

**Tussenrapport Opkomende
stoffen uit
consumentenproducten**

Risico's voor oppervlaktewater?



Tussenrapport Opkomende stoffen uit consumentenproducten

Risico's voor oppervlaktewater?

Gerlinde Roskam

Titel

Tussenrapport Opkomende stoffen uit consumentenproducten

| | | |
|----------------|-----------------------|-----------------|
| Project | Kenmerk | Pagina's |
| 11203728-007 | 11203728-007-BGS-0001 | 16 |

Trefwoorden

Consumentenproducten, opkomende stoffen, prioritering

Samenvatting




In het kader van deze studie zijn gegevens verzameld over het voorkomen van stoffen in consumentenproducten, het gebruik van deze producten, de aanwezigheid van stoffen in het oppervlaktewater (gemeten of geschat) en de toxiciteit. Het doel was om op basis van deze resultaten stoffen of categorieën van producten te prioriteren voor nader onderzoek.

De stoffen zijn, afhankelijk van de beschikbaarheid van gegevens over de stoffen, in verschillende lijsten opgenomen (beschikbaar als Excel-bestand). Binnen elke lijst zijn de stoffen geordend op basis van de verwachte concentratie in oppervlaktewater, de toxiciteit van de stof, of de verhouding van deze beide waarden. De stoffen die het hoogste risico vormen, verschijnen daardoor bovenaan in de lijst.

De onderzoeksresultaten laten zien dat het een complex vraagstuk is dat nog nadere uitwerking behoeft. Het aantal stoffen dat in beeld is loopt in de duizenden. Door onvolledige gegevens en data waarvan de juistheid niet bekend is, is het nog niet verantwoord om stoffen (of de producten waaruit deze stoffen afkomstig zijn) te prioriteren. Het rapport eindigt met een lijst van vervolgacties om prioritering mogelijk te maken.

Referenties

Roskam (2019). Opkomende stoffen in consumentenproducten - Welke stoffen vormen een risico voor het oppervlaktewater? Deltares-rapport 11203728-007-BGS-0001.

| Versie | Datum | Auteur | Paraaf | Review | Paraaf | Goedkeuring | Paraaf |
|--------|----------|-----------------|---|--------------|--|------------------|---|
| 0.1 | nov 2019 | Gerlinde Roskam |  | Leonard Osté |  | Sophie Vermooten |  |

Status

definitief

Inhoud

| | |
|---|-----------|
| 1 Inleiding | 1 |
| 1.1 Een lijst met stoffen | 1 |
| 1.2 Concentraties van stoffen | 2 |
| 1.3 Toxiciteit | 2 |
| 1.4 Prioritering | 3 |
| 2 Aanpak | 5 |
| 2.1 Selectie stoffen | 5 |
| 2.2 Concentratie in oppervlaktewater | 8 |
| 2.3 Toxiciteit | 8 |
| 2.4 Verwerking resultaten | 9 |
| 3 Resultaten | 11 |
| 3.1 Samenstelling van producten | 11 |
| 3.2 Stoffen zonder CAS-nummer | 11 |
| 3.3 Stoffen aanwezig in producten met onvolledige ingrediëntenlijsten | 12 |
| 3.4 Stoffen zonder PEC, deel met PNEC | 12 |
| 3.5 Stoffen met PEC, maar zonder PNEC | 13 |
| 3.6 Vergelijking van PEC met gemeten concentraties | 13 |
| 3.7 Vergelijking van PEC met PNEC | 14 |
| 4 Conclusies en aanbevelingen | 17 |
| 5 Literatuurlijst | 19 |

1 Inleiding

Binnen de opkomende stoffen staan consumentenproducten in de belangstelling. Een aantal stoffen dat de kranten haalt, zijn UV-blockers in zonnebrand en microplastics in scrubs en tandpasta. De regelgeving ten aanzien van persoonlijke verzorgingsmiddelen is opgenomen in EU-verordening 1223/2009, met als voornaamste doel de veiligheid van de producten. Toch blijven de stoffen in consumentenproducten vaak een beetje onder de radar. Zo staat een groot deel niet in REACH geregistreerd omdat de geproduceerde/geïmporteerde hoeveelheid minder is dan 1000 kg/jaar of omdat de stoffen niet of nauwelijks als stof maar alleen als ingrediënt in consumentenproducten in Europa worden geïmporteerd. In dit rapport wordt een begin gemaakt met het selecteren van stoffen die een risico zouden kunnen vormen voor het oppervlaktewater.

Er zijn al veel studies uitgevoerd gericht op de prioritering van stoffen die mogelijk een risico kunnen vormen voor mens of milieu (o.a. Soeteman et al., 2018, Sjerps et al, 2014, Dulio en Von der Ohe, 2013, Woutersen et al., 2015, Osté et al., 2017). De volgende aspecten komen daarin naar voren:

- 1) Allereerst, om te kunnen prioriteren, moet je een lijst met stoffen (of eventueel stofgroepen) hebben;
- 2) vervolgens moet je enig idee hebben welke hoeveelheden worden gebruikt, hoe stoffen zich gedragen (o.a. zuiveringsrendement, persistentie, mobiliteit), welke concentraties daadwerkelijk worden aangetroffen, of welke concentraties aangetroffen zouden kunnen worden;
- 3) de concentraties worden over het algemeen beoordeeld door ze te vergelijken met toxiciteitsgegevens;
- 4) waarna de prioritering kan plaatsvinden.

