

Mobiliteit en Toxiciteit van chemische stoffen in de voormalige vuilstortplaats in de Coupépolder in Alphen aan den Rijn



In opdracht van de gemeente Alphen aan den Rijn

Definitief
24 mei 2013

Ir. Karel Verschueren

1. Inleiding	3
2. Inventarisatie van mogelijk aanwezige chemicaliën	4
3. Beoordeling van stoffen	7
4. Rangschikking van stoffen naar mobiliteit en toxiciteit	10
5. Samenvatting en Conclusie	13
Bijlage 1: Geconsulteerde documenten en lijsten	15
Bijlage 2: Gebruik van mogelijk in de Coupépolder aanwezige stoffen	17
1. Inleiding	17
2. Alcoholen	18
2.1 Alifatische en onverzadigde alcoholen	18
2.2 Terpeenalcoholen	18
3. Aldehyden	19
4. Alkanen	19
5. Amides, secondaire	19
6. Aminen	20
7. Aromaten gehalogeneerd	20
8. Azo pigmenten	21
9. Carbonzuren en zouten	22
10. Carbonzuuresters	22
11. Ethers	25
12. Fenolen gesubstitueerd	25
13. Fenolen gechloreerd	25
14. Furanen zwavelhoudend	26
15. Isocyanaten	27
16. Ketonen	28
17. Nitrocellulose	29
18. PAK's	30
19. Pesticiden	31
20. Polyhydroxyverbindingen : Polyolen	32
21. Purine	33
22. Phthalocyanines	34
23. Silanen	35
24. Steroiden	36
25. Terpenen	37
26. Tributyltinoxide	37
27. VOX: vluchtige organohalogenverbindingen	38
28. Zwavelverbindingen anorganisch	39
29. Zwavelverbindingen, organisch	39
Bijlage 3: Relatie tussen wateroplosbaarheid en aquatische toxiciteit	40
1. Relatie tussen molecuulgewicht en wateroplosbaarheid	40
2. Relatie tussen de wateroplosbaarheid en aquatische toxiciteit	42
3. Retardatiefactor Rf	43
Bijlage 4: Curriculum Vitae van de auteur	45
Bijlage 5: Verklarende woordenlijst	46
Bijlage 6: Gegevens stoffen mogelijk aanwezig in de Coupépolder	47

MOBILITEIT EN TOXICITEIT VAN CHEMISCHE STOFFEN IN DE VOORMALIGE VUILSTORTPLAATS IN DE COUPÉPOLDER IN ALPHEN AAN DEN RIJN

1. Inleiding

De externe deskundigencommissie heeft in haar rapport van 6 december 2012 “ *Verslag van een onafhankelijk onderzoek naar de aanpak van de nazorg van de Coupépolder in Alphen aan den Rijn*” een aantal aanbevelingen voor de nazorg geformuleerd. Een belangrijke aanbeveling nl 1 c luidt; “ *Alle stoffen waarvan bekend is dat die (kunnen) zijn gestort rangschikken op beweeglijkheid en toxiciteit.*” Deze gegevens zijn noodzakelijk om het tweede deel van de aanbeveling te kunnen uitvoeren nl; “ *Vervolgens de meest beweeglijke en de meest toxische stoffen in het diepe grondwater meten.*”

Gegevens over het gedrag en effecten van mobiele stoffen zijn ook nodig voor de verdere uitwerking van het conceptueel model (aanbeveling 20). De problematiek van vuilstortplaatsen wordt als complex ervaren. De aard van de gestorte stoffen zijn in hoofdlijnen bekend en ook de aard van de processen die zorgen voor transport, omzetting, neerslag en hechting van stoffen. Echter overzichtelijke gegevens over beweeglijkheid, toxiciteit en afbraaksnelheid van individuele milieugevaarlijke stoffen ontbreken meestal hetgeen discussie en communicatie over het conceptueel model belemmert.

De heer *Kor van Hateren* van de Omgevingsdienst West-Holland verwoordt de wens van de raad van de gemeente Alphen aan den Rijn als volgt:

“Het is de wens van de raad van de gemeente Alphen aan den Rijn om naar aanleiding van de bevindingen van de onderzoekscommissie meer duidelijkheid te krijgen over de mogelijkheid van uitlekken naar en verspreiding in het watervoerende pakket van chemische stoffen die in het stortlichaam aanwezig zijn.”

Concreet wil de raad de volgende vraag beantwoord hebben:

“Welke stoffen zijn zinvol te monitoren in de peilbuizen in het watervoerende pakket, benedenstrooms gelegen van de stortplaats, met afweging op mobiliteit en toxiciteit.”

2. Inventarisatie van mogelijk aanwezige chemicaliën

De Coupépolder is een voormalige vuilstort in de gemeente Alphen aan den Rijn, die als zodanig heeft gefunctioneerd van 1959 tot 1985. Er wordt melding gemaakt van de aanwezigheid van huisvuil, bouw- en sloopafval, agrarisch en chemisch afval. In 1992 heeft de Commissie van onderzoek inzake de Coupépolder (zogenaamde Commissie Engwirda) uit het strafrechtelijk dossier Kemp afgeleid dat in de periode 1977 tot en met 1981 omvangrijke hoeveelheden chemisch afval op de Coupépolder zijn gestort. De commissie Engwirda acht het aannemelijk dat in de bedoelde jaren enige tienduizenden vaten met chemisch afval op de Coupépolder zijn gestort.

Door het Regionaal Rechercheteam 'Coupe Team' van de Regio Zuid Holland Midden werd in 1989 een stoffenlijst opgesteld "*Lijst van aangetroffen stoffen/verbindingen op de stortplaats in de Coupe-polder te Alphen aan den Rijn*" (zie volgende pagina).

Deze lijst werd aangevuld met gegevens afkomstig uit de proces-verbalen van het Regionaal Rechercheteam Coupé Team uit de periode 1988-1989 en uit de rapportages van het RIVM inzake monsters uit opgravingen in de Coupé-Polder in november-december 1988. Tenslotte werd door Iwaco in juli 1992 een Containeronderzoek vuilstort Coupépolder verricht en werd door TNO tijdens de opgravingen luchtmonsters geanalyseerd. De lijst van de geconsulteerde rapporten is in bijlage 1 opgenomen.

Alle stoffen en stofgroepen vermeld in de bovenvermelde onderzoeken werden geordend naar stofgroep en weergegeven in tabel 1.

Van alle geïdentificeerde stoffen werden gegevens over mobiliteit en toxiciteit verzameld en overzichtelijk weergegeven in de tabellen in bijlage 6. In de voormelde onderzoeken werden echter ook een aantal stofgroepen weergegeven zoals ftalaten, steroïden, gesubstitueerde fenolen, carbonzuren, esters van carbonzuren, organische zwavelverbindingen enz.. Individuele chemicaliën van deze stofgroepen konden toen in 1988 in de onderzochte monsters niet in voldoende mate van elkaar worden gescheiden om identificatie mogelijk te maken. Het ging om complexe mengsels van afvalstoffen bestaande uit vele individuele verbindingen.

Voor elk van de vermelde stofgroepen, waarvoor geen individuele stoffen werden geïdentificeerd, werden de meest representatieve mobiele chemicaliën geselecteerd en in bijlage 6 opgenomen.

De vermelding van deze stoffen in de lijsten in bijlage 6 betekent slechts dat zij *mogelijk* aanwezig kunnen zijn in de Coupépolder. Op deze wijze werden in het totaal 182 stoffen beoordeeld op hun mobiliteit en toxiciteit en werd een selectie gemaakt van 10 stoffen voor aanvullende bemonstering en analyse van het diepe grondwater van de Coupépolder.

Een verklarende woordenlijst is toegevoegd in bijlage 5.

Tabel 1: Chemicaliën geïdentificeerd in monsters van bedrijfsafval uit de Coupépolder

CHEMICALIËN GEÏDENTIFICEERD IN DE COUPEPOLDER	
ALCOHOLEN	CARBONZUREN EN -ZOUTEN
benzyl-alcohol	acetaat, natrium
butanol, iso-	adipinezuur
butanol, n-	azijnzuur
dibutoxymethanol	ketocarbonzuren
ethanol	mierezuur
methanol	CARBONZUURESTERS
onverzadigd alifatisch C ₉ H ₁₈ O	acetaat, ethyl-
ALDEHYDEN	acetaat, isobutyl-
acetaldehyde	acetaat, methyl-
benzaldehyde	acetaat, n-butyl-
ALKANEN	butanoaat, ethyl-
cyclohexaan	butanoaat, methyl-
cyclohexaan, C4-	buteenzuur-ethylester, 2-
decaan, n-	carbonzuur-ethylesters (C ₁₄ -18)
dimethylbutaan	pentanoaat, methyl-
n-C ₂₁ -30 (opgelost in aromatisch oplosmiddel)	propionaat, -dimethyl
nonaan, n-	octynoaat, methyl-2- (Folione) = Alifatische O verbinding C ₉ H ₁₄ O ₂
ALLERLEI	ETHERS
nitrocellulose	anisol
tributyltinoxide	methoxypropan
AMIDES	FENOLEN GESUBSTITUEERD
dimethylformamide	fenolen gesubstitueerd
secundaire (op basis van geur)	pentachloorfenol
AMINEN	FTALATEN
alkaan-aminen (C ₁₆ -20)	FTALOCYANINES
diethyleentriamine	Ftalocyanine blauw
hexamethyleentriamine, bis-	Ftalocyanine groen
purine-amine	FURAAAN ZWAVELVERBINDINGEN
Pyridine-afval	Furan-carbonzuur: oxopentaaan carbonzuur, 4-
triethyleentetra-amine	Furfurylsulfide : C ₄ H ₃ O-CH ₂ -S-C ₄ H ₃ O-CH ₃
AROMATEN GEHALOGENEERD	Furfurylsulfide: C ₄ H ₃ O-CH ₂ -S-C ₄ H ₃ O-CH ₂ -SH
dibroombenzeen	Furfurylsulfide: CH ₃ -C ₄ H ₃ O-CH ₂ -S-C ₄ H ₃ O-CH ₂ -SH
dichloorbenzeen	bis-furfuryl sulfide; bis furfuryl disulfide; bis furfuryl trisulfide; furfuryl mercaptaan.
dichloortolueen	ISOCYANATEN
AZOPIGMENTEN	cyclohexylisocyaanaat
BTEX AROMATEN	KETONEN
benzeen	acetofenon
benzeen, ethyl-	aceton
benzenen, C ₃ -	benzophenone, 4,4-bis(dimethylamino)-
benzenen, C ₄ -	benzopyranon = cumarine
tolueen	cyclohexanon, C ₄ -
xylenen	hexanon
	methoxy-methyl-pentanon
	methoxypropanon
	Tetramethyldiaminobenzofenon (Milchers keton)

MINERALE OLIE	TERPENEN
gasolie	C10H16
motorbenzine	C10H16 Trimethylnorbornene (mogelijk)
terpentine (lichte aardoliefractie)	C10H18O
PAK'S	Trimethyl cyclohexaan-methanol
naftaleen tot pyreen	VLUCHTIGE ORGANOHALOGEEN VERBINDINGEN: VOX
PESTICIDEN	bromoform
Dioxathion = dioxanditol-S,S-bis (O,O-diethyl- fosfordithioaat), 2,3-p-	epichloorhydrine
DDT	methyleenchloride
Dialifor = Delnav	tetrabroomethaan
POLYOLEN	tetrachloorethyleen
Polyhydroxy verbindingen (polyadducten van ethyleenoxide en propyleenoxide)	tetrachloorkoolstof
POLYMEREN	trichloorethaan
acrylpolymeer	trichloorethyleen
polypropyleen	ZWAVELVERBINDINGEN ORGANISCH
Polysiloxanen opgelost in toluen	ZWAVELVERBINDINGEN ANORGANISCH
SILANEN	ammoniumsulfide
siloxaan, Hexamethylcyclotri- siloxaan, octamethylcyclotetra-	dizwavelchloride
STEROIDEN	

3. Beoordeling van stoffen

Het doel van deze studie werd als volgt verwoord:

“ Alle stoffen waarvan bekend is dat die (kunnen) zijn gestort rangschikken op beweeglijkheid en toxiciteit.” Deze gegevens zijn noodzakelijk om het tweede deel van de aanbeveling te kunnen uitvoeren nl; *”Vervolgens de meest beweeglijke en de meest toxische stoffen in het diepe grondwater meten.”*

De achtergrond van deze doelstelling is de vraag: werden tot nu toe wel de juiste stoffen in het diepe grondwater gemeten gezien het vermoeden dat onbekende toxische stoffen in de Coupépolder aanwezig kunnen zijn. Het diepe grondwater wordt vooral bedreigd door goed wateroplosbare (en dus mobiele) én toxische stoffen.

De mobiliteit van stoffen in het grondwater is afhankelijk van de wateroplosbaarheid en het organisch stofgehalte van de bodem. Stoffen die slecht oplosbaar zijn zullen ten opzichte van de grondwaterstroming een grotere retardatie kennen dan stoffen die goed oplosbaar zijn in water. De retardatiefactor die bij een bepaald organisch stofgehalte wordt berekend is dus een goede maatstaf voor de mobiliteit van een stof in het grondwater. In de tabellen in bijlage 6 werden voor alle stoffen retardatiefactoren berekend voor een organisch koolstofgehalte van 2%. Hoe kleiner de retardatiefactor, des te groter is de mobiliteit van een stof. Een stofgehalte van 2% staat voor een humusarme grond. Onder de Coupépolder is evenwel veen aanwezig waarin stoffen een veel grotere retardatie zullen kennen. De berekende retardatiefactor is dus niet bedoeld om het transport in het grondwater te berekenen doch enkel om de mobiliteit van stoffen onderling te vergelijken.

Toxiciteitsgegevens werden verzameld voor zowel zoogdieren, meestal rat of muis, als maatstaf voor humane toxiciteit en voor aquatische organismen, voornamelijk algen, kreeftachtigen en vissen.

De zoogdiertoxiciteit is de acute toxiciteit in mg/kg lichaamsgewicht (mg/kg bw body weight) en de aquatische toxiciteit is de laagste in de literatuur vermelde 2 tot 4 dag LC₅₀ in mg/L.

De acute toxiciteit is de toxiciteit die ontstaat na een vrij korte blootstelling aan de onderzochte gevaarlijke stoffen. Voor de zoogdiertoxiciteit is dit de toxiciteit die veroorzaakt wordt door een éénmalige dosis van de stof meestal via inslikken (orale dosis). Voor aquatische organismen is dit de toxiciteit na blootstelling gedurende 2 tot 4 dagen aan de onderzochte stof opgelost in water.

We beperken ons voor dit onderzoek tot de acute toxiciteit voor zoogdieren en aquatische organismen om de eenvoudige reden dat voor de meeste stoffen onvoldoende gegevens over blootstelling gedurende een langere periode (chronische toxiciteit) ontbreken.

Een uitzondering wordt gemaakt voor kankerverwekkende stoffen (carcinogene stoffen) omdat er een mondiaal gehanteerde classificatie bestaat van carcinogeniteit op basis van uitvoerig wetenschappelijk bewijs. Deze classificatie werd opgesteld door het Internationaal Agentschap voor Onderzoek naar Kanker, het IARC (*International Agency for Research on Cancer*). Deze standaard classificatie wordt beschreven in het volgende ingekaderd tekstveld. In de stoffentabellen in bijlage 6 wordt de IARC classificatie van de geïnventariseerde stoffen weergegeven.

Standard IARC classification

Stoffen worden ingedeeld door IARC (*International Agency for Research on Cancer*) in vier groepen op basis van wetenschappelijk bewijs voor carcinogeniteit.

- Groep 1:** stoffen die zeker kankerverwekkend zijn voor mensen.
- Groep 2A:** stoffen die waarschijnlijk kankerverwekkend zijn voor mensen.
- Groep 2B:** stoffen die mogelijk kankerverwekkend zijn voor mensen.
- Groep 3:** stoffen die niet in te delen zijn.
- Groep 4:** stoffen die waarschijnlijk niet kankerverwekkend voor mensen zijn.

Omdat vroeger de indeling in gevarenklassen en de benaming van de toxiciteit van stoffen van land tot land verschillend was, is er nu een mondiaal geaccepteerde indeling van gevaarlijke stoffen in categorieën waarbij de stoffen die in categorie 1 vallen de hoogste acute toxiciteit bezitten. Zulk een mondiaal geharmoniseerd systeem GHS (*Globally Harmonised System*) is belangrijk voor het harmoniseren van de wetgeving inzake gevaarlijke stoffen. Dit speelt met name een belangrijke rol in de etiketering van gevaarlijke stoffen. In dit document wordt verschillende malen gerefereerd naar deze categorieën van acute zoogdiertoxiciteit.

Categorieën voor humane toxiciteit

Het geharmoniseerd systeem voor classificatie en etikettering van gevaarlijke stoffen GHS/CLP¹ classificatie systeem kent 5 categorieën voor acute orale toxiciteit waarbij de LD50 concentraties worden uitgedrukt in mg/kg lichaamsgewicht (mg/kg bw)

- Categorie 1 :** < 5 mg/kg bw
- Categorie 2:** 5-50 mg/kg bw
- Categorie 3:** 50-300 mg/kg bw
- Categorie 4:** 300-2000 mg/kg bw
- Categorie 5:** 2000-5000 mg/kg bw

Voor de aquatische toxiciteit gelden andere categorieën zoals in de volgende ingekaderd tekstveld wordt aangegeven. Deze indeling wordt louter ter informatie gegeven om de lezer toe te laten zich een beter oordeel te vormen van het niveau van de toxiciteit van de besproken stoffen.

