Hydrocarbon Contaminated Sites in New Zealand.

De berekende BCFs worden ook vergeleken met waarden die in de literatuur zijn gerapporteerd (Verschueren, 1996; Technical Support Document for Exposure assessment and Stochastic Analysis, Appendix H: Fish Bioconcentration Factors, 2000; literatuurgegevens).

Tabel 3.9 geeft een overzicht van de belangrijkste organische verbindingen en hun concentraties in ruwe olie ('Kuwait crude') en twee afgeleide destillaten (No 2. fuel oil, Bunker C residual oil) die, op basis van hun concentratie en toxiciteit, potentieel kunnen bijdragen tot de degradatie van het mariene milieu.

Daarnaast werden nog een aantal andere stoffen geïdentificeerd die eveneens in het marien milieu kunnen vrijkomen bij accidentele lozingen. De verbindingen die in het kader van de huidige studie eveneens werden weerhouden op basis van hun toxiciteit en/of de beschikbaarheid van chemische en toxiciteitsdata, zijn samengevat in Tabel 3.10.

Voor elk van deze stoffen werd de theoretische BCF berekend, gebruik makend van de vergelijkingen voorgesteld door Meylan et al. (1999). Zoals eerder vermeld, steunt deze methodologie op de waargenomen relatie tussen de BCF en de octanol/water partitiecoëfficiënt. Tabel 3.11 geeft een overzicht van de partitiecoëfficiënten voor elk van onderzochte verbindingen in deze studie. Zoals blijkt uit Tabel 3.11 zijn er voor een aantal verbindingen verschillende log K_{OW} -waarden gepubliceerd, waarbij de onderlinge variatie voor eenzelfde verbinding meer dan 1 log-eenheid kan bedragen (vb: benzeen). Voor die verbindingen werd dan ook besloten een gemiddelde van de K_{OW} -waarden te berekenen en deze waarde te gebruiken voor de berekening van de theoretische BCF. Voor de verbindingen waar de verschillen in log K_{OW} minder dan 0.1 eenheid bedroeg, werd de waarde gebruikt uit Verschueren (1996). De log K_{OW} -waarden die in deze studie werden gebruikt, zijn weergegeven in de laatste kolom van Tabel 3.11.

Tabel 3.9: de Voornaamste PAK-concentraties in verschillende olieën.

Component	Kuwait crude	No. 2 fuel oil	Bunker C residual oil
	(µg/g)	(µg/g)	(µg/g)
Naftaleen	400	4000	1000
1-Methylnaftaleen	500	8200	2800
2-Methylnaftaleen	700	18900	4700
Dimethylnaftaleen	2000	31100	12300
Trimethylnaftaleen	1900	18400	8800
Fluoreen	<100	3600	2400
Fenanthreen	26	429	482
1-Methylfenanthreen	-	173	43
2-Methylfenanthreen	89	7677	828
Fluorantheen	2.9	37	240
Pyreen	4.5	41	23
Benzo[a]anthraceen	2.3	1.2	90
Chryseen	6.9	2.2	196
Benzo[b]fluorantheen	<1		
Benzo[k]fluorantheen	<1		
Benzo[a]pyreen	2.8	0.6	44
Peryleen	<0.1	-	22
Benzo[ghi]peryleen	<1		

Tabel 3.10: Andere organische verbindingen die in het marien milieu kunnen vrijkomen bij (accidentele) olielozingen.

Acenaptheen	Heptaan
Acenaphyleen	Hexaan
Anthraceen	Tolueen
Benzeen	o-Xyleen
Cyclohexaan	m-Xyleen
Diphenyl	p-Xyleen
Ethylbenzeen	

Tabel 3.11: Samenvatting van log K_{OW}-waarden uit de literatuur en de log K_{OW}-waarden die in deze studie worden gebruikt

	Bron 1	Bron 2	Bron 3	Bron 4	Bron 5	Log K _{OW} deze studie
Acenafteen	3.98	3.92 – 4.43				3.98
Acenaphyleen	4.07	4.07				4.07
Anthraceen	4.5	4.45		4.54		4.5
Benzeen		2.64 - 2.73	1.9	2.13	2.13	2.42 (Average)
Benz(a)anthraceen	5.63	5.61		5.91		5.74 (Average)
Benz(b)fluorantheen	6.04	6.57		5.8		6.26 (Average)
Benz(k)fluorantheen		6.84		6		6.60 (Average)
Benz(ghi)peryleen	6.78	7.23		6.5		6.94 (Average)
Benz(a)pyreen	6.06	6.04		6.04		6.04
Chryseen	5.63	5.61		5.79		6.05 (Average)
Cyclohexaan		--	3.4	3.44	3.44	3.44
Dibenz(ah)anthraceen	6.86	5.97				6.61 (Average)
Dimethylnaftaleen						4.42
Diphenyl		3.16 – 4.09	3.8			3.83 (Average)
Ethylbenzeen		3.15	3.2			3.15
Fenanthreen	4.46	4.46		4.57		4.46
Fluorantheen	4.90	5.33		5.22		5.18 (Average)
Fluoreen	4.18	4.18 – 4.38				4.18
Heptaan		4.66	4.7	5	4.66	4.66
Hexaan		4.00	3.5		3.90	3.85 (Average)
1-Methylnaftaleen		3.84 – 3.87				3.85
2-Methylnaftaleen						3.85
1-Methylfenanthreen						4.86
2-Methylfenanthreen		4.86				4.86
2-Methylpentaan		2.77				2.77
Naftaleen	3.37	3.01 – 3.45	3.3			3.28 (Average)
Nonaan						
Octaan						
Peryleen		6.12 – 6.50		6.25		6.25
n-propylbenzeen		3.57-3.68				3.60
Pyreen	4.88	5.32		5.18		5.16 (Average)

Tabel 3.11: vervolg.

Tolueen	2.69	2.7	2.73	2.70
o-xyleen	2.77	2.8	3.12	2.93 (Average)
m-xyleen	3.20	3.2	3.20	3.20
p-xyleen	3.15	3.2	3.12	3.15

Bronnen:

1: Report: Ambient Water Quality criteria for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs). Ministry of Environment, Lands and Parks, Province of British Columbia, 1993.

2: Verschueren, 1996.

3: Chemiekaarten, 1998.

4: Technical Memorandum: Preliminary Selection of Candidate Petroleum Hydrocarbons as Surrogates for Ecological Risk Evaluation of THP. Foster Wheeler environmental corporation. Prepared for Project Oversight Group Duwamish Brownfields/ THP Project, 1997.

5: Guidelines for Assessing and Managing Petroleum Hydrocarbon Contaminated Sites in New Zealand

*: extrapolatie op basis van de log K_{OW} van 1-methylnaphtaleen

Voor dimethylnaftaleen werd geen log K_{OW} waarde teruggevonden. De waarde die in Tabel 3.11 voor deze verbinding wordt weergegeven, werd berekend op basis van de extrapolatiemethode voorgesteld door Verschueren (1996), waarbij de log K_{OW} waarde van een derivaat wordt berekend op basis van a) de log K_{OW} -waarde van een analoge verbinding en b) correctiefactor(en) voor additionele functionele groepen. Voor dimethylnaftaleen geeft dit de volgende vergelijking:

$$\log K_{OW, \text{dimethylnaftaleen}} = \log K_{OW, \text{methylnaftaleen}} + \pi_{CH_3}$$

De correctiefactor voor de methylgroep werd afgeleid uit een analoge relatie tussen de log K_{OW} -waardes van naftaleen en methylnaftaleen (Tabel 3.11):

$$\log K_{OW, \text{methylnaftaleen}} = \log K_{OW, \text{naftaleen}} + \pi_{CH_3}$$

of $\pi_{CH_3} = 3.85 - 3.28 = 0.57$, waaruit volgt dat de log $K_{OW, \text{methylnaftaleen}}$ gelijk is aan 4.42 ($3.85 + 0.57$).

Ook voor de verbindingen 2-methylnaftaleen en 1-methylfenanthreen werden er in de literatuur geen log K_{OW} -waarden gevonden. Er werd echter aangenomen dat deze waarden gelijk zijn aan de respectievelijk gevonden waarden voor 1-methylnaftaleen en 2-methylfenanthreen.

De waarden die in de laatste kolom van Tabel 3.11 zijn weergegeven, werden gebruikt voor de berekening van een theoretische bioconcentratiefactor. Voor al deze verbindingen kon dezelfde formule worden toegepast: $\log BCF = 0.77 * \log K_{OW} - 0.70 + SFi$ (Meylan et al, 1999; zie Tabel 3.4). Met uitzondering van de fenanthreenverbindingen, is de correctiefactor SFi steeds gelijk aan 0.

Voor de fenanthreenverbindingen is SF_i gelijk aan 0.48. Tabel 3.12 geeft de berekende BCF's voor de verschillende organische verbindingen weer. De laagste BCF wordt waargenomen bij benzeen (15), daar waar benzo(ghi)peryleen de organische verbinding is die (theoretisch) het sterkst bioaccumuleert (44040).

Tabel 3.12: Theoretische bioconcentratiefactoren voor 32 organische verbindingen

Acenafteen	232	Dibenzo(ah)anthraceen	24530	2-Methylfenanthreen	3270
Acenaftyleen	272	Dimethylnaftaleen	505	Naftaleen	67
Anthraceen	582	Difenyl	177	Peryleen	12960
Benzeen	15	Ethylbenzeen	53	Phenanthreen	1638
Benzo(a)anthraceen	5246	Fluorantheen	1944	n-propylbenzeen	118
Benzo(b)fluorantheen	13190	Fluoreen	330	Pyreen	1876
Benzo(k)fluorantheen	24100	Heptaan	773	Tolueen	24
Benzo(ghi)peryleen	44040	Hexaan	184	o-xyleen	36
Benzo(a)pyreen	8929	1-Methylnaftaleen	184	m-xyleen	58
Chryseen	9089	2-Methylnaftaleen	184	p-xyleen	53
Cyclohexaan	89	1-Methylfenanthreen	3270		

3.4 Bepaling van ICL-curves voor 32 organische verbindingen

In principe is het relatief eenvoudig om voor verschillende contaminanten en biotische groepen de relatie tussen $\ln LT_{50}$ en de ILC_{50} te bepalen: door de lineariteit van deze relatie zijn in principe slechts 2 datapunten vereist:

- de natuurlijke levensverwachting van een organisme
- de interne concentratie die voor een gekende blootstellingsperiode leidt tot 50% mortaliteit.

Zoals eerder vermeld is de natuurlijke levensverwachting van de meeste organismen vrij goed gekend. De determinatie van een tweede datapunt is afhankelijk van beschikbare data in de literatuur. Indien er voor een organische verbinding geen LC_{50} -waarden (uitgedrukt als interne concentratie) beschikbaar zijn, is het mogelijk deze waarde te voorspellen op basis van acute/chronische toxiciteitsdata uitgedrukt als opgeloste concentratie. In de meeste gevallen worden acute toxiciteitstesten uitgevoerd zonder toevoeging van voedsel, waardoor kan worden aangenomen dat de interne concentratie die 50% mortaliteit veroorzaakt enkelen alleen wordt bepaald door opname via het water (BCF_{water}):

$$C_{biota} = BCF * C_{WD} * \%L$$

met:

C_{biota} : inwendige concentratie van het contaminant bij een organisme dat 50% mortaliteit veroorzaakt bij een welbepaalde blootstellingsduur

BCF: berekend op basis van K_{OW} (Meylan et al., 1999)

C_{WD} : opgeloste (biobeschikbare) concentratie van het contaminant

$\%L$: vetfractie in het organisme : 0.05

Met deze gegevens kan de relatie $ILC_{50} - \ln LT_{50}$ worden afgeleid welke op haar beurt toelaat de gereduceerde levensverwachting te berekenen voor elke interne concentratie.

Deze benadering laat toe om een vrij betrouwbare schatting te krijgen van de lange-termijn effecten op basis van een zeer beperkte hoeveelheid acute en/of chronische toxiciteitsdata. Initieel werd getracht om op basis van QSARs (Quantitative Structure Activity Relationships) en AARs (Activity-Activity Relationships) ontbrekende lange-termijn toxiciteitsdata te genereren, maar door de de uiterst beperkte hoeveelheid beschikbare en betrouwbare data zou een dergelijke aanpak leiden tot te veel onzekerheden met betrekking tot de werkelijke effecten.

De huidige voorgestelde benadering laat toe om voor elke stof en elke biotische groep een eenvoudige vergelijking op te stellen die, in functie van de beschikbaarheid van nieuwe toxiciteitsdata, gemakkelijk kan worden aangepast door het wijzigen van de helling en/of de snijpunten met de assen.

Toepassing: bepaling van de $ILC_{50} * \ln T_{50}$ relatie voor cyclohexaan.

Ter illustratie wordt de hierboven beschreven methodologie toegepast op beschikbare toxiciteitsdata voor cyclohexaan (zie ook paragraaf 4.6.7).

De BCF voor cyclohexaan bedraagt 89 (zie Tabel 3.12) en werd afgeleid op basis van een log K_{OW} van 3.44. De volgende toxiciteitsdata voor de verschillende trofische niveaus werden in de literatuur weergevonden:

Zooplankton:

Artemia salina: 24h- EC_{50} : 7.308 mg/L

Epibenthos:

Crangon franciscorum: 24h- LC_{50} : 3.4 mg/L

Crangon franciscorum: 96h- LC_{50} : 2.4 mg/L

Vissen:

Lepomis macrochirus: 24h- LC_{50} : 42.33 mg/L

Lepomis macrochirus: 48h- LC_{50} : 40.60 mg/L

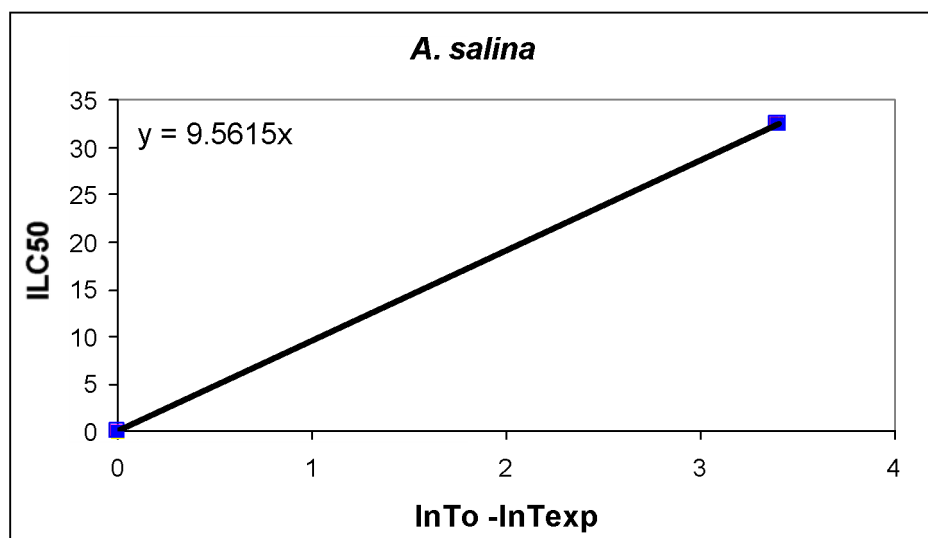
Lepomis macrochirus: 96h- LC_{50} : 34.72 mg/L

In Tabel 3.13 wordt de berekening van de verschillende interne concentraties weergegeven die overeenkomen met de gerapporteerde effect-concentraties. Hierbij wordt steeds aangenomen dat de blootstellingsduur lang genoeg was voor het verkrijgen van een evenwicht tussen de inwendige en uitwendige cyclohexaan concentratie. Op basis van de berekende interne concentraties kan vervolgens de relatie tussen ILC_{50} en $\ln T_{50}$ worden opgesteld. Voor de gemiddelde levensverwachting van de species wordt de standaardwaarde van hun trofisch niveau aangenomen. De ILC_{50} werd berekend op basis van de vergelijking $C_{biota} = BCF * C_{WD} * \%L$.

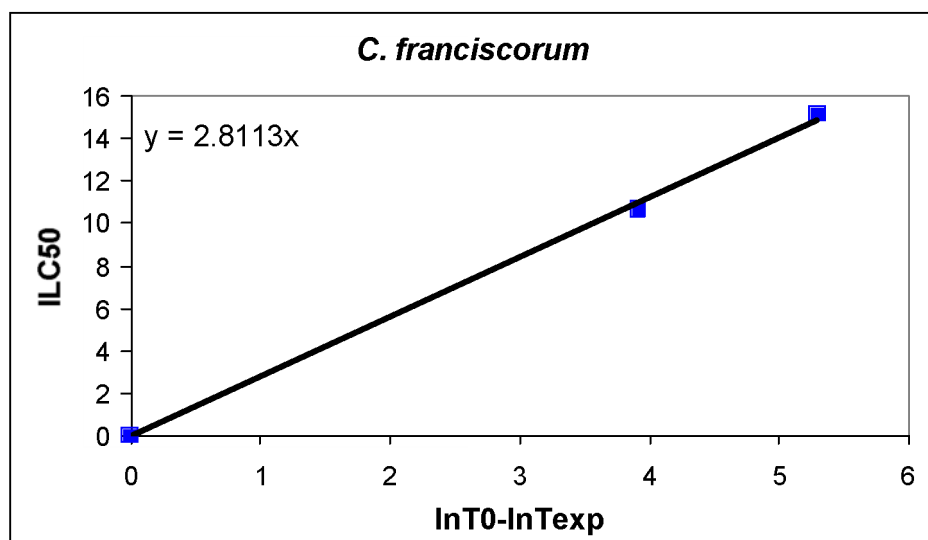
Tabel 3.13: Bepalen van de ILC_{50} - $\ln T_{50}$ relaties van drie species voor cyclohexaan.