1.1 Een lijst met stoffen

Er bestaan grote verschillen in het startpunt van de prioritering. Zo beginnen Phillips et al. (2018) met het resultaat van een GCMS-analyse op de producten zelf, dat wordt vergeleken met een 'signature database' met spectrale eigenschappen. Van de 1602 geïdentificeerde chemicaliën, waren er overigens 1404 niet aanwezig in een database met ingrediënten van consumentenproducten. Soeteman et al. (2018) en Dulio en Van der Ohe (2005) beginnen op basis van wetenschappelijke literatuur, websites en databases. Van der Velden-Slootweg en Bannink (2018) maken gebruik van vergelijkbare bronnen bij het opstellen van een lijst van nieuwe stoffen die relevant zijn voor de productie van drinkwater. Er bestaat een risico dat daarbij ongemerkt selectie plaatsvindt. Negatieve studies, waarbij een stof geen effect blijkt te hebben, worden minder gepubliceerd dan studies met positieve effecten (Li en Suh, 2019). Bovendien kan de publicatie van toxische effecten de monitoringsinspanning beïnvloeden, waardoor van een aantal stoffen steeds meer informatie beschikbaar is, terwijl andere stoffen onder de radar blijven (Sjerps et al., 2014). Een andere mogelijkheid is om uit te gaan van bestaande lijsten met stoffen, bijvoorbeeld de stoffen die in ECHA geregistreerd staan (Woutersen et al., 2015), stoffen die door A.I.S.E. (International Association for Soaps, Detergents and Maintenance Products) leden worden vermarkt (HERA, 2005), CosIng (database met informatie over ingrediënten van cosmetica), suspectlijsten van NORMAN, aanwezigheid in de Watson database (effluenten RWZI's) of andere monitoringsresultaten (Diamond et al., 2011).

1.2 Concentraties van stoffen

Het volgende punt is het afleiden of meten van de concentraties van de betreffende stoffen. Gemeten concentraties zijn waardevolle informatie. Voor veel opkomende stoffen, die gekenmerkt worden door een gebrek aan informatie, zijn monitoringsresultaten schaars. En als er wel monitoringsdata beschikbaar zijn, komt de vraag op hoe representatief deze zijn voor andere watersystemen en momenten. Diverse studies kennen daarom een score toe afhankelijk van de kans op blootstelling of schatten de concentraties (de zogenaamde predicted environmental concentration of PEC). Binnen het EU-project SOLUTIONS zijn de concentraties voor de waterlichamen in Europa geschat op basis van onder andere de tonnages in REACH, verkoopcijfers van medicijnen, welvaartskenmerken, bevolkingsdruk, eigenschappen van stoffen die relevant voor de verdeling over verschillende compartimenten (water, waterbodembodem, zwevend slib en opgeloste organische stof) en een bestaand hydrologisch model (Van Gils et al., concept). De parameters die verder vaak worden toegepast bij het berekenen van de PEC zijn de octanol-water verdelingscoëfficiënt ($\log K_{OW}$), het geproduceerde of gebruiksvolume en het zuiveringsrendement (James et al., 2015). Veel van de eigenschappen van stoffen worden berekend op basis van de structuur van een stof, waarvoor met name EPI-Suite van de US-EPA wordt toegepast.

Het schatten van concentraties levert een grote onzekerheid op. De kwaliteit hangt af van de mate van overeenstemming in stoffeigenschappen tussen de nieuwe stof en de stoffen waarop de methode is gebaseerd (Stempel et al., 2012) en de volledigheid van productie- en gebruikgegevens. Ook de kwaliteit van een berekende $\log K_{OW}$ en zuiveringsrendement is afhankelijk van de voorspelbaarheid van deze eigenschappen voor de specifieke stof. Echter, bij gebrek aan gemeten waarden, vormen berekeningen op basis van aannames het beste alternatief. Het heeft wel de voorkeur om stoffen voorafgaand aan de prioritering te categoriseren op basis van de beschikbare gegevens, zodat daadwerkelijk gemeten concentraties (kwantitatief of semi-kwantitatief (uit non-target screening activiteiten)) niet uit het oog worden verloren. Stoffen met een (al dan niet hoge) PEC, hoeven namelijk niet voor te komen in een watersysteem. Wanneer afbraak en zuiveringsrendement niet worden meegenomen, is de betrouwbaarheid van de PEC dusdanig beperkt dat een risicoanalyse alleen op basis van de chemische eigenschappen van stoffen een beter resultaat oplevert (James et al., 2015).

Voor opkomende stoffen afkomstig uit consumentenproducten is de afbraaksnelheid naar verwachting minder relevant. Deze stoffen komen continu vrij bij RWZI's, zodat zelfs stoffen met een korte halfwaardetijd kunnen worden aangetroffen in het ontvangende oppervlaktewater (Stempel et al., 2012). Dit wordt ook wel pseudo-persistentie genoemd. Voor de verspreiding van stoffen door het watersysteem en voor de productie van drinkwater is de persistentie wel van belang.

1.3 Toxiciteit

Het volgende aspect zijn gegevens op basis waarvan het risico van het voorkomen van stoffen kan worden beoordeeld. Vaak wordt gebruik gemaakt van de resultaten van ecotoxiciteitsstudies, zoals de NOEC (no observed effect concentration; concentraties waarbij geen effect optreedt), LC50 (concentratie waarbij 50% van de organismen sterft) of EC50 (concentratie waarbij 50% effect optreedt). De ecotoxiciteitsgegevens voor individuele soorten worden gedeeld door een veiligheidsfactor of assessment factor om ze te vertalen naar een veilige concentratie voor het ecosysteem. Deze waarde wordt aangeduid als de PNEC (predicted no effect concentration). De hoogte van de veiligheidsfactor reflecteert de onzekerheid en is afhankelijk van het aantal ecotoxiciteitsgegevens en het soort testen.