In de beoordeling en rangschikking van stoffen naar hun effecten op het diepe grondwater werden in dit document twee belangrijke parameters niet meegewogen nl de hoeveelheid van de aanwezige stoffen op de stortplaats en de biodegradatiesnelheid van deze stoffen. De reden voor het niet meenemen van deze parameters is het ontbreken van betrouwbare gegevens. De hoeveelheden van de individuele stoffen die in de Coupépolder zijn gestort zijn niet bekend en voor een betrouwbare beoordeling van de biodegradatiesnelheid in het specifiek geval van de Coupépolder ontbreken eveneens de nodige gegevens.

De concentratie van een bepaalde stof in het grondwater zal proportioneel evenredig zijn met de beschikbare (uitloogbare) massa van deze stof (hoeveelheid kg x concentratie mg/kg) in de stortplaats. Er zijn echter geen gegevens beschikbaar om deze parameter mee te nemen in de berekeningen. We weten wel dat minerale oliecomponenten zoals de BTEX aromaten en de gechlloreerde oplosmiddelen in de industrie in zeer grote hoeveelheden werden gebruikt. Naar verwachting zullen deze stofgroepen de grootste fractie van de gevaarlijke stoffen in het industrieel afval vormen.

¹ GHS: Globally Harmonised System; CLP: Classification, Labelling and Packaging of Substances and Mixtures

Categorieën voor acute aquatische toxiciteit

De acute toxiciteit van stoffen op korte termijn voor het aquatisch milieu wordt ingedeeld in drie categorieën nl:

Categorie Acuut 1:

96-uurs LC ₅₀ (voor vissen)	< 1 mg/L en/of
48-uurs EC ₅₀ (voor schaaldieren)	< 1 mg/L en/of
72- of 96-uurs ErC ₅₀ (voor algen of andere waterplanten)	< 1 mg/L

Categorie Acuut 2:

96-uurs LC ₅₀ (voor vissen)	>1 tot <10 mg/L en/of
48-uurs EC ₅₀ (voor schaaldieren)	>1 tot <10 mg/L en/of
72- of 96-uurs ErC ₅₀ (voor algen of andere waterplanten)	>1 tot <10 mg/L

Categorie Acuut 3:

96-uurs LC ₅₀ (voor vissen)	>10 tot <100 mg/L en/of
48-uurs EC ₅₀ (voor schaaldieren)	>10 tot <100 mg/L en/of
72- of 96-uurs ErC ₅₀ (voor algen of andere waterplanten)	>10 tot <100 mg/L

Stoffen die snel biologische afbreekbaar zijn, en dat zijn de meeste snel oplosbare stoffen, zullen tijdens hun reis naar het diepe grondwater in meer of mindere mate worden afgebroken waardoor hun concentratie snel zal afnemen. In stortplaatsen vindt biodegradatie plaats onder zuurstofloze omstandigheden, in het grondwater daarentegen kan wel zuurstof voorkomen . Te weinig gegevens zijn beschikbaar voor de lijst van geïdentificeerde stoffen om de biodegradatiesnelheid als parameter volwaardig te kunnen meenemen in deze beoordeling.

Tenslotte bevat de lijst van stoffen een aantal stoffen die als “reactief” kunnen worden aangemerkt. Deze stoffen gaan snel reacties aan met het water of met andere aanwezige stoffen en zullen hierdoor het diepere grondwater niet bereiken. Dit is me name het geval voor stoffen die snel hydrolyseren dwz splitsen onder invloed van water.

Dit is met name het geval voor :

cyclohexylisocyaan dat in het water hydrolyseert tot *cyclohexylamine*;
epichloorhydrine dat hydrolyseert tot *3-monochloorpropaan-1,2-diol* ;
dizwavelchloride dat hydrolyseert tot *zwavel dioxide, waterstofchloride en zwavel*;
ammoniumsulfide hydrolyseert tot *zwavelwaterstof en ammonium* (het bekende stinkbom recept).

De hydrolyseproducten van de reactieve verbindingen worden, voor zover zij organisch zijn, in deze studie wel meegenomen.

4. Rangschikking van stoffen naar mobiliteit en toxiciteit

Concreet wil de gemeenteraad de volgende vraag beantwoord hebben:

“Welke stoffen zijn zinvol te monitoren in de peilbuizen in het watervoerende pakket, benedenstrooms gelegen van de stortplaats, met afweging op mobiliteit en toxiciteit.”

Een afweging enkel op mobiliteit is niet zinvol. De meest mobiele van de aangetroffen organische stoffen zijn o.a. azijnzuur en ethanol. Dit zijn ook de minst schadelijke stoffen en breken bovendien vlug af tot CO₂ en H₂O. Een afweging enkel op toxiciteit is evenmin zinvol. Hierbij zou eerst de vraag moeten beantwoord worden welke toxiciteit de meest belangrijke parameter is, de acute zoogdiertoxiciteit, de acute aquatische toxiciteit of de carcinogeniteit. Bovendien zullen zeer toxische stoffen die nauwelijks mobiel zijn geen meetbare concentraties veroorzaken in het diepere grondwater.

Enkel naar de acute zoogdiertoxiciteit gerangschikt scoren de volgende stoffen het hoogst (enkel stoffen tot max LD50 = 100 mg/kg). In de kolom ‘Retardatie’ werden de vakken geel gearceerd met een retardatiefactor t/m 5, dit zijn de meest mobiele stoffen.

Tabel 2 : Stoffen gerangschikt naar acute zoogdiertoxiciteit.

Chemicaliën	Retardatie Factor Bij 2% o.c.	Zoogdier Tox Acute LC50 mg/kg bw	IARC Classif	Aquatische Tox mg/L 2-4d LC50
Dialifor	>4	5		0.02
Dioxathion	>29	23		0.0003
3-monochloorpropaan-1,2-diol	1	26	2B	
pentachloorphenol	170	27		0.2
bis(tributyltinoxide)	127	50		0.002
B(a)pyreen	842,668	50	1	
DDT	941,668	87	2B	0.001
furan-2-carbonzuur	1	100		
furfurylmercaptaan	2	100		
2-methyl-3-furaanthiol	5	100		
4,4-bis(dimethylamino) benzophenon	338	100	2B	

De pesticides Dialifor, Dioxathion, DDT en de biociden pentachloorphenol en bis(tributyltinoxide) scoren hoog in bovenstaande tabel 2. Maar deze stoffen zijn weinig mobiel.

Naar acute aquatische toxiciteit worden de stoffen gerangschikt in tabel 3 (enkel stoffen met LC₅₀ <1 mg/L):

Ook in deze rangschikking scoren de pesticides en de biocides het hoogst hetgeen niet verwonderlijk is aangezien zij gebruikt worden omwille van hun aquatische toxiciteit. Echter slechts twee stoffen op deze lijst worden als mobiel beoordeeld nl dimethylsulfide en tetrachloormethaan

Geen van de twee criteria alleen is dus voldoende om een selectie te maken voor verder onderzoek op basis van toxiciteit en mobiliteit. In tabel 3 werden enkel die vakken geel gearceerd wanneer tegelijkertijd de retardatiefactor ≤ 5 én de Aquatische Toxiciteit < 1 mg/L bedragen.

Tabel 3 : Stoffen gerangschikt naar acute aquatische toxiciteit

Chemicaliën	Retardatie Factor Bij 2% o.c.	Zoogdier Tox Acute LC ₅₀ mg/kg bw	IARC Classif	Aquatische Tox mg/L 2-4d LC ₅₀
Dioxathion	>29	23		0.0003
DDT	941,668	87	2B	0.001
bis(tributyltinoxide)	127	50		0.002
B(a)antraceen	252,801	1,600	2B	0.01
Dialifor	>4	5		0.02
fluorantheen	9,724	2,000	3	0.05
pentachloorphenol	170	27		0.2
dimethyldisulfide	2	190		0.31
tetrachloormethaan	4	2,350	2B	0.5
di-iso-butylftalaat	127	15,000		0.5
dl-limoneen	184	>4,000		0.5
acenafteen	507	600	3	0.5
di-n-octylftalaat	844	47,000		0.5
2,4-dichloortolueen	102	2,790		0.6
1,4-dibroombenzeen	127	3,120		0.68

Om voor verder onderzoek geselecteerd te worden moeten de stoffen minimaal mobiel zijn (retardatiefactor ≤ 5) én voldoen aan minimaal één van de drie toxiciteitscriteria:
 Acute zoogdier toxiciteit: LD₅₀ ≤ 100 mg/kg
 Acute aquatische toxiciteit: LC₅₀ ≤ 1 mg/L
 IARC Classificatie : 1

In tabel 4 worden tenslotte die stoffen weergegeven die én mobiel zijn (retardatiefactor ≤ 5) én een hoge zoogdiertoxiciteit hebben (LD₅₀ ≤ 100 mg/kg) én/of een IARC Classificatie 1 (bewezen humaan carcinogeen) én/of een aquatische toxiciteit ≤ 1 mg/L.

In tabel 4 worden alle stoffen die aan voormelde criteria voldoen gerangschikt volgens oplopende retardatiefactor waarbij in geel arcering wordt aangegeven aan welke van de bovenvermelde criteria zij voldoen. De stoffen die in deze tabel 4 het hoogst scoren zijn kandidaten voor verder onderzoek in het diepere grondwater.

Hierbij dient de kanttekening dat de wateroplosbaarheid van Dialifor werd geschat op $< 1,000$ mg/L hetgeen een retardatiefactor oplevert van >4 .

In de laatste kolom van tabel 4 wordt in oranje arcering aangegeven welke de kandidaten voor verder onderzoek zijn.

Tabel 4 : Stoffen gerangschikt naar mobiliteit én toxiciteit

Chemicaliën	Retardatie Factor Bij 2% o.c.	Zoogdier Tox Acute LC50 mg/kg bw	IARC Classif	Aquatische Tox mg/L 2-4d LC50	A
3-monochloorpropaan-1,2-diol	1	26	2B		
furan-2-carbonzuur	1	100			
furfurylmercaptaan	2	100			
dimethyldisulfide	2	190		0.31	
benzeen	2	2,990	1	5	
vinylchloride	3	>4,000	1	210	
trichlooretheen	3	2,900	1	40	
tetrachloormethaan	4	2,350	2B	0.5	
2-methyl-3-furaanthiol	5	100			
Dialifor	>4	5		0.02	
dipropylftalaat	18			1	
Dioxathion	>29	23		0.0003	
1,4-dichloorbenzeen	33	500	2B	1	
1,2-dichloorbenzeen	35	500	3	1	
naftaleen	85	490	2B	1	
2,4-dichloortolueen	102	2,790		0.6	
bis(tributyltinoxide)	127	50		0.002	
1,4-dibroombenzeen	127	3,120		0.68	
di-iso-butylftalaat	127	15,000		0.5	
pentachloorphenol	170	27		0.2	
dl-limoneen	184	>4,000		0.5	
di-n-butylftalaat	231	8,000		1	
4,4-bis(dimethylamino) benzophenon	338	100	2B		
acenafteen	507	600	3	0.5	
di-n-octylftalaat	844	47,000		0.5	
fluorantheen	9,724	2,000	3	0.05	
stearylamine	84,268	>2,000		1	
B(a)antraceen	252,801	1,600	2B	0.01	
chryseen	421,334	>320	2B	1	
B(a)pyreen	842,668	50	1		
DDT	941,668	87	2B	0.001	

In de bovenstaande tabel zijn sommige vakken geel gearceerd wanneer aan de volgende voorwaarde is voldaan:

- voor de kolom 'Retardatie': 1 t/m 5 = de zg 'meest mobiele' stoffen
- voor de kolom 'Zoogdier Tox': t/m 100 mg/kg bw = de meest toxische stoffen
- voor de kolom 'IARC': categorie 1 = de meest toxische stoffen
- voor de kolom 'Aquatische Tox': <1 mg/L = de meest toxische stoffen

5. Samenvatting en Conclusie

Naar aanleiding van het “ *Verslag van een onafhankelijk onderzoek naar de aanpak van de nazorg van de Coupépolder in Alphen aan den Rijn*” wil de gemeenteraad de volgende vraag beantwoord hebben:

“Welke stoffen zijn zinvol te monitoren in de peilbuizen in het watervoerende pakket, benedenstrooms gelegen van de stortplaats, met afweging op mobiliteit en toxiciteit.”

In 1988 werden tijdens ontgravingswerkzaamheden in de voormalige stortplaats vele monsters genomen van aanwezige materialen, al dan niet in vaten, die als bedrijfsafvalstoffen konden worden bestempeld. Analyses van deze materialen en onderzoek door het Regionale Recherche Team, Coupé Team aangevuld met verder onderzoek in juli 1992, tijdens het zg ‘Containeronderzoek’ hebben geleid tot de identificatie van een lijst van stoffen en stofgroepen die mogelijk in de Coupépolder aanwezig zijn.

De tien stoffen die het hoogst scoren op basis van mobiliteit én toxiciteit zijn de volgende:

3-monochloorpropaan-1,2-diol
furan-2-carbonzuur
furfurylmercaptaan
dimethyldisulfide
benzeen
vinylchloride
trichlooretheen
tetrachloormethaan
2-methyl-3-furaanthiol
Dialifor

In rood zijn aangegeven de stoffen die nu reeds in het analysepakket van het nazorgprogramma zijn opgenomen.

De selectie van de bovenstaande stoffen geschiedde enkel op mobiliteit en toxiciteit. Een afweging op basis van de hoeveelheid van de gestorte gevaarlijke stoffen en van hun biodegradatiesnelheid kon niet worden uitgevoerd bij gebrek aan voldoende nauwkeurige gegevens over hoeveelheden en biodegradatiesnelheden en behoorde ook niet tot de opdracht van het onderzoek.

In het analysepakket van de periodieke monitoring van drain- en grondwater worden trouwens die stofgroepen van gevaarlijke stoffen geanalyseerd die in de grootste hoeveelheden voorkomen in bedrijfsafval én in huishoudelijk afval. Dit zijn de aromatische petroleum-oplosmiddelen (voornamelijk BTEX) en de vluchtige gechloreerde oplosmiddelen (VOC1's) zoals bijvoorbeeld tetrachloormethaan en trichlooretheen. Indien de hoeveelheden en de biodegradatiesnelheid van deze stoffen wel meegewogen zouden worden dan zouden deze bovenaan de weergegeven lijst staan.

Stoffen die mobiel zijn en zeer toxisch, doch slechts in relatief kleine hoeveelheden in de Coupépolder voorkomen, zullen naar verwachting geen significante concentraties in het drainwater en in het diepere grondwater veroorzaken. De voorgestelde aanvullende monitoring zal de validiteit van deze verwachting bevestigen of ontkrachten.

Bijlage 1: Geconsulteerde documenten en lijsten

REGIO LUID HOLLAND MIDDEN

REGIONAAL RECHERCHETEAM

COUPE TEAM

NO: S-M-2

BETREFT: Lijst van
aangetroffen stof-
fen/verbindingen
op de stortplaats in
de Coupe-polder te
Alphen aan den Rijn.

ZWAVEL
FOSFOR
CALCIUM
TITAN
IJZER
BITUMEN
SILICIUM
ZIRCOON
ALKANEN (KOOLSTOF-10 tot en met 22)
ALKAAN-AMINES (KOOLSTOF-16,18,19 en 20)
POLYCYCLISCHE AROMATISCHE KOOLWATERSTOFFEN (PAKS : naftaleen,
acenaftyleen, fluoreen, fenanthreen, fluorantheen, pyreen)
FTALATEN
TERPENTINE
DIZWAVEL-DICHLORIDE
POLY-SILOXANEN
C3- en C4- BENZENEN
GESUBSTITUEERDE FENOLEN
STEROIDEN
TOLUEEN
XYLEEN
FTALOCYANIDE-GROEN
ACRYL POLYMEER
FTALOCYANIDE-BLAUW
CARBONZUREN
ESTERS VAN CARBONZUREN
DIBUTOXY-METHANOL
ALUMINIUM
ZOUTZUUR
AMMONIUMSULFIDE
FURAAN-ZWAVELVERBINDINGEN
TRIMETHYL CYCLOHEXAAN-METHANOL (TERPEEN)
BENZOPYRANON (CUMARINE)
ANISOL
BENZYLALCOHOL
PURINE-AMINE
DIBROOM-BENZEEN
DICHLOR-TOLUEEN
ETHYLESTERS van CARBONZUREN (KOOLSTOF14, KOOLSTOF16, KOOL-
STOF18)
POLYPROPYLEEN
BENZEEN
METHANOL
ETHANOL
METHOXY-PROPANON
C2-BUTEENZURE ETHYLESTER
C10H16-TERPEEN (TRIMETHYLNORBORNENE)

1129

ALIFATISCHE ESTER.
ALIFATISCHE OH(HYDROXY)-GROEPEN
CYCLOHEXAAN
DIMETHYLPROPIONAAT
METHYL-BUTANOAT
HEXENON
METHYL-PENTANOAT
ETHYL-BUTANOAT
METHOXY METHYL PENTANON
TERPEEN C10H16 (5*)
ALIFATISCHE ZUURSTOF-VERBINDING C9H14O2
TERPEEN C10H180 (3*)
ONVERZADIGD ALIFATISCH ALCOHOL C9H18O
ALIFATISCHE ZUURSTOF-VERBINDING (ESTER)
NATRIUM-ACETAAT
SECUNDAIRE AMIDES
POLY-HYDROXY-VERBINDINGEN
KETO-CARBONZUREN
ORGANISCHE ZWAVELVERBINDINGEN.