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	ln Texp	EC ₅₀ (µg/L)	ln T (ln T ₀ – ln Texp)	ILC ₅₀ (mg/kg)
Referentie punt (=snijpunt door de oorsprong)	T ₀	ln T ₀	0	0	0
ZOOPLANKTON : BCF=89, T₀ = 720 h					
<i>A. salina</i>	24	3.1781	7308	3.4012	32.52
EPIBENTHOS: BCF = 89, T₀ = 4800 h					
<i>C. franciscorum</i>	24	3.1781	3400	5.2983	15.13
<i>C. franciscorum</i>	96	4.5643	2400	3.9120	10.68
VISSEN: BCF = 89, T₀ = 24000 h					
<i>L. macrochirus</i>	24	3.1781	42330	6.9078	188.4
<i>L. macrochirus</i>	48	3.8712	40600	6.2146	180.7
<i>L. macrochirus</i>	96	4.5643	34720	5.5215	154.5

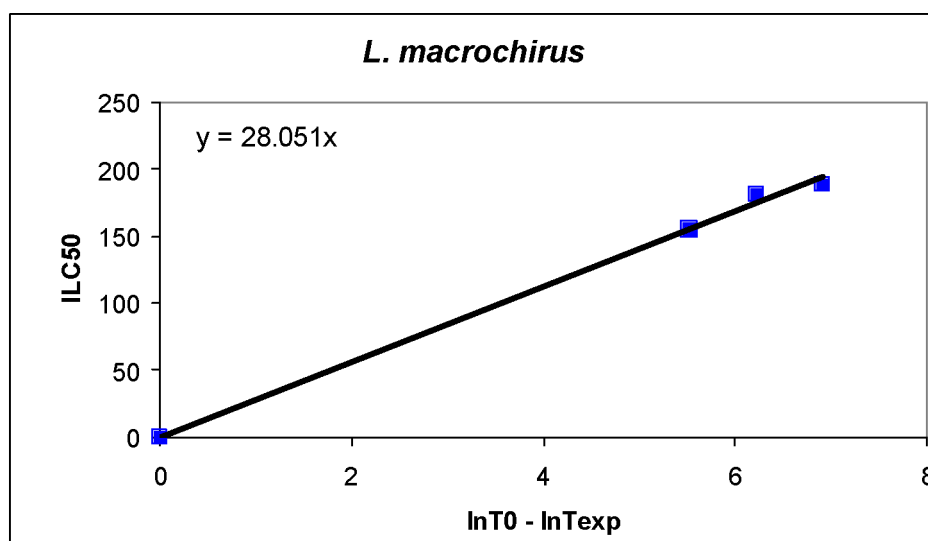
Op basis van de data in de laatste twee kolommen van Tabel 3.13, kan er een ILC_{50} - $\ln T_{50}$ relatie worden opgesteld voor de drie organismen. Deze relaties worden in Figuren 3.4, 3.5 en 3.6 weergegeven.



Figuur 3.4: ILC₅₀-lnT₅₀ relatie van *A. salina* voor cyclohexaan (T₀ = 720 h)



Figuur 3.5: ILC₅₀-lnT₅₀ relatie van *C. franciscorum* voor cyclohexaan (T₀ = 4800 h)



Figuur 3.6: ILC₅₀-lnT₅₀ relatie van *L. macrochirus* voor cyclohexaan (T₀ = 24000 h)

Op basis van de bekomen vergelijkingen kan voor de verschillende organismen een procentuele reductie van de levensverwachting worden berekend in functie van de cyclohexaanconcentratie. Wanneer een opgeloste cyclohexaanconcentratie van 100 µg/L wordt verondersteld, dan zal dit leiden tot een inwendige concentratie van:

$$C_{\text{intern}} = C_{\text{opgel.}} * \text{BCF} * \%L = 100 \mu\text{g/L} * 89 * 0.05 = 445 \mu\text{g/L} \text{ of } 0.445 \text{ mg/kg.}$$

Deze voorspelde interne concentratie is slechts geldig wanneer wordt verondersteld dat de blootstellingsperiode lang genoeg is om een evenwicht te krijgen tussen de inwendige en uitwendige cyclohexaan-concentratie.

In Tabel 3.14 wordt de voorspelde reductie (in %) weer van de levensverwachting voor de drie organismen weergegeven. Deze tabel bevat in de laatste 2 kolommen ook de helling van ILC_{50} -lnT relatie en de verwachte reductie in levensverwachting wanneer de levensverwachting (T0) wordt verdubbeld. Hieruit blijkt dat een verdubbeling van de levensverwachting slechts leidt tot een beperkte verandering in de voorspelde procentuele reductie van de levensverwachting bij de verschillende trofische niveaus.

Tabel 3.14: Procentuele reductie van de levensverwachting bij drie species blootgesteld aan 100 µg/L cyclohexaan.

ILC50 = a * lnT (met lnT = lnT0 – lnTexp)						
ILC50 = 0.455 mg/kg						
Organisme				lnT0' = lnT0 * 2		
	a	lnT	% reductie	a	lnT	% reductie
<i>A. salina</i>	9.562	0.0465	4.55	7.943	0.0560	5.48
<i>C. franciscorum</i>	2.811	0.158	14.6	2.449	0.182	16.6
<i>L. macrochirus</i>	28.05	0.0159	1.57	25.26	0.0176	1.75

Er moet worden opgemerkt dat in deze oefening geen rekening wordt gehouden met de bijdrage van cyclohexaan door voedselopname.

HOOFDSTUK 4

ECOTOXICITEITSDATA VAN 23 ORGANISCHE VERBINDINGEN: BEPALING VAN ILC₅₀-lnT-RELATIES

4.1 Inleiding

Voor de toepassing van het LTE-Model is het essentieel dat een aantal basisgegevens voorhanden zijn. In dit hoofdstuk wordt voor elk van de geselecteerde verbindingen een overzicht gegeven van de fysische, chemische en ecotoxicologische data die momenteel voorhanden zijn. Ook wordt de berekening van een aantal parameters, nodig voor het LTEM, weergegeven.

De volgende data worden in dit hoofdstuk weergegeven:

- berekende bioconcentratiefactor
- gemeten bioconcentratiefactoren
- beschikbare toxiciteitsdata voor de verschillende trofische niveau's
- berekening van de interne concentratie in acute toxiciteitstesten op basis van de BCF
- bepaling van de helling (a) van de ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus
- bepaling van species-specifieke helling (a) van de ILC₅₀-lnT relatie

Voor het berekenen van de helling van de ILC₅₀-lnT relaties werd aangenomen dat de gemiddelde levensduur van zooplankton, epibenthos en vissen respectievelijk 720, 4800 en 24000 uren bedroeg. Ook werd aangenomen dat een aantal fysiologische parameters vrij identiek zijn voor alle species binnen eenzelfde trofisch niveau. Het is evident dat dit niets steeds voor elke parameter en organisme een juiste veronderstelling zal zijn, maar door het ontbreken van de noodzakelijke data is dit in vele gevallen de enige oplossing voor het incorporeren van deze parameter: zo zal het vetgehalte voor elk organisme binnen eenzelfde trofisch niveau variëren, waarbij organismen met de grootste vetfractie minder gevoelig kunnen zijn door hun grotere opslagcapaciteit voor contaminanten (Driscoll & Landrum, 1997). Zoals reeds in Hoofdstuk 3 vermeld (paragraaf 3.2.1.1), heeft ondermeer Borga et al. (2001) vetgehalten van een beperkt aantal mariene organismen gerapporteerd die variëren tussen de 1.45 en 7.1 %.

Bij de evaluatie en verwerking van de verzamelde toxiciteitsdata werden tot slot een aantal belangrijke vaststellingen gemaakt die hierna worden vermeld en nader toegelicht.

4.2 Foto-inductie

4.2.1 Algemeen

Bij een aantal polycyclische aromatische koolwaterstoffen werd vastgesteld dat de gebioaccumuleerde fractie in een organisme sterk toxisch kan worden wanneer het organisme wordt blootgesteld aan zonlicht of UV-straling. Een duidelijk voorbeeld van dit fenomeen werd door Bowling et al. (1983) gerapporteerd voor de ‘bluegill sunfish’ *Lepomis macrochirus*. Mortaliteit werd vastgesteld wanneer deze vis werd blootgesteld aan 12.7 µg/L anthraceen bij helder zonlicht, maar niet wanneer de vis zich in een gebied bevond dat werd afgeschermd van zonlicht. Wanneer deze ‘schaduw’-vissen na 4 dagen in het zonlicht werden gebracht (anthraceenconcentratie in het water gelijk aan 0 en 1 dag depuratie), stierven deze vissen binnen de 24 uur. Uit deze en andere vaststellingen werd geconcludeerd dat niet de (extern) gevormde foto-producten van PAK-verbindingen in het water verantwoordelijk zijn voor de waargenomen toxiciteit, maar wel de interne concentraties (Hatch en Burton, 1999). Fototoxiciteit treedt dus op wanneer UV-licht kan inwerken op biogeaccumuleerde PAKs.

UV-straling kan in 3 groepen worden ingedeeld: UV-A (390-315 nm), UV-B (315-285 nm) en UV-C (< 285 nm). De absorptiemaxima van foto-induceerbare PAKs bevinden zich voornamelijk in het 290-400 nm gebied, en het is net deze fractie van het UV-zonlicht (SUVR; Solar UV-Radiation) dat niet volledig door de atmosfeer wordt geabsorbeerd. Conventioneel fluorescent licht daarentegen wordt nauwelijks of niet door deze verbindingen geabsorbeerd. Om foto-oxidatie van PAK-verbindingen te voorkomen werden acute laboratoriumtesten met deze stoffen in het verleden uitgevoerd met dergelijke lichtbronnen.

Fototoxiciteit van een verbinding is afhankelijk van een aantal factoren (Newsted & Giesy, 1987, Ankley et al., 1995, 1997):

- PAK-weefselconcentratie;
- blootstellingsperiode aan en absorptie van SUVR door het organisme;
- conversie-efficiëntie van het moleculaire grond-niveau molecule naar het geëxciteerd triplet-niveau;
- de probabiliteit dat een geëxciteerd intermediair zal reageren met een ‘target’ molecule.

Hiernaast zijn er nog andere parameters die eventueel het al dan niet optreden van fototoxiciteit kunnen beïnvloeden: de vetfractie van een organisme (minder gevoelig indien grote vetfractie aanwezig) (Driscoll en Landrum, 1997), metabolisatiesnelheid van de verbinding door het organisme (Driscoll et al., 1997), species-specifieke kenmerken zoals ingraafgedrag en pigmentatie (Boese et al., 1997) en turbiditeit van het water en de daaraan verbonden penetratiediepte van de UV-straling (Ireland et al., 1996). Fototoxiciteit wordt vooral veroorzaakt door de aanwezigheid van een (toxisch)

singlet zuurstofatoom dat als bijproduct wordt gevormd bij excitatie van PAK-electronen (US-EPA, 1993). Het is dit zuurstof-singlet dat leidt tot beschadiging van biologische weefsels (Ankley et al., 1995; Monson et al., 1995).

Newsted & Giesy (1987) stelden bij *Daphnia magna* vast dat de fototoxiciteit van een PAK sterk gecorreleerd is met de laagste triplet-energieniveau (LETS, kJ/mol; Lowest Energy Triplet State).

Ook bleek dat verbindingen met lange fosforescentie halfwaardetijden (>3.5 s) niet fototoxisch zijn. Deze kenmerken werden door Newsted & Giesy (1987) gebruikt om PAKs in te delen in zeer toxische, toxische en niet toxische verbindingen. Momenteel is deze methode echter nog niet voldoende ontwikkeld om te worden gebruikt in huidige milieuwetgeving voor PAKs. Tabel 4.1 geeft een overzicht weer van de (mogelijke) fototoxiciteit van verschillende polycyclische aromatische koolwaterstoffen, en dit zowel op basis van waargenomen effecten bij de watervlo *Daphnia magna* als bij de vis *Pimephales promelas*.

Uit Tabel 4.1 blijkt dat fototoxiciteit van een verbinding inderdaad species-specifiek kan zijn: zo werd ondermeer voor peryleen, benzo(e)pyreen en benzo(g,h,i)peryleen fototoxiciteit vastgesteld bij *D. magna* maar niet bij *P. promelas*. Ook voor een aantal andere verbindingen kan dezelfde conclusie worden getrokken, weliswaar op basis van voorspelde effecten (modellerings). De data uit tabel 3.1 suggereren wel dat *D. magna* meer gevoelig is dan *P. promelas* voor de effecten van fototoxiciteit.

In de literatuur zijn een aantal data met betrekking tot deze problematiek gepubliceerd. Zo vonden Wernersson & Dave (1997) een afname van de EC_{50} van benzo(a)pyreen voor *D. magna* met een factor 4.6 na 2h blootstelling aan UV-straling. Schirmer et al. (1998) onderzochten de fotocytotoxiciteit van 16 PAKs voor een cellijn van de kieuwen van de forel *Lepomis macrochirus*. Hoewel fotocytotoxiciteit werd vastgesteld bij de meeste PAKs, bleek enkel voor een beperkt aantal verbindingen de effect-concentratie theoretisch mogelijk in water (ondermeer fluorantheen en pyreen). Tot slot onderzochten Gala & Giesy (1992) de fototoxiciteit van anthraceen voor de alg *Pseudokirchneriella subcapitata* (beter gekend als *Selenastrum capricornutum* en *Raphidocelis subcapitata*) en vonden 22h- EC_{50} s (op basis van specifieke groeisnelheid) tussen 3.9 en 37.4 $\mu\text{g/L}$ anthraceen in functie van de UV-straling. Zij concludeerden ook dat, in vergelijking met vissen en invertebraten, algen relatief minder gevoelig zijn voor deze verbinding. Uit de gevonden effect-concentraties kan worden geconcludeerd dat sommige aquatische ecosystemen voldoende vervuild zijn met PAK opdat deze fototoxische effecten zich kunnen voordoen bij natuurlijke algenpopulaties.

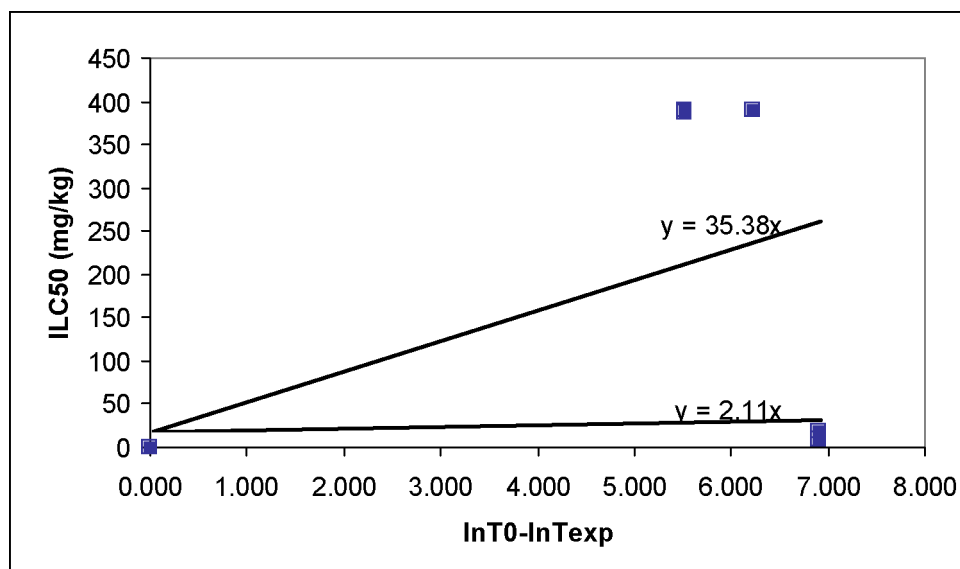
Tabel 4.1: Fototoxiciteit van PAKs bij *Daphnia magna* (Newsted & Giesy, 1987) en *Pimephales promelas* (Oris & Giesy, 1987). PAKs aangeduid in vet zijn opgenomen in deze studie.

PAK	Fototoxiciteit bij <i>D. magna</i>		Fototoxiciteit bij <i>P. promelas</i>	
	waargenomen	voorspeld	waargenomen	voorspeld
Fluoreen	niet toxisch			niet toxisch
Anthraceen	zeer toxisch		toxisch	
Fenanthreen	niet toxisch		niet toxisch	
Fluorantheen	zeer toxisch			niet toxisch
Pyreen	zeer toxisch		toxisch	
Benzo(a)anthraceen	zeer toxisch		toxisch	
Chryseen	gematigd toxisch			niet toxisch
Benzo(a)pyreen	zeer toxisch		toxisch	
Benzo(k)fluorantheen	zeer toxisch			niet toxisch
Peryleen	zeer toxisch		niet toxisch	
Dibenzo(a,h)anthraceen	zeer toxisch		toxisch	
Benzo(g,h,i)peryleen	zeer toxisch		niet toxisch	
Carbazolen	niet toxisch			niet toxisch
Acridine	zeer toxisch		toxisch	
Phenazine		zeer toxisch		toxisch
1H-Benzo(a)fluoreen	gematigd toxisch			niet toxisch
1H-Benzo(b)fluoreen	gematigd toxisch			niet toxisch
Benzo(b)anthraceen	zeer toxisch			toxisch
Trifenyleen	niet toxisch			
Benzo(a)acridine		zeer toxisch		toxisch
Benzo(b)acridine		zeer toxisch		toxisch
Benzatrone	zeer toxisch		toxisch	
Benzo(e)pyreen	zeer toxisch		toxisch	
Dibenzo(a,h)acridine		zeer toxisch		niet toxisch
Dibenzo(a,j)anthraceen		zeer toxisch		niet toxisch
Benzo(b)chryseen		zeer toxisch		toxisch
Dibenzo(a,c)phenazine		zeer toxisch		toxisch
Benzo(b)trifenyleen	zeer toxisch			niet toxisch
Coroneen		niet toxisch		niet toxisch

4.2.2 Incorporatie van fototoxiciteit voor het voorspellen van lange-termijn effecten.

In deze studie werden er 6 stoffen geëvalueerd waarvoor er in de literatuur werd aangetoond dat zij fototoxisch zijn en waarvoor er toxiciteitsdata beschikbaar waren: anthraceen, benzo(a)anthraceen, fluorantheen, pyreen, benzo(a)pyreen, chryseen. Op basis van de huidige kennis met betrekking tot fototoxiciteit, werd voor de berekening van de ILC_{50} - $\ln T$ -relatie uitgevoerd op basis van data die werden bekomen in experimenten onder UV-straling. Er kan immers worden aangenomen dat blootgestelde organismen in hun natuurlijke omgeving frequent aan zonlicht worden blootgesteld. Zo vond Landrum et al. (1986) dat zonlicht-UV-straling van gemiddelde sterkte in staat was om tot op een diepte van 7 meter fototoxiciteit te induceren bij *D. magna* die gedurende 14h aan 1.2 µg/L anthraceen werden blootgesteld.