In de Ecologische Sleutelfactor Toxiciteit wordt gebruik gemaakt van de SSD (species sensitivity distribution) van stoffen. Deze geeft aan bij welke concentratie welk deel van de organismen nadelige gevolgen van de aanwezigheid van een stof ondervindt en is gebaseerd op alle (relevante) beschikbare toxiciteitsgegevens. Uitgaande van gemeten concentraties, resulteert elke stof in een PAF (potentieel aangetaste fractie van organismen), en de som van alle stoffen levert een msPAF (meer stoffen PAF) op (Posthuma et al., 2016).

In de drinkwaterwereld wordt ook gebruik gemaakt van de Threshold of Toxicological Concern (TTC); onder deze concentratie is het humaan-toxicologische risico verwaarloosbaar. Deze wordt afgeleid wanneer er geen of weinig stof-specifieke toxiciteitsgegevens beschikbaar zijn. Stoffen worden op basis van hun structuur geclassificeerd, waarna een grenswaarde wordt vastgesteld voor de gehele structuurklasse (Baken, 2018). De ERM-streefwaarde (Europese Rivieren Memorandum) van 0,1 µg/l voor biologisch actieve stoffen is hier ook op gebaseerd. Indien voor opkomende stoffen geen toxiciteitsgegevens beschikbaar zijn, wordt deze geschat op basis van de chemische structuur met behulp van QSAR's (quantitative structure activity relationships). Een voorbeeld is het programma ECOSAR van de US-EPA. Dit kan voor generieke effecten, maar voor specifieke effecten geven tools slechts een indicatie. Voor stoffen met een structuur die afwijkt van de structuren op basis waarvan de QSAR's zijn afgeleid, geldt dat de voorspelde toxiciteit mogelijk afwijkt van de werkelijke toxiciteit. Voor sommige stofgroepen is de betrouwbaarheid van de voorspellingen laag, omdat de relaties tussen structuur en ecotoxiciteit maar op een paar testen zijn gebaseerd. Ook voor stoffen met heel reactieve groepen is de betrouwbaarheid beperkt. Bij een studie waarbij duizenden stoffen worden beoordeeld, is het niet mogelijk om de kwaliteit van de match per stof te beoordelen. Er is wel informatie beschikbaar over de kwaliteit van de QSAR per stofgroep.

1.4 Prioritering

De prioritering is afhankelijk van de hoeveelheid gegevens die beschikbaar is, vandaar dat veel studies stoffen eerst categoriseren. De systematiek die binnen NORMAN (Dulio en Von der Rohe, 2013) is toegepast, is een indeling in actiecategorieën, met als mogelijke acties regulering (bij voldoende data), meer meten, vaststellen van de toxiciteit en verbetering van de kwaliteit van analyses. Binnen de actiecategorie wordt vervolgens een rangorde aangebracht. Verschillende studies kennen scores toe aan het voorkomen van stoffen (al dan niet gemeten), eigenschappen van stoffen en toxische effecten (Woutersen et al., 2015; Van der Velden-Slootweg en Bannink, 2018; Sjerps et al., 2014).

2 Aanpak

2.1 Selectie stoffen

Aan de basis van deze studie liggen de consumentenproducten waaruit stoffen afkomstig kunnen zijn die uiteindelijk het oppervlaktewater bereiken. Om het risico te beperken dat deze studie alleen stoffen prioriteert waarvan al veel gegevens bekend zijn, is besloten om de samenstelling van consumentenproducten als uitgangspunt te gebruiken.

Allereerst zijn twee supermarkten (Albert Heijn en Jumbo) en een drogisterij (Kruidvat) bezocht om te komen tot een lijst met productcategorieën (zoals shampoo, tandpasta, vaatwasmiddel). Naar verwachting hebben we daarmee alle productcategorieën wel in het vizier. De volgende producten die op de schappen aanwezig waren, zijn in deze studie buiten beschouwing gelaten:

- doe-het-zelf producten (omdat het een volledig andere groep stoffen betreft)
- middelen ter bestrijding van ongedierte (deze stoffen vallen onder de biocide wetgeving)
- over-the-counter geneesmiddelen (omdat geneesmiddelen onder andere wetgeving vallen).

Vervolgens zijn die categorieën geselecteerd waarvan de producten veel gebruikt worden en waarvan de restanten naar verwachting via het riool worden afgevoerd. Dit laatste argument maakt bijvoorbeeld dat cosmetica buiten beschouwing wordt gelaten, omdat dit na verwijdering veelal in de prullenbak terecht zal komen. De selectie is afgestemd met de leden van de themagroep opkomende stoffen in oppervlaktewater.