1. Betreft: Lijst van aangetroffen stoffen/verbindingen op de stortplaats in de Coupé-polder te Alphen aan den Rijn. Regio Zuid-Holland Midden, Regionaal Recherche Team, Coupé Team. Februari 1989
2. Proces-verbaal. Betreft: Bevindingen selectie bedrijven ingevolge art 174 WvSr., Regio Zuid-Holland Midden, Regionaal Recherche Team, Coupé Team. 11.7.1988
3. Ligtenberg J.A.D. en Meijer N.M.M.J., “Betreft: Onderzoeksresultaten boringen, monsternemingen en analyses m.b.t. de stortplaats Coupé-Polder” te Alphen aan den Rijn.” Regio Zuid-Holland Midden, Regionaal Recherche Team, Coupé Team. 6.10.1988
4. RIVM. “Onderzoeksresultaten van monsters afkomstig van de ontgraving in de Coupé polder te Alphen aan den Rijn.” November 1988
5. RIVM. “ Inzake de monsters 18Z-8 t/m 18Z-14 genomen uit vaten bij de opgraving in de Coupé-polder te Alphen.” December 1988
6. Gerechtelijk Laboratorium van het Ministerie van Justitie. Rapport No 88.12.05.52/XIII betreffende het onderzoek van monsters die opgegraven werden bij de voormalige vuilnisstort te Alphen aan den Rijn. 16.2 1989.
7. RIVM. Betreft: Rapportage Alphen a/d Rijn (project 747620). 15 12.1988
8. Proces Verbaal. “Betreft: Verklaring m.b.t. de schadelijkheid van de stoffen”. Regio Zuid-Holland Midden, Regionaal Recherche Team, Coupé Team. 14.3. 1989
9. Proces Verbaal. “Betreft: Resultaten opgravingen.” Regio Zuid-Holland Midden, Regionaal Recherche Team, Coupé Team. 10.2.1989
10. Lijst: Betreft: Mogelijk afgevoerd afval, betrekking hebbende op de projecten inzake het gerechtelijk vooronderzoek artikel 174 van het Wetboek van Strafrecht contra S.A.C. Kemp.
11. TNO-Defensieonderzoek. “Bevindingen TNO PML monstername- en detectieteam tijdens het ‘containeronderzoek ‘Coupépolder’”. 22.7.1992
12. IWACO. “ Containeronderzoek vuilstort Coupépolder.” Juli 1992.
13. Royal Haskoning. “ Nazorgplan Coupépolder.” 30 mei 2011
14. Externe deskundigencommissie. “ Verslag van een onafhankelijk onderzoek naar de aanpak van de nazorg van de Coupépolder in Alphen aan den Rijn. “ 6 december 2012.

Bijlage 2: Gebruik van mogelijk in de Coupépolder aanwezige stoffen

1. Inleiding

Voor de meeste mensen zijn de namen van vele chemicaliën nietszeggend. Moeilijke chemische namen van stoffen worden vaak door de ontoegankelijkheid van de naamgevingsystematiek met gevaar geassocieerd.

De meeste stoffen die deel uitmaken van de producten en voedingsmiddelen die we dagelijks gebruiken vinden we ook terug in het bedrijfsafval. Om de geïnteresseerde lezer meer inzicht te bieden in welke producten de in de Coupépolder geïnventariseerde stoffen voorkomen wordt in dit hoofdstuk in alfabetische volgorde per stoffengroep en zelfs voor een aantal stoffen per individuele stof een beknopte beschrijving gegeven van het gebruik van deze stoffen. Hierbij werd veelvuldige gebruik gemaakt van bronnen die voor iedereen toegankelijk zijn zoals Wikipedia en informatiebladen (*MSDS : Material Safety Data Sheet*) van fabrikanten en leveranciers van chemicaliën.

De informatie in dit hoofdstuk is beknopt en beoogt geen volledigheid. Milieurelevante gegevens van chemicaliën in producten en voedingsmiddelen die we kopen zijn schaars en moeilijk toegankelijk voor de consument. De consument moet niet enkel beschikken over arendsogen maar moet ook een ervaren scheikundige zijn met een encyclopedische kennis van stoffen om met de geboden informatie op de verpakking een bewuste keuze te kunnen maken (zie de illustratie op ware grootte van een van de betere voorbeelden).

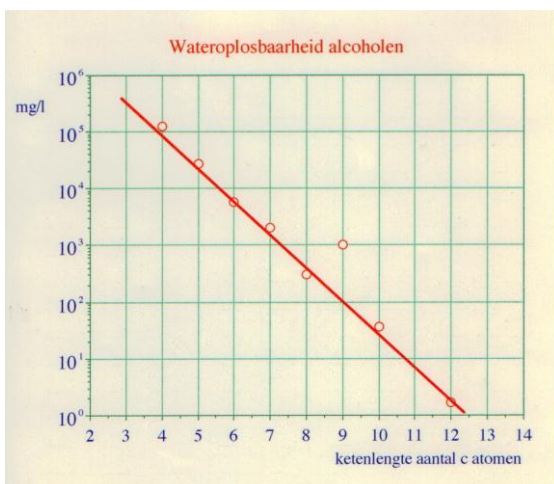


2. Alcoholen

2.1 Alifatische en onverzadigde alcoholen

Alcoholen komen algemeen voor in vele planten en vruchten als gevolg van natuurlijke fermentatieprocessen. Alcoholen worden niet enkel gebruikt voor menselijke en dierlijke consumptie maar in producten vooral als oplosmiddel voor bijvoorbeeld inkt, verf en lak. De lagere alcoholen zoals ethanol zijn goed wateroplosbaar, snel biologische afbreekbaar en niet

schadelijk voor mens en milieu tenzij bij overdreven consumptie.



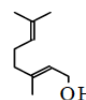
(The Flavor and Extract Manufacturers Association of the United States) erkend als GRAS voedseladditief. (*Generally Recognized As Safe*). De verzadigde en onverzadigde alcoholen worden eveneens veelvuldig toegepast in vele cosmetica.

De onverzadigde alcoholen zoals hexeen-3-ol en octeen-3-ol en 6-nonen-1-ol hebben een grotere wateroplosbaarheid dan hun onverzadigde homologen. Deze onverzadigde alcoholen zijn verantwoordelijk voor de specifieke geuren van planten en vruchten en worden als voedseladditieven gebruikt om de smaak van voedingsmiddelen zoals bijvoorbeeld koffie te versterken. Deze onverzadigde alcoholen zijn goed wateroplosbaar, snel biologische afbreekbaar en matig toxisch. Ze zijn door de FEMA

Benzylalcohol is een aromatisch alcohol dat wel matig toxisch is voor waterorganismen. Benzylalcohol komt eveneens voor in planten en vruchten en wordt in de chemische industrie gebruikt o.a. voor de productie van esters voor de zeep, parfum en reuk- en smaakstoffenindustrie.

2.2 Terpeenalcoholen

Een bijzondere groep alcoholen zijn de zogenaamde terpeenalcoholen. Zij worden in zeer grote hoeveelheden geproduceerd door dennenbomen. Vroeger werden de terpeenalcoholen geïsoleerd uit het sap van dennenbomen (Pinus) door distillatie en extractie. Nu worden terpeenalcoholen op grote schaal synthetisch geproduceerd uit minerale olie. Terpeenalcoholen zoals myrcenol, terpineol, geraniol, nerol, linalool e.a. worden als geurstoffen gebruikt in zepen, schoonmaakmiddelen en cosmetica. Zij zijn slecht in water oplosbaar, goed biologisch afbreekbaar, weinig schadelijk voor de mens en matig toxisch voor aquatische organismen.



trans-3,7-Dimethyl-2,6-octadien-1-ol
(Geraniol)



cis-3,7-Dimethyl-2,6-octadien-1-ol
(Nerol)

3. Aldehyden

Aldehyden zijn zeer reactieve stoffen die tal van reacties kunnen aangaan. Zij worden daarom in de chemische industrie gebruikt voor o.a. de productie van weekmakers, polyolen, harsen en alcoholen. De in de Coupépolder aanwezige aldehyden nl acetaldehyde en benzaldehyde zijn beide goed wateroplosbaar, biologisch afbreekbaar en matig toxisch.

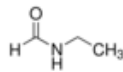


4. Alkanen

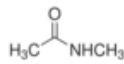
Alkanen zijn eenvoudige koolwaterstoffen zonder functionele groepen of dubbele bindingen. De lagere alkanen zoals methaan, ethaan, propaan en butaan zijn bij omgevingstemperatuur gassen en zij zijn de voornaamste bestanddelen van aardgas en LPG. De hogere alkanen zijn bekend als paraffinen en vinden toepassingen in zalven, motorolie, smeerolie en oplosmiddelen.

5. Amides, secundaire

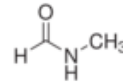
Secundaire amides zijn amides waarbij het stikstofatoom gebonden is met twee koolstofatomen nl enerzijds de carbonylgroep (C=O) en anderzijds een alkylgroep. Secundaire amides zijn basischemicaliën voor de synthese van vele andere chemicaliën. Enkele voorbeelden van secundaire amides zijn hieronder weergegeven.



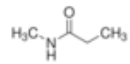
03951
N-Ethylformamide
≥99.0% (GC)



M26305
N-Methylacetamide
≥99%



473936
N-Methylformamide
99%

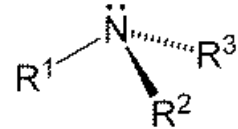


290874
N-Methylpropionamide
98%

Amides zijn reactieve chemicaliën en zullen ook in de bodem en het grondwater reacties aangaan met andere stoffen. De secundaire amides met een korte alkylgroep zoals bijvoorbeeld methyl-, ethyl-, propyl-, butyl-, zijn goed oplosbaar in water en dus mobiel. Ze zijn echter weinig schadelijk voor mens en milieu. De secundaire amides met een lange alkylketen zoals dodecyl zijn daarentegen slecht oplosbaar in water doch ook niet schadelijk voor mens en milieu.

6. Aminen

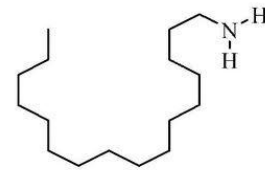
Aminen lijken op ammoniak met dit verschil dat een, twee of drie waterstofatomen zijn vervangen door andere groepen zoals bijvoorbeeld alkylgroepen in bijvoorbeeld hexadecylamine, of door onverzadigde verbindingen zoals ethyleen in diethyleentriamine.



Aminen zijn reactieve verbindingen en worden als grondstoffen of tussenproducten in de industrie toegepast in de productie van weekmakers, corrosie inhibitoren, antioxidanta en polyamide harsen. Hexamethyleendiamine wordt bijna uitsluitend gebruikt voor de productie van polyamidevezel Nylon die tal van toepassingen kent zoals bijvoorbeeld in klimtouwen (zie illustratie)



De alkylaminen (fatty amines) zoals palmitylamine en stearylamine worden geproduceerd op basis van plantaardige vetzuuresters verkregen uit bijvoorbeeld palmolie, cocosolie en soyaolie. De voornaamste toepassing van deze alkylaminen is de productie van detergents en wasmiddelen.



hexadecylamine

De lagere aminen zijn zeer goed wateroplosbaar terwijl de alkylaminen met lange alkylketens slecht in water oplossen. Ondanks de aquatische toxiciteit van enkele van deze alkylaminen zoals stearylamine is de wateroplosbaarheid van deze aminen kleiner dan de aquatische LC50 zodat zij geen bijzondere zorg behoeven.

7. Aromaten gehalogeneerd

Met gehalogeneerde aromaten wordt in dit verband bedoeld gechlooreerde en gebroomeerde benzenen en toluenen en met name dibroombenzenen, dichloorbenzenen en dichloortoluenen.

Dichloorbenzenen en dichloortoluenen zijn krachtige oplosmiddelen die in industriële detergents worden toegevoegd voor het reinigen van sterk vervuilde apparatuur. Deze stoffen zijn zeer schadelijk voor aquatische organismen



Dibroombenzeen is een reactieve stof die in de chemische industrie als grondstof wordt toegepast voor de synthese van o.a. Phthalocyanine pigmenten. Dibroombenzenen zijn eveneens zeer schadelijk voor aquatische organismen.

8. Azo pigmenten

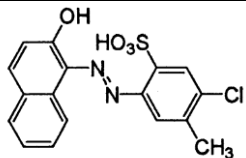
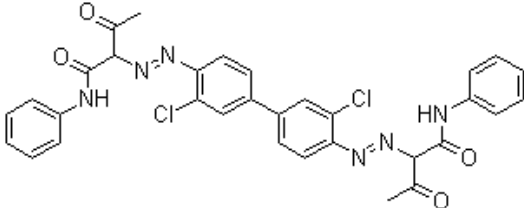
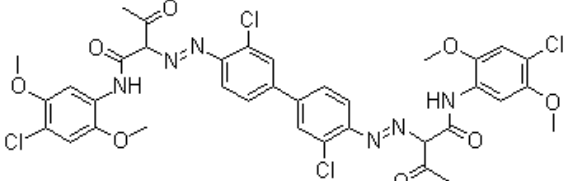
Kleurstoffen lossen op in water of alcohol. Een pigment daarentegen drijft op, of zinkt in water. Pigment is poeder dat uit kleine, onoplosbare, sterk gekleurde korrels bestaat. Om pigment te verwerken, moet er gebruik worden gemaakt van een bindmiddel. Pigmenten zijn niet in water oplosbaar, een kleurstof daarentegen vaak wel.



Azo pigmenten zijn chemicaliën afgeleid van de functionele groep **R-N=N-R'** waarbij R en R' zowel een alkyl groep of een ringverbinding kan zijn. De N=N groep wordt een azogroep genoemd naar 'azote' Frans voor stikstof (N). Azo pigmenten worden in verven gebruikt vooral voor textiel en leer.

De meeste azo pigmenten zijn niet schadelijk en bovendien slecht in water oplosbaar. Ze zijn in het grondwater zo goed als immobiel.

Er zijn vele verschillende azo kleurstoffen.

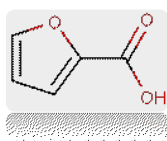
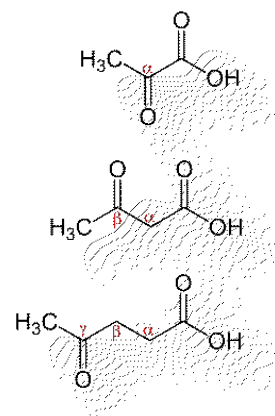
		Retardatie Factor bij 2% o.c.	Toxiciteit LD50 mg/kg bw
Pigment Red 53.1		1,265	
Pigment Yellow 12		2,500,000,000	>1,750
Pigment Yellow 83		285	>1,750

9. Carbonsuren en zouten

De voornaamste carbonsuren en -zouten zijn mierzuur en azijnzuur en hun natrium zouten respectievelijk natriumformiaat en natriumacetaat. Deze zuren kennen zeer vele toepassingen en komen overal in de natuur voor.

Ketocarbonsuren zijn carbonsuren die een ketonfunctie (C=O) hebben zoals wordt getoond in de molecuulstructuren rechts (van boven naar onder: pyruvinezuur, acetoazijnzuur en levulinezuur). Ketocarbonsuren spelen een belangrijke rol in ons eigen metabolisme. Zij komen alom voor in planten, huidvet en in de hersens en worden in de industrie gebruikt als grondstoffen voor o.a. de synthese van aminozuren en geur- en smaakstoffen.

De meeste zuren zijn goed in water oplosbaar, snel afbreekbaar en weinig schadelijk.



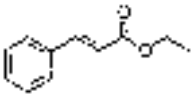
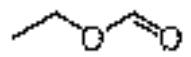

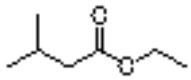
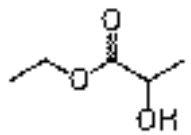



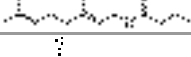

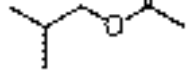
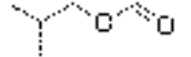

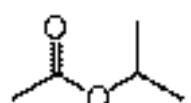



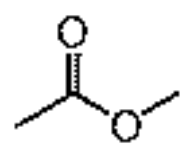
Een vreemde eend in de bijt is furan-2-carbonzuur (furoic acid). Furan-2-carbonzuur heeft een 5-ring met een zuurstofatoom (furan ring). Deze stof is de grondstof voor vele farmaceutische en industriële en landbouwchemicaliën. Furan-2-carbonzuur is zeer mobiel en bovendien matig humaan toxisch (categorie 3).

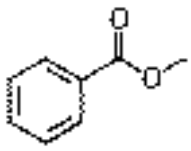

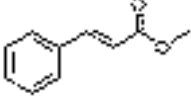

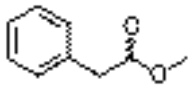
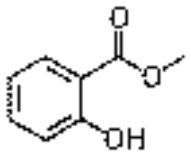


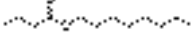


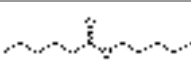
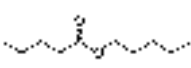
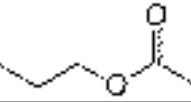
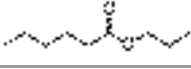
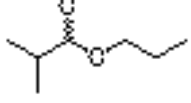
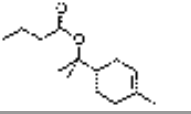
10. Carbonzuuresters

Carbonesters zijn dé geur en smaakstoffen in de plantenwereld en in ons voedsel. Ter illustratie wordt hieronder een lijst van veel voorkomende carbonesters weergegeven met hun structuurformule en de voornaamste planten waarin zij een belangrijke bijdrage leveren in de typische geur of smaak van de betreffende planten (*bron Wikipedia*).