De resultaten van experimenten die geen rekening houden met dit fenomeen (of experimenten waarbij de gebruikte lichtbron niet expliciet werd vermeld), werden niet weerhouden. In Figuur 4.1 wordt de impact van dergelijke 'foute' data op de voorspelling van lange-termijn effecten bij vissen van een blootstelling aan fluorantheen weergegeven. Een relatie die enkel rekening houdt met de (foto)-toxiciteitsdata gevonden voor *Pimephales promelas* (24h EC_{50} s van 100 en 200 µg/L), heeft een helling a van 2.11. Wanneer daarentegen ook de toxiciteitsdata van *Lepomis macrochirus* worden geïncorporeerd (48-96h EC_{50} s van 3980 tot 4000 µg/L), wordt een helling a van 35.38 bekomen.



Figuur 4.1: ILC_{50} - $\ln T$ relatie van fluorantheen voor vissen.

Op basis van de tweede relatie (a van 35.38) zal een interne concentratie van 5 mg/kg leiden tot een (algemene) reductie van de levensverwachting van vissen met 13.1%. Wanneer enkel rekening wordt gehouden met fototoxiciteit, zal een dergelijke interne concentratie leiden tot een reductie van de

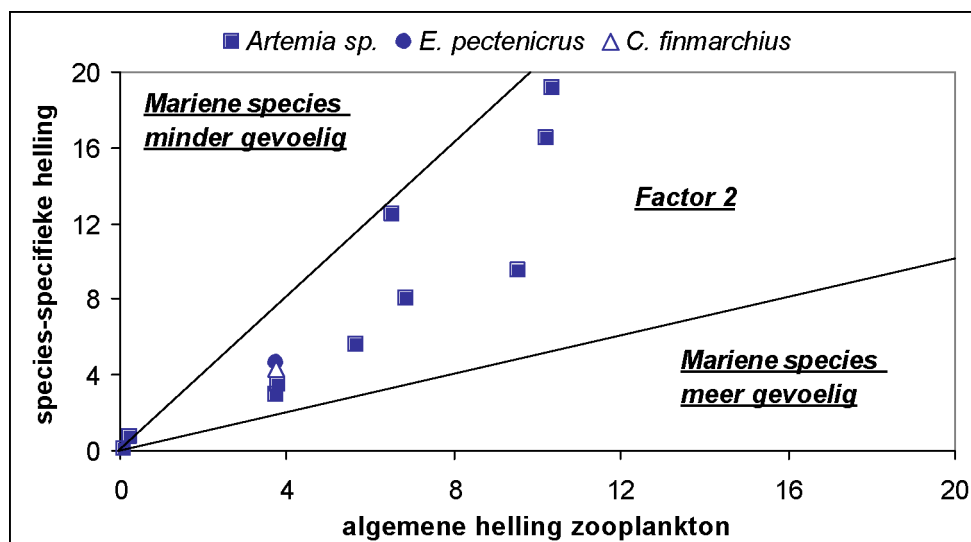
levensverwachting met 90.6%. Hieruit blijkt dat, op basis van de tweede relatie (a van 35.38), de lange-termijn effecten van fluorantheen sterk worden onderschat.

De toxiciteitsdata van de zes bovenvernoemde fototoxische PAK-verbindingen liggen algemeen een factor 10 tot 1000 lager dan de toxiciteitsdata van andere verbindingen voor dezelfde species, met uitzondering van chryseen. Voor deze verbinding is er momenteel slechts 1 effect-concentratie beschikbaar, namelijk een 2h EC₅₀ van 1900 µg/L voor *D. magna*. In vergelijking met de andere fototoxische verbindingen kan deze hoge waarde te wijten zijn aan de korte blootstellingsduur (zie paragraaf 4.1.4) of aan het ontbreken van UV-straling tijdens de blootstellingsperiode.

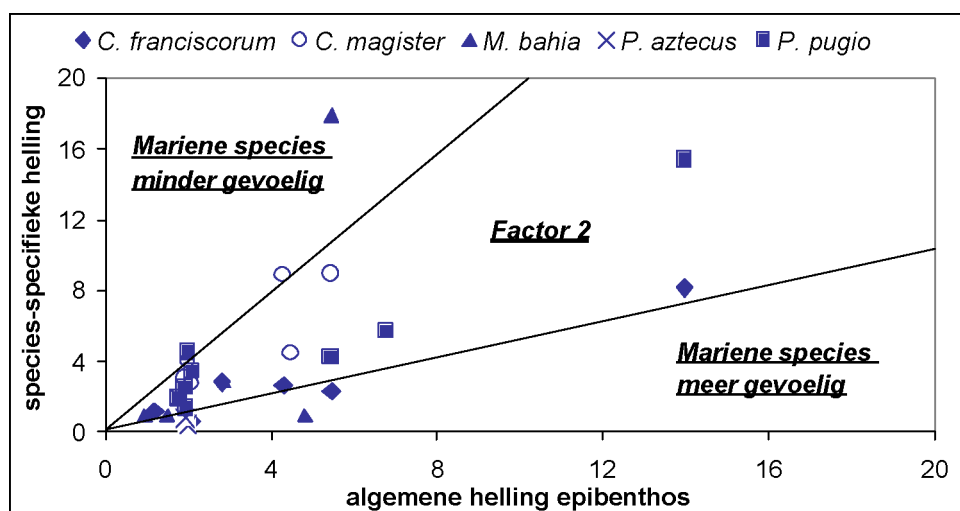
4.3 Bruikbaarheid van toxiciteitsdata van zoetwaterspecies voor de lange-termijn evaluatie van toxicanten in het marien milieu.

In de literatuur zijn er slechts een beperkt aantal toxiciteitsdata beschikbaar voor mariene species. Bij de vissen zijn er een beperkt aantal data voor de forel (*Oncorhynchus* sp.), de kabeljauw *Gadus morhua* en de ansjovis *Engraulis mordax*. Voor het zooplankton zijn er voornamelijk toxiciteitsdata voorhanden voor de pekelkreeft *Artemia* sp. Voor het epibenthos daarentegen zijn er relatief gezien meer toxiciteitsdata beschikbaar voor het mariene milieu.

Voor het bepalen van de algemene ILC₅₀-lnT-relatie voor de verschillende trofische niveaus werden er echter ook data gebruikt van zoetwaterspecies. Dit veronderstelt echter dat de gevoeligheid van mariene en zoetwaterspecies voor de betrokken verbindingen vrij gelijkend zijn. Deze hypothese wordt getoetst in Figuren 3.2, 3.3 en 3.4. In deze figuren wordt de helling van de algemene relatie uitgezet ten opzichte van de species-specifieke helling van mariene organismen, en dit voor de verschillende trofische niveaus. Voor het zooplankton en het epibenthos (Figuren 4.2, 4.3) blijkt dat vrijwel alle species-specifieke hellingen van de mariene soorten minder dan een factor 2 verschillen van de algemene helling die werd berekend voor deze trofische niveaus. Enkel voor de aasgarnaal *Mysidopsis bahia* worden een verschillen groter dan een factor 2 waargenomen ten opzichte van de algemene helling. Voor fluorantheen blijkt *M. bahia* beduidend meer gevoelig te zijn dan de gemiddelde epibenthosoort. Dit kan te wijten zijn aan mogelijke fototoxiciteit van fluorantheen voor dit specifiek organisme: uit Tabel 4.1 blijkt dat de fototoxiciteit van deze PAK species-afhankelijk is. Voor toluene daarentegen is deze species minder gevoelig dan de overige epibenthische organismen.

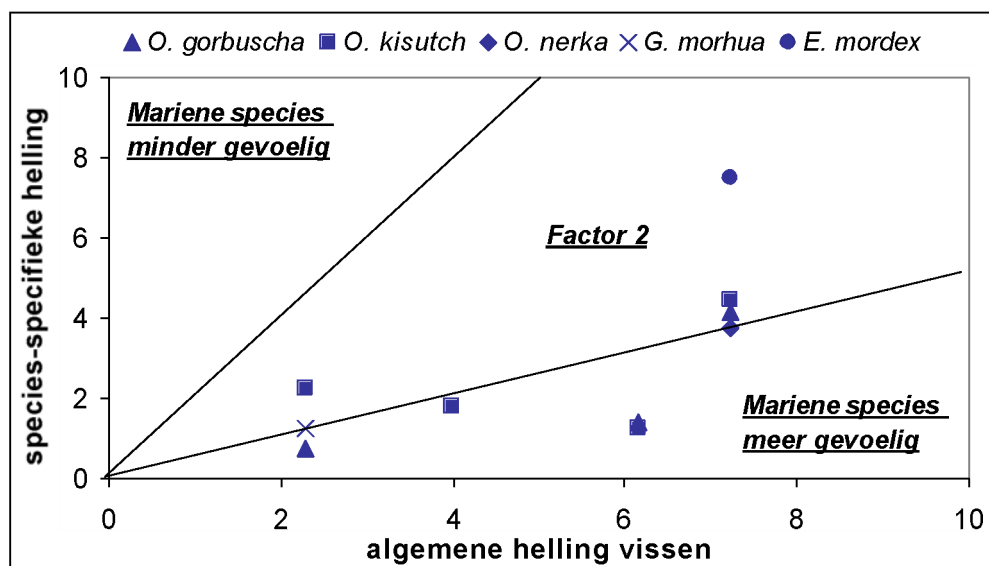


Figuur 4.2: Vergelijking tussen species-specifieke helling van marien zooplankton en de algemene helling van de ILC_{50} -lnT-relatie.



Figuur 4.3: Vergelijking tussen species-specifieke helling van marien epibenthos en de algemene helling van de ILC_{50} -lnT-relatie.

Uit de species-specifieke a van de ILC_{50} -lnT-relatie die bij mariene vissen werd gevonden (Figuur 4.4), blijkt dat de drie mariene species (*Oncorhynchus* sp., *Gadus* sp., *Engraulis* sp.) licht gevoeliger zijn dan de gemiddelde zoetwatervis. De factor verschil tussen deze algemene en mariene species-specifieke a blijft echter beperkt en varieert tussen 0.96 en 4.94, afhankelijk van de soort en de verbinding.



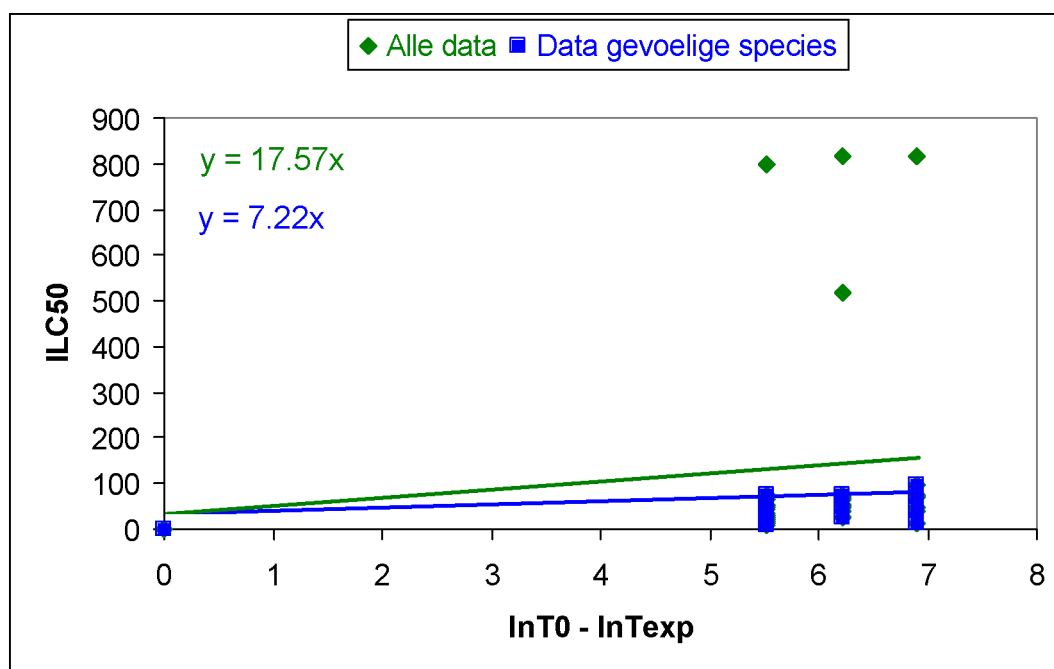
Figuur 4.4: Vergelijking tussen species-specifieke helling van mariene vissen en de algemene helling van de $ILC_{50}-\ln T$ -relatie.

De beperkte hoeveelheid mariene toxiciteitsdata die momenteel beschikbaar zijn, geven aan dat er een significante leemte bestaat met betrekking tot acute en chronische effecten van organische verbindingen bij mariene species, en meer concreet, economisch belangrijke soorten. Op basis van de huidige informatie kan echter worden geconcludeerd dat het gebruik van zoetwater toxiciteitsdata niet zal leiden tot significante over- of onderschattingen van de lange-termijn effecten van organische verbindingen in het marien milieu.

4.4 Incorporatie van toxiciteitsdata van niet-gevoelige species op de ILC_{50} -lnT helling

Wanneer de beschikbare toxiciteitsdata binnen eenzelfde trofisch niveau worden vergeleken, blijkt dat sommige species herhaaldelijk beduidend minder gevoelig zijn. Bij de vissen is ondermeer ‘the mosquitofish’ (*Gambusia affinis*) beduidend minder gevoelig dan andere species: voor benzeen liggen de gerapporteerde 24-96h EC_{50} s voor 19 species tussen de 5 en 46 mg/L, daar waar voor *G. affinis* een 96h- EC_{50} van 386 mg/L wordt gevonden. Ook voor de verbindingen heptaan en fenanthreen blijkt deze species veel minder gevoelig te zijn dan andere, vaak gebruikte, vissoorten zoals de regenboogforel *Oncorhynchus* of de goudvis *Carassius auratus*. Andere, relatief minder gevoelige species voor een of meerdere verbindingen zijn tilapia (*Tilapia mossambica*) en “Japanese medaka” (*Oryzias latipes*).

De incorporatie van toxiciteitsdata van minder gevoelige species voor het bepalen van een ILC_{50} -lnT relatie kan leiden tot voorspellingen van lange termijn effecten die de werkelijke impact beduidend onderschatten. Dit kan duidelijk worden aangetoond met de toxiciteitsdata van benzeen voor vissen. Bij dit contaminant zijn er 2 soorten die beduidend minder gevoelig zijn (*G. affinis* en *O. latipes*) dan de overige 19 waarvoor er data voorhanden zijn. In Figuur 4.5 worden twee ILC_{50} -lnT relaties weergegeven: de ene relatie is berekend op basis van alle toxiciteitsdata die voor dit trofisch niveau beschikbaar zijn, daar waar de tweede relatie enkel rekening houdt met de 19 ‘gevoelige species’.



Figuur 4.5: Invloed van toxiciteitsdata van ongevoelige species op de helling van de ILC_{50} -lnT relatie

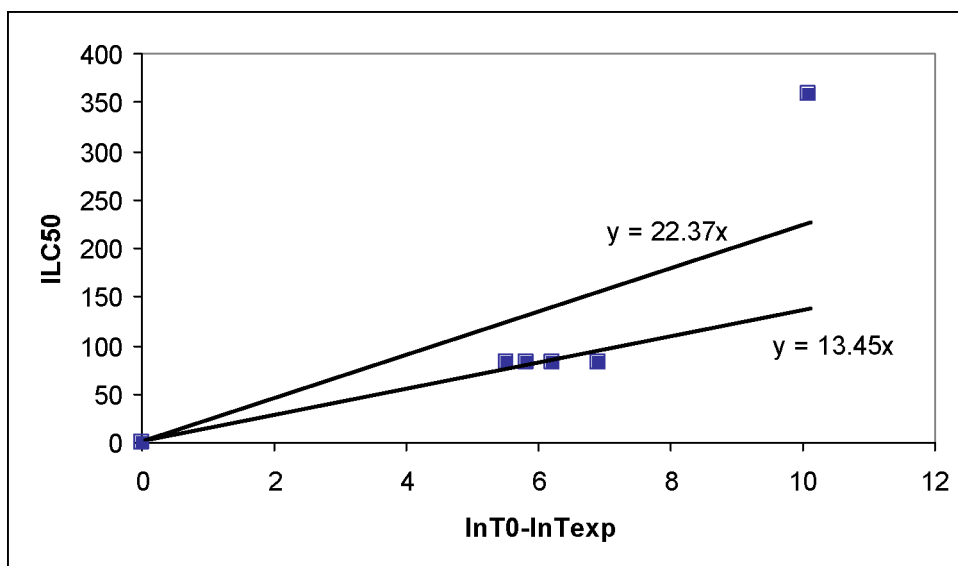
De helling a voor A en B bedraagt respectievelijk 17.57 en 7.22. Wanneer er dus een voorspelling van de lange-termijn effecten van 1000 μ g/L benzeen wordt gemaakt op basis van (A), leidt dit tot een

interne concentratie van ± 2 mg/kg, wat overeenkomt met een algemene reductie van 10.8% van de normale levensverwachting van vissen. Wanneer het effect van deze benzeen-concentratie echter wordt berekend voor elk van de 19 ‘gevoelige’ species afzonderlijk – en dit op basis van de species-specifieke ILC_{50} -lnT relatie (zie paragraaf 4.6.3) – dan leidt dit echter tot reducties van de gemiddelde levensverwachting van respectievelijk 15.3 tot 65.6 procent voor *Poelica reticulata* en *Salmo gairdnerik*. De algemene gereduceerde levensverwachting op basis van relatie (B) tot slot geeft een waarde van 24.2%.

De resultaten van deze analyse tonen duidelijk aan dat de incorporatie van toxiciteitsdata van relatief ongevoelige species voor de bepaling van een algemene ILC_{50} -lnT-relatie leidt tot significante onderpredicties van lange-termijn effecten bij meer gevoelige soorten. Bij de bepaling van algemene hellingen voor de verschillende trofische niveau's werden de toxiciteitsdata van species die beduidend minder gevoelig waren voor een contaminant dan ook niet gebruikt. Deze data werden echter wel weerhouden voor de bepaling van de species-specifieke ILC_{50} -lnT-relaties.