Als derde stap zijn de ingrediënten die aanwezig zijn in de geselecteerde productcategorieën op een rij gezet. De Nederlandse website <https://waarzitwatin.nl/> levert informatie over de samenstelling van productcategorieën, maar het aantal categorieën en het aantal ingrediënten per categorie is beperkt. Daarnaast ontbreken CAS-nummers, wat de koppeling met andere data bemoeilijkt. De CPID (Consumer Product Information Database, <https://www.whatsinproducts.com/chemicals/index/1>) bevat informatie over de samenstelling van 21000 consumentenproducten. Aan de ingrediënten zijn MSDS-bladen (Material Safety Data Sheet) gekoppeld, en er is een koppeling met TOXNET (Toxicology Data Network, <https://toxnet.nlm.nih.gov/>) met referenties naar toxicologische studies voor de betreffende stof. Omdat een groot deel van de gebruikers van de database uit Europa afkomstig is, zijn er ook Europese producten in de database opgenomen, maar onbekend is hoe groot het aandeel aan het totale aantal is. De data worden echter niet in de vorm van een database beschikbaar gesteld. De toepassingsmogelijkheden van deze database zijn daardoor beperkt tot zoekacties naar individuele stoffen. Op het moment dat je wil weten hoe vaak een stof in een bepaalde productcategorie wordt toegepast, is dit uit de database te halen, evenals het percentage waarmee het in de producten aanwezig is.

De dataset behorende bij de publicatie van Goldsmith et al. (2014) bevat de samenstelling van 8921 consumentenproducten op basis van de MSDS-bladen (Material Safety Data Sheets). De MSDS-bladen waren afkomstig van Walmart, een Amerikaanse supermarkt/warenhuis keten, en daarmee mogelijk niet erg representatief voor Nederland. De data zijn onderdeel geworden van een grotere dataset met de samenstelling van bijna 16 duizend producten: CPDAT (Chemical and Products Database, <https://www.epa.gov/chemical-research/chemical-and-products-database-cpdat>). Van deze producten zijn bijna 161 duizend ingrediënten bekend; de ingrediënten betreffen ruim 75 duizend verschillende stoffen. Voor een uitgebreide omschrijving van de database, zie Dionisio et al. (2018). De database is gevuld met informatie uit MSDS-bladen en ingrediëntenlijsten van 5 producenten/merken: Unilever, Procter & Gamble, Drugstore.com, Church & Dwight en Palmolive. De bijdrage van de laatste twee is beperkt in aantal. In hoeverre de samenstelling van de (Amerikaanse) producten overeenstemt met de samenstelling van producten in Europa, is niet bekend. Omdat deze dataset de meest uitgebreide set is die als database beschikbaar is, is deze als startpunt gebruikt bij het opstellen van een lijst met stoffen.

De geselecteerde productcategorieën (opgenomen in Tabel 2.1) zijn opgezocht in de CPDat-database. In de dataset zijn 6054 individuele producten (bijvoorbeeld 56 soorten Head&Shoulders shampoo en conditioner) in de geselecteerde productcategorieën aanwezig (voorbeelden van productcategorieën: shampoo, tandpasta, glasreiniger). Het aantal ingrediënten per product verschilt sterk. Om te voorkomen dat een stof, die bij wijze van spreken maar in 1 product met een incomplete ingrediëntenlijst aanwezig is, uiteindelijk bovenaan in de lijstjes komt te staan, zijn alleen de producten met het grootste aantal ingrediënten geselecteerd. Voor elke productcategorie is een minimaal aantal ingrediënten vastgesteld, op basis waarvan circa de helft van de producten buiten beschouwing wordt gelaten. Met shampoo als voorbeeld: er zijn 725 soorten shampoo in de dataset aanwezig. De 'rijkste' shampoos bevatten meer dan 50 stoffen, maar een groot aantal bevat maar enkele ingrediënten. Als we minimaal de helft van het aantal shampoo producten willen selecteren, kunnen we het criterium op 17 ingrediënten zetten, want dan worden er 384 soorten shampoo in de analyse meegenomen. De stoffen in de overige shampoo producten worden wel op een rijtje gezet, maar niet verder meegenomen in de berekening van concentraties van stoffen in het oppervlaktewater. Voor de aantallen per productcategorie, zie Tabel 2.1.

Van alle producten die het gewenste aantal ingrediënten bevatten, zijn de volgende gegevens geëxporteerd uit de database:

- Ingrediënten
- CAS (indien beschikbaar)
- Van elk ingrediënt (voor zover beschikbaar) het gemiddelde van het minimale en van het maximale gehalte in de productcategorie. Het gemiddelde van deze twee gemiddelden is gebruikt in de verdere berekeningen.
- De functie van de stof in de productcategorie (beperkt beschikbaar)

Tabel 2.1 Overzicht van de productcategorieën (in het Engels ivm koppeling met database).

GC = gebruikscijfers per persoon in ml/dag of g/dag, X = geen gebruikscijfers beschikbaar.