Ester Name	Formula	Odor or occurrence
Allyl hexanoate		pineapple
Benzyl acetate		pear, strawberry, jasmine
Butyl acetate		apple, honey bee
Butyl butyrate		pineapple
Ethyl acetate		nail polish remover, model paint, model airplane glue
Ethyl butyrate		banana, pineapple, strawberry
Ethyl hexanoate		pineapple, waxy-green banana

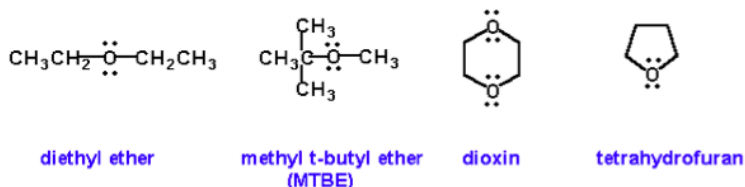
Ethyl cinnamate		cinnamon
Ethyl formate		lemon, rum, strawberry
Ethyl heptanoate		apricot, cherry, grape, raspberry
Ethyl isovalerate		apple
Ethyl lactate		butter, cream
Ethyl nonanoate		grape
Ethyl pentanoate		apple
Geranyl acetate		geranium
Geranyl butyrate		cherry
Geranyl pentanoate		apple
Isobutyl acetate		cherry, raspberry, strawberry
Isobutyl formate		raspberry
Isoamyl acetate		pear, banana (flavoring in Pear drops)
Isopropyl acetate		fruity
Linalyl acetate		lavender, sage
Linalyl butyrate		peach
Linalyl formate		apple, peach
Methyl acetate		glue

Methyl benzoate		fruity, ylang ylang, feijoa
Methyl butyrate (methyl butanoate)		pineapple, apple, strawberry
Methyl cinnamate		strawberry
Methyl pentanoate (methyl valerate)		flowery
Methyl phenylacetate		honey
Methyl salicylate (oil of wintergreen)		Modern root beer, wintergreen
Nonyl caprylate		orange
Octyl acetate		fruity-orange
Octyl butyrate		parsnip
Amyl acetate (pentyl acetate)		apple, banana
Pentyl butyrate (amyl butyrate)		apricot, pear, pineapple
Pentyl hexanoate (amyl caproate)		apple, pineapple
Pentyl pentanoate (amyl valerate)		apple
Propyl acetate		pear
Propyl hexanoate		blackberry, pineapple, cheese, wine
Propyl isobutyrate		rum
Terpenyl butyrate		cherry

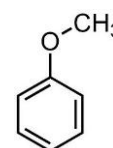
De lagere carbonzuuresters zijn goed wateroplosbaar, snel biologische afbreekbaar en weinig toxisch. De hogere carbonzuuresters zoals de ethylzuuresters van carbonzuren C14 tot C18 zijn slecht in wateroplosbaar maar eveneens weinig toxisch.

11. Ethers

Ethers zijn stoffen die bestaan uit twee groepen (alkyl of ring) gebonden door een zuurstofatoom. Ethers zijn geen reactieve stoffen en zijn daarom goede oplosmiddelen. De vluchtige ethers zoals diethylether (ethoxyethaan) en methylpropylether zijn anaesthetica (slaapmiddelen).



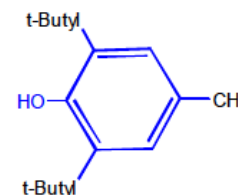
Anisole is een synthetische stof en grondstof voor o.a. de productie van farmaceutische stoffen, parfums en insect lokstoffen.



anisole

12. Fenolen gesubstitueerd

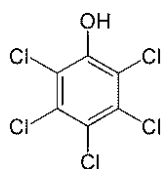
Gesubstitueerde fenolen waarvan een of meerdere waterstofatomen op de ring zijn vervangen (gesubstitueerd) door andere groepen, meestal alkylgroepen. Een speciale groep gesubstitueerde fenolen zijn de zogenaamde 'hindered' fenolen waarbij twee tertiäre alkylgroepen naast de hydroxylgroep zijn geplaatst zodat deze hydroxylgroep wordt belet (hindered) om te reageren met andere stoffen (zie voorbeeld 2,6-di-(tert-butyl)-4-methylphenol). Deze 'hindered' fenolen zijn additieven voor natuurrubber, synthetische rubber, lijmen, plastics, textielvezels, coatings en natuurlijke en synthetische olie. Deze fenolen zijn anti-oxidantia die aan vele producten wordt toegevoegd in concentraties typisch tussen 0,5 en 2%. Deze 'hindered' fenolen zijn weinig toxisch voor de mens maar wel zeer toxisch voor aquatische organismen.



2,6-di-(tert-butyl)-4-methylphenol

13. Fenolen gechloreerd

De enige gechloreerde fenol die in de Coupépolder werd geïdentificeerd is pentachloorfenol.



Deze stof werd sinds de jaren dertig van vorige eeuw tot in de jaren negentig grootschalig gebruikt voor de verduurzamen van hout. Het gebruik van pentachloorfenol loopt van herbicide via insecticide, fungicide, algicide en ontsmettingsmiddel tot antifoulingverf.

De verbinding is onder een groot aantal namen op de markt gebracht, zoals: *Santophen*, *Pentachlorol*, *Chlon*, *Dowicide 7*, *Pentacon*, *Penwar*, *Sinituho* en *Penta*.

Kortstondige blootstelling aan grote hoeveelheden pentachloorfenol heeft schadelijke effecten op lever, nieren, maag, darmen, bloed, longen, het zenuwstelsel en immuunsysteem. Gezien de toxiciteit van pentachloorfenol worden in het Warenwetbesluit grenswaarden gesteld aan de import van producten die mogelijk pentachloorfenol bevatten.

Artikel 2 Warenwetbesluit Pentachloorfenol

Het is verboden waren, niet zijnde eet- en drinkwaren, die meer dan 5 mg/kg pentachloorfenol bevatten, te verhandelen of binnen Nederlands grondgebied te brengen.

14. Furanen zwavelhoudend

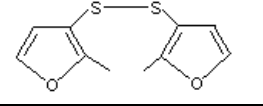
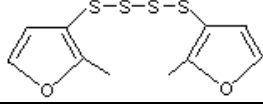
Zwavelhoudende furaanderivaten zijn stoffen die een furaanring bezitten en een of meerdere zwavelgroepen op een zijketen. Zwavelhoudende furaanderivaten worden algemeen gebruikt als reuk en smaakstoffen in voedingsmiddelen. Zwavelhoudende furaanderivaten komen voor in vele groenten en fruit en werden gedetecteerd in bijvoorbeeld melk, brood, koffie, vlees, bier, honing. De volgende concentraties werden door EFSA (*European Food Safety Organisation*) in 2011 gerapporteerd:



	Voedingsmiddel	Concentratie µg/kg
Ethyl furfuryl sulfide	koffie	10
2-methyl 5-methylfurfuryl disulfide	koffie	tot 30
2-methyl 5-methylfurfuryl sulfide	koffie	tot 200
5-methyl-2-furanmethanethiol	koffie	tot 200

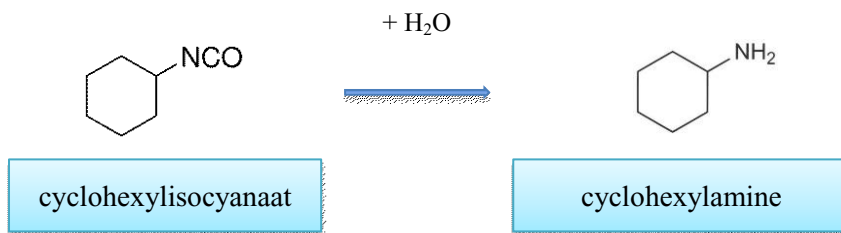
Alhoewel de meeste zwavelhoudende furanen matig toxisch zijn voor de mens (categorie 3: LD50: 50-300 mg/kg lichaamsgewicht) zijn deze furanen doorgaans door de *American Food and Drug Administration* als GRAS (*Generally Recognised as Safe*) beoordeeld gezien de lage concentraties in voedingsmiddelen en de lage toegestane concentraties als voedseladditieven. Enkele kleine moleculen zoals furfurylmercaptaan (CAS 98-02-3) en 2-methyl-furaanthiol (CAS 28588-74-1) zijn bovendien mobiel en zijn kandidaten voor verder onderzoek.

Compound	Empirical Formula	CAS#	
2 methyl 3 furan thiol	C ₅ H ₆ OS	28588-74-1	
furfurylmercaptaan	C ₅ H ₆ OS	98-02-3	
2 methyl 3 tetrahydro furan thiol	C ₅ H ₁₀ OS	57124-87-5	
2,5 dimethyl furan thiol	C ₆ H ₈ OS	55764-23-3	
methyl 2 methyl 2 furyl disulfide	C ₆ H ₈ OS ₂	65505-17-1	
propyl 2 methyl 3 furyl disulfide	C ₈ H ₁₂ OS ₂	61197-09-9	
difurfuryl monosulfide (2, 2 (thio dimethylene)difuran)	C ₁₀ H ₁₀ O ₂ S	13678-67-6	

bis (2 methyl 3 furyl) disulfide	C10H10O2S2	28588-75-2	
bis (2 methyl 3 furyl) tetrasulfide (tetra thio bis (2-methyl furan))	C10H10O2S4	28588-20-1	

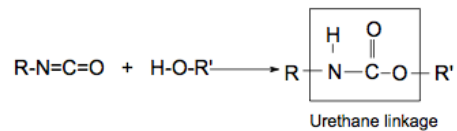
15. Isocyanaten

Isocyanaten zijn zeer reactieve stoffen die in water snel hydrolyseren tot de overeenkomstig aminen. In de Coupépolder werd slechts éénmaal cyclohexylisocyaanaat gedetecteerd. Cyclohexylisocyaanaat hydrolyseert in water in ca 2 uur tot cylohexylamine. Om deze reden is het zinvol om deze laatste stof te beoordelen.



Cyclohexylamine is matig humaan toxisch (categorie 3 : LD₅₀ : 50-330 mg/kg lichaamsgewicht) en zeer mobiel en is dus een kandidaat voor verder onderzoek.

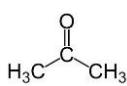
Cyclohexylamine zal o.a. met polyolen reageren tot urethaan monomeren (zie onderstaande reactie) die verder met andere chemicaliën kunnen reageren tot polyurethanen. Polyurethanen kennen vele toepassingen zoals polyurethaanschuim voor kussens matrassen en stoelbekleding, autolakken, verven, coatings en thermoplastische kunststoffen.



Cyclohexylisocyaanaat + alcohol → urethaan

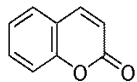
16. Ketonen

Ketonen zijn moleculen met een C=O (keton) groep. Zij komen in de natuur veelvuldig voor.



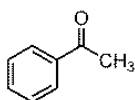
aceton

De eigenschappen van acetone, het kleinste keton, zijn te vergelijken met die van ethylalcohol. Het is zeer goed oplosbaar in water, snel biodegradeerbaar en weinig schadelijk. Acetone is een goed en goedkoop oplosmiddel en wordt daarom in grote volumes gebruikt in allerlei oplosmiddelen ook voor gebruik door consumenten.



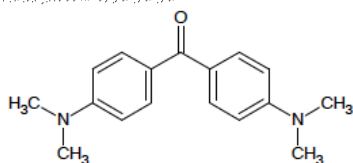
coumarin

Coumarin (benzopyran) is een aromatische verbinding die naar hooi en drogend gras ruikt. Coumarin wordt gebruikt als geurstof o.a. in parfums.



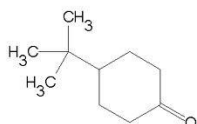
acetophenon

Acetophenone komt in de natuur voor in vele voedingsmiddelen zoals appel, kaas, abrikoos, banaan en rundsvlees. Acetophenone wordt dan ook gebruikt om smaak- en geurstoffen samen te stellen. Acetophenone wordt vermeld op de lijst van ca 600 additieven die aan sigarettentabak worden toegevoegd. In de industrie wordt acetophenone gebruikt in acetophenone-formaldehyde hars.



Michler's keton

Michler's ketone of 4,4-bis(dimethylamino)benzophenone wordt gebruikt als een belangrijke intermediair in de synthese van trifenylmethaan kleurstoffen. Deze kleurstoffen worden o.a. toegepast in drukinkt en in verven voor leer en textiel. Michler's ketone wordt eveneens gebruikt voor de productie van geneesmiddelen en polymeren.



4-tert-butylcyclohexanone wordt voornamelijk gebruikt in zeep parfums.

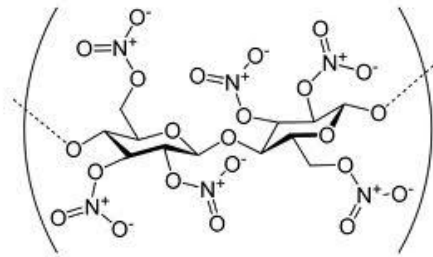
4-tert-butylcyclohexanon

De lagere ketonen zijn zoals de alcoholen goed in water oplosbaar en weinig schadelijk. De hogere ketonen zoals Coumarin en Michler's ketone hebben een hogere toxiciteit doch zijn slecht in water oplosbaar en zijn daarom geen kandidaten voor verder onderzoek.

17. Nitrocellulose

Nitrocellulose of ook schietkatoen genoemd is in feite cellulosenitraat. Cellulosenitraat wordt bereid door cellulose te nitreren met een mengsel van geconcentreerd salpeterzuur en zwavelzuur.

Afhankelijk van de kwaliteit van de cellulose en van de nitreringsgraad ligt het molecuulgewicht tussen 115.000 en 400.000. Cellulosenitraat is door de aanwezigheid van nitraatgroepen brandbaar tot explosief. In combinatie met andere middelen zoals nitroglycerine wordt het in munitie gebruikt als rookloos kruit.



nitrocellulose



Minder sterk genitreeerde cellulose kan worden opgelost in een mengsel van alcohol, esters en ketonen waarbij ook stabilisatoren zoals diphenylamine worden toegevoegd. Door verdamping van de oplosmiddelen ontstaat celluloid, een kunststof waar vroeger onder

andere tafeltennisballen en filmmateriaal van werden gemaakt.

Top brand nagellakken bevatten altijd nitrocellulose en daarnaast ook nog een aantal andere basiscomponenten zoals filmvormers, kunstharsen, weekmakers, oplosmiddelen en kleurstoffen (pigmenten).

Nitrocelluloselakken worden veelal gebruikt op houten producten zoals meubilair, muziekinstrumenten en andere voorwerpen. Nitrocelluloselak zorgt voor een harde maar flexibele, duurzame afwerking die kan worden gepolijst tot een hoge glans.

Nitrocellulose is onoplosbaar in water en heeft een geringe toxiciteit.



18. PAK's

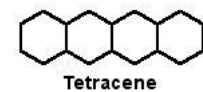
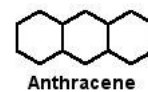
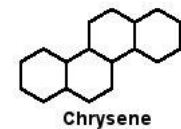
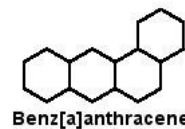
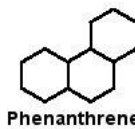
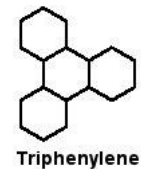
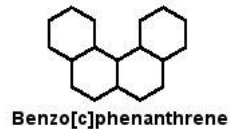
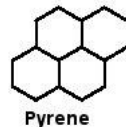
PAK's of Polyaromatische Koolwaterstoffen is een verzamelnaam voor een groot aantal teerachtige stoffen bestaande uit gekoppelde aromatische ringen (bijvoorbeeld benzeenringen).



PAK's ontstaan door onvolledige verbranding van koolstofbevattende materialen zoals olie, hout, tabak of voedingsmiddelen (barbecu!).

PAK's komen voor in steenkoolteer en steenkoolteerderivaten zoals creosootolie en anthraceenolie, roet en zware petroleumproducten zoals zware stookolie en asfalt. Steenkoolteer werd voornamelijk toegepast bij de verduurzaming van ijzer, onderwaterbehandelingen, ondergrondse constructies in beton of staal, buitenkant van schepen en houten schuren en voor dakbedekking (roofing).

Alhoewel de meeste PAK's zeer toxisch zijn voor aquatische organismen is hun wateroplosbaarheid te gering om een toxisch effect te veroorzaken. Door hun geringe wateroplosbaarheid zijn zij nauwelijks mobiel. Van alle PAK's is benzo(a)pyreen (BaP) de meest toxische (carcinogeen).



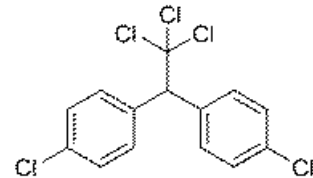
19. Pesticiden

Er werden drie pesticiden geïdentificeerd in het materiaal in de Coupépolder nl DDT, Dialifor en Dioxathion.



DDT heeft een toxische werking op luizen bedwantsen, vlooien, muggen en vele andere insecten. Zoals voor vele insecticiden heeft het massaal gebruik van DDT geleid tot de ontwikkeling van resistentie bij vele insecten.

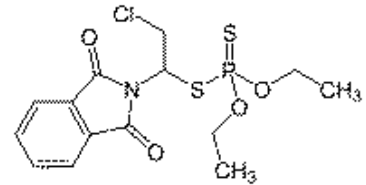
Door de slechte afbreekbaarheid, de schadelijkheid voor mens en dier door ophoping in vetten is het gebruik van DDT tegenwoordig verboden in de westerse wereld. In de derde wereld echter wordt op heden nog steeds DDT gebruikt, met name voor de bestrijding van malaria.