4.5 Bruikbaarheid van <24h-toxiciteitsdata voor de bepaling van ILC_{50} -lnT relaties

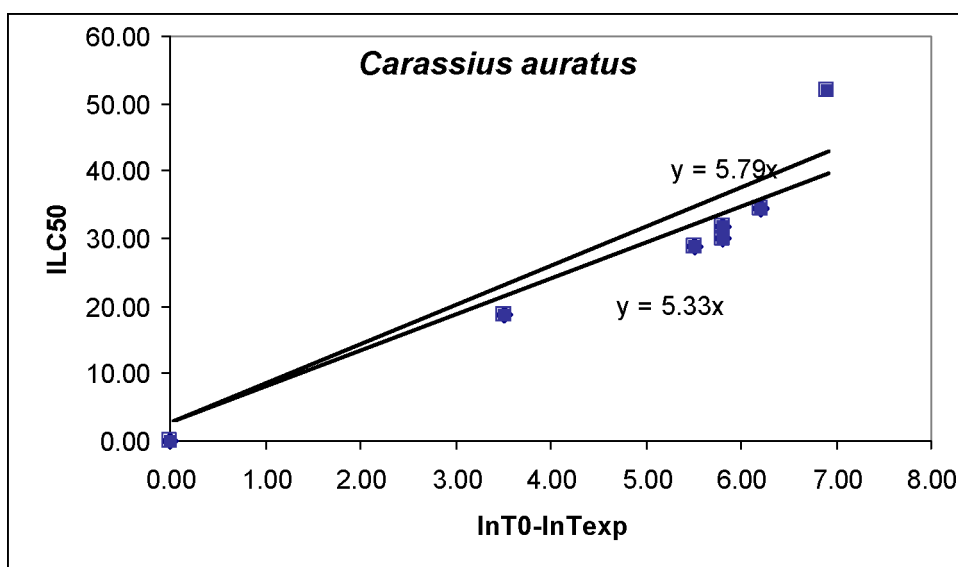
Bij de bepaling van de species-specifieke ILC_{50} -lnT-relatie werd vastgesteld dat het lineair verband tussen beide parameters niet steeds werd teruggevonden bij de laagste blootstellingsperiodes. Een mooi voorbeeld van dit fenomeen wordt weergegeven in Figuur 4.6. Hierin worden het verband tussen de ILC_{50} en de lnT weergegeven voor de vis *Pimephales promelas* die werd blootgesteld aan 1-methylnaftaleen. Uit deze grafiek kan er worden geconcludeerd dat het verband tussen de interne lethale concentratie en de blootstellingsperiode eerder een exponentieel verloop kent in plaats van het lineair verband zoals voorgesteld door Yu et al. (2000). De waargenomen non-lineariteit tussen beide parameters wordt veroorzaakt door de hoge berekende ILC_{50} -waarden bij korte-termijn blootstellingen. Een mogelijke verklaring hiervoor kan worden gezocht in het feit dat er bij de berekening van de interne concentratie er wordt van uitgegaan dat de tijd nodig voor het bereiken van een evenwicht tussen externe en interne concentratie relatief veel korter is dan de blootstellingsperiode. In realiteit zal bij zeer korte blootstellingsperiodes (<24h) dit evenwicht niet steeds bereikt zijn op het einde van de blootstellingsperiode. Dit heeft tot gevolg dat vooral bij deze korte-termijn blootstellingen de berekende interne concentratie een overschatting is van de werkelijke interne concentratie. Incorporatie van deze data bij de bepaling van de ILC_{50} -lnT-relatie leidt dan ook tot een hogere waarde voor a (22.37 in plaats van 13.45) en dus ook tot onderschatting van de lange-termijn effecten.



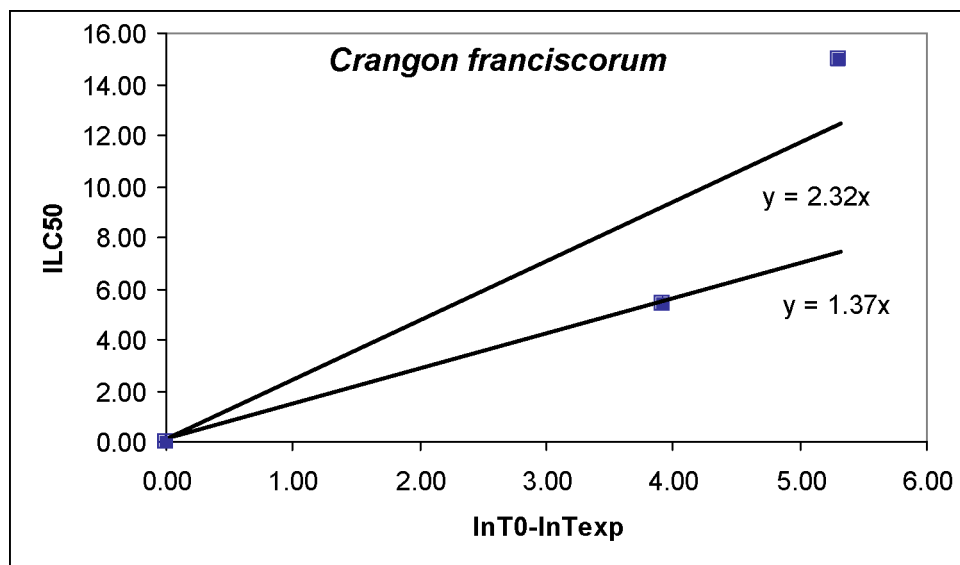
Figuur 4.6: Invloed van toxiciteitsdata van experimenten met een blootstellingsperiode <24h op de helling van de ILC_{50} -lnT relatie van 1-methylnaftaleen voor de vis *P. promelas*.

Bij het opstellen van de algemene en species-specifieke ILC_{50} -lnT-relatie werd dan ook steeds nagegaan of dergelijke sterke stijgingen van de ILC_{50} bij lage korte blootstellingsperiodes zich voordeden, en desgevallend werden deze waarden niet weerhouden bij het bepalen van de algemene en species-specifieke a-waarde.

Dit korte-termijn effect is species-specifiek: het gebruik van 24h-toxiciteitsdata voor de goudvis *Carassius auratus* (Figuur 4.7) beïnvloedt nauwelijks de hellingsgraad van de ILC_{50} -lnT-relatie voor toluene (5.79 ten opzichte van 5.33). Voor de garnaal *Crangon franciscorum* (Figuur 4.8) heeft het gebruik van de 24h-data reeds een grotere invloed (factor van 1.7 verschil in helling).



Figuur 4.7: Invloed van toxiciteitsdata van experimenten met een blootstellingsperiode <24h op de helling van de ILC₅₀-lnT relatie van toluen voor de vis *C. auratus*.



Figuur 4.8: Invloed van toxiciteitsdata van experimenten met een blootstellingsperiode <24h op de helling van de ILC₅₀-lnT relatie van toluen voor de garnaal *C. franciscorum*.

4.6 Overzicht van de gebruikte toxiciteitsdata en afgeleide ILC₅₀-lnT –hellingen

4.6.1 Acenaptheen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	232
Gemeten BCF	
<i>Lepomis macrochirus</i>	387
<i>Pimephales promelas</i>	8

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	48	3500	3.871	2.708	40.43
EPIBENTHOS					
<i>Mysidopsis bahia</i>	96	970	4.564	3.912	11.20

VISSEN					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96	3100	4.564	5.521	35.81
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96	2200	4.564	5.521	25.41
<i>Cyprinodon variegatus</i>	24	3700	3.178	6.908	42.74
<i>Cyprinodon variegatus</i>	48	2300	3.871	6.215	26.57
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96	2230	4.564	5.521	25.76
<i>Pimephales promelas</i>	96	610	4.564	5.521	7.05
<i>Pimephales promelas</i>	96	1600	4.564	5.521	18.48
<i>Pimephales promelas</i>	96	1700	4.564	5.521	19.64
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	1700	4.564	5.521	19.64
<i>Lepomis macrochirus</i>	48	1700	3.871	6.215	19.64
<i>Ictalurus punctatus</i>	48	1700	3.871	6.215	19.64
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	24	1600	3.178	6.908	18.48
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	48	1100	3.871	6.215	12.71
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	72	800	4.277	5.809	9.24
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	670	4.564	5.521	7.74
<i>Salmo trutta</i>	24	840	3.178	6.908	9.70
<i>Salmo trutta</i>	48	650	3.871	6.215	7.51
<i>Salmo trutta</i>	72	600	4.277	5.809	6.93
<i>Salmo trutta</i>	96	580	4.564	5.521	6.70

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	14.938
Epibenthos	2.864
Vissen	3.003
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	14.938
<i>Mysidopsis bahia</i>	2.864
<i>Cyprinodon variegatus</i>	5.290
<i>Pimephales promelas</i>	2.726
<i>Lepomis macrochirus</i>	3.335
<i>Ictalurus punctatus</i>	3.160
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	2.012
<i>Salmo trutta</i>	1.268

4.6.2 Anthraceen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	582

Gemeten BCF's	
<i>Daphnia pulex</i>	760 – 1192
<i>Daphnia magna</i>	200
<i>Salmo gairdneri</i>	4400 – 9200
<i>Oncorhynchus sp.</i>	570
<i>Pimephales promelas</i>	485
<i>Carassius auratus</i>	160
<i>Carassius auratus</i> - berekend	4230
<i>Crassostrea virginica</i>	1160
<i>Prionospio cirrifera</i> (polychaet)	6.6
<i>Capitella capitata</i> (polychaet)	23.6
<i>Hexagonia sp.</i> (mayfly)	3500

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	4.3	15	1.459	5.121	0.437
<i>Daphnia magna</i>	1	20	0.000	6.579	0.582
<i>Artemia salina</i>	2	20	0.693	5.886	0.582
EPIBENTHOS					
geen toxiciteitsdata beschikbaar					
VISSEN					
<i>Pimephales promelas</i>	15.75	5.4	2.757	7.329	0.157
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	11.9	4.564	5.521	0.346
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	5	4.564	5.521	0.146
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	46	4.564	5.521	1.339
<i>Lepomis macrochirus</i>	36.5	26.8	3.597	6.488	0.780

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	0.0911
Epibenthos	---
Vissen	0.0871
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	0.0872
<i>Artemia salina</i>	0.0989
<i>Pimephales promelas</i>	0.0214
<i>Lepomis macrochirus</i>	0.1136

4.6.3 Benzeen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	15

Gemeten BCF	
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	42.6
<i>Chlorella sp.</i>	30
<i>Daphnia pulex</i>	153 - 225
<i>Oncorhynchus sp.</i>	52.5
<i>Lepomis macrochirus</i>	30.2

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene IL_{C50}-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	24	200000	3.178	3.401	1940.000
<i>Daphnia magna</i>	48	203000	3.871	2.708	1969.100
<i>Daphnia magna</i>	24	250000	3.178	3.401	2425.000
<i>Daphnia pulex</i>	96	15000	4.564	2.015	145.500
<i>Artemia salina</i>	24	66000	3.178	3.401	640.200
<i>Artemia salina</i>	48	21000	3.871	2.708	203.700
EPIBENTHOS					
<i>Gammarus pulex</i>	48	42000	3.871	4.605	86.835
<i>Nicotra spinipes</i>	24	28000	3.178	5.298	57.890
<i>Palaemonetes pugio</i>	24	34000	3.178	5.298	70.295
<i>Palaemonetes pugio</i>	24	41000	3.178	5.298	84.768
<i>Palaemonetes pugio</i>	24	42000	3.178	5.298	86.835
<i>Palaemonetes pugio</i>	96	27000	4.564	3.912	55.823
<i>Palaemonetes pugio</i>	24	43500	3.178	5.298	89.936
<i>Palaemonetes pugio</i>	48	35000	3.871	4.605	72.363
<i>Palaemonetes pugio</i>	96	27000	4.564	3.912	55.823
<i>Crangon franciscorum</i>	24	19000	3.178	5.298	39.283
<i>Crangon franciscorum</i>	96	18000	4.564	3.912	37.215
VISSEN					
<i>Pimephales promelas</i>	96	12600	4.564	5.521	26.051
<i>Pimephales promelas</i>	24	35560	3.178	6.908	73.520
<i>Pimephales promelas</i>	48	35080	3.871	6.215	72.528

<i>Pimephales promelas</i>	96	33470	4.564	5.521	69.199
<i>Pimephales promelas</i>	24	34420	3.178	6.908	71.163
<i>Pimephales promelas</i>	48	32000	3.871	6.215	66.160
<i>Pimephales promelas</i>	96	32000	4.564	5.521	66.160
<i>Pimephales promelas</i>	96	24600	4.564	5.521	50.861
<i>Pimephales promelas</i>	96	15000	4.564	5.521	31.013
<i>Salvenius malma</i>	96	5500	4.564	5.521	11.371
<i>Salvenius malma</i>	96	11000	4.564	5.521	22.743
<i>Gasterosteus aculeatus</i>	96	21800	4.564	5.521	45.072
<i>Carassius auratus</i>	24	34420	3.178	6.908	71.163
<i>Carassius auratus</i>	24	46000	3.178	6.908	95.105
<i>Carassius auratus</i>	48	34420	3.871	6.215	71.163
<i>Poelica reticulata</i>	96	36600	4.564	5.521	75.671
<i>Poelica reticulata</i>	24	36600	3.178	6.908	75.671
<i>Poelica reticulata</i>	48	36600	3.871	6.215	75.671
<i>Oncorhynchus nerka</i>	96	10000	4.564	5.521	20.675
<i>Lepomis macrochirus</i>	48	20000	3.871	6.215	41.350
<i>Lepomis macrochirus</i>	24	20000	3.178	6.908	41.350
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	22490	4.564	5.521	46.498
<i>Lepomis macrochirus</i>	48	22490	3.871	6.215	46.498
<i>Lepomis macrochirus</i>	24	22490	3.178	6.908	46.498
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	5900	4.564	5.521	12.198
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	9200	4.564	5.521	19.021
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	5300	4.564	5.521	10.958
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	5000	4.564	5.521	10.338
<i>Morone saxatilis</i>	24	6900	3.178	6.908	14.266
<i>Morone saxatilis</i>	96	5800	4.564	5.521	11.992
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	96	14090	4.564	5.521	29.131
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	96	9800	4.564	5.521	20.262
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	96	17000	4.564	5.521	35.148
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	96	5280	4.564	5.521	10.916
<i>Cottus cognatus</i>	96	14000	4.564	5.521	28.945
<i>Oncorhynchus tshawytscha</i>	96	10000	4.564	5.521	20.675
<i>Salmo trutta</i>	48	12000	3.871	6.215	24.810
<i>Thymallus articus</i>	96	13000	4.564	5.521	26.878
<i>Clupea harengus pallasii</i>	48	20000	3.871	6.215	41.350
<i>Clupea harengus pallasii</i>	48	25000	3.871	6.215	51.688
<i>Engraulis mordax</i>	48	20000	3.871	6.215	41.350
<i>Engraulis mordax</i>	48	25000	3.871	6.215	51.688

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$			
ALGEMEEN		a	
Zooplankton	131.62	<i>Carassius auratus</i>	11.87
Epibenthos	13.976	<i>Poelica reticulata</i>	12.08
Vissen	7.217	<i>Oncorhynchus nerka</i>	3.745
SPECIES-SPECIFIEK		<i>Lepomis macrochirus</i>	6.938
<i>Daphnia magna</i>	662.3	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	2.378
<i>Daphnia pulex</i>	72.21	<i>Morone saxatilis</i>	2.107
<i>Artemia salina</i>	75.22	<i>Oncorhynchus kisutch</i>	4.473
<i>Asellus aquaticus</i>	53.87	<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	4.171
<i>Gammarus pulex</i>	18.86	<i>Cottus cognatus</i>	5.242
<i>Nicotra spinipes</i>	10.93	<i>Leuciscus idus melanotus</i>	43.91
<i>Palaemonetes pugio</i>	15.41	<i>Oncorhynchus tshawytscha</i>	3.745
<i>Crangon fransiscorum</i>	8.155	<i>Oryzias latipes</i>	83.17
<i>Cancer magister</i>	57.08	<i>Salmo trutta</i>	3.992
<i>Pimephales promelas</i>	9.857	<i>Thymallus articus</i>	4.868
<i>Salvenius malma</i>	3.090	<i>Clupea harengus pallasii</i>	7.485
<i>Gambusia affinis</i>	129.5	<i>Engraulis mordax</i>	7.485
<i>Gasterosteus aculeatus</i>	8.163		

4.6.4 Benzo(a)anthraceen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	5246

Gemeten BCF	
Daphnia pulex (whole body)	4646
vissen (berekend)	4230
Crassostrea virginica (whole body)	3700
Prionospio cirrifera (polychaet)	9.4
Capitella capitata (polychaet)	3.6

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	12.51	2	2.527	4.053	0.525
EPIBENTHOS					
geen toxiciteitsdata beschikbaar					
VISSEN					
geen toxiciteitsdata beschikbaar					

Helling van de ILC₅₀-lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

ILC₅₀ = a * lnT	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	0.129
Epibenthos	---
Vissen	---
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	0.129

4.6.5 Benzo(a)pyreen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	8929

Gemeten BCF	
vissen (berekend)	8750
<i>Daphnia magna</i>	2837
<i>Daphnia magna</i> (whole body)	134248
<i>Gambusia affinis</i>	930
<i>Lepomis macrochirus</i>	12 - 2657
<i>Oncorhynchus mykiss</i> (spieren en nieren)	920
<i>Oncorhynchus mykiss</i> (lever)	182
<i>E. lucius</i> (Northern pike) (lever)	259 - 1276
<i>E. lucius</i> (Northern pike) (vet en galblaas)	3974 - 82916
<i>E. lucius</i> (Northern pike) (kieuwen)	213 - 383
<i>E. lucius</i> (Northern pike) (nieren)	192 - 2015
<i>E. lucius</i> (Northern pike) (overig weefsel)	< 55
<i>Crassostrea virginica</i>	242 - 2560
<i>R. cuneata</i> (clam)	8.7 - 236
<i>M. inquinata</i> (clam)	861
<i>Palaemonetes pugio</i>	3.5 - 154
<i>Prionospio cirrifera</i> (polychaet)	13.8
<i>Capitella capitata</i> (polychaet)	0.7

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia pulex</i>	96	5	4.564	2.015	2.232
<i>Daphnia magna</i>	4.44	2	1.491	5.089	0.893
EPIBENTHOS					
geen toxiciteitsdata beschikbaar					
VISSSEN					
<i>Pimephales promelas</i>	40.05	5.6	3.690	6.396	2.500

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	0.302
Epibenthos	---
Vissen	0.391
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia pulex</i>	1.108
<i>Daphnia magna</i>	0.176
<i>Pimephales promelas</i>	0.391