| Product categorie | # producten | Minimaal # ingrediënten | # producten met min # ingr. | GC | Bron gebruikscijfers |
|--------------------------------|-------------|-------------------------|-----------------------------|------|--------------------------|
| Aftershave | 50 | 3 | 26 | 0.6 | Biesterbos et al. (2013) |
| Automatic dishwashing additive | 11 | 2 | 7 | X | |
| Automatic dishw. detergent | 52 | 3 | 29 | 4.7 | HERA (2005) |
| Bathroom cleaner | 103 | 2 | 67 | 1.7 | HERA (2005) |
| Body wash | 302 | 9 | 152 | 4.5 | Biesterbos et al. (2013) |
| Bubble bath | 85 | 12 | 45 | 1.2 | Biesterbos et al. (2013) |
| Contact care | 13 | 4 | 9 | X | |
| Denture adhesive | 3 | 2 | 2 | X | |
| Denture cleaner | 1 | 7 | 1 | X | |
| Deodorant | 241 | 3 | 147 | 1.7 | Biesterbos et al. (2013) |
| Dish soap | 56 | 3 | 41 | 4 | ECHA (2015) |
| Drain | 22 | 2 | 16 | X | |
| Fabric softener | 34 | 2 | 12 | 6.2 | ECHA (2015) |
| Face cream/ moisturizer | 722 | 18 | 359 | 0.7 | Biesterbos et al. (2013) |
| Glass cleaner | 40 | 3 | 20 | X | |
| Hair color | 354 | 8 | 193 | X | |
| Hair color activator | 4 | 2 | 3 | X | |
| Hair color developer | 28 | 2 | 22 | X | |
| Hair color toner | 3 | 7 | 3 | X | |
| Hair conditioner | 585 | 17 | 296 | 4.9 | Biesterbos et al. (2013) |
| Hair spray | 263 | 3 | 148 | 0.9 | Biesterbos et al. (2013) |
| Hair styling | 753 | 13 | 386 | 3.1 | Biesterbos et al. (2013) |
| Hand sanitizer | 45 | 2 | 24 | X | |
| Hand soap | 60 | 3 | 41 | 12.7 | Rotsidou et al. (2015) |
| Hand/body lotion | 560 | 15 | 296 | 4 | Biesterbos et al. (2013) |
| Laundry detergent (liquid) | 65 | 4 | 36 | 7.7 | ECHA (2015) |
| Laundry detergent (powder) | 20 | 4 | 12 | 5.1 | ECHA (2015) |
| Lime remover | 12 | 2 | 7 | X | |
| Mouthwash | 38 | 3 | 22 | X | |
| Oven cleaner | 8 | 3 | 4 | X | |
| Shampoo | 725 | 17 | 384 | 2.4 | Biesterbos et al. (2013) |
| Shaving cream | 196 | 4 | 120 | 3 | Biesterbos et al. (2013) |
| Sunscreen | 382 | 8 | 209 | 0.4 | Biesterbos et al. (2013) |
| Surface cleaner | 101 | 2 | 58 | 3.4 | HERA (2005) |
| Toothpaste | 117 | 5 | 64 | 2.2 | Biesterbos et al. (2013) |
| TOTAAL | 6054 | | 3261 | | |

2.2 Concentratie in oppervlaktewater

Vervolgens is de te verwachten concentratie in oppervlaktewater (PEC, predicted environmental concentration) berekend. Dit is echter alleen mogelijk als het CAS-nummer bekend is (in verband met het opvragen van eigenschappen van de stof uit EpiSuite), het gehalte in één of meer productcategorieën bekend is en gebruikscijfers beschikbaar zijn. De gebruikscijfers zijn afkomstig uit diverse Europese studies (zie referenties in Tabel 2.1). Bij de berekening van de PEC zijn de volgende aannames gedaan:

- Alle ingrediënten in een productcategorie zijn in alle producten aanwezig. Dit komt erop neer dat alle ingrediënten van 384 verschillende soorten shampoo in alle gebruikte shampoo aanwezig worden verondersteld. Dit levert dus een overschatting op.
- Het gehalte van een stof in de productcategorie wordt berekend door het gemiddelde te berekenen van de minimale gehalten die zijn gerapporteerd, het gemiddelde van de maximale gehalten, en deze beide gemiddelden weer te middelen.
- De gebruikscijfers (in ml/dag of g/dag) van de verschillende producten zijn uit diverse bronnen verzameld (zie Tabel 2.1).
- De dagelijkse belasting ten gevolg van de verschillende productcategorieën wordt opgenomen in de 120 liter water die we dagelijks per persoon gebruiken. Als een stof bijvoorbeeld zowel in shampoo als in tandpasta wordt toegepast, wordt de concentratie ten gevolg van deze beide productcategorieën bij elkaar opgeteld.
- Als het zuiveringsrendement bekend is (EPI-Suite) wordt de concentratie hiermee gecorrigeerd. Er is geen verdere selectie uitgevoerd op basis van vluchtigheid, adsorptie of afbraak, in de veronderstelling dat al deze parameters hun invloed uitoefenen via het zuiveringsrendement.
- Het effluent wordt geloosd op oppervlaktewater met een verdunning van een factor 10 (afkomstig uit EC (2003)). De berekende concentratie beoogt daarmee representatief te zijn voor de concentratie in het oppervlaktewater in de nabijheid van een lozingspunt van een RWZI.

Daarnaast zijn de concentraties van stoffen in oppervlaktewater in Noordwest Europa (Nederland, Duitsland en Zweden (2011-2014) en Frankrijk (2013-2016) uit de NORMAN EMPODAT Database opgevraagd (<https://www.norman-network.com/nds/empodat/chemicalSearch.php>). Van de gemeten concentraties is de hoogste meetwaarde vergeleken met de PEC. De hoeveelheid beschikbare data was erg beperkt, daarom is er geen werk gemaakt van het afleiden van een P95-waarde, hoewel de P95 minder gevoelig is voor foute meetwaarden dan de maximale waarde.