DDT

Dialifor wordt gebruikt als gewasbeschermingsmiddel voor fruit, aardappelen, groenten, katoen en andere gewassen.

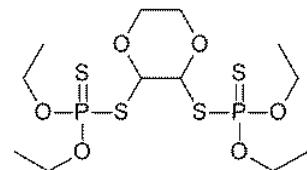
Dioxathion of *Delnav* (Hercules Powder Co.) was bedoeld voor de bestrijding van teken, mijten en vliegen op vee (koeien, geiten, schapen, varkens, ...). De behandeling gebeurde door onderdompeling of via verstuiving. Het werd ook gebruikt tegen insecten en mijten op citrusfruit, boomfruit (appel, peer, pruim, ...) of noten. Inmiddels wordt het door de WHO (*World Health Organisation*) beschouwd als een verouderd pesticide, en is het in vele landen niet meer toegelaten of aan beperkingen onderhevig.



dialifor

Pesticiden zijn biociden en de geïdentificeerde stoffen bezitten een hoge humane toxiciteit (categorie 2 : LD50 : 5 tot 50 mg/kg lichaamsgewicht) en zijn zeer toxisch voor aquatische organismen (LC50 < 1 mg/L).

De vermelde pesticiden zijn echter door hun geringe wateroplosbaarheid nauwelijks mobiel.



dioxathion

20. Polyhydroxyverbindingen : Polyolen

Polyhydroxyverbindingen of polyolen zijn verbindingen die meer dan een hydroxylgroep (OH) bezitten op een alifatische keten waarbij elke hydroxylgroep verbonden is met een ander koolstofatoom. Tot deze groep behoren de glycolen, glycerol en pentaerythritol en ook producten zoals o.a. trimethylolethaan, trimethylolpropan, 1,2,6-hexaantriol.

Monomeer polyolen worden gebruikt in de productie van polymeren voor alkyd harsen voor decoratieve coatings en voor poly-urethaan schuim en worden toegepast als weekmakers voor o.a. gelatine en lijm. Deze polymeren zijn polyethers en polyesters.

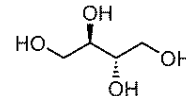


De bijzondere groep van polyolen zijn de zogenaamde 'suiker alcoholen' sorbitol, inositol, maltitol, xylitol, erythritol en isomalt. Dit zijn voedseladditieven ter vervanging van sucrose. Polyolen worden algemeen toegepast in persoonlijke verzorgingsproducten zoals tandpasta, parfum, crèmes, lotions en deodorants.

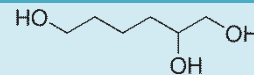
Monomeer polyolen zoals glycerin, pentaerythritol, ethyleenglycol en sucrose worden vaak gebruikt als grondstof voor de synthese van polymeerpolyolen. Deze stoffen zijn de "initiatoren" die reageren met propyleenoxide of ethyleenoxide tot polyethers. In de onderstaande figuur wordt een geïdealiseerde structuur weergegeven van de reactie van respectievelijk propyleenoxide en ethyleenoxide tot polyether

Polymere polyolen worden toegepast in de productie van andere polymeren zoals polyurethanen. Hierbij reageert de polyol met een isocyaanaat. Polyuretanen worden toegepast in schuimrubber voor matrassen, isolatiematerialen, schoenzolen, vezels en lijmen.

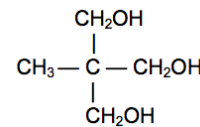
erythritol



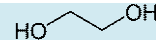
1,2,6-hexaantriol



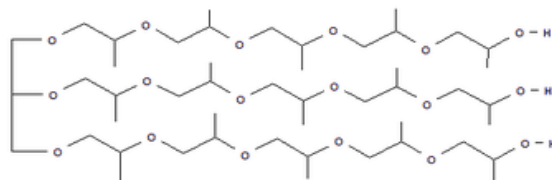
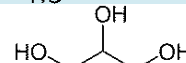
trimethylolethaan



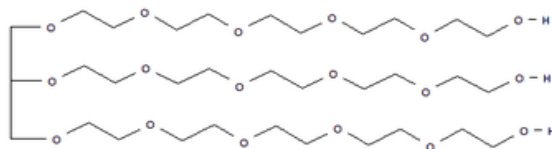
glycol



glycerol



An idealized structure for a 960 mw all-propylene oxide triol based on glycerin

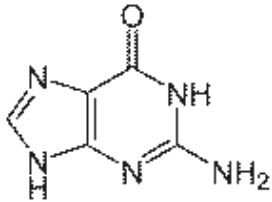


An idealized structure for a 750 mw all-ethylene oxide triol based on glycerin

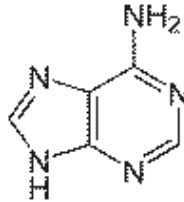
Enkele voorbeelden van geïdealiseerde structuren van polyethers

21. Purine

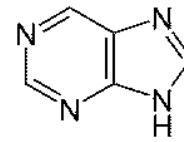
Purine (Latijn: *purum (acidum) uricum*, "zuiver urinezuur") is een **verbinding** met de chemische formule $C_5H_4N_4$. De stof is de basis voor de groep **derivaten** die **purines** genoemd worden, organische basen die bestaan uit gesubstitueerd purine. Hoewel purine zelf in de natuur niet vrij voorkomt, komen de afgeleide moleculen, de purines, overvloedig voor. De helft van de **nucleïnezuren**, dus van **DNA** en **RNA**, bestaat uit de purines **adenine** (A) of **guanine**.



adenine



guanine



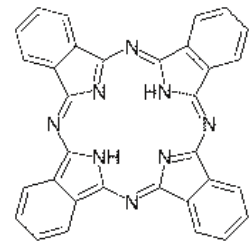
purine

De hoogste concentraties purines komen voor in vlees en vleeswaren in het bijzonder in organen zoals lever en nieren. Hoge concentraties komen ook voor in anchovies, sardientjes, haring, makereel, vleesextracten en -jus en bier (van het gist).

22. Phthalocyanines



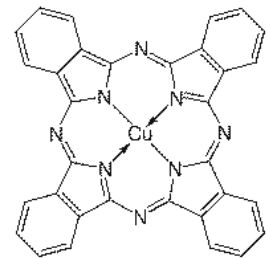
Wereldwijd zijn ongeveer 25% van alle organische pigmenten Phthalocyanine derivaten. Onder de naam *Phthalocyanine Blauw* en *Phthalocyanine Groen* worden een reeks van Phthalocyanine pigmenten bedoeld gebaseerd op de



Phthalocyanine ring

Phthalocyanine ringstructuur.

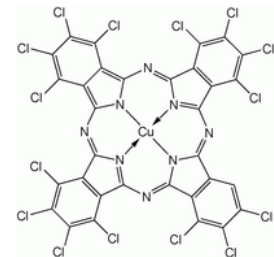
In de voornoemde pigmenten is de Phthalocyanine ring gecomplexeerd met een koper ion.



Phthalocyanine blauw

Phthalocyanine Blauw wordt door chlorering omgevormd tot Phthalocyanine Groen. Hierbij worden de waterstofatomen op de 4 benzeenringen vervangen door chlooratomen.

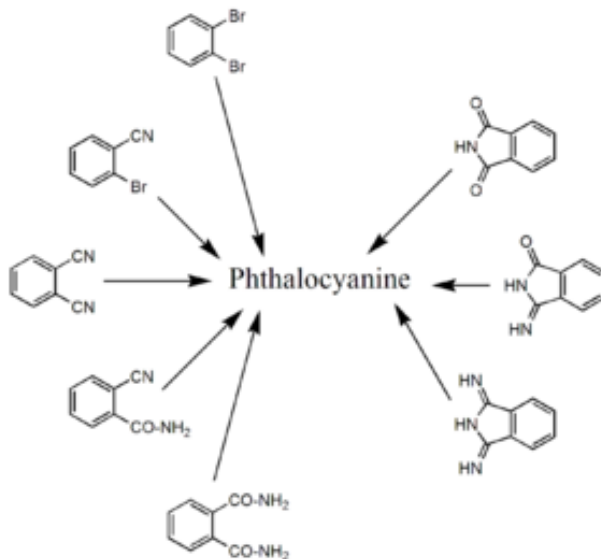
De Phthalocyanine pigmenten zijn slecht oplosbaar in water en zijn niet schadelijk voor mens en milieu.



Phthalocyanine groen

Echter de grondstoffen voor de synthese van phthalocyanine

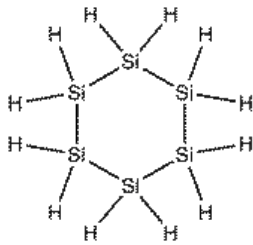
pigmenten, zoals bijvoorbeeld dibroombenzeen, die in bedrijfsafvalstoffen kunnen voorkomen kunnen wel schadelijk zijn voor mens en milieu (zie molecuulstructuren linksonder). Kijk verder voor de eigenschappen van enkele grondstoffen in de rubriek "Aromaten gehalogeneerd".



Synthese van phthalocyanine pigmenten

23. Silanen

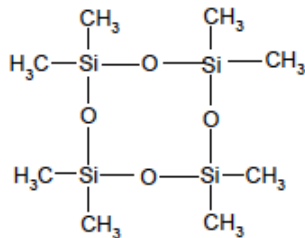
De **silanen** vormen een groep van organosiliciumverbindingen met als algemene brutoformule Si_nH_{2n} waarbij de siliciumatomen onderling verbonden zijn. Een voorbeeld ervan is cyclohexasilaan (figuur rechts).



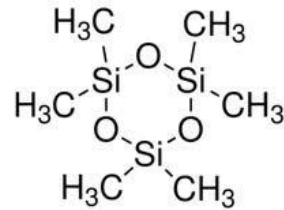
cyclohexasilaan

De zg ‘silanen’ die geïdentificeerd werden in de Coupépolder zijn echter siloxanen omdat de siliciumatomen onderling verbonden zijn via zuurstofatomen.

Hexamethylcyclotrisiloxaan en octamethylcyclotetrasiloxaan worden vooral gebruikt voor de productie van polymeren en in cosmetica zoals haarlak en deodorants.



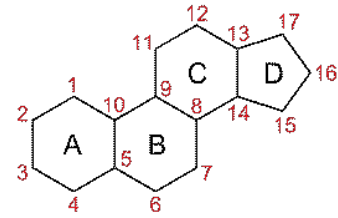
octamethylcyclotetrasiloxaan



hexamethylcyclotrisiloxaan

24. Steroïden

Steroïden zijn organische stoffen die een karakteristiek arrangement bezitten van vier aan elkaar gebonden cycloalkaantingen, nl drie cyclohexaanringen en één cyclopentaanring. De meest eenvoudige steroïd is hiernaast weergegeven met de nummering van de ringen en de koolstofatomen.



Er bestaan honderden verschillende steroïden die gevonden worden in planten, schimmels en dieren. Alle steroïden worden gesynthetiseerd in de cellen uitgaande van *lanosterol* (schimmels en dieren) of van *cycloartenol* (planten). Steroïden zijn bij omgevingstemperatuur een vaste stof, vandaar hun naam (Ster = hard; -oïdes = gelijkend op). De alom bekende lichaamseigen stoffen *cholesterol* en *testosterone* zijn ook steroïden. De structuren van de vermelde steroïden worden in de onderstaande tabel weergegeven.



Steroïden kennen tal van toepassingen zoals bijvoorbeeld in cosmetica, geneesmiddelen, drugs, snijolie, leerbalsem. Wolvet is een belangrijke bron van steroïden voor industriële toepassingen en voor toepassingen in consumentenproducten zoals cosmetica en leerbalsems.

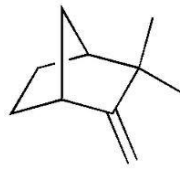
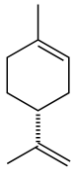
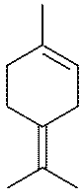
Wolvet of **lanoline** is het vet dat voorkomt in de wol van schapen. Wolvet wordt uit wol gewonnen door het te wassen en vervolgens het water te laten verdampen. Daarna wordt het gereinigd. Wolvet wordt veel gebruikt in zalven en crèmes, omdat het goed in de hoornlaag van de huid trekt. Bovendien kan wolvet veel water vasthouden. Wolvet bestaat voor een belangrijk deel uit esters van cholesterol.

lanosterol	 Lanosterol
cycloartenol	
cholesterol	
testosterone	

25. Terpenen

Terpenen zijn vluchtige koolwaterstoffen met de formules $C_{10}H_{16}$ en $C_{10}H_{18}$ die in de atmosfeer worden gebracht door dennenbomen. In de Coupépolder werden $C_{10}H_{16}$ terpenen gevonden.

Er zijn een hele reeks $C_{10}H_{16}$ terpenen. Enkele van de meest voorkomende zijn campheen, limoneen, terpinoleen en myrceen. Limoneen, myrceen en terpinoleen werden door de FDA (*U.S. Food and Drug Administration*) erkend als GRAS (*Generally Regarded As Safe*) voor gebruik als smaakstoffen in voedingsmiddelen. Limoneen wordt ook in toenemende mate als oplosmiddel gebruikt in verven, vernissen en industriële detergenten.



Terpinoleen

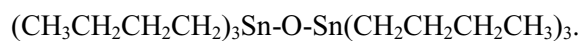
limoneen

campheen

Deze terpenen zijn slecht wateroplosbaar en zijn weinig schadelijk voor de mens.

26. Tributyltinoxide

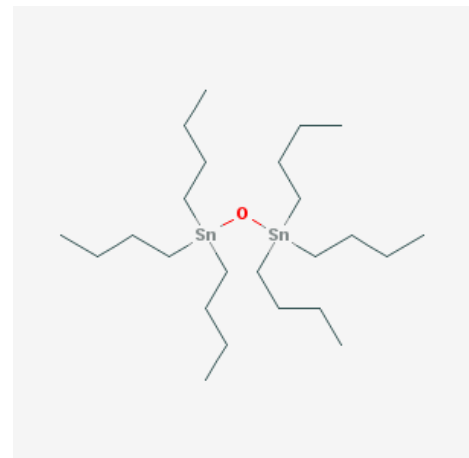
Tributyltin oxide (CAS No. 56-35-9; bis-[tri-*n*-butyltin]-oxide; tri-*n*-butyltin oxide; TBTO; hexabutyl distannoxane heeft de structuurformule :



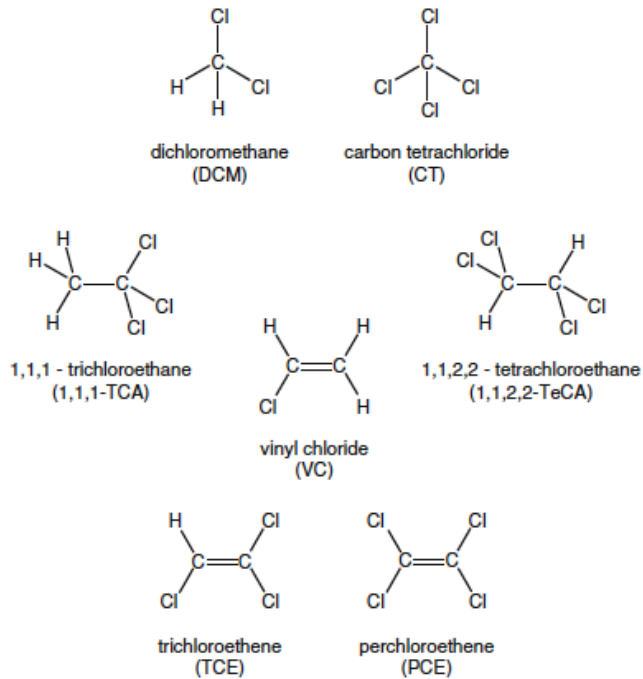
TBTO is een effectieve biocide voor hout, katoen textiel, papier en verf. Het wordt als antifouling additief toegevoegd aan scheepsverf als een copolymeer. Tributyltin zal langzaam in het water oplossen naargelang het polymeer hydrolyseert.

TBTO is zeer toxisch voor sommige aquatische organismen en heeft een hormonale werking voor sommige organismen (*endocrine disruptor*). TBTO is echter slecht in water oplosbaar en nauwelijks mobiel.

Ondanks de aquatische toxiciteit is TBTO geen kandidaat voor verder onderzoek voor de Coupépolder omdat het niet mobiel is.



27. VOX: vluchtige organohalogeenvverbindingen



Tot deze groep behoren de gechloreerde en de gebromeerde methanen, ethanen en ethenen. De gechloreerde verbindingen worden vooral gebruikt als ontvettingsmiddelen, oplosmiddelen en als anestetica. Grote hoeveelheden worden gebruikt door chemische wasserijen.

Tribroommethaan (bromoform)

wordt in kleine hoeveelheden in de natuur geproduceerd door algen. In het verleden werd bromoform gebruikt als oplosmiddelen en als vlamvertrager.

De vluchtige organohalogeenvverbindingen zijn als regel zeer mobiel en sommigen zijn een humaan carcinogeen zoals vinylchloride en trichlooretheen en andere zoals tetrachloormethaan zijn zeer toxisch voor aquatische organismen. Aangezien deze stoffen in grote hoeveelheden werden gebruikt zullen ze in meetbare concentraties voorkomen in percolatiewater van stortplaatsen.