4.6.6 Chrvseen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K_{OW}	9082
Gemeten BCF	
<i>Palaemonetes duorarum</i>	8.2 - 694
<i>R. cuneata</i> (clam)	8.2
<i>M. inquinata</i> (clam)	694
<i>Neanthes arenaneodentata</i>	4230
<i>Prionospio cirrifera</i> (polychaet)	14.7
<i>Capitella capitata</i> (polychaet)	6.2

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC_{50} -lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	2	1900	0.693	5.886	863.360
EPIBENTHOS					
geen toxiciteitsdata beschikbaar					
VISSEN					
geen toxiciteitsdata beschikbaar					

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	146.68

Epibenthos	---
Vissen	---
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	146.68

4.6.7 Cyclohexaan

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	89
Gemeten BCF	
Geen BCF-data beschikbaar	

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Artemia salina</i>	24	7308	3.178	3.401	32.521
EPIBENTHOS					
<i>Crangon franciscorum</i>	24	3400	3.178	5.298	15.130
<i>Crangon franciscorum</i>	96	2400	4.564	3.912	10.680
VISSEN					
<i>Pimephales promelas</i>	24	43000	3.178	6.908	191.350
<i>Pimephales promelas</i>	96	32000	4.564	5.521	142.400
<i>Pimephales promelas</i>	96	4530	4.564	5.521	20.159
<i>Pimephales promelas</i>	24	35080	3.178	6.908	156.106
<i>Pimephales promelas</i>	96	32710	4.564	5.521	145.560
<i>Pimephales promelas</i>	48	24330	3.871	6.215	108.269
<i>Pimephales promelas</i>	96	42330	4.564	5.521	188.369
<i>Pimephales promelas</i>	48	35080	3.871	6.215	156.106
<i>bluegills</i>	24	43000	3.178	6.908	191.350
<i>bluegills</i>	96	34000	4.564	5.521	151.300
<i>Carassius auratus</i>	24	42300	3.178	6.908	188.235
<i>Carassius auratus</i>	96	42300	4.564	5.521	188.235
<i>Poelica reticulata</i>	24	57700	3.178	6.908	256.765
<i>Poelica reticulata</i>	96	57700	4.564	5.521	256.765
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	34720	4.564	5.521	154.504

<i>Lepomis macrochirus</i>	48	40600	3.871	6.215	180.670
<i>Lepomis macrochirus</i>	24	42330	3.178	6.908	188.369
<i>Morone saxatilis</i>	96	8300	4.564	5.521	36.935
<i>Morone saxatilis</i>	24	8300	3.178	6.908	36.935

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	9.562
Epibenthos	2.811
Vissen	25.14
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Artemia salina</i>	9.562
<i>Crangon franciscorum</i>	2.811
<i>Pimephales promelas</i>	23.028
<i>Carassius auratus</i>	29.917
<i>Poelica reticulata</i>	40.809
<i>Lepomis macrochirus</i>	28.051
<i>Morone saxatilis</i>	5.870

4.6.8 Dimethylnaftaleen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K_{OW}	505
Gemeten BCF	
<i>R. cuneata</i> (clam)	17.1
<i>Penaeus aztecus</i>	967
<i>U. minax</i> (fiddler crab)	1105
<i>S. cinereum</i> (wharf crab)	1625

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC_{50} -lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (μ g/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					

<i>Daphnia pulex</i>	48	1280	3.871	2.708	32.320
<i>Daphnia pulex</i>	48	770	3.871	2.708	19.443
<i>Daphnia pulex</i>	48	190	3.871	2.708	4.798
<i>Eurytemora affinis</i>	24	850	3.178	3.401	21.463
EPIBENTHOS					
<i>Palaemonetes pugio</i>	96	700	4.564	3.912	17.675
<i>Cancer magister</i>	48	3100	3.871	4.605	78.275
<i>Cancer magister</i>	96	600	4.564	3.912	15.150
<i>Penaeus aztecus</i>	24	80	3.178	5.298	2.020
<i>Penaeus aztecus</i>	96	80	4.564	3.912	2.020
<i>Neanthes arenaceodentata</i>	96	2600	4.564	3.912	65.650
VISSEN					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	24	5100	3.178	6.908	128.775

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	6.737
Epibenthos	1.495
Vissen	18.64
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia pulex</i>	6.962
<i>Eurytemora affinis</i>	6.310
<i>Palaemonetes pugio</i>	4.518
<i>Cancer magister</i>	3.973
<i>Penaeus aztecus</i>	0.429
<i>Neanthes arenaceodentata</i>	16.78
<i>Cyprinodon variegatus</i>	18.64

4.6.9 Ethylbenzeen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K_{OW}	53
Gemeten BCF	
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	204
<i>Carassius auratus</i>	15.5

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC_{50} -lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	24	2200	3.178	3.401	5.830
EPIBENTHOS					
geen toxiciteitsdata beschikbaar					
VISSEN					
<i>Pimephales promelas</i>	96	48000	4.564	5.521	127.200
<i>bluegills</i>	24	35000	3.178	6.908	92.750
<i>bluegills</i>	96	32000	4.564	5.521	84.800
<i>Carassius auratus</i>	24	94000	3.178	6.908	249.100
<i>Poelicia reticulata</i>	96	9600	4.564	5.521	25.440
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	4200	4.564	5.521	11.130

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	1.714
Epibenthos	---
Vissen	17.177
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	1.714
<i>Pimephales promelas</i>	23.04
<i>bluegills</i>	14.18
<i>Carassius auratus</i>	36.06
<i>Poelicia reticulata</i>	4.608
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	2.016

3.6.10 Fluorantheen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K_{OW}	1944
Gemeten BCF	
vissen (berekend)	1700
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	82 - 378
<i>Crassostrea virginica</i>	2860

<i>Prionospio cirrifer</i> (polychaet)	5.7
<i>Capitella capitata</i> (polychaet)	12

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	10.8	9	2.380	4.200	0.875
<i>Daphnia magna</i>	1	4	0.000	6.579	0.389
<i>Daphnia magna</i>	2	4	0.693	5.886	0.389
<i>Artemia salina</i>	3	40	1.099	5.481	3.888
EPIBENTHOS					
<i>Mysidopsis bahia</i>	96	40	4.564	3.912	3.888
<i>Menidia beryllina</i>	96	40	4.564	3.912	3.888
<i>Neanthes arenaceodentata</i>	96	500	4.564	3.912	48.600
VISSSEN					
<i>Pimephales promelas</i>	24	200	3.178	6.908	19.440
<i>Pimephales promelas</i>	24	100	3.178	6.908	9.720
no photo-induction:					
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	4000	4.564	5.521	388.800
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	3980	4.564	5.521	386.856
<i>Lepomis macrochirus</i>	48	4000	3.871	6.215	388.800

Helling van de ILC₅₀-lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

ILC₅₀ = a * lnT	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	0.238
Epibenthos *	0.994
Vissen *	2.111
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	0.089
<i>Artemia salina</i>	0.709
<i>Mysidopsis bahia</i>	0.994
<i>Neanthes arenaceodentata</i>	12.42
<i>Menidia beryllina</i>	0.994
<i>Pimephales promelas</i>	2.111

<i>Lepomis macrochirus</i>	67.26
----------------------------	-------

* helling berekend op basis van data waarbij rekening werd gehouden met fototoxiciteit

4.6.11 Fluoreen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	330

Gemeten BCF	
<i>Pimephales promelas</i>	1288
<i>Lepomis macrochirus</i>	200 - 1800

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	48	430	3.871	2.708	7.095
<i>Daphnia pulex</i>	48	210	3.871	2.708	3.465
EPIBENTHOS					
<i>Gammarus</i>					
<i>pseudolimnaeus</i>	96	600	4.564	3.912	9.900
<i>Palaemonetes pugio</i>	96	320	4.564	3.912	5.280
VISSEN					
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	910	4.564	5.521	15.015
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	820	4.564	5.521	13.530
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96	1680	4.564	5.521	27.720

Helling van de ILC₅₀-lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

ILC₅₀ = a * lnT	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	1.950
Epibenthos	1.940
Vissen	3.397
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	2.62
<i>Daphnia pulex</i>	1.280
<i>Gammarus pseudolimnaeus</i>	2.5317
<i>Palaemonetes pugio</i>	1.380
<i>Lepomis macrochirus</i>	2.719

<i>Oncorhynchus mykiss</i>	2.450
<i>Cyprinodon variegatus</i>	5.020

4.6.12 Heptaan

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	773
Gemeten BCF	
Geen BCF-data beschikbaar	

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	48	1500	3.871	2.708	57.975
EPIBENTHOS					
<i>Chaetogammarus</i>					
<i>marinus</i>	96	200	4.564	3.912	7.730
<i>Mysidopsis bahia</i>	96	100	4.564	3.912	3.865
VISSSEN					
<i>Carassius auratus</i>	24	4000	3.178	6.908	154.600
<i>Tilapia mossambica</i>	96	375000	4.564	5.521	14493.750
<i>Gambusia affinis</i>	96	49240	4.564	5.521	1903.126
<i>Gambusia affinis</i>	48	49240	3.871	6.215	1903.126
<i>Gambusia affinis</i>	24	49240	3.178	6.908	1903.126

Helling van de ILC₅₀-lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

ILC₅₀ = a * lnT	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	21.408
Epibenthos	1.482
Vissen	22.381
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	21.408
<i>Chaetogammarus marinus</i>	1.976
<i>Mysidopsis bahia</i>	0.988
<i>Carassius auratus</i>	22.381

<i>Tilapia mossambica</i>	2625
<i>Gambusia affinis</i>	303.72
Helling vissen : enkel op basis van <i>C. auratus</i>	

4.6.13 Hexaan

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	184

Gemeten BCF	
Geen BCF-data beschikbaar	

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	48	2100	3.871	2.708	19.320
<i>Artemia salina</i>	24	3530	3.178	3.401	32.476
<i>Artemia salina</i>	24	1510	3.178	3.401	13.892
EPIBENTHOS					
<i>Chaetogammarus</i>					
<i>marinus</i>	96	400	4.564	3.912	3.680
<i>Mysidopsis bahia</i>	96	400	4.564	3.912	3.680
VISSEN					
<i>Carassius auratus</i>	24	4000	3.178	6.908	36.800

Helling van de ILC₅₀-lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

ILC₅₀ = a * lnT	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	6.893
Epibenthos	0.901
Vissen	5.327
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	7.134
<i>Artemia salina</i>	3.524
<i>Chaetogammarus marinus</i>	0.941
<i>Mysidopsis bahia</i>	0.941
<i>Carassius auratus</i>	5.327

4.6.14 1-Methyl-naftaleen

Bioconcentratiefactoren.

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	184

Gemeten BCF	
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	38 - 129
<i>R. cuneata</i> (clam)	8.5
<i>P. stellatus</i> (starry flounder) (spieren)	320

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Artemia salina</i>	24	2566	3.178	3.401	23.607
<i>Artemia salina</i>	24	1610	3.178	3.401	14.812
EPIBENTHOS					
<i>Cancer magister</i>	96	1900	4.564	3.912	17.480
VISSSEN					
<i>Pimephales promelas</i>	24	9000	3.178	6.908	82.800
<i>Pimephales promelas</i>	48	9000	3.871	6.215	82.800
<i>Pimephales promelas</i>	72	9000	4.277	5.809	82.800
<i>Pimephales promelas</i>	96	9000	4.564	5.521	82.800
brown trout	24	8400	3.178	6.908	77.280
<i>Cyprinodon variegatus</i>	24	3400	3.178	6.908	31.280

Helling van de ILC₅₀-lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

ILC₅₀ = a * lnT	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	5.648
Epibenthos	4.468
Vissen	11.279
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Artemia salina</i>	5.648
<i>Cancer magister</i>	4.468
<i>Pimephales promelas</i>	13.447
<i>brown trout</i>	11.187
<i>Cyprinodon variegatus</i>	4.5282

4.6.15 2-Methylnaftaleen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	184

Gemeten BCF	
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	26 - 190
<i>R. cuneata</i> (clam)	8.1
<i>P. stellatus</i> (starry flounder) (spieren)	400
<i>Oncorhynchus</i> sp.	40 - 23500

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Eurytemora affinis</i>	24	1300	3.178	3.401	11.960
<i>Eurytemora affinis</i>	24	1500	3.178	3.401	13.800
<i>Daphnia magna</i>	48	1490	3.871	2.708	13.708
EPIBENTHOS					
<i>Palaemonetes pugio</i>	96	1100	4.564	3.912	10.120
<i>Penaeus aztecus</i>	24	700	3.178	5.298	6.440
<i>Penaeus aztecus</i>	96	600	4.564	3.912	5.520
<i>Cancer magister</i>	96	1300	4.564	3.912	11.960
VISSEN					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	24	2000	3.178	6.908	18.400

Helling van de ILC₅₀-lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

ILC ₅₀ = a * lnT	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	4.094
Epibenthos	1.921
Vissen	2.664
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Eurytemora affinis</i>	3.787
<i>Daphnia magna</i>	5.062
<i>Palaemonetes pugio</i>	2.587
<i>Penaeus aztecus</i>	0.809
<i>Cancer magister</i>	3.057
<i>Cyprinodon variegatus</i>	2.664

4.6.16 Fenanthreen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	1638

Gemeten BCF	
vissen (berekend)	570
<i>Pimephales promelas</i>	2630
<i>Daphnia pulex</i>	374
<i>Chlorella fusca</i>	1760
<i>R. cuneata</i> (clam)	32
<i>M. inquinata</i> (clam)	10.2
<i>Prionospio cirrifera</i> (polychaet)	5.7
<i>Capitella capitata</i> (polychaet)	30.7

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	2	450	0.693	5.886	36.855
<i>Daphnia magna</i>	48	200	3.871	2.708	16.380
<i>Daphnia pulex</i>	96	100	4.564	2.015	8.190
<i>Daphnia pulex</i>	48	350	3.871	2.708	28.665
<i>Daphnia pulex</i>	48	100	3.871	2.708	8.190
<i>Artemia salina</i>	24	200	3.178	3.401	16.380
<i>Artemia salina</i>	24	300	3.178	3.401	24.570
<i>Artemia salina</i>	24	500	3.178	3.401	40.950
EPIBENTHOS					
<i>Gammarus minus</i>	48	460	3.871	4.605	37.674
<i>Palaemonetes pugio</i>	24	370	3.178	5.298	30.303
VISSEN					
<i>Micropterus salmoides</i>	168	180	5.124	4.962	14.742
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	672	40	6.510	3.576	3.276
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	648	30	6.474	3.612	2.457
<i>M. salmoides</i>	168	250	5.124	4.962	20.475

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	6.877
Epibenthos	6.779
Vissen	2.602
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	6.224
<i>Daphnia pulex</i>	6.211
<i>Artemia salina</i>	8.027
<i>Gammarus minus</i>	8.181
<i>Palaemonetes pugio</i>	5.719
<i>Micropterus salmoides</i>	3.549
<i>Gambusia affinis</i>	2225
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	2.602

4.6.17 Naftaleen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K_{OW}	67
Gemeten BCF	
<i>Chlorella fusca</i>	130
<i>Daphnia pulex</i>	118
<i>Lepomis macrochirus</i>	310
<i>Pimephales promelas</i>	426
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	16 - 79.5
<i>R. cuneata</i> (clam)	2.3 - 6.1
<i>Mytilus edulis</i>	37 - 44
<i>C. helgolandicus</i> (copepode)	50 - 60
<i>Eurytemora affinis</i>	5000
<i>Penaues aztecus</i>	195
<i>U. minax</i> (fiddler crab)	325
<i>S. cinereum</i> (wharf crab)	404
<i>C. stigmaeus</i> (speckled crab)	22.5 – 160.3
<i>G. mirabilis</i> (mudsucker)	11.8 - 252
<i>P. stellatus</i> (starry flounder)	220
Oyster	4000-6000

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC_{50} -lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	48	3400	3.871	2.708	11.900
<i>Daphnia magna</i>	48	4100	3.871	2.708	14.350
<i>Daphnia magna</i>	48	4700	3.871	2.708	16.450
<i>Daphnia magna</i>	48	2160	3.871	2.708	7.560
<i>Daphnia magna</i>	24	6600	3.178	3.401	23.100
<i>Daphnia magna</i>	48	2100	3.871	2.708	7.350
<i>Artemia salina</i>	24	3200	3.178	3.401	11.200
<i>Artemia salina</i>	24	2100	3.178	3.401	7.350
<i>Calanus finmarchicus</i>	96	2500	4.564	2.015	8.750
<i>Callinectes sapidus</i>	48	2300	3.871	2.708	8.050
<i>Callinectes sapidus</i>	24	1980	3.178	3.401	6.930
<i>Daphnia pulex</i>	48	3400	3.871	2.708	11.900
<i>Daphnia pulex</i>	96	1000	4.564	2.015	3.500
<i>Daphnia pulex</i>	48	3890	3.871	2.708	13.615
<i>Daphnia pulex</i>	48	2920	3.871	2.708	10.220
<i>Daphnia pulex</i>	96	1000	4.564	2.015	3.500
<i>Eurytemora</i>	24	3800	3.178	3.401	13.300
<i>Elasmopus pecteniscus</i>	96	2680	4.564	2.015	9.380
<i>Calanus finmarchicus</i>	96	2500	4.564	2.015	8.750
EPIBENTHOS					
<i>Gammarus minus</i>	48	3900	3.871	4.605	13.650
<i>Metapenaeus monoceros</i>	96	5000	4.564	3.912	17.500
<i>Hemigrapsus nudus</i>	96	1800	4.564	3.912	6.300
<i>Hemigrapsus nudus</i>	168	1000	5.124	3.352	3.500
<i>Neomysis americana</i>	96	800	4.564	3.912	2.800
<i>Neomysis americana</i>	96	1000	4.564	3.912	3.500
<i>Neomysis americana</i>	96	850	4.564	3.912	2.975
<i>Neomysis americana</i>	96	1280	4.564	3.912	4.480
<i>Penaeus aztecus</i>	96	2500	4.564	3.912	8.750
<i>Penaeus aztecus</i>	24	2500	3.178	5.298	8.750
<i>Penaeus aztecus</i>	96	2500	4.564	3.912	8.750
<i>Palaemonetes pugio</i>	24	2600	3.178	5.298	9.100
<i>Palaemonetes pugio</i>	96	2300	4.564	3.912	8.050
<i>Palaemonetes pugio</i>	96	2350	4.564	3.912	8.225
<i>Parhyale hawaiensis</i>	24	6200	3.178	5.298	21.700