2.3 Toxiciteit

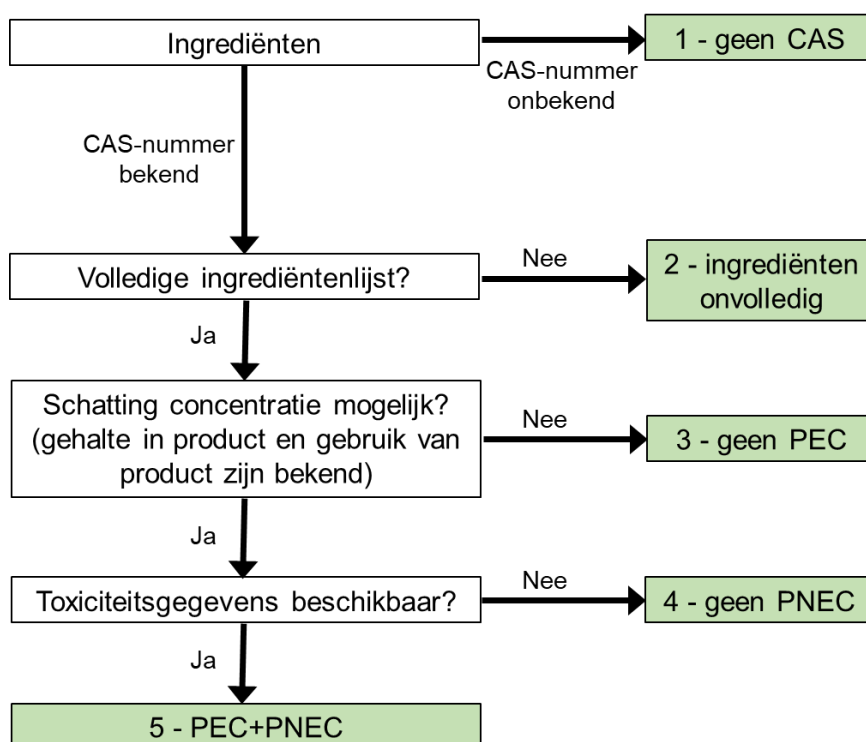
Gegevens over de toxiciteit van stoffen zijn uit diverse bronnen afkomstig. Als basis zijn de PNEC-waarden uit de NORMAN Ecotoxicology Database gebruikt (<https://www.norman-network.com/nds/ecotox/>). Voor stoffen die ontbreken in deze database, is de toxiciteit berekend door middel van ECOSAR (ECOSAR V2.0, US-EPA) en/of opgezocht in CompTox (<https://comptox.epa.gov/dashboard/>). De handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicofactoren (De Poorter et al., 2015) geeft een assessment factor van 10 voor chronische NOEC's, een factor 100 voor LC50 of EC50 waarden en een extra factor 10 voor ecotoxiciteitsdata verkregen via QSAR's. Op de LC50 en EC50 waarden is daarom een correctiefactor van 1000 toegepast, en op de chronische toxiciteitsgegevens een factor 100. De laagste van de beide waarden is gebruikt als aanvulling op de NORMAN PNEC's.

Er is nog een database (ECOTOX Knowledgebase, <https://cfpub.epa.gov/ecotox/>), onder beheer bij de US-EPA, met toxiciteitsgegevens van bijna 12 duizend stoffen. Het aantal verschillende organismen in de toxiciteitstesten en het aantal verschillende eindpunten, maakte omrekening richting een PNEC echter te bewerkelijk voor deze studie. Deze database is daarom op dit moment niet gebruikt.

Een deel van de stoffen is in de ESF-TOX aanwezig, echter, een kleiner aantal dan in de NORMAN database aangevuld vanuit ECOSAR en CompTox. Om zoveel mogelijk stoffen te kunnen beoordelen, is de voorkeur daarom uitgegaan naar PNEC-waarden.

2.4 Verwerking resultaten

De gehele exercitie heeft een aantal lijsten met stoffen opgeleverd, waarnaar in de resultaten wordt verwezen. Aan de basis ligt de export van de ingrediënten van de geselecteerde producten vanuit de CPDAT database (zie toelichting paragraaf 2.1). Deze stoffen zijn afhankelijk van het al dan niet beschikbaar zijn van gegevens op verschillende lijsten gezet. Deze zijn opgenomen in het Excel-bestand "Opkomende stoffen uit consumentenproducten_Deltares 2019" behorende bij dit rapport. De indeling van de lijsten is weergegeven in Figuur 2.1.

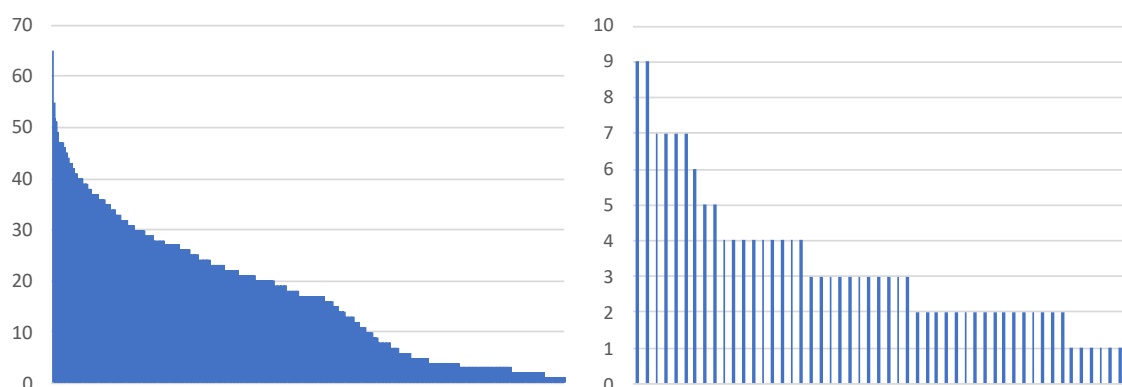


Figuur 2.1 Verdeling van de ingrediënten van consumentenproducten over diverse lijsten. In de groene blokken is weergegeven op welk tabblad van het bestand "Opkomende stoffen uit consumentenproducten_Deltares 2019" de betreffende stoffen staan.