Epichloorhydrine is eveneens een vluchtige organochloorverbinding en een reactieve epoxide. Epichloorhydrine wordt gebruikt in de synthese van glycerine, kunststoffen, epoxylijmen en epoxyharsen. In contact met water zal epichloorhydrine vlug hydrolyseren tot 3-monochloorpropaan-1,2-diol dat ook in voedsel voorkomt.

Epichlorohydrin is een oplosmiddel voor cellulose, harsen en verven en wordt tevens als bodemontsmettingsmiddel (fumigant) gebruikt.

3-monochloorpropaan-1,2-diol, het hydrolyseproduct van epichloorhydrine, is zeer mobiel en humaan toxisch (categorie 2 : LD50: 5-50 mg/kg lichaamsgewicht) en is dus een kandidaat voor verder onderzoek.

28. Zwavelverbindingen anorganisch



In de Coupépolder werden twee anorganische zwavelverbindingen geïdentificeerd nl ammoniumsulfide en zwavelchloride (dizwavelchloride). Zonder twijfel is in de voormalige stortplaats ook zwavelwaterstof aanwezig als gevolg van de reductie van de aanwezige sulfaten. Zwavelchloride wordt in de chemische industrie gebruikt voor het synthetiseren van C-S bindingen. Zwavelchloride reageert echter hevig met water tot zwaveldioxide, chloorzuur en zwavel en vormt dus geen bedreiging voor het diepere grondwater.

Ammonium sulfide, ook bekend als diammonium sulfide, is een onstabiel zout met de chemische formule $(\text{NH}_4)_2\text{S}$. Waterige oplossingen zijn in de handel die voornamelijk bestaan uit een mengsel van ammonium en $(\text{NH}_4)\text{SH}$. Ammonium sulfide wordt gebruikt in fotografische processen en in de textiel industrie.

De stof ontleedt bij kamertemperatuur met vorming van giftige en bijtende gassen onder andere ammoniak en waterstofsulfide. Dit mengsel ontleedt gemakkelijk tot ammonium en zwavelwaterstof die beide een penetrante en onaangename geur hebben en zijn daarom populaire als ‘stinkbom’. Deze producten zijn in de speelgoedwinkel te koop voor kinderen ouder dan 3 jaar !!!!



29. Zwavelverbindingen, organisch

Organische zwavelverbindingen werden gedetecteerd doch niet geïdentificeerd in de Coupépolder. De reden hiervan is wellicht dat onder de methanogene condities die heersen in een voormalige stortplaats organische sulfaten en sulfonaten die in vele afwasmiddelen en shampoo's en andere cosmetica worden gebruikt, worden gereduceerd tot sulfide. Hiernaast ter illustratie de samenstelling van een bekend citroenkleurig en naar citroen ruikend afwasmiddel.

Samenstelling Afwasmiddel
 sodium dodecylbenzenesulfonate;
 sodium C14-17 alkyl sec sulfonate;
 sodium laureth/pareth sulfate;
 magnesium sulfate;
 urea;
 parfum;
 tetrasodium EDTA;
 2-bromo-2- nitropropane-1,3-diol;
 CI 19140 = gele kleurstof Tartrazine
 CI 16255 = rode kleurstof Cochenillerood

Uiteindelijk zal de anaërobe afbraak van organische sulfaten en sulfonaten, resulteren in kleine sulfidemoleculen die zeer goed wateroplosbaar zijn zoals dimethylsulfide en diethylsulfide. Aanverwante zwavelverbindingen zijn dimethyldisulfide, diethyldisulfide en dipropyldisulfide die ook zeer mobiel zijn. Omwille van hun goede wateroplosbaarheid werden deze stoffen opgenomen in de lijst van mogelijk aanwezige verbindingen.

Dimethyldisulfide komt in vele voedingsmiddelen voor en wordt gebruikt als reagentia in de petrochemische industrie en verder als smaakstof en corrosie-inhibitor. Dimethyldisulfide is zeer toxisch voor aquatische organismen en heeft een zoogdiertoxiciteit van $\text{LD}_{50} = 190$ mg/kg bw en valt hierdoor in categorie 3 (LD_{50} tussen 50 en 300 mg/kg bw) en is een kandidaat voor verder onderzoek. Al deze sulfiden hebben een lage geurdrempel.

Bijlage 3: Relatie tussen wateroplosbaarheid en aquatische toxiciteit

1. Relatie tussen molecuulgewicht en wateroplosbaarheid

Bij bodemverontreinigingsonderzoeken en –saneringen hebben we meestal te maken met relatief kleine moleculen met molecuulgewicht zelden groter dan 600 grammol. Voor deze relatief kleine moleculen bestaan per homologe reeks eenvoudige relaties tussen molecuulgewicht en fysische eigenschappen zoals wateroplosbaarheid, vetoplosbaarheid (lipofiliteit), dampspanning enz.

Chiou, C.T., Freed V.H. en Schmedding² ontwikkelden in 1977 een eenvoudige methodiek om de wateroplosbaarheid van alifatische en aromatische verbindingen te berekenen aan de hand van de functionele groepen die zich op deze verbindingen bevinden. Sommige functionele groepen zoals amine (-NH₂), phenol (-OH), aldehyde (-COH), zuur (-COOH) en nitro (-NO₂) zullen de wateroplosbaarheid verhogen terwijl andere functionele groepen zoals fluor, chloor, broom, jodium, methyl (-CH₃) en phenyl (-C₆H₅) de wateroplosbaarheid doen dalen. In de onderstaande tabel uit het Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals³ worden ter illustratie van het voorgaande de factoren weergegeven om de wateroplosbaarheid van benzeenderivaten te berekenen.

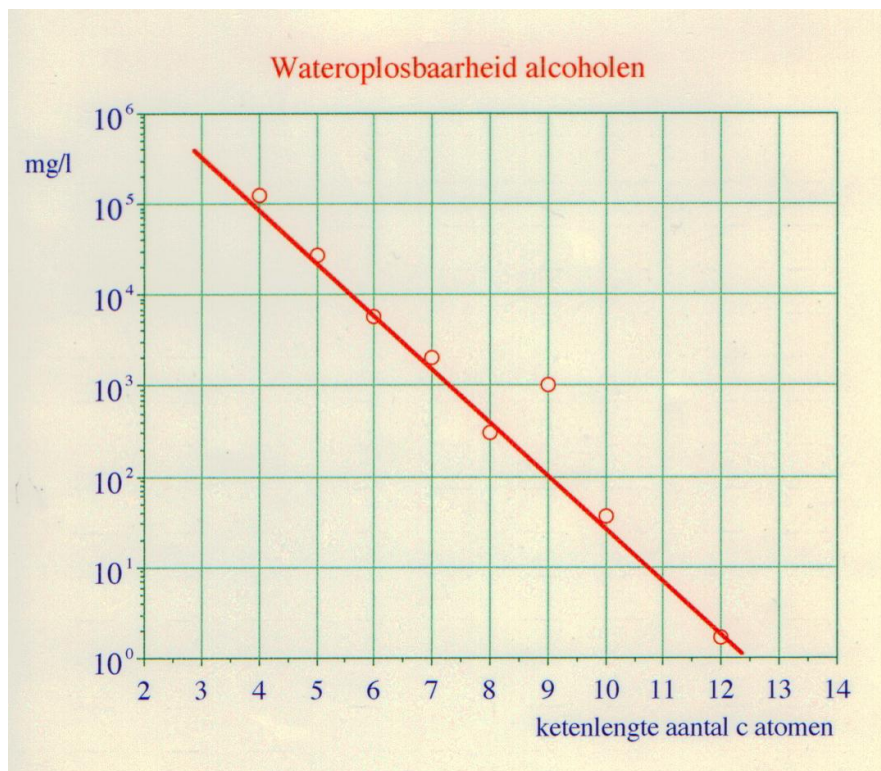
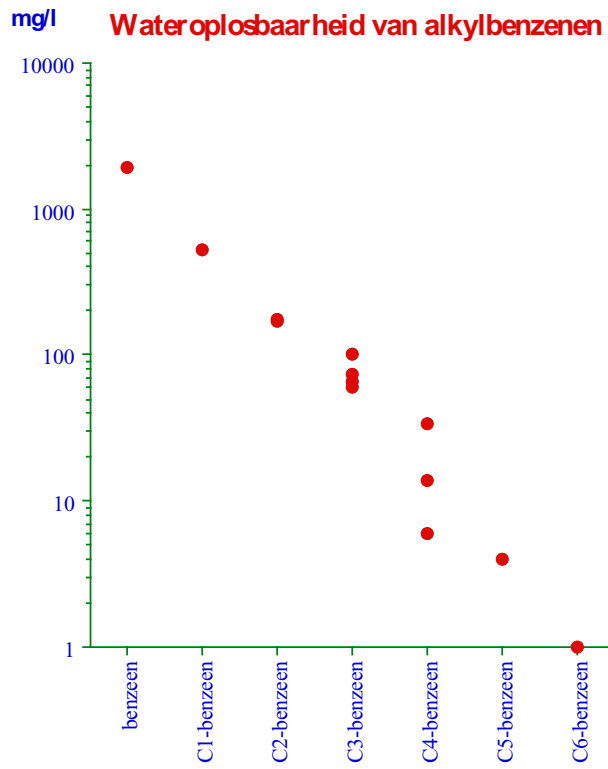
Table 2. Influence of Functional Groups on Solubility of Benzene Derivatives.

	Functional Group	$S_{mg/l}$ Solubility mg/l (temp., °C)	$\log S_{mg/l}$	$\Delta \log S_{mg/l}$ $\log S_{C_6H_5X}$ $-\log S_{C_6H_6}$
Aniline	—NH ₂	34,000 (20°)	4.53	1.28
Phenol	—OH	82,000 (15°)	4.91	1.66
Benzaldehyde	—COH	3,300	3.52	0.27
Benzoic acid	—COOH	2,900	3.46	0.21
Nitrobenzene	—NO ₂	1,900	3.28	0.03
Benzene	—	1,780	3.25	0.00
Fluorobenzene	—F	1,540 (30°)	3.19	-0.06
Thiophenol	—SH	470 (15°)	2.67	-0.58
Toluene	—CH ₃	515	2.71	-0.54
Chlorobenzene	—Cl	448 (30°)	2.65	-0.60
Bromobenzene	—Br	446 (30°)	2.65	-0.60
Iodobenzene	—I	340 (30°)	2.53	-0.72
Diphenylether	O—⊙	21 (25°)	1.32	-1.93
Diphenyl	—⊙	7.5 (25°)	0.88	-2.37

Deze rekenmethodiek is eenvoudig en voldoende nauwkeurig voor bodemverontreinigingsonderzoeken en –saneringen. Ter illustratie van het voorgaande worden in de volgende grafieken de relaties getoond tussen de wateroplosbaarheid en het molecuulgewicht voor alkylbenzenen en alcoholen.

² Chiou, C.T., Freed V.H. en Schmedding” Partitioncoefficient and bioaccumulation of selected organic chemicals” *Environm. Sci. & Techn*, 11 (5), May 1977

³ Karel Verschueren, “Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals” 2009 *John Wiley & Sons Inc.*



2. Relatie tussen de wateroplosbaarheid en aquatische toxiciteit

“*Quantitative structure-activity relationships*” (QSAR) tonen relaties tussen bepaalde eigenschappen van stoffen en hun gedrag en effecten zoals bijvoorbeeld acute toxiciteit. Deze fysico-chemische parameters van moleculen zoals wateroplosbaarheid, topologie, dissociatiegraad en sterische effecten, werden empirisch bepaald. QSAR's worden nu gebruikt in verschillende disciplines en met name in het ontwerpen van geneesmiddelen en in risico-evaluaties van milieugevaarlijke stoffen.

QSAR's werden reeds ontwikkeld in de 19de eeuw. A. Cros van de Universiteit van Strasburg⁴ observeerde in 1863 dat de toxiciteit van alcoholen voor zoogdieren toenam met afnemende wateroplosbaarheid van de alcoholen.

Op dit ogenblik hebben we de beschikking over computermodellen die rekening houden met een groter aantal parameters en waarmede specifieke effecten zoals de werking van geneesmiddelen kunnen worden berekend. Deze ingewikkelde modellen die we kunnen samenvatten onder de term “*Computer-assisted drug design*” (CADD) houden onder meer rekening met de vorm van de moleculen en de elektronische effecten van de functionele groepen.

Deze ingewikkelde QSAR's zijn weliswaar prachtige hulpmiddelen doch gezien hun complexiteit zijn ze moeilijk te begrijpen voor niet-specialisten op dit gebied.

Ten behoeve van het verkrijgen van inzicht van bepaalde eigenschappen van chemische verbindingen op de toxiciteit zijn echter eenvoudige QSAR's met slechts één enkele variabele zeer nuttig. Bij complexe verontreinigingen zoals in het geval van Coupépolder wordt de vraag gesteld: welke stoffen binnen elk van de chemische klassen is het meest toxisch?

Als vuistregel geldt binnen homologe groepen chemische verbindingen (groepen van gelijkaardige stoffen) dat de aquatische toxiciteit toeneemt bij afnemende wateroplosbaarheid. Deze relaties zijn specifiek voor de stofgroep en voor de soort organismen die worden beschouwd.

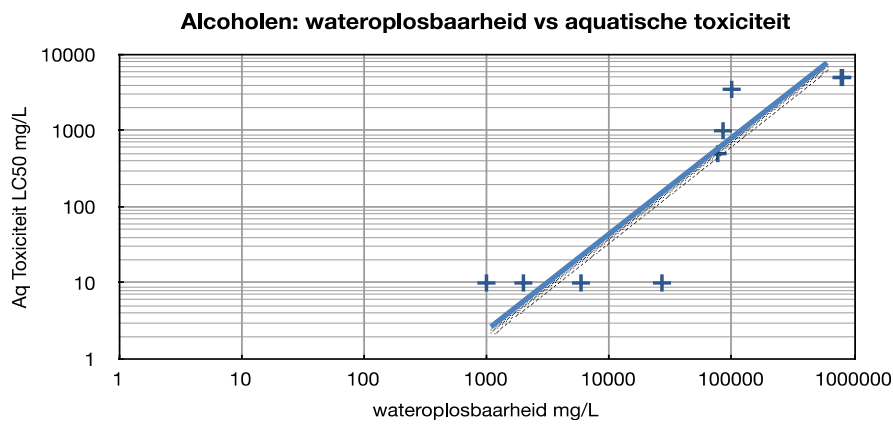
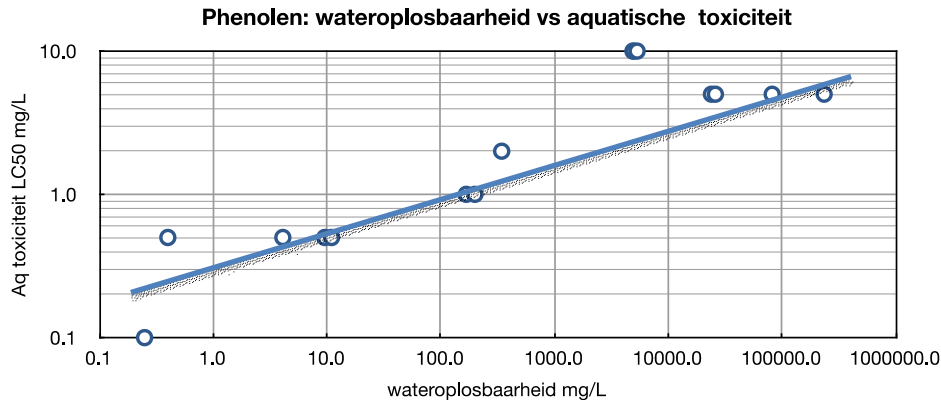
Om enig inzicht te geven in de aquatische toxiciteit van de mogelijk aanwezige stoffen in de Coupépolder werd in de stoffentabellen (bijlage 6) in de laatste kolom de aquatische toxiciteit weergegeven. Dit is de laagste waarde uit de literatuur van de 48-96 uur LC₅₀ voor algen, kreeftachtigen en vissen. Deze waarde werd vervolgens afgerond naar onder. Deze waarde is dus louter indicatief en dient enkel om de verschillen in toxiciteit tussen de aangetroffen stoffen te verduidelijken en om onderscheid te kunnen maken tussen de schadelijke en de minder schadelijke stoffen.

Voor enkele stoffenklassen werden de in de stoffentabellen vermelde LC₅₀ waarden vergeleken met de respectievelijke wateroplosbaarheden en in de volgende figuren weergegeven. Deze figuren tonen duidelijk dat binnen elke stofklasse de aquatische toxiciteit toeneemt (afnemende LC₅₀) bij dalende wateroplosbaarheid.

De stoffen met de laagste wateroplosbaarheid zijn binnen een homologe groep van stoffen als regel de meest toxische. Dit betekent geenszins dat deze stoffen in het grondwater het hoogste

⁴ Borman, S. (1990) New QSAR Techniques Eyed for Environmental Assessments. *Chem. Eng. News* 68: 20-23.

toxisch effect zullen veroorzaken. Door hun geringe wateroplosbaarheid zullen zij sterk adsorberen aan de vaste bodemfractie.



3. Retardatiefactor Rf

De retardatiefactor is de verhouding tussen de snelheid van de waterdeeltjes en de verontreiniging:

$$R_f = 1 + (b * K_d) / p$$

waarin,

R_f = retardatiefactor (-)

b = bulkdichtheid in kg droge stof per volume bodem (kg/l)

p = porositeit, poriefractie in de verzadigde zone (-)

K_d = distributiecoëfficiënt (l/kg)

Hoe groter de K_{oc}, des te groter de K_d en des te hoger de R_f en des te minder snel de verspreiding.