<i>Pandalus goniurus</i>	24	1290	3.178	5.298	4.515
<i>Pandalus goniurus</i>	96	971	4.564	3.912	3.399
<i>Pandalus goniurus</i>	96	2160	4.564	3.912	7.560
<i>Pandalus goniurus</i>	24	2060	3.178	5.298	7.210
<i>Pandalus goniurus</i>	24	2210	3.178	5.298	7.735
<i>Pandalus goniurus</i>	96	1020	4.564	3.912	3.570
<i>Pandalus goniurus</i>	96	1600	4.564	3.912	5.600
<i>Eualus suckleyi</i>	96	1390	4.564	3.912	4.865
VISSSEN					
<i>Pimephales promelas</i>	96	2000	4.564	5.521	7.000
<i>Pimephales promelas</i>	96	4900	4.564	5.521	17.150
<i>Pimephales promelas</i>	96	6100	4.564	5.521	21.350
<i>Pimephales promelas</i>	96	7900	4.564	5.521	27.650
<i>Pimephales promelas</i>	96	8900	4.564	5.521	31.150
<i>Pimephales promelas</i>	72	6080	4.277	5.809	21.280
<i>Pimephales promelas</i>	24	7760	3.178	6.908	27.160
<i>Pimephales promelas</i>	96	6140	4.564	5.521	21.490
<i>Pimephales promelas</i>	96	1990	4.564	5.521	6.965
<i>Pimephales promelas</i>	96	6080	4.564	5.521	21.280
<i>Pimephales promelas</i>	48	6350	3.871	6.215	22.225
<i>Cyprinodon variegatus</i>	24	2400	3.178	6.908	8.400
<i>Fundulus heteroclitus</i>	96	4000	4.564	5.521	14.000
<i>Fundulus heteroclitus</i>	30	5000	3.401	6.685	17.500
<i>Fundulus heteroclitus</i>	96	8000	4.564	5.521	28.000
<i>Oncorhynchus gorboscha</i>	96	1200	4.564	5.521	4.200
<i>Oncorhynchus gorboscha</i>	24	900	3.178	6.908	3.150
<i>Oncorhynchus gorboscha</i>	96	1200	4.564	5.521	4.200
<i>Oncorhynchus gorboscha</i>	96	1840	4.564	5.521	6.440
<i>Oncorhynchus gorboscha</i>	96	1370	4.564	5.521	4.795
<i>Oncorhynchus gorboscha</i>	24	1380	3.178	6.908	4.830
<i>Oncorhynchus gorboscha</i>	24	1840	3.178	6.908	6.440
<i>Oncorhynchus gorboscha</i>	24	1560	3.178	6.908	5.460
<i>Oncorhynchus gorboscha</i>	48	1010	3.871	6.215	3.535
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	1600	4.564	5.521	5.600
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	648	120	6.474	3.612	0.420
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	648	110	6.474	3.612	0.385
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	1800	4.564	5.521	6.300
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	7900	4.564	5.521	27.650
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	4500	4.564	5.521	15.750
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	2600	4.564	5.521	9.100

<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	6100	4.564	5.521	21.350
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	4400	4.564	5.521	15.400
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	72	3200	4.277	5.809	11.200
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	96	2100	4.564	5.521	7.350
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	72	5600	4.277	5.809	19.600
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	96	3200	4.564	5.521	11.200
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	5	5600	1.609	8.476	19.600
<i>M. salmoides</i>	168	680	5.124	4.962	2.380
<i>Sarotherodon mossambica</i>	96	7900	4.564	5.521	27.650
<i>Gadus morhua</i>	96	2000	4.564	5.521	7.000

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	3.760
Epibenthos	1.775
Vissen	2.286
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	4.863
<i>Artemia salina</i>	2.973
<i>Calanus finmarchicus</i>	4.343
<i>Callinectes sapidus</i>	2.400
<i>Daphnia pulex</i>	3.681
<i>Eurytemora affinis</i>	3.910
<i>Elasmopus pecteniscus</i>	4.655
<i>Gammarus minus</i>	2.964
<i>Metapenaeus monoceros</i>	4.473
<i>Hemigrapsus nudus</i>	1.371
<i>Neomysis americana</i>	0.879
<i>Penaeus aztecus</i>	1.957
<i>Palaemonetes pugio</i>	1.907
<i>Parhyale hawaiensis</i>	4.096
<i>Pandalus goniurus</i>	1.250
<i>Eualus suckleyi</i>	1.244
<i>Callinectes sapidus</i>	1.308
<i>Pimephales promelas</i>	3.571
<i>Cyprinodon variegatus</i>	1.216
<i>Fundulus heteroclitus</i>	3.302
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	0.762

<i>Oncorhynchus mykiss</i>	2.344
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	2.234
<i>M. salmoides</i>	0.480
<i>Sarotherodon mossambica</i>	5.008
<i>Gadus morhua</i>	1.268

4.6.18 n-Propylbenzeen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	118
Gemeten BCF	
Geen BCF-data beschikbaar	

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	24	2000	3.178	3.401	11.800
EPIBENTHOS					
geen toxiciteitsdata beschikbaar					
VISSEN					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	1500	4.564	5.521	8.850

Helling van de ILC₅₀-lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

ILC₅₀ = a * lnT	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	3.469
Epibenthos	---
Vissen	1.603
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	3.469
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	1.603

4.6.19 Pyreen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	

Gemeten BCF	
Daphnia pulex	3283
Carassius auratus	457
Oncorhynchus mykiss	21 – 72
Prionospio cirrifera (polychaet)	5.2
Capitella capitata (polychaet)	13.3

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					

EPIBENTHOS					

VISSEN					

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a

Zooplankton	
Epibenthos	
Vissen	
SPECIES-SPECIFIEK	

<i>Daphnia magna</i>	
<i>Artemia salina</i>	
<i>Pimephales promelas</i>	
<i>Lepomis macrochirus</i>	

4.6.20 Tolueen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	24

Gemeten BCF	
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	98
<i>Chlorella fusca</i>	380
<i>Pimephales promelas</i>	91
<i>Carassius auratus</i>	8.3
<i>Anguilla japonica</i>	13
<i>Mytilus edulis</i>	4.2

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	24	7000	3.178	3.401	8.750
<i>Daphnia magna</i>	48	15000	3.871	2.708	18.750
<i>Daphnia magna</i>	48	11500	3.871	2.708	14.375
<i>Daphnia magna</i>	16	3800	2.773	3.807	4.750
<i>Daphnia magna</i>	48	19600	3.871	2.708	24.500
EPIBENTHOS					
<i>Palaemonetes pugio</i>	96	9500	4.564	3.912	11.875
<i>Palaemonetes pugio</i>	48	15500	3.871	4.605	19.375
<i>Palaemonetes pugio</i>	24	21000	3.178	5.298	26.250
<i>Cancer magister</i>	96	28000	4.564	3.912	35.000
<i>Crangon franciscorum</i>	96	4300	4.564	3.912	5.375
<i>Crangon franciscorum</i>	24	12000	3.178	5.298	15.000
<i>Mysidopsis bahia</i>	96	56000	4.564	3.912	70.000
<i>Eualus suckleyi</i>	96	19750	4.564	3.912	24.688
<i>Eualus sp</i>	96	14700	4.564	3.912	18.375
<i>Eualus sp</i>	24	18000	3.178	5.298	22.500
VISSEN					
<i>Carassius auratus</i>	96	23000	4.564	5.521	28.750
<i>Carassius auratus</i>	720	15000	6.579	3.507	18.750
<i>Carassius auratus</i>	96	34000	4.564	5.521	42.500
<i>Carassius auratus</i>	72	24000	4.277	5.809	30.000
<i>Carassius auratus</i>	96	23000	4.564	5.521	28.750

<i>Carassius auratus</i>	24	41590	3.178	6.908	51.988
<i>Carassius auratus</i>	48	27620	3.871	6.215	34.525
<i>Carassius auratus</i>	72	25330	4.277	5.809	31.663
<i>Pimephales promelas</i>	96	38000	4.564	5.521	47.500
<i>Pimephales promelas</i>	96	32000	4.564	5.521	40.000
<i>Pimephales promelas</i>	96	24000	4.564	5.521	30.000
<i>Pimephales promelas</i>	96	31700	4.564	5.521	39.625
<i>Pimephales promelas</i>	96	56400	4.564	5.521	70.500
<i>Pimephales promelas</i>	96	55000	4.564	5.521	68.750
<i>Pimephales promelas</i>	96	25000	4.564	5.521	31.250
<i>Pimephales promelas</i>	96	18000	4.564	5.521	22.500
<i>Pimephales promelas</i>	96	36200	4.564	5.521	45.250
<i>Pimephales promelas</i>	96	12600	4.564	5.521	15.750
<i>Pimephales promelas</i>	96	77400	4.564	5.521	96.750
<i>Pimephales promelas</i>	96	34270	4.564	5.521	42.838
<i>Pimephales promelas</i>	48	46310	3.871	6.215	57.888
<i>Pimephales promelas</i>	24	46310	3.178	6.908	57.888
<i>Pimephales promelas</i>	96	54000	4.564	5.521	67.500
<i>Pimephales promelas</i>	24	56000	3.178	6.908	70.000
<i>Pimephales promelas</i>	96	42330	4.564	5.521	52.913
<i>Pimephales promelas</i>	48	56000	3.871	6.215	70.000
<i>Poelica reticulata</i>	96	28200	4.564	5.521	35.250
<i>Poelica reticulata</i>	96	59300	4.564	5.521	74.125
<i>Poelica reticulata</i>	48	60950	3.871	6.215	76.188
<i>Poelica reticulata</i>	24	62810	3.178	6.908	78.513
<i>Poelica reticulata</i>	336	68000	5.817	4.269	85.000
<i>Lepomis macrochirus</i>	24	24000	3.178	6.908	30.000
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	24000	4.564	5.521	30.000
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	13000	4.564	5.521	16.250
<i>Lepomis macrochirus</i>	48	24000	3.871	6.215	30.000
<i>Lepomis macrochirus</i>	24	17000	3.178	6.908	21.250
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	24	7550	3.178	6.908	9.438
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	24	8090	3.178	6.908	10.113
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	24	6690	3.178	6.908	8.363
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	48	6780	3.871	6.215	8.475
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	96	8090	4.564	5.521	10.113
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	96	7630	4.564	5.521	9.538
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	96	6410	4.564	5.521	8.013
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	48	5620	3.871	6.215	7.025
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	48	6190	3.871	6.215	7.738

<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	5800	4.564	5.521	7.250
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	24000	4.564	5.521	30.000
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	96	5500	4.564	5.521	6.875
<i>Morone saxatilis</i>	96	7300	4.564	5.521	9.125
<i>Clarias lazera</i>	96	26200	4.564	5.521	32.750
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96	13000	4.564	5.521	16.250

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	4.243
Epibenthos	5.443
Vissen	6.149
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	4.243
<i>Palaemonetes pugio</i>	4.254
<i>Cancer magister</i>	8.947
<i>Crangon franciscorum</i>	2.317
<i>Mysidopsis bahia</i>	17.894
<i>Eualus suckleyi</i>	4.697
<i>Eualus sp</i>	4.406
<i>Carassius auratus</i>	6.017
<i>Pimephales promelas</i>	8.981
<i>Poelica reticulata</i>	11.977
<i>Lepomis macrochirus</i>	4.081
<i>Oncorhynchus gorbuscha</i>	1.398
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	3.373
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	1.245
<i>Morone saxatilis</i>	1.653
<i>Clarias lazera</i>	5.931
<i>Cyprinodon variegatus</i>	2.943

4.6.21 o-Xyleen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	36
Gemeten BCF	
Anguilla japonica	21

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	24	1000	3.178	3.401	1.800
<i>Artemia salina</i>	24	23600	3.178	3.401	42.480
EPIBENTHOS					
<i>Palaemonetes pugio</i>	96	7400	4.564	3.912	13.320
<i>Cancer magister</i>	96	6000	4.564	3.912	10.800
<i>Crangon franciscorum</i>	96	1300	4.564	3.912	2.340
<i>Crangon franciscorum</i>	24	5300	3.178	5.298	9.540
VISSEN					
<i>Carassius auratus</i>	24	13000	3.178	6.908	23.400
<i>Carassius auratus</i>	96	17000	4.564	5.521	30.600
<i>Carassius auratus</i>	96	16000	4.564	5.521	28.800
<i>Oncorhynchus sp.</i>	96	13000	4.564	5.521	23.400
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	8050	4.564	5.521	14.490
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	7600	4.564	5.521	13.680
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	96	5500	4.564	5.521	9.900
<i>Morone saxatilis</i>	96	11000	4.564	5.521	19.800
<i>Morone saxatilis</i>	24	11000	3.178	6.908	19.800
<i>Pimephales promelas</i>	96	16400	4.564	5.521	29.520
<i>Pimephales promelas</i>	96	16400	4.564	5.521	29.520
<i>Pimephales promelas</i>	96	16100	4.564	5.521	28.980
<i>Poelica reticulata</i>	96	12000	4.564	5.521	21.600
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	16000	4.564	5.521	28.800

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	6.510
Epibenthos	5.443
Vissen	3.988
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	0.529
<i>Artemia salina</i>	12.490
<i>Palaemonetes pugio</i>	3.405
<i>Cancer magister</i>	2.761
<i>Crangon franciscorum</i>	0.598
<i>Carassius auratus</i>	4.505
<i>Oncorhynchus sp.</i>	4.238
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	2.551
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	1.793
<i>Morone saxatilis</i>	3.147
<i>Pimephales promelas</i>	5.314
<i>Poelica reticulata</i>	3.912
<i>Lepomis macrochirus</i>	5.216

4.6.22 m-Xyleen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K _{OW}	58
Gemeten BCF	
<i>Anguilla japonica</i>	24

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC₅₀-lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (µg/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Artemia salina</i>	24	19300	3.178	3.401	55.970
<i>Daphnia magna</i>	24	4700	3.178	3.401	13.630
<i>Daphnia magna</i>	48	9540	3.871	2.708	27.666
EPIBENTHOS					
<i>Cancer magister</i>	96	12000	4.564	3.912	34.800
<i>Crangon franciscorum</i>	96	3700	4.564	3.912	10.730
<i>Crangon franciscorum</i>	24	4800	3.178	5.298	13.920
VISSEN					
<i>Poelica reticulata</i>	96	13000	4.564	5.521	37.700
<i>Morone saxatilis (bass)</i>	96	9200	4.564	5.521	26.680
<i>Carassius auratus</i>	24	16000	3.178	6.908	46.400
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	8400	4.564	5.521	24.360
<i>Pimephales promelas</i>	96	16000	4.564	5.521	46.400

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	10.228
Epibenthos	4.292
Vissen	6.287
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Artemia salina</i>	16.456
<i>Daphnia magna</i>	6.416
<i>Cancer magister</i>	15.799
<i>Crangon franciscorum</i>	2.668
<i>Poelica reticulata</i>	6.828
<i>Morone saxatilis (bass)</i>	4.832
<i>Carassius auratus</i>	6.717
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4.412
<i>Pimephales promelas</i>	8.404

4.6.23 p-Xyleen

Bioconcentratiefactoren

Berekende BCF op basis van de log K_{OW}	53
Gemeten BCF	
Geen BCF-data beschikbaar	

Toxiciteitsdata voor de berekening van een algemene ILC_{50} -lnT relatie voor de verschillende trofische niveaus

Organisme	Texp (h) (blootstellings- periode)	EC50 (μ g/L)	lnTexp	lnT (lnT0 – lnTexp)	ILC50 (mg/kg)
ZOOPLANKTON					
<i>Daphnia magna</i>	24	3600	3.178	3.401	9.540
<i>Daphnia magna</i>	48	8480	3.871	2.708	22.472
<i>Artemia salina</i>	24	24590	3.178	3.401	65.164
EPIBENTHOS					
<i>Crangon franciscorum</i>	96	2000	4.564	3.912	5.300
<i>Crangon franciscorum</i>	96	2000	4.564	3.912	5.300
<i>Crangon franciscorum</i>	24	2000	3.178	5.298	5.300
VISSEN					
<i>Poelica reticulata</i>	24	35000	3.178	6.908	92.750

<i>Poelica reticulata</i>	96	8800	4.564	5.521	23.320
<i>Oncorhynchus spp.</i>	24	29000	3.178	6.908	76.850
<i>Oncorhynchus spp.</i>	96	27000	4.564	5.521	71.550
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	2600	4.564	5.521	6.890
<i>Carassius auratus</i>	24	18000	3.178	6.908	47.700
<i>Morone saxatilis</i>	96	2000	4.564	5.521	5.300
<i>Morone saxatilis</i>	24	2000	3.178	6.908	5.300
<i>bluegill</i>	24	37000	3.178	6.908	98.050

Helling van de ILC_{50} -lnT relatie voor trofische niveaus (algemeen) en individuele species

$ILC_{50} = a * \ln T$	
ALGEMEEN	a
Zooplankton	10.336
Epibenthos	1.185
Vissen	7.783
SPECIES-SPECIFIEK	
<i>Daphnia magna</i>	4.9362
<i>Artemia salina</i>	19.159
<i>Crangon franciscorum</i>	1.185
<i>Poelica reticulata</i>	9.8391
<i>Oncorhynchus spp.</i>	11.84
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	1.2479
<i>Carassius auratus</i>	6.9053
<i>Morone saxatilis</i>	0.8424

HOOFDSTUK 5

VOORSPELLEN VAN LANGE-TERMIJN EFFECTEN VAN OLIEVERONTREINIGING : HYPOTHETISCHE CASESTUDIES

5.1 Gebruik van het LTEM voor het voorspellen van lage-termijn effecten

Op basis van het LTEM model dat in Hoofdstuk 3 werd ontwikkeld, werden een aantal hypothetische gevallen uitgewerkt voor het voorspellen van het lange-termijn effect van een aantal contaminanten op de verschillende niveaus van het vereenvoudigd voedselwebmodel (effect: reductie van de levensverwachting).

De volgende 3 contaminanten werden onderzocht: cyclohexaan, naftaleen en toluen.