3 Resultaten

3.1 Samenstelling van producten

De samenstelling van producten in de CPDAT database blijkt lang niet altijd volledig te zijn. In Figuur 3.1 is het aantal ingrediënten in de verschillende merken shampoo (links) en vaatwasmiddel (rechts) weergegeven. Van de 725 verschillende soorten shampoo, hebben 150 soorten minder dan 4 ingrediënten volgens de database. In de verdere analyse zijn shampoo merken met minder dan 17 ingrediënten buiten beschouwing gelaten (zie paragraaf 2.1 voor toelichting op het vaststellen van het gewenste aantal ingrediënten). De analyse is daarmee gebaseerd op de samenstelling van 384 verschillende soorten shampoo. Voor vaatwasmiddel is het minimum aantal ingrediënten op 3 gezet, omdat anders meer dan de helft van de producten buiten beschouwing zou worden gelaten.



Figuur 3.1 Aantal ingrediënten in shampoo (links) en vaatwasmiddel (rechts). Data vanuit CPDAT.

In Tabel 2.1 zijn de productcategorieën (in het Engels, direct gekoppeld aan de naamgeving in de database), het aantal producten in de productcategorie, het gewenste aantal ingrediënten en de gebruikscijfers opgenomen. Alleen voor stoffen met gebruikscijfers (en een bekend gehalte in de productcategorie) is berekening van de PEC mogelijk.

3.2 Stoffen zonder CAS-nummer

In totaal zijn er 6385 verschillende stoffen aanwezig in de producten. Van 5106 vermeldt de database geen CAS-nummer (Excelbestand, tabblad 1 - geen CAS), waarmee ze zijn uitgesloten van verder verwerking. Dit zijn overigens geen vijfduizend verschillende stoffen. Door verschillen in de spelling van de naam van de stof (een extra spatie is voldoende), komen stoffen meerdere malen in de lijst voor. Van de vijfduizend stoffen zonder CAS zijn 1800 stoffen eenvoudig herkenbaar als zijnde een extract, olie of sap van bloemen of planten. Er zijn 86 stoffen die als kleurstof worden toegepast. Er zijn 66 stofnamen met polyquaternium in de naam (wederom verschillen in spelling, dus minder stoffen), en 248 vormen van polyethyleen glycol (PEG).

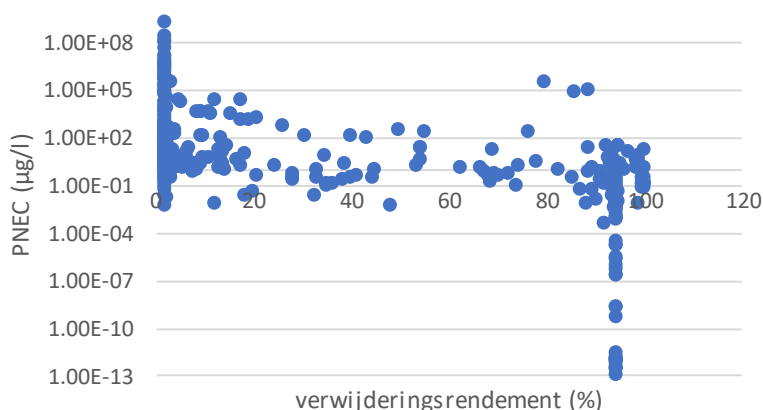
3.3 Stoffen aanwezig in producten met onvolledige ingrediëntenlijsten

Er zijn 1283 stoffen voorzien van een CAS-nummer in de database aanwezig. Hiervan vallen 156 stoffen af, omdat ze alleen in de producten voorkomen die minder dan het gewenste aantal ingrediënten bevatten (tabblad 2 - te weinig ingrediënten). De meeste van deze stoffen zijn afkomstig van producten in de productcategorieën face cream/moisturizer (35 stoffen), hair styling (24 stoffen), hair conditioner (19 stoffen) en shampoo (17 stoffen). Dit zijn de productcategorieën met het grootste aantal producten, waarbij ook de grootste aantallen producten afvallen. Een blik op de lijst levert niet direct duidelijk herkenbare stofgroepen op.

3.4 Stoffen zonder PEC, deel met PNEC

Van 756 stoffen (van de 1283 met CAS-nummer) kan geen PEC berekend worden, omdat niet bekend is wat de gebruikscijfers van de productcategorie zijn (zie in Tabel 2.1 de stoffen met een 'X' in de kolom met gebruikscijfers), of omdat niet bekend is in welke hoeveelheid de stof in de producten aanwezig is. Deze stoffen zijn verzameld op tabblad 3 - geen PEC in het Excel-bestand. De productcategorieën die de meest stoffen aan deze lijst aanleveren zijn face cream/moisturizer, hair color, hair styling en shampoo. Voor 556 van de 756 stoffen is een PNEC beschikbaar. In Figuur 3.2 staan de PNEC's voor deze stoffen uitgezet tegen het verwijderingsrendement. De stoffen met de laagste PNEC waarden ($< 10^{-5}$ µg/l) betreffen voornamelijk oliën (onder andere olive oil, soy oil, castor oil, palm oil). De ecotoxische effecten van oliën zouden veroorzaakt kunnen worden door fysische processen die mogelijk in het lab domineren maar onder veldcondities minder van invloed zijn. Een andere mogelijkheid is dat verontreinigingen die in de olie aanwezig zijn de gemeten toxiciteit veroorzaken. Castor oil (in het Nederlands wonderolie) wordt gemaakt van de vruchten van de boom *Ricinus communis*. Als er ricine vanuit de pulp die overblijft na het uitpersen van de bonen in de olie terecht komt, zou dit de toxiciteit kunnen verklaren. De oliën hebben een hoog verwijderingsrendement, en zullen sterk de neiging hebben om te binden aan bijvoorbeeld organische stof of zwevend stof, als ze in het watersysteem terecht komen. Ook voor een aantal kleurstoffen worden lage PNEC's gerapporteerd ($\sim 10^{-3}$ µg/l). In totaal hebben er 189 stoffen een PNEC die kleiner is dan 1 µg/l.