Voor de locatie Coupépolder worden in de stof Tabellen R_f waarden berekend op basis van een organisch koolstofgehalte van 2%, een bulkdensiteit 1,75 en een porositeit van 0,25. De bovenstaande formule voor het berekenen van R_f kan dan als volgt sterk worden vereenvoudigd:

$$R_f = 1 + (1.75 K_d)/0.25 = 1 + (1.75 \times 0.02 K_{oc})/0.25 = 1 + 0.14 K_{oc}$$

En vermits $K_{oc} = 0.48 K_{ow}$

$$R_f = 1 + 0.067 K_{ow}$$

en $K_{ow} = 42163/S$

$$R_f = 1 + 2825 / S$$

waarin S = wateroplosbaarheid in mg/L

werden in de bijgevoegde tabellen de retardatiefactoren berekend op basis van de wateroplosbaarheid om de onderlinge vergelijking van retardatiefactoren van de aanwezige chemische stoffen te vergemakkelijken. In de tabellen werden de retardatiefactoren berekend aan de hand van de volgende vergelijking die geldt voor een o.c. van 2%:

Bijlage 4: Curriculum Vitae van de auteur

Karel Verschueren studeerde scheikunde aan de Universiteit van Leuven. Hij heeft twaalf jaar ervaring in de petroleum industrie, eerst als process ingenieur op de Exxon raffinaderij te Antwerpen en vervolgens bij Concawe, de milieustichting van de europeesche olieraffinaderijen in den Haag. Bij Arcadis was hij als Hoofd van de afdeling Milieu in 1980 betrokken bij de grootschalige sanering van Lekkerkerk. Daarnaast was hij hoofddocent aan de Universiteit van Wageningen en adviseur van de Kamers van Koophandel in Brabant.



Sinds 1987 is hij directeur van Adviesbureau Verschueren. Hij is internationaal bekend door het standaardwerk “Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals” waarvan de eerste editie reeds verscheen in 1977 en dat o.a. de EPA heeft gebruikt voor het opstellen van de TOSCA (The Toxic Substances Control Act).

Bijlage 5: Verklarende woordenlijst

2-4d LC50	Lethale concentratie in water waarbij 50% van de organismen sterft na een blootstelling tussen 2 en 4 dagen.
Anaëroob	Anaëroob betekent letterlijk ‘zonder lucht’. We bedoelen hiermede dat in het grondwater geen zuurstof meer aanwezig is. Deze is ‘opgebruikt’ door de micro-organismen voor de vertering (biodegradatie) van opgeloste stoffen.
Biodegradatiesnelheid	Stoffen in de bodem en/of in het grondwater worden door de aanwezige micro-organismen zoals schimmels en bacteriën afgebroken. Om door de micro-organismen te kunnen worden opgenomen moeten stoffen in water oplossen. Hoe hoger de wateroplosbaarheid van een stof des te hoger zal als regel ook de biodegradatiesnelheid zijn.
bw	Body weight = lichaamsgewicht
BTEX	Som van de voornaamste aromatische koolwaterstoffen nl. Benzeen, Toluëen, Ethylbenzeen en Xylenen
CLP	Classification, Labelling and Packaging of Substances and Mixtures = mondiale afspraken over classificatie, etikettering en verpakking van stoffen en mengsels.
GHS	Global Harmonised System = mondiale afspraken over informatie over gevaarlijke stoffen.
Hydrolyseren	Hydrolyse betekent letterlijk splitsen (Lysis) in water (Hydro). Een aantal stoffen (moleculen) zullen in water spontaan (onder invloed van de watermoleculen) uiteenvallen in kleinere moleculen (hydrolyseproducten). Hierdoor verdwijnt de oorspronkelijke stof.
IARC	International Association for Research on Cancer
LD50	Lethale Dosis uitgedrukt in mg/kg lichaamsgewicht waarbij 50% van de dieren sterft.
Percolatiewater	Regenwater dat door het stortmateriaal sijpelt (percoleert)
Retardatiefactor	Stoffen die in het grondwater opgelost zijn verplaatsen zich trager dan het grondwater omdat ze tijdelijk geadsorbeerd worden door bodemdeeltjes. De mate van vertraging ten opzichte van de grondwaterstromingssnelheid wordt de retardatiefactor genoemd. Een retardatiefactor 2 betekent dat het grondwater zich 2 maal sneller verplaatst dan de beschouwde opgeloste stof.
Retentie	Synoniem voor retardatie
VOCl's	Vluchtige Organo Chloor oplosmiddelen = gechloreerde oplosmiddelen zoals TETRA en PER.

Bijlage 6: Gegevens stoffen mogelijk aanwezig in de Coupépolder

Deze lijsten bevatten stoffen die mogelijk aanwezig zijn in de Coupépolder omdat zij in een van de monsters tijdens ontgravingen werden geïdentificeerd of omdat zij representatief zijn voor een van de stofgroepen die werden geïdentificeerd. De stoffen werden ingedeeld in stofgroepen en alfabetisch gerangschikt weergegeven. Deze lijsten bevatten de toxiciteitsgegevens en de gegevens om de retardatiefactoren te berekenen. In bijlage 3 wordt de rekenmethodiek toegelicht. In hoofdstuk 2 wordt vermeld dat tijdens vroegere onderzoeken van een aantal stoffen slechts de stofgroep kon worden vastgesteld zoals bijvoorbeeld 'zwavelverbindingen' of 'gesubstitueerde fenolen'. Om toch deze stofgroepen mee te nemen in het onderzoek werden een aantal voor deze stofgroepen representatieve stoffen opgenomen in deze lijsten en beoordeeld op mobiliteit en toxiciteit. Dit betekent geenszins dat deze stoffen in de Coupépolder aanwezig zijn.

In de bijgevoegde tabellen zijn sommige vakken geel gearceerd wanneer aan de volgende voorwaarde is voldaan:

- voor de kolom 'Retardatie': 1 t/m 5 = de zg 'meest mobiele' stoffen
- voor de kolom 'Tox mg/kg bw': <100 mg/kg bw
- voor de kolom 'IARC': categorie 1
- voor de kolom 'Tox aquatic': <1 mg/L

1	alcoholen
2	aldehyden
3	alkanen
4	amiden
5	amines
6	aromaten BTEX
7	aromaten gehalogeneerd
8	azo pigmenten
9	carbonsuren
10	carbonzuuresters
11	ethers
12	fenolen
13	ftalaten
14	Ftalocyanines
15	furan verbindingen
16	isocyanaten
17	ketonen
18	PAK's
19	pesticiden
20	polyolen
21	silanen
22	steroiden
23	terpenen
24	VOX
25	zwavelverbindingen anorganisch
26	zwavelverbindingen organisch
27	overige chemicaliën

			mol gewicht	water oplosb. mg/L	log Kow	Retardatie factor Rf*	Tox mg/kg bw	IARC classification	Tox aquatic 2-4d LC ₅₀ mg/L
Alcoholen	CAS	Formule		20-25°C		bij 2% o.c.	oraal		
methanol	67-56-1	CH ₄ O	32	800,000	0.2	1	5,628		5,000
ethanol	64-17-5	C ₂ H ₆ O	46.1	785,000	0.5	1	7,060		5,000
n-butanol	71-36-3	C ₄ H ₁₀ O	74.1	77,000	0.9	1	790		500
iso-butanol	78-83-1	C ₄ H ₁₀ O	74.1	85,000	0.7	1	2,460		1,000
cis-3-hexenol	928-96-1	C ₆ H ₁₂ O	100.16	ca 50,000		1	4,700		
benzylalcohol	100-51-6	C ₇ H ₈ O	108.14	35,000		1	1,040		10
1-octen-3-ol	3391-86-4	C ₈ H ₁₆ O	128.21	ca 3,000		2	340		
6-nonen-1-ol (onverzadigd C ₉ H ₁₈ O)	40709-05-5	C ₉ H ₁₈ O	142.24	ca 1,000		4			
dibutoxymethanol	54518-04-6	C ₉ H ₂₀ O ₃	176.25	ca 5,000		2			
Terpeenalcoholen C₁₀H₁₈O									
myrcenol	543-39-5	C ₁₀ H ₁₈ O	154.25	261	3.5	11	>5000		
a-terpineol	10482-56-1	C ₁₀ H ₁₈ O	154.25	686		5	2,830		10
geraniol	106-24-1	C ₁₀ H ₁₈ O	154.25	670	3.5	5	3,600		10
nerol	106-25-2	C ₁₀ H ₁₈ O	154.25	854	3.0	4	4,500		10
linalool	78-70-6	C ₁₀ H ₁₈ O	154.25	1,589	3.0	3	2,200		20
4-trimethylcyclohexaanmethanol	7322-63-6	C ₁₀ H ₂₀ O	156.25	ca 200		14			
*Rf = 1 + 2825/S									

			mol gewicht	water oplosb.	log Kow	Retardatie	Tox	IARC	Tox
Aldehyden	CAS	Formule		mg/L		factor Rf*	mg/kg bw	classification	aquatic
				20-25°C		bij 2% o.c.	oraal		2-4d LC ₅₀ mg/L
acetaldehyde	75-07-0	C ₂ H ₄ O	44.1	783,000	-0.2	1	661	2B	50
benzaldehyde	100-52-7	C ₇ H ₆ O	106.1	3,300	1.5	2	1,300		5
alkanen									
cyclohexaan	110-82-7	C ₆ H ₁₂	84.2	55		47	813		10
2,3-dimethylbutaan	79-29-8	C ₆ H ₁₄	86.18	ca 10		254	ca 25,000		
n-nonaan	61193-19-9	C ₉ H ₂₀	128.3	0.43	5.8	5,880	220		
n-decaan	124-18-5	C ₁₀ H ₂₂	142.3	0.009	6.3	280,890	>5,000		>100
diethylcyclohexaan	1331-43-7	C ₁₀ H ₂₀	140.27	ca 1		2,529	4,900		
n-alkanen C ₂₁ -C ₃₀				<0.001		>2,600,000			

*Rf = 1 + 2825/S

1: kankerverwekkend bij mensen

2B: mogelijk kankerverwekkend bij mensen

3: niet classificeerbaar als kankerverwekkend bij mensen

			mol	water oplosb.	log Kow	Retardatie	Tox	IARC	Tox
Amides secondaire	CAS	Formule	gewicht	mg/L		factor Rf*	mg/kg bw	classification	aquatic
				20-25°C		bij 2% o.c.	oraal		2-4d LC ₅₀ mg/L
N-methylformamide	123-39-7	C ₂ H ₅ NO	59.06	1,000,000		1	2,600		500
N-methylacetamide	79-16-3	C ₃ H ₇ NO	73.1	946,000		1	4,000		500
N-ethylformamide	627-45-2	C ₃ H ₇ NO	73.1	166,000		1			
N-ethylacetamide	625-50-3	C ₄ H ₉ NO	87.12	200,800	-0.31	1	3,130 ip		
N-(2-hydroxyethyl)dodecanamide	142-78-9	C ₁₄ H ₂₉ NO ₂	243	44	3.2	58	>3,000		
Aminen									
alkeenaminen									
diethyleentriamine	111-40-0	C ₄ H ₁₃ N ₃	103.17	>100,000	-1.73	1	1,090		30
triethyleentetramine	112-24-3	C ₆ H ₁₈ N ₄	146.22	>100,000	-1.98	1	550		10
hexamethyleendiamine	124-09-4	C ₆ H ₁₆ N ₂	116.2	490,000	0.39	1	750		20
bis(hexamethyleen)triamine	68411-90-5	C ₁₂ H ₂₉ N ₃		>100,000		1	450		
aromatische amine									
pyridine	110-86-1	C ₅ H ₅ N	79.1	>100,000	0.8	1	891	3	100
alkylaminen									
N,N-dimethyldodecylamine	112-18-5	C ₁₄ H ₃₁ N	213.41	10	5.47	254	1450		
1-hexadecylamine (palmitylamine)	143-27-1	C ₁₆ H ₂₅ N	241.52	0.31	6.7	8,156	200		
1-octadecylamine (stearylamine)	124-30-1	C ₁₈ H ₃₉ N	270	0.03	7.7	84,268	>2,000		1
N,N-dimethyl-1-octadecylamine	112-69-6	C ₂₀ H ₄₃ N	298	0.44	8.4	5,746	524		
cycloalkaanamine									
cyclohexylamine	108-91-8	C ₆ H ₁₃ N	99.17	9,000	1.4	1	156		40

*Rf = 1 + 2825/S

ip = intraperitoneaal

			mol gewicht	water oplosb.	log Kow	Retardatie	Tox	IARC	Tox
aromaten	CAS	Formule		mg/L		factor Rf*	mg/kg bw	classification	aquatic
BTEX				20-25°C		bij 2% o.c.	oraal		2-4d LC ₅₀ mg/L
benzeen	71-43-2	C ₆ H ₆	78.1	1780	2.11	2	2,990	1	5
tolueen	108-88-3	C ₇ H ₈	92.1	515	2.69	6	>5,580	3	5
o-xyleen	95-47-6	C ₈ H ₁₀	106.2	175	2.80	15	5,000	3	5
ethylbenzeen	100-41-4	C ₈ H ₁₀	106.2	152	3.20	18	>5,000	2B	1
1,2,4-trimethylbenzeen	95-63-6	C ₉ H ₁₂	118.2	57	3.80	45	5,000		10
p-diethylbenzeen	105-05-5	C ₁₀ H ₁₄	134.2	17	4.06	150			1
gehalogeneerde aromaten									
1,3-dibroombenzeen	108-36-1	C ₆ H ₄ Br ₂	235.9	ca 20		127	2,250		
1,4-dibroombenzeen	106-37-6	C ₆ H ₄ Br ₂	235.9	20		127	3,120		0.68
1,2-dichloorbenzeen	95-50-1	C ₆ H ₄ Cl ₂	147	75	3.50	35	500	3	1
1,4-dichloorbenzeen	106-46-7	C ₆ H ₄ Cl ₂	147	80		33	500	2B	1
2,3-dichloortolueen	32768-54-0	C ₇ H ₆ Cl ₂	161.03	ca 25		102			
2,4-dichloortolueen	95-73-8	C ₇ H ₆ Cl ₂	161.03	25	4.10	102	2,790		0.6
2,6-dichloortolueen	118-69-4	C ₇ H ₆ Cl ₂	161.03	26	4.20	98			2

*Rf = 1 + 2825/S

1: kankerverwekkend bij mensen

2B: mogelijk kankerverwekkend bij mensen

3: niet classificeerbaar als
kankerverwekkend bij mensen

ip = intraperitoneaal

sc = subcutaan

			mol	water oplosb.	log Kow	Retardatie	Tox	IARC	Tox
azo pigmenten	CAS	Formule	gewicht	mg/L		factor Rf*	mg/kg bw	classification	aquatic
				20-25°C		bij 2% o.c.	oraal		2-4d LC ₅₀ mg/L
Pigment Red 53.1	5160-02-1	C ₁₇ H ₁₃ ClN ₂ O ₄ S	376.81	2		1,265			
Pigment Yellow 12	6358-85-6	C ₃₂ H ₂₆ Cl ₂ N ₆ O ₄	629.51	<10 ⁻⁶	5	2,500,000,000	>1,750		
Pigment Yellow 83	5567-15-7	C ₃₆ H ₃₂ Cl ₄ N ₆ O ₈	818.5	8.9	6	285	>1,750		
Carbonzuren									
mierezuur	64-18-6	CH ₂ O ₂	46.03	1,200,000	-0.54	1	1,100		25
azijnzuur	64-19-7	C ₂ H ₄ O ₂	60.05	1,000,000	-0.17	1	3,310		50
n-propionzuur	79-09-4	C ₃ H ₆ O ₂	74.08	990,000	0.25	1	3,500		50
boterzuur	107-92-6	C ₄ H ₈ O ₂	88.11	50,000	0.79	1	2,940		20
valeriaanzuur	109-52-4	C ₅ H ₁₀ O ₂	102.13	40,000	1.39	1	600		50
adipinezuur	124-04-9	C ₆ H ₁₀ O ₄	146.11	1,000,000	0.09	1	3,600		100
n-dodecaanzuur	143-07-7	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	200.32	63	4.20	41	>5,000		5
n-tetradecaanzuur	544-63-8	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	228.37	24		106	>5,000		10
n-hexadecaanzuur	57-10-3	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	256.42	8.3		306	>5,000		
n-octadecaanzuur	57-11-4	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	280.47	3.4		745	>5,000		5
keto-carbonzuren									
glyoxylzuur	298-12-4	C ₂ H ₂ O ₃	74.04	224,000	-0.30	1			100
pyruvinezuur	127-17-3	C ₃ H ₄ O ₃	88.06	1,200,000		1	3,533		
levulinezuur	123-76-2	C ₅ H ₈ O ₃	116.12	ca 100,000		1	1,850		
furan-zuren									
furan-2-carbonzuur	88-14-2	C ₅ H ₄ O ₃	112.08	37,100		1	100		
zout van carbonzuur									
natrium acetaat	127-09-3	C ₂ H ₃ NaO ₂	82.03	1,528,000		1	25,956		7,000