5.1.1 Algemeen Model voor drie contaminanten

Bij de ontwikkeling en toepassing van het LTEM werden een aantal belangrijke assumpties vooropgesteld:

- identieke bioconcentratiefactoren (BCF) voor alle organismen
- identieke vetfractie (L) voor elk trofisch niveau van de voedselketen
- identieke assimilatie-efficiëntie (a_c) voor elk trofisch niveau van de voedselketen
- eenvoudige voedselketen: fytoplankton → zooplankton → epibenthos/benthos → vissen
- levensverwachting: 30 dagen voor zooplankton; 200 dagen voor epibenthos/benthos; 1000 dagen voor vissen
- identieke vetspecifieke opnamesnelheden (LSUR, lipid-specific uptake rate) voor elk trofisch niveau van de voedselketen

In Tabel 5.1 worden de verschillende hellingen van de ILC50-lnT relatie voor de drie stoffen en drie trofische niveaus weergegeven. Deze hellingen werden vervolgens gebruikt bij de evaluatie van het algemeen model.

Tabel 5.1: ILC50 – lnT hellingen voor verschillende toxicanten en trofische niveaus.

	Cyclohexaan	Naftaleen	Tolueen
Zooplankton	9.562	3.902	4.243
(Epi)benthos	2.811	1.810	5.443

Vissen	25.141	2.286	6.149
--------	--------	-------	-------

De gebruikte bioconcentratiefactoren voor de verschillende stoffen is afgeleid van de water-octanol partiticoëfficiënt ($\log K_{OW}$), gebruik makend van de vergelijkingen van Meylan et al. (1999). Voor de meeste stoffen zijn de afgeleide bioconcentratiefactoren vergelijkbaar met gerapporteerde (gemeten) waarden uit de literatuur.

In Tabel 5.2 wordt de berekende reductie van de levensverwachting weergegeven na een blootstelingsperiode van 5 dagen aan 0.1 mg/L, en dit voor de drie verschillende toxicanten.

Tabel 5.2: % reductie van de levensverwachting voor drie trofische niveaus als gevolg van vijf dagen blootstelling aan 0.1 mg/L van drie verschillende stoffen

	Cyclohexaan	Naftaleen	Tolueen
Zooplankton	6.243	11.682	3.999
(Epi)benthos	15.882	19.050	2.478
Vissen	1.947	15.644	2.233

5.1.2 Species-specifieke model

Wanneer voor een bepaalde stof voldoende gegevens voorhanden zijn, kunnen met deze methode meer species-specifieke voorspellingen worden gemaakt. een dergelijke aanpak wordt gedemonstreerd aan de hand van een hypothetisch species-specifiek voedselweb. Dit web wordt in Figuur 5.1 weergegeven. Het gaat hier wel degelijk om een fictief voedselweb waarbij er zowel zoetwater als mariene species worden gebruikt. Dit web dient echter enkel en alleen ter illustratie van hoe het voorgestelde LTEM meer specifiek kan worden gebruikt.

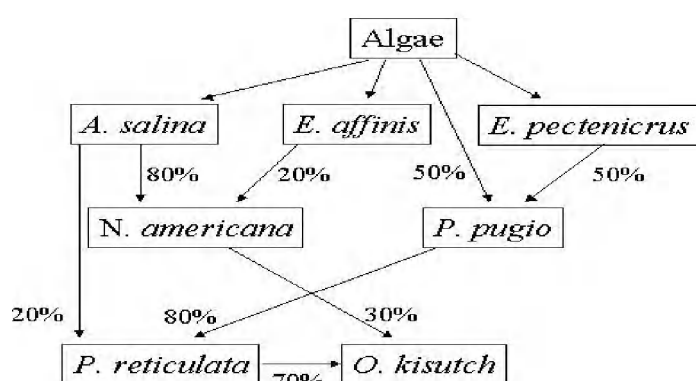
5.1.2.1 Beschrijving van de specifieke voedselketen

In het algemeen model wordt er aangenomen dat elk trofisch niveau slechts 1 enkele voedselbron heeft. Wanneer de specifieke voedselpreferenties van de verschillende organismen in de voedselketen gekend zijn, kan een meer realistische benadering worden toegepast. In het hypothetische voedselweb (Figuur 5.1) voedt de vish *P. reticulata* zich voor 80% met de garnaal *P. pugio* (epibenthos) en voor 20% met de pekelkreeft *A. salina* (zooplankton).

De opname van een contaminant via het voedsel voor de vus *P. reticulata* kan dus als volgt worden berekend:

$$U_{\text{voedsel}} = 0.8 * a_e * \text{LSUR}_{\text{vis}} * (\text{blootstellingsperiode} + \text{generatietijd van het epibenthos}/2) * C_{\text{epib.}} + 0.2 * a_e * \text{LSUR}_{\text{vis}} * (\text{blootstellingsperiode} + \text{generatietijd van het zooplankton}/2) * C_{\text{zoopl.}}$$

Indien gekend kan de specifieke voedselpreferenties van de prooi-organismen eveneens in het model worden geïncorporeerd. Ook prooi-organismen van eenzelfde trofisch niveau als de rover, kunnen in het model worden ingebouwd (vb. vissen die zich voeden met kleinere vissen).



Figuur 5.1: Species-specifiek voedselweb

De resultaten van een simulatie, op basis van het in Figuur 5.1 voorgestelde model, zijn weergegeven in Tabel 5.3. Er werd een blootstellingsperiode van 5 dagen aan 0.1 mg/L naftaleen aangenomen. Op basis van de assumpties zoals gegeven in sectie 5.2, werd de procentuele reductie van de levensverwachting voor de verschillende organismen van het voedselmodel berekend (Tabel 5.3).

Tabel 5.3: Procentuele reductie van de levensverwachting van de verschillende organismen uit het hypothetisch voedselweb als gevolf van vijf dagen blootstelling aan 0.1 mg/L naftaleen..

Species	% reductie van de levensverwachting
<i>A. salina</i>	15.05
<i>E. pectenocrus</i>	9.89
<i>E. affinis</i>	11.66
<i>N. americana</i>	34.85
<i>P. pugio</i>	17.77
<i>P. reticulata</i>	3.14

<i>O. kisutch</i>	31.02
-------------------	-------

Deze initiële oefening geeft duidelijk weer dat de voorspelde reductie van de levensverwachting merkbaar kan verschillen voor organismen binnen dezelfde voedselketen, afhankelijk van hun gevoeligheid (helling van de ILC50-LnT relatie) en hun voedselpreferentie (bijvoorbeeld voor vissen: 3.14 vs. 31.0 % reductie).

5.1.2.2 Species-specifieke fysiologische gegevens

In het algemeen model worden er een aantal assumpties voorgesteld en gebruikt. Het is evident dat deze default-waarden kunnen worden vervangen door (gemeten) species-specifieke data. Het betreft ondermeer de volgende parameters:

- species-specifieke bioconcentratiefactoren (gemeten data) voor de verschillende organismen van een voedselweb.
- levensverwachting
- assimilatiefactoren
- vetfractie van de verschillende species
- vetspecifieke opnamesnelheden
- generatietijden van de prooi-organismen
- species-specifieke ILC50-LnT relaties

Indien deze gegevens niet (of slechts gedeeltelijk) beschikbaar zijn, worden voor de ontbrekende waarden de vooropgestelde defaultwaarden gebruikt.

Er moet worden opgemerkt dat het vervangen van sommige default-waarden door meer specifieke data belangrijke gevolgen kan hebben: de helling van de ILC50-LnT relatie is afgeleid van berekende interne concentraties waarbij gebruik werd gemaakt van de theoretisch afgeleide BCF. Wanneer de theoretische BCF wordt vervangen door een gemeten waarde, moet ook de helling van de ILC50-LnT relatie opnieuw worden berekend. Bovendien zal ook de helling van deze relatie wijzigen wanneer de species-specifieke levensverwachting wordt aangepast.

5.2 Case studie met Fuel No2 olie: lange termijn effecten van de belangrijkste contaminanten

In Hoofdstuk 2 werd reeds de partitionering van een hypothetische olieverontreiniging (10 Ton Fuel No.2) berekend. In dit Hoofdstuk wordt het ontwikkelde LTEM toegepast, gebruik makend van de

concentraties van de belangrijkste componenten bij deze olieverontreiniging. In Tabel 5.4 wordt de gebruikte concentraties in de waterkolom weergegeven. In het eerste geval (A) wordt aangenomen dat de volledige hoeveelheid van de desbetreffende component zich onmiddellijk gelijkmatig over het ganse volume van de waterkolom heeft verdeeld (15 km², 30 m diepte, $t=0$). In het tweede geval (B) wordt enkel de fractie beschouwd die zich in de waterkolom bevindt nadat de stof zich over de verschillende compartimenten van het milieu heeft verdeeld (evenwichtssituatie). Er wordt een blootstellingsperiode van 14 dagen aangenomen. Het procentueel aandeel in de waterkolom werd reeds berekend in Hoofdstuk 2 (zie sectie x.x), maar wordt eveneens in Tabel 5.4 gegeven.

Tabel 5.4: Concentratie in zeewater van de belangrijkste contaminanten van Fuel No.2 bij een hypothetische olieverontreiniging

Component	Totale concentratie in waterkolom op $t=0$	% aandeel in water	Concentratie in waterkolom bij evenwicht
	(A)		(B)
Naftaleen	89 ng/L	29.0	25.8 ng/L
Fluoreen	80 ng/L	25.8	20.6 ng/L
Fenanthreen	9.5 ng/L	19.4	1.84 ng/L
Fluorantheen	0.82 ng/L	4.5	37 pg/L
Pyreen	0.91 ng/L	4.7	43 pg/L
Benzo[a]anthraceen	0.027 ng/L	1.3	0.35 pg/L
Chryseen	0.048 ng/L	0.63	0.30 pg/L
Benzo[a]pyreen	0.013 ng/L	0.65	0.085 pg/L

Op basis van deze concentraties werd met het LTEM reducties van de levensverwachting waargenomen van 0.05% of lager.

In realiteit zal de concentratie van deze componenten tijdens de eerste uren/dagen lokaal verschillende grootte-orde hoger liggen. Omdat wordt aangenomen dat het evenwicht tussen de externe en interne concentratie relatief snel wordt bereikt, kan worden verondersteld dat het lange-termijn hoofdzakelijk wordt bepaald door de initiele, hogere concentraties van de verschillende componenten. Voor een meer realistische schatting van de lange-termijn effecten wordt er aangenomen dat gedurende de eerste twee dagen de concentratie (locaal) een factor 100 hoger ligt dan hetgeen wordt gemeten wanneer de stoffen zich gelijkmatig over de ganse watermassa hebben verdeeld. De reductie van de levensverwachting bij de verschillende trofische niveaus bij deze assumptie wordt weergegeven in Tabel 5.5.

Tabel 5.5: Reductie van de levensverwachting van drie trofische niveaus, berekend met het LTEM.

Component	Reductie van de levensverwachting van zooplankton	Reductie van de levensverwachting van (epi)benthos	Reductie van de levensverwachting van vissen
Naftaleen	0.9	1.7	1.4
Fluoreen	7.5	6.9	4.2
Fenanthreen	1.3	1.2	3.2
Fluorantheen	3.8	0.8	0.4
Pyreen	--	--	--
Benzo[a]anthraceen	0.63	--	--
Chryseen	< 0.01	--	--
Benzo[a]pyreen	0.2	--	0.2

Uit de resultaten blijkt dat bij een dergelijke graad van verontreiniging de algemene levensverwachting voor de verschillende trofische niveaus zal worden gereduceerd met 4.2 – 7.5 %. De waargenomen effecten zijn voornamelijk te wijten aan fluoreen en – in mindere mate – aan naftaleen, fenanthreen en fluorantheen. Omdat momenteel nog geen onderzoek werd verricht naar de gecombineerde toxische werking van deze verbindingen, wordt aangenomen dat het uiteindelijk effect zal worden bepaald door de stof die de grootste reductie van de levensverwachting veroorzaakt. Een dergelijke benadering werd eveneens toegepast in het eerder ontwikkelde BESM (Vandenbroele et al., 1997).

Uit Tabel 5.5 blijkt eveneens dat de klassificatie in toxiciteit van deze stoffen verschillend is voor de drie trofische niveaus. De hoeveelheid fluoranteen in Fuel No.2 leidt bij het zooplankton tot een grotere reductie van de levensverwachting dan naftaleen; voor de vissen daarentegen blijkt naftaleen meer toxisch te zijn. Voor een aantal stoffen ontbreken de nodige toxiciteitsdata om de reductie van de levensverwachting van één of meerde trofische niveaus te berekenen. Voor pyreen werden zelfs geen bruikbare data in de literatuur gevonden.

BIBLIOGRAFIE

- Albrecht A, Reise K, 1994. Effects of *Fucus vesiculosus* covering intertidal mussel beds in the Wadden Sea. *Helgolander Meeresuntersuchungen*, 48, 243-256.
- Anderson JW, 1977. Responses to sublethal levels petroleum hydrocarbons: are they sensitive indicators and do they correlate with tissue contamination? In: Wolfe DA (Ed.), *Fate and Effects of Petroleum Hydrocarbons in Marine Ecosystems and Organisms* Pergamon, New York, USA, pp. 95-114.
- Ankley GT, Erickson RJ, Phipps GL, Mattson VR, Kosian PA, Sheedy BR, Cox JS, 1995. Effects of light intensity on the phototoxicity of fluoranthene to a benthic macroinvertebrate. *Environmental Science and Technology*, 29, 2828-2833.
- Ankley GT, Erickson RJ, Sheedy BR, Kosian PA, Mattson VR, Cox JS, 1997. Evaluation of models for predicting the phototoxic potency of polycyclic aromatic hydrocarbons. *Aquatic Toxicology* 37, 37-50.
- Barber MC, Suárez LA, Lassiter RR, 1991. Modelling bioaccumulation of organic pollutants in fish with an application to PCBs in Lake Ontario salmonids. *Canadian Journal of Fisheries and Aquatic Sciences*, 48, 318-337.
- Barron MG, 1990. Bioconcentration. *Environmental Science and Technology*, 24, 1612-1618.
- Barron MG, Podrabsky T, Ogle S, Ricker RW, 1999. Are aromatic hydrocarbons the primary determinant of petroleum toxicity to aquatic organisms? *Aquatic Toxicology*, 1999, 253-268.
- Beddig S, Brockmann U, Dannecker W, Korner D, Pohlmann T, Puls W, Radach G, Rebers A, Rick HJ, Schatzmann M, Schlunzen H, Schulz M, 1997. Nitrogen fluxes in the German Bight. *Marine Pollution Bulletin*, 34, 382-394.
- Berganon JM, Crews D, McLachlan JA, 1994. PCGs as environmental oestrogens: turtle sex determination as a biomarker of environmental contamination. *Environmental Health Perspectives*, 102, 780-798.
- Billen G, Lancelot C, Meybeck M, 1991. N, P and Si retention along the aquatic continuum from land to ocean. In: Mantoura RFC, Martin JM, Wollast R (Eds.), *Ocean Margin Processes in Global Change*. Wiley Publ., Chichester, UK, pp. 19-44.
- Boese BL, Lamberson JO, Swartz RC, Ozretich RJ, 1997. Photoinduced toxicity of fluoranthene to seven marine benthic crustaceans. *Archives of Environmental Contamination and Toxicology*, 32, 389-393.
- Borga K, Gabrielsen GW, Skaare JU, 2001. Biomagnification of organochlorines along a Barents Sea food chain. *Environmental Pollution*, 113, 187-198.

- Bowling JW, Leversee GJ, Landrum PF, Giesy JP, 1983. Acute mortality of anthracene contaminated fish exposed to sunlight. *Aquatic Toxicology* 3, 79-90.
- Campfens J, Mackay D, 1997. Fugacity-based model of PCB bioaccumulation in complex aquatic food webs. *Environmental Science and Technology*, 31, 577-583.
- Chadha A, McKelvey LD, Mangis JK, 1998. Targeting lead in the multimedia environment in the continental United States. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 48, 3-15.
- Chapra SC, 1997. *Surface Water Quality Modeling*. Mc-Graw-Hill, New York, USA, pp. 784-794.
- Chiou CT, Freed VH, Schmedding DW, Kohnert RL, 1977. Partition coefficient and bioaccumulation of selected organic chemicals. *Environmental Science and Technology*, 11.
- Clark KE, Gobas FAPC, Mackay D, 1990. Model of organic chemical uptake and clearance from fish from food and water. *Environmental Science and Technology*, 31, 577-583.
- Connell DW, Markwell R, 1992. Mechanisms and prediction of nonspecific toxicity to fish using bioconcentration characteristics. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 24, 247-265.
- Connell DW, Miller GJ, 1981. Petroleum hydrocarbons in aquatic ecosystems – behaviour and effects of sublethal concentrations: part 2. *CRC Critical Reviews of Environmental Control*, 11, 105-162.
- Connolly JP, 1991. Application of a food chain model to polychlorinated biphenyl contamination of the lobster and winter flounder food chains in New Bedford Harbor. *Environmental Science and Technology*, 25, 760-770.
- Davies AG, De Madiviaga I, Baitista B, Fernandez E, Harbour DS, Serret P, Tranter PRG, 1992. The ecology of a coastal *Phaeocystis* bloom in the north-western English Channel in 1990. *Journal of Marine Biological Association UK*, 72, 691-708.
- De Maagd PG-J, Van de Klundert CM, Van Wezel AP, Opperhuizen A, Sijm DTHM, 1997. Lipid content and time-to-death-dependent lethal body burden of naphthalene and 1,2,4-trichlorobenzene in fathead minnow (*Pimephales promelas*). *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 38, 232-237.
- De Wolf W, Opperhuizen A, Seinen W, Hermens JLM, 1991. Influence of survival time in the lethal body burden of 2,3,4,5-tetrachloroaniline in Guppy. *Science of the Total Environment*, 109/110, 457-459.
- De Wolf W, Opperhuizen A, Seinen W, Hermens JLM, 1992. Bioconcentration of lethal body burden of 2,3,4,5-tetrachloroaniline in Guppy (*Pocilia reticulata*). *Chemosphere*, 25, 853-863.

- Doe KG, Wells PG, 1978. Acute aquatic toxicity and dispersing effectiveness of oil spill dispersants: results of a Canadian oil dispersant testing program (1973 to 1977). In: McCarthy LT, Lindblom GP, Walter HF (Eds.), Chemical Dispersants for the Control of Oil Spills ASTM STP 659. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, USA, pp. 50-65.
- Donkin P, Widdows J, Evans SV, Worral CM, Carr M, 1989. Quantitative structure-activity relationships for the effect of hydrophobic organic chemicals on rate of feeding by mussels (*Mytilus edulis*). Aquatic Toxicology, 14, 277-294.
- Driscoll SK, Landrum PF, 1997. A comparison of equilibrium partitioning and critical body residue approaches for predicting toxicity of sediment-associated fluoranthene to freshwater amphipods. Environmental Toxicology and Chemistry, 16, 2179-2186.
- Driscoll SK, Landrum PF, Tighe E, 1997. Accumulation and toxicokinetics of fluoranthene in water-only exposures with freshwater amphipods. Environmental Toxicology and Chemistry, 4, 754-761.
- Duarte-Davidson R, Courage C, Rushton L, Levy L, 2001. Benzene in the environment: an assessment of the potential risks to the health of the population. Occupational and Environmental Medicine, 58, 2-13.
- Ducrotoy J-P, 1999. Indications of change in the marine flora of the North Sea in the 1990s. Marine Pollution Bulletin, 38, 646-654.
- Eertman RHM, Groenink CLFM, Sandee B, Hummel M, Smaal AC, 1995. Response of the blue mussel *Mytilus edulis* L. following exposure to PAHs or contaminated sediment. Marine Environmental Research, 39, 169-173.
- Emery VL, Dillon TM, 1996. Chronic toxicity of phenanthrene to the marine polychaete worm, *Nereis (Neanthes) arenaceodentata*. Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology, 56, 265-270.
- Fiala Z, Vyskocil A, Krajak V, Viau C, Ettlerova E, Bukac J, Fialova D, Emminger S, 2001. Environmental exposure of small children to polycyclic aromatic hydrocarbons. International Archives of Occupational and Environmental Health, 74, 411-420.
- French DP, 1991. Estimation of exposure and resulting mortality of aquatic biota following spills of toxic substances using a numerical model. In: Mayes MA, Barron MG (Eds.), Aquatic Toxicology and Risk Assessment, ASTM STP 1124, vol. 14. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, USA, pp. 35-47.
- Gala WR, Giesy JP, 1992. Photoinduced toxicity of anthracene to the green-alga, *Selenastrum capricornutum*. Archives of Environmental Contamination and Toxicology, 23, 316-323.
- Getter CD, Baca BJ, 1984. A laboratory approach for determining the effects of oils and dispersants on mangroves. In: Allen TE (Ed.), Oil Spill Chemical Dispersants:

- Research, Experience, and Recommendations, ASTM STP 840. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, USA, pp. 5-13.
- Gin KYH, Kamrul Huda MD, Lim WK, Tkalic P, 2001. An oil spill-food chain interaction model for coastal waters.
 - Gobas, FAPC, 1993. A model for predicting the bioaccumulation of hydrophobic organic chemicals in aquatic food-webs: application to Lake Ontario. *Ecological Modelling*, 69, 1-17.
 - Gobas FAPC, Morrison GA, 2000. Bioconcentration and biomagnification in the aquatic environment. In: Boethling RS, Mackay D (Eds.), *Handbook of Property Estimation Methods for Chemicals*. CRC Press, Boca Raton, FL, pp. 189-231.
 - Ireland DS, Burton GA, Hess GG, 1996. *In situ* evaluations of turbidity and photoinduction of polycyclic aromatic hydrocarbons. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 15, 574-581.
 - Kane Driscoll S, Harkey GA, Landrum PF, 1997. Accumulation and toxicokinetics of fluoranthene in sediment bioassays with freshwater amphipods. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 16, 742-753.
 - Koelmans AA, Van der Heijde A, Knijff LM, Alderink RH, 2001. Integrated modelling of eutrophication and organic contaminant fate & effects in aquatic ecosystems: a review. *Water Research*, 35, 3517-3536.
 - Krizek RJ, Raphaelian LA, 1977. Fate of pesticides in bottom sediments during dredging and disposal cycle. In: Yen TF (Ed.) *Chemistry of Marine Sediments*. Ann Arbor Science Publishers, Ann Arbor, Michigan, United States.
 - Lancelot C, 1995. The mucilage phenomenon in the continental coastal waters of the North Sea. *The Science of the Total Environment*, 165, 83-102.
 - Lancelot C, Rousseau V, Keller M, Smith W, Mathot S, 1998. Auto-ecology of *Phaeocystis* blooms. In: *Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on the Physiological Ecology of Harmful Algal Blooms*. NATO-ASI Series, 41, 209-224.
 - Lancelot C, Wassmann P, Barth H, 1994. Ecology of *Phaeocystis*-dominated ecosystems. *Journal of Marine Systems*, 5, 1-4.
 - Landrum PF, Giesy JP, Oris JT, Allred PM, 1986. Photoinduced toxicity of polycyclic aromatic hydrocarbons to aquatic organisms. In: Vandermeulen JH, Hruddy SE (Eds.), *Oil in Freshwater: Chemistry, Biology, Countermeasure Technology*. Pergamon, Toronto, Canada, 304 p.
 - Landrum PF, Eadie BJ, Faust WR, 1991. Toxicokinetics and toxicity of a mixture of sediment-associated polycyclic aromatic hydrocarbons to the amphipod *Diporeia* spp. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 10, 35-46.

- Landrum PF, Lee HI, Lydy MJ, 1992. Toxicokinetics in aquatic systems: model comparisons and use in hazard assesment. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 11, 1709-1725.
- Landrum PF, Dupuis WS, Kukkonen J, 1994. Toxicokinetics and toxicity of sediment-associated pyrene and phenanthrene in *Diporeia* spp.: examination of equilibrium-partitioning theory and residue-based effects for assessing hazard. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 13, 1769-1780.
- Lotufo GR, 1997. Toxicity of sediment-associated PAHs to an estuarine copepod: effects on survival, feeding, reproduction, and behaviour. *Marine Environmental Research*, 44, 149-166.
- Lotufo GR, 1998a. Bioaccumulation of sediment-associated fluoranthene in benthic copepods: uptake, elimination, and biotransformation. *Aquatic Toxicology*, 44, 1-15.
- Lotufo GR, 1998b. Lethal and sublethal toxicity of sediment-associated fluoranthene to benthic copepods: application of the critical-body-residu approach. *Aquatic Toxicology*, 44, 17-30.
- Monson PD, Ankley GT, Kosian PA, 1995. Phototoxic response of *Lumbriculus variegatus* to sediments contaminated by polycyclic aromatic hydrocarbons. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 14, 891-894.
- Liss PS, Malin G, Turner SM, Holligan PM, 1994. Dimethyl sulphide and *Phaeocystis*: a review. *Journal of Marine Systems*, 5, 41-54.
- Lu JCS, Chen KY, 1977. Migration of chemical constituents in sediment-seawater interfaces. In: Yen TF (Ed.) *Chemistry of Marine Sediments*. Ann Arbor Science Publishers, Ann Arbor, Michigan, United States.
- Mackay D (1982). Correlation of bioconcentration factors. *Environmental Science and Technology*, 16, 274-278.
- Mackay D, Paterson S, Shiu WY, 1992. Generic models for evaluating the regional fate of chemicals. *Chemosphere*, 24, 695-717.
- Mackay D, Puig H, McCarty LS, 1992. An equation describing the time course and variability in uptake and toxicity of narcotic chemicals to fish. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 10, 1541-1583.
- Mackay D, Di Guardo A, Paterson S, Kisci G, Cowan CE, 1996a. Assessing the fate of new and existing chemicals: a five stage process. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 15, 1618-1626.
- Mackay D, Di Guardo A, Paterson S, Cowan CE, 1996b. Evaluating the environmental fate of a variety of types of chemicals using the EQC model. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 15, 1627-1637.

- Mackay D, Fraser A, 2000. Bioaccumulation of persistent organic chemicals: mechanisms and models. *Environmental Pollution*, 110, 375-391.
- McCarty LS, Mackay D, 1993. Enhancing ecotoxicological modelling and assessment. *Environmental Science and Technology*, 27, 1719-1727.
- McCarty LS, Mackay D, Smith AD, Ozburn GW, Dixon DG, 1991. Interpreting aquatic toxicity QSARs: the significance of toxicant body residues at the pharmacologic endpoint. *Science of the Total Environment*, 109/110, 515-525.
- McCarty LS, Mackay D, Smith AD, Ozburn GW, Dixon DG, 1992. Residu-based interpretation of toxicity and bioconcentration QSARs from aquatic bioassays: neutral narcotic organics. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 11, 917-930.
- Meylan WM, Howard PH, Boethling RS, Aronson D, Printup H, Gouchie S, 1999. Improved method for estimating bioconcentration/bioaccumulation factor from octanol/water partitioning coefficient. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 18, 664-672.
- MNZ, 1995. Stofstromen naar de Noordzee: de Belgische emissies van gevaarlijke stoffen naar de lucht en naar het water in de periode 1985-1995 (36 stofstroomfiches). Technische Commissie Noordzee.
- Monson PD, Ankley GT, Kosian PA, 1995. Phototoxic response of *Lumbriculus variegatus* to sediments contaminated by polycyclic aromatic hydrocarbons. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 14, 891-894.
- Mortimer M, Connell DW, 1994. Critical internal and aqueous lethal concentrations of chlorobenzenes with the crab *Portunus pelagicus* (L). *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 28, 298-312.
- Neely BW, Branson DR, Blau GE, 1974. Partition coefficient to measure bioconcentration potential of organic chemicals in fish. *Environmental Science and Technology*, 30, 3377-3384.
- Neff JM, Stubblefield WA, 1995. Chemical and toxicological evaluation of water quality following the Exxon Valdez oil spill. In: Wells PG, Butler JN, Hughes JS (Eds.), *Exxon Valdez Oil Spill: Fate and Effects in Alaskan Waters*, ASTM STP 1219. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, USA, pp. 141-177.
- Newsted JL, Giesy JP, 1987. Predictive models for photoinduced acute toxicity of polycyclic aromatic hydrocarbons to *Daphnia magna* Straus (Cladocera, Crustacea). *Environmental Toxicology and Chemistry*, 6, 445-461.
- Nichols JW, Jensen KM, Tietge JE, Johnson RD, 1998. Physiologically based toxicokinetic model for maternal transfer of 2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-p-dioxin in brook trout (*Salvenius fontinalis*). *Environmental Toxicology and Chemistry*, 17, 2422-2434.

- Notar M, Leskovsek H, Faganeli J, 2001. Composition, distribution and sources of polycyclic aromatic hydrocarbons in sediments of the Gulf of Trieste, Northern Adriatic Sea. *Marine Pollution Bulletin*, 42, 36-44.
- Okay OS, Donkin P, Peters LD, Livingstone DR, 2000. The role of algae (*Isochrysis galbana*) enrichment on the bioaccumulation of benzo(a)pyrene and its effects on the blue mussel *Mytilus edulis*. *Environmental Pollution*, 110, 103-113.
- Oris JT, Giesy JP, 1987. The photoinduced toxicity of polycyclic aromatic hydrocarbons to larvae of the fathead minnow (*Pimephales promelas*). *Chemosphere*, 16, 1395-1404.
- OSPAR, 1998. Report on liquid discharges from nuclear installations in 1996. OSPAR Commission. Report Point and Diffuse Sources, pp. 25-44.
- OSPAR QSR, 2000. Quality Status Report. Region II Greater North Sea, OSPAR Commission, London, 136 p.
- Pelletier MC, Burgess RM, Ho KT, Kuhn A, McKinney RA, Ryba SA, 1997. Phototoxicity of individual PAHs and petroleum to marine invertebrate larvae and juveniles. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 16, 2190-2199.
- Peña-Méndez EM, Astorga-España MS, Garcia-Montelongo FJ, 2001. Chemical fingerprinting applied to the evaluation of marine oil pollution in the coasts of Canary Islands (Spain). *Environmental Pollution*, 111, 177-187.
- Pezeshki SR, DeLaune RD, Jugsujinda A, 2001. The effects of crude oil and the effectiveness of cleaner application following oiling on US Gulf of Mexico coastal marsh plants. *Environmental Pollution*, 112, 483-489.
- Regnier P, Steefel CI, 1999. A high resolution estimate of the inorganic nitrogen flux from the Scheldt estuary to the coastal North Sea during a nitrogen-limited algal bloom, spring 1995. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 63, 1359-1374.
- Regnier P; Wollast R, Steefel CI, 1997. Long-term fluxes of reactive species in macrotidal estuaries: estimates from a fully transient, multi-component reaction transport model. *Marine Chemistry*, 58, 127-145.
- Riis V, Mielthe D, Babel W, 1995. Degradation of refinery products and oils from polluted sites by the autochthonous micro-organisms of contaminated and pristine soils *Microbiological Research*, 150, 1-8.
- Riis V, Stimming M, Mielthe D, Babel W, 1996. Investigations into the toxicity of persistent fractions of mineral oils. *Chemosphere*, 32, 1435-1443.
- Salomon JC, Breton M, Guegueniat P, 1995. A 2D long term advection dispersion model for the Channel and Southern North Sea. Part B: transit time and transfer function for Cap de la Hague. *Journal of Marine Systems*, 6, 515-527.

- Schirmer K, Chan AGJ, Greenberg BM, Dixon DG, Bols NC, 1998. Ability of 16 priority PAHs to be photocytotoxic to a cell line from the rainbow trout gill. *Toxicology*, 127, 143-155.
- Sijm DTHM, Schipper M, Opperhuizen A, 1993. Toxicokinetics of halogenated benzenes in fish: lethal bodyburden as a toxicological endpoint. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 12, 1117-1127.
- Singer MM, George S, Benner D, Jacobson S, Tjeerdema RS, Sowby ML, 1993. Comparative toxicity of two dispersants to the early life stages of two marine species. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 12, 1855-1963.
- Singer MM, George S, Jacobson S, Lee I, Tjeerdema RS, Sowby ML, 1994. Comparative effects of oil dispersants to the early life stages of topsmelt (*Atherinops affinis*) and kelp (*Macrocystis pyrifera*). *Environmental Toxicology and Chemistry*, 13, 649-655.
- Singer MM, Aurand D, Bragin GE, Clark JR, Coelho GM, Sowby ML, Tjeerdema RS, 2000. Standardization of the preparation and quantification of water-accommodated fractions of petroleum for toxicity testing. *Marine Pollution Bulletin*, 40, 1007-1016.
- Smetacek V, Bathmann U, Nöthig EM, Scharek R, 1991. Coastal eutrophication: causes and consequences. In: Mantoura RFC, Martin JM, Wollast R (Eds.), *Ocean Margin Processes in Global Change*. Wiley Publ., Chichester, UK, pp. 251-280.
- Smith JE, 1968. *Torrey Canyon Pollution and Marine Life*. Cambridge University Press, New York, USA.
- Smith SM, Hitchcock GL, 1994. Nutrient enrichments and phytoplankton growth in the surface waters of the Louisiana Bight. *Estuaries*, 17.
- Spies RB, 1987. The biological effects of petroleum hydrocarbons in the sea: assessments from the field and microcosms, Chapter 9. In : *Long-Term Environmental Effects of Offshore Oil and Gas Development*, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands.
- Stein ED, Cohen Y, Winer AM, 1996. Environmental distribution and transformation of mercury compounds. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 26, 1-43.
- Swedmark M, Granmo A, Kollberg S, 1973. Effects of oil dispersants and oil emulsions on marine animals. *Water Research*, 7, 1649-1672.
- Thomann RV, Mueller JA, 1987. *Principles of Surface Water Quality Modeling and Control*. McGraw-Hill, New York, USA, pp. 549-576.

- Thomann RV, Connolly JP, 1992. Modeling accumulation of organic chemicals in aquatic food webs. In: Gobas FACP, McCorquodale JA (Eds.), Chemical Dynamics in Freshwater Ecosystems. Lewis Publishers, Boca Raton, Florida, USA, pp. 153-186.
- Thomann RV, Connolly JP, Parkeron, TF, 1992. An equilibrium model of organic chemical accumulation in aquatic food webs with sediment interaction. Environmental Toxicology and Chemistry, 11, 615-629.
- Tiehm A, 1994. Degradation of polycyclic aromatic hydrocarbons in the presence of synthetic surfactants. Applied Environmental Microbiology, 60, 258-263.
- US-EPA, 1993. Sediment quality criteria for the protection of benthic organisms : fluoranthene. US Environmental Protection Agency (Publication No. 822/R-93/012). Washington , D.C.
- Verschueren K, 1996. Handbook of Environmental Data of Organic Chemicals, 3th Edition. Van Nostrand Reinhold, New York, USA, 2064 p.
- Van Hoogen G, Opperhuizen A, 1988. Toxicokinetics of chlorobenzenes in fish. Environmental Toxicology and Chemistry, 7, 213-219.
- Van Weers AW, 1989. Liquid releases into North European waters from nuclear installations other than fuel processing plants. Poceedings of a seminar of the project "MARINA", CEC-DG XI/4669/89-EN.
- Van Wezel AP, Opperhuizen A, 1995. Narcosis due to envirommental pollutants in aquatic organisms: residue-based toxicity, mechanisms, and membrane burdens. Critical Reviews in Toxicology, 25, 255-279.
- Veith GD, Call DJ, Brooke LT, 1983. Structure-toxicity relationships for the fathead minnow *Pimephales promelas*: narcotic industrial chemicals. Canadian Journal of Fisheries and Aquatic Science, 40, 743-748.
- Veith GD, Defoe DL, Bergstedt BV, 1979. Measuring and estimating the bioconcentration factor of chemicals in fish. Journal Fisheries Research Board of Canada, 36, 1040-1048.
- Wernersson AS, Dave G, 1997. Phototoxicity identification by solid phase extraction and photoinduced toxicity to *Daphnia magna*. Archives of Environmental Contamination and Toxicology, 32, 268-273.
- Widdows J, Donkin P, 1989. The application of combined tissue residue chemistry and physiological measurements of mussel (*Mytilus edulis*) for the assessment of environmental pollution. Hydrobiologia 188/189, 455-461.
- Wolfe MF, Schlosser JA, Schwartz GJB, Singaram S, Mielbrecht EE, Tjeerdema RS, Sowby ML, 1998. Influence of dispersants on the bioavailability and trophic transfer of petroleum hydrocarbons to primary levels of a marine food chain. Aquatic Toxicology, 42, 211-227.

- Wolfe MF, Schwartz GJB, Singaram S, Mielbracht EE, Tjeerdema RS, Sowby, ML, 1999. Influence of dispersants on the bioavailability and throphic transfer of phenanthrene to algae and rotifers. *Aquatic Toxicology*, 48, 13-24.
- Yaffe D, Cohen Y, Arey J, Grosovsky AJ, 2001. Multimedia analysis of PAHs and nitro-PAH daughter products in the Los Angeles basin. *Risk Analysis*, 21, 275-294.