			mol gewicht	water oplosb. mg/L	log Kow	Retardatie factor Rf*	Tox mg/kg bw oraal	IARC classification	Tox aquatic 2-4d LC ₅₀ mg/L
Carbonzuuresters	CAS	Formule		20-25°C		bij 2% o.c.			
methylacetaat	79-20-9	C ₃ H ₆ O ₂	74.08	319,000	0.18	1.0	>5,000		250
ethylacetaat	141-78-6	C ₄ H ₈ O ₂	88.12	700,000	0.73	1.0	5,620		100
methylcrotonaat (methylbuteenoaat)	623-43-8	C ₅ H ₈ O ₂	100.12				>3,200		
methylbutanoaat	623-42-7	C ₅ H ₁₀ O ₂	102.16	15,000		1.2			
ethyl-2-buteenoaat (ethylcrotonaat)	623-70-1	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.14				3,000		
methyl-2,2-dimethylpropionaat	598-98-1	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16						
methylpentanoaat (methylvaleraat)	624-24-8	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16						
isobutylacetaat	110-19-0	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16		1.82		13,400		
n-butylacetaat	123-86-4	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16		1.82		10,700		20
ethylbutanoaat		C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16						20
methylhexanoaat (methylcaproaat)	106-70-7	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.18				>5,000		
ethylesters van carbonzuren C ₁₄₋₁₈									
ethyltetradecanoaat	124-06-1	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	256.4						
ethylhexadecanoaat	628-97-7	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	284.48				>5,000		
ethyloctadecanoaat	111-61-5	C ₂₀ H ₄₀ O ₂	312.5						
C ₉ H ₁₄ O ₂ alifatisch									
methyl-2-octynoaat (Folione)	111-12-6	C ₉ H ₁₄ O ₂	154.23		3.4		1,530		
ethers									
methoxypropaan (methylpropylether)	557-17-5	C ₄ H ₁₀ O	74.12	30,500		1.1			
1-methoxy-2-propanon	5878-19-3	C ₄ H ₈ O ₂	88.12	800,000		1	2,488		
anisole (methylphenylether)	100-66-3	C ₇ H ₈ O	108.14	ca 1,000	2	4.0	3,700		
4-methoxy-4-methylpentan-2-on	107-70-0	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.21	>100,000		1	2,050		
dibutoxymethanol	54518-04-6	C ₉ H ₂₀ O ₃	176.25	ca 5,000		2.0			

			mol gewicht	water oplosb. mg/L	log Kow	Retardatie factor Rf*	Tox mg/kg bw	IARC classification	Tox aquatic 2-4d LC ₅₀ mg/L
fenolen gesubstitueerd									
o-cresol	95-48-7	C ₇ H ₈ O	108.1	26,000	1.46	1.1	121		5
o-ethylphenol	90-00-6	C ₈ H ₁₀ O	122.2	5,340	2.72	1.5	600		
2-propylphenol	644-35-9	C ₉ H ₁₂ O	136.2	1,500	2.9	2.7	500		10
2,4,6-trimethylphenol	527-60-6	C ₉ H ₁₂ O	136.2	1,400	2.7	2.8	10,000		3
4-tert-butylphenol	98-54-4	C ₁₀ H ₁₄ O	150.2	610	3.3	5.1	4,000		1
2,4-di-(tert-butyl)phenol	96-76-4	C ₁₄ H ₂₂ O	206.3	12	5.13	212	>5,000		0.1
2,6-di-(tert-butyl)-4-methylphenol	128-37-0	C ₁₅ H ₂₄ O	220.3	0.4	5.1	6,321	890		0.5
2,4,6-tri-(tert-butyl)phenol	8050-07-7	C ₁₈ H ₃₀ O	262.4	0.51	6.06	4,958	1,610		0.05
gechloreerde fenolen									
pentachloorfenol	87-86-5	C ₆ HCl ₅ O	266.34	15		170	27		0.2
ftalaten									
dimethylftalaat	131-11-3	C ₁₀ H ₁₀ O ₄	194.2	4,300	1.54	2	8,239		10
diethylftalaat	84-66-2	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	222.2	910	2.7	4	8,600		5
dipropylftalaat	131-16-8	C ₁₄ H ₁₈ O ₄	250.3	150	3.27	18	7,900		1
di-n-butylftalaat	84-74-2	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	278.3	11	4.57	231	8,000		1
di-isobutylftalaat	84-69-5	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	278.3	20	5.11	127	15,000		0.5
di(2-ethylhexyl)ftalaat	117-81-7	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	390.6	0.3	4.8	8,428	30,000	3	5
di-n-octylftalaat	117-84-0	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	390.6	3	7.9	844	47,000		0.5

*Rf = 1 + 2825/S

1: kankerverwekkend bij mensen

2B: mogelijk kankerverwekkend bij mensen

3: niet classificeerbaar als

kankerverwekkend bij mensen

			mol gewicht	water oplosb. mg/L	log Kow	Retardatie factor Rf*	Tox mg/kg bw	IARC classification	Tox aquatic
	CAS	Formule		20-25°C		bij 2% o.c.	LD ₅₀ oraal		2-4d LC ₅₀ mg/L
ftalocyanines									
Ftalocyanine blauw	147-14-8	C ₃₂ H ₁₆ CuN ₈	576.08	<1000		>4	>5000		>100
Ftalocyanine groen	1328-53-6	C ₃₂ Cl ₁₆ CuN ₈	1127.2	1		2826	>5000		>100
furanen zwavelhoudend									
2-methyl-3-furaanthiol	28588-74-1	C ₅ H ₆ OS	114.17	631		5	100		
furfurylmercaptaan	98-02-2	C ₅ H ₆ OS	114.17	2,216		2	100		
2,5-dimethyl-3-furanthiol	55764-23-3	C ₆ H ₈ OS	128.19	190		14	360		
2-methyl-3-tetrahydrofuranthiol	57124-87-5	C ₅ H ₁₀ OS	118.2	9,169		1	1,860		
2,5-dimethyl-3-furylthio-isovaleraat				<1,000		>4	580		
bis-furfurylsulfide	13678-67-6	C ₁₀ H ₁₀ O ₂ S	194.25	110		24			
bis-furfuryldisulfide	4437-20-1	C ₁₀ H ₁₀ O ₂ S ₂	226.32	11		231			
methyl-2-methyl-3-furyldisulfide	65505-17-1	C ₆ H ₈ OS ₂	160.26	185		15	142		
propyl-2-methyl-3-furyldisulfide	61197-09-9	C ₈ H ₁₂ OS ₂	188.31	19.6		130	284		
bis(2-methyl-3-furyl)disulfide	28588-75-2	C ₁₀ H ₁₀ O ₂ S ₂	226.32	9.2		276	106		
bis(2-methyl-3-furyl)tetrasulfide	28588-76-3	C ₁₀ H ₁₀ O ₂ S ₄	290.45	4.1		618	220		

			mol gewicht	water oplosb. mg/L	log Kow	Retardatie factor Rf*	Tox mg/kg bw	IARC classification	Tox aquatic 2-4d LC ₅₀ mg/L
	CAS	Formule		20-25°C		bij 2% o.c.	oraal		
isocyanaten									
cyclohexylisocyanaat	3173-53-3	C ₆ H ₄ NCO	125.17	decomposes	nvt	nvt	335		nvt
ketonen									
aceton	67-64-1	C ₃ H ₆ O	58.08	900,000	0.24	1	5,800		2,000
1-methoxy-2-propanon	5878-19-3	C ₄ H ₈ O ₂	88.12	800,000		1	2,488		
4-hexen-3-on	2497-21-4	C ₆ H ₁₀ O	98.14	8,974		1	780		
acetophenon	98-86-2	C ₈ H ₈ O	120.15	5,500	1.6	1	815		100
4-methoxy-4-methylpentan-2-on	107-70-0	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.21	>100,000		1	2,050		
benzopyran (coumarin)	91-64-5	C ₉ H ₆ O ₂	146.14	170		16	275	3	30
4-tert.butylcyclohexanon	98-53-3	C ₁₀ H ₁₈ O	154.25	ca 800		4	5,000		
4,4-bis(dimethylamino)benzophenon	90-94-8	C ₁₇ H ₂₀ N ₂ O	268.4	7.5	3.59	338	100	2B	

*Rf = 1 + 2825/S

1: kankerverwekkend bij mensen

2B: mogelijk kankerverwekkend bij mensen

3: niet classificeerbaar als kankerverwekkend bij mensen

PAK'S	CAS	Formule	mol gewicht	water oplosb. mg/L 20-25°C	Kow	Retardatie factor Rf* bij 2% o.c.	Tox mg/kg bw oraal	IARC classification	Tox aquatic 4d LC ₅₀ mg/L
naftaleen	91-20-3	C ₁₀ H ₈	128.2	30	2,340	85	490	2B	1
1-methylnaftaleen	90-12-0	C ₁₁ H ₁₀	142.2	27	9,300	95	1840		5
acenaftaleen	83-32-9	C ₁₂ H ₁₀	154.2	5	14,100	507	600 (ip)	3	0.5
fenanthreen	85-01-8	C ₁₄ H ₁₀	178.2	0.82	2.9 x 10 ⁴	3,084	700	3	
anthraceen	120-12-7	C ₁₄ H ₁₀	178.2	1.3	2.8 x 10 ⁴	1,946	430 (ip)	3	
fluorantheen	206-44-0	C ₁₆ H ₁₀	202.3	0.26	2.0 x 10 ⁵	9,724	2000	3	0.05
pyreen	129-00-0	C ₁₆ H ₁₀	202.3	0.16	2.0 x 10 ⁵	15,801	2700	3	
chryseen	218-01-9	C ₁₈ H ₁₂	228.2	0.006	4.1 x 10 ⁵	421,334	>320	2B	1
B(a)antracene	56-55-3	C ₁₈ H ₁₂	228.2	0.01	4.1 x 10 ⁵	252,801	1600	2B	0.01
B(a)pyreen	50-32-8	C ₂₀ H ₁₂	252.3	0.003	1.1 x 10 ⁶	842,668	50 (sc)	1	
benzo(k)fluorantheen	207-08-9	C ₂₀ H ₁₂	252.3	0.00055	6.9 x 10 ⁶	4,596,365		2B	
benzo(b)fluorantheen	205-99-2	C ₂₀ H ₁₂	252.3	0.00055	6.9 x 10 ⁶	4,596,365		2B	
benzo(ghi)peryleen	191-24-2	C ₂₂ H ₁₂	276.3	0.00026	1.7 x 10 ⁷	9,723,078		3	
dibenzo(a,h)anthracene	53-70-3	C ₂₂ H ₁₄	278.4	0.0005	9.3 x 10 ⁷	5,056,001	985	2B	

*Rf = 1 + 2825/S

1: kankerverwekkend bij mensen

2B: mogelijk kankerverwekkend bij mensen

3: niet classificeerbaar als
kankerverwekkend bij mensen

ip = intraperitoneaal

sc = subcutaan

			mol gewicht	water oplosb.	log Kow	Retardatie	Tox	IARC	Tox
	CAS	Formule		mg/L		factor Rf*	mg/kg bw	classification	aquatic
Pesticiden				20-25°C		bij 2% o.c.	oraal		2-4d LC ₅₀ mg/L
DDT	50-29-3	C ₁₄ H ₉ Cl ₅	354.5	0.003	6.19	941,668	87	2B	0.001
Dialifor	10311-84-9	C ₁₄ H ₁₇ O ₄ NS ₂ PCl	393.85	<1000		>4	5		0.02
dioxathion (Delnav)	78-34-2	C ₁₂ H ₂₆ O ₆ P ₂ S ₄	456.5	<100		>29	23		0.0003
Polyolen									
glycol (ethyleenglycol)	107-21-1	C ₂ H ₆ O ₂	62.07	1,100,000	-1.2	1	4,700		16,000
glycerol (glycerine)	56-81-5	C ₃ H ₈ O ₃	92.09	1,260,000	-2.5	1	12,600		3,000
trimethylolethaan	77-85-0	C ₆ H ₁₂ O ₃	120.15	400,000		1	>5,000		
erythritol	149-32-6	C ₄ H ₁₀ O ₄	122.12	1,450,000	-2.5	1	7,000		
1,2,6-hexaantriol	106-69-4	C ₆ H ₁₄ O ₃	134.17	ca 400,000		1	15,500		>10,000
sorbitol	50-70-4	C ₆ H ₁₄ O ₆	182.17	1,450,000		1	15,900		
Purines									
7H-purine	120-73-0	C ₅ H ₄ N ₄	120.11	400,000		1	800		
adenine (6-aminopurine)	73-24-5	C ₅ H ₅ N ₅	135.13	1,030		3	227		
guanine (2-amino-6-hydroxypurine)	73-40-5	C ₅ H ₅ N ₅ O	151.13	5		507			
Silanen									
octamethylcyclotetrasiloxane	556-67-2	C ₈ H ₂₄ O ₄ Si ₄	296.62	0.056	6.49	45,144	2,000		25
hexamethylcyclotrisiloxane	541-05-9	C ₆ H ₁₈ O ₃ Si ₃	222.47	1,540		3	1,540		

*Rf = 1 + 2825/S

1: kankerverwekkend bij mensen

2B: mogelijk kankerverwekkend bij mensen

3: niet classificeerbaar als

kankerverwekkend bij mensen

			mol gewicht	water oplosb. mg/L	log Kow	Retardatie factor Rf*	Tox mg/kg bw	IARC classification	Tox aquatic 4d LC ₅₀ mg/L
	CAS	Formule		20-25°C		bij 2% o.c. #DEEL/0!	oraal		
Steroïden									
cholesterol	57-88-5	C ₂₇ H ₄₆ O	386.66					3	
Terpenen									
campeen	79-92-5	C ₁₀ H ₁₆	136.23	4.2	4.1	603	>2,500		2
1,7,7-trimethylnorborneen	464-17-5	C ₁₀ H ₁₆	136.23	6.9	4.2	367			
dl-limoneen	138-86-3	C ₁₀ H ₁₆	136.23	13.8		184	>4,000		0.5
terpinoleen	586-62-9	C ₁₀ H ₁₆	136.23	9.5	5.3	267	>4,000		
myrceen	123-35-3	C ₁₀ H ₁₆	136.23	5.6		452	>4,000		
VOX: vluchtige organohalogenen									
broommethanen en -ethanen									
tribroommethaan (bromoform)	75-25-2	CHBr ₃	252.73	3,200		2	933	3	2
tetrabroommethaan	79-27-6	C ₂ H ₂ Br ₄	345.65	630		5	270		
chloormethanen									
dichloormethaan (methyleenchloride)	75-09-2	C ₂ H ₂ Cl ₂	84.9	20,000	1.25	1	985	2B	100
trichloormethaan (chloroform)	67-66-3	CHCl ₃	119.4	8,000	1.97	1	695	2B	30
tetrachloormethaan	56-23-5	CCl ₄	153.8	800	2.64	4	2,350	2B	0.5
chloorethanen									
monochloorethaan	75-00-3	C ₂ H ₅ Cl	64.5	5,740	1.54	1		3	
1,2-dichloorethaan	107-06-2	C ₂ H ₄ Cl ₂	99	8,690	1.48	1	670	2B	5
1,1,2-trichloorethaan	79-00-5	C ₂ H ₃ Cl ₃	133.4	4,400		2	836		10
chloorethenen									
monochlooretheen (vinylchloride)	75-01-4	C ₂ H ₃ Cl	62.5	1,100		3	>4,000	1	210
cis,1,2-dichlooretheen	156-59-2	C ₂ H ₂ Cl ₂	96.5	5,100		1			100
trichlooretheen	79-01-6	C ₂ HCl ₃	131.5	1,100		3	2,900	1	40
tetrachlooretheen	127-18-4	C ₂ Cl ₄	165.8	150	2.6	18	2,629		10
miscellaneous									
epichloorhydrine	106-89-8	C ₃ H ₅ ClO	92.3	decomposes		nvt			nvt
3-monochloorpropaan-1,2-diol	96-24-2	C ₃ H ₇ ClO ₂	110.54	800,000	-0.53	1	26	2B	

*Rf = 1 + 2825/S

1: kankerverwekkend bij mensen

2B: mogelijk kankerverwekkend bij mensen

3: niet classificeerbaar als kankerverwekkend bij mensen

			mol gewicht	water oplosb.	log Kow	Retardatie	Tox	IARC	Tox
zwavelverbindingen	CAS	Formule		mg/L		factor Rf*	mg/kg bw	classification	aquatic
organische zwavelverbindingen				20-25°C		bij 2% o.c.	oraal		2-4d LC ₅₀ mg/L
dimethylsulfide	75-18-3	C ₂ H ₆ S	62.13	20,000	0.92	1	535		23
diethylsulfide	352-93-2	C ₄ H ₁₀ S	90.2	3,130	1.95	2	3,415		500
dimethyldisulfide	624-92-0	C ₂ H ₆ S ₂	94.2	2,500	1.77	2	190		0.31
diethyldisulfide	110-81-6	C ₄ H ₁₀ S ₂	122.25	ca 300		9			14.5
dipropyldisulfide		C ₆ H ₁₄ S ₂	150.25	40	2.70	64	2,000		2.6
anorganische zwavelverbindingen									
ammoniumsulfide	12135-76-1	N ₂ H ₈ S	68.15	hydrolyseert		1	nvt		nvt
dizwavedichloride	10025-67-9	S ₂ Cl ₂	135.04	hydrolyseert		1	nvt		nvt
Overige chemicaliën									
bis(tributyltinoxide)	56-35-9	C ₂₄ H ₅₄ OSn ₂	596.12	20	3.5	127	50		0.002
nitrocellulose	9004-70-0	(C ₆ H ₈ (NO ₂) ₂ O ₅) _n	115,000	1		>2,530	>5,000		500

Oude Baan 36
5244 JB Rosmalen
Nederland

GSM +31(0)6 53441398
Tel. +31(0)73 5236006
Fax +31(0)73 5134288
verschuerenkarel@mac.com

IBAN NL31 RABO 0175 4388 38
BIC RABONL2U
BTW NL009830881B01

Algemene voorwaarden
Gedeponeerd KvK
's-Hertogenbosch
nr. 16063435