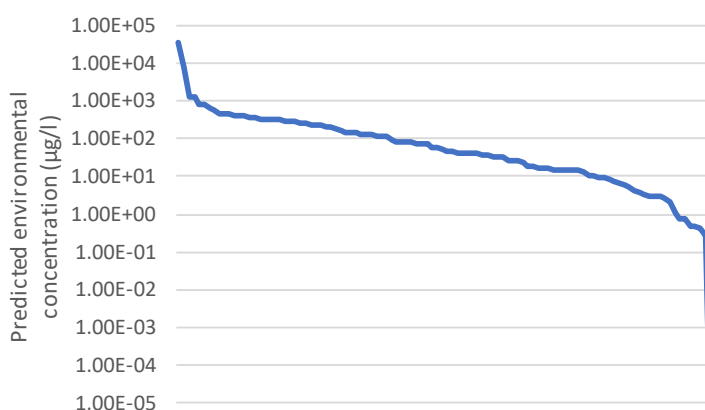
Aan de andere kant van het spectrum staan stoffen die niet of nauwelijks verwijderd worden en die een hele hoge PNEC hebben. Het is mogelijk dat dit slecht-oplosbare stoffen betreft waarvan de toxiciteit niet goed is bepaald.



Figuur 3.2 Voor stoffen waarvoor geen PEC berekend kan worden, is de PNEC uitgezet tegen het geschatte verwijderingsrendement.

3.5 Stoffen met PEC, maar zonder PNEC

Vervolgens zijn er 106 stoffen waarvoor wel een PEC berekend kan worden, maar waarvoor PNEC waarden ontbreken (tabblad 4 - geen PNEC). De PEC's liggen, op één uitzondering na, allemaal boven de streefwaarde uit het ERM (Europees Rivierenmemorandum) van 0,1 µg/l (Figuur 3.3). Voor 44 van deze stoffen, met name anorganische verbindingen, zijn wel toxiciteitsgegevens beschikbaar in de ECOTOX knowledgebase. Omdat in deze database veel verschillende organismen en eindpunten zijn opgenomen, was omrekening tot een waarde die vergelijkbaar is met een PNEC niet uitvoerbaar in het tijdsbestek van deze studie.



Figuur 3.3 PEC's voor de stoffen waarvoor PNEC waarden ontbreken.

Bij de hoogste PEC-waarden treffen we stoffen aan als natuurlijke mineralen zoals natrium(aluminium)silicaat, natriumchloride, kalk, kaolin en bentonite, maar ook een aantal polymeren. Producten die frequent de hoogste bijdrage aan de concentraties van deze stoffen leveren zijn bathroom cleaner, hair styling en toothpaste.

3.6 Vergelijking van PEC met gemeten concentraties

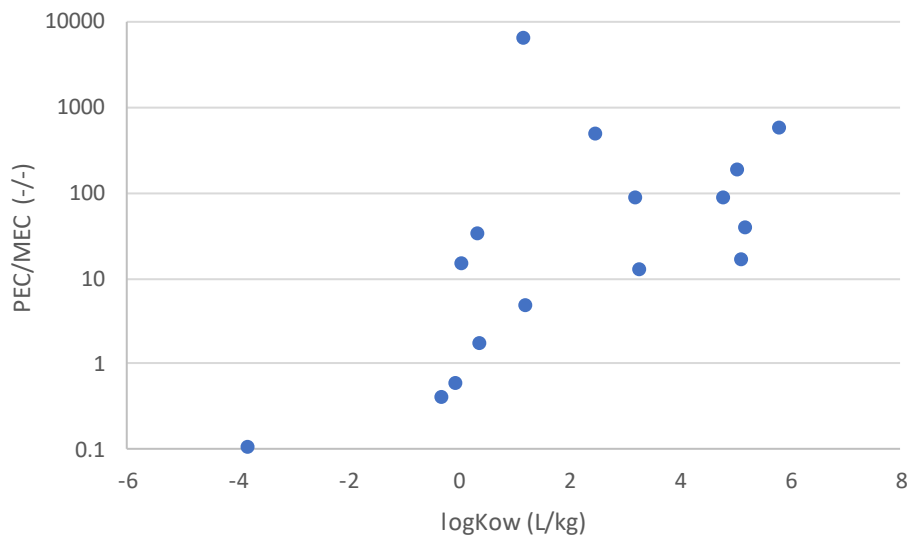
De betrouwbaarheid van de PEC is sterk afhankelijk van

- de juistheid van de aannames die worden gedaan ten aanzien van het gebruik van producten die de stof bevatten;
- de aanwezigheid in producten die niet worden meegenomen bij de berekening van de PEC;
- de kwaliteit van de QSAR. Deze bepaalt hoe een stof zich naar verwachting gedraagt in de zuivering en in het milieu.

Op basis van meetwaarden (MEC - measured environmental concentration) kan een beeld worden verkregen van de kwaliteit van de PEC. Voor een zeer beperkt aantal stoffen, 16 stuks, zijn gemeten concentraties achterhaald uit de EMPODAT database. De export vanuit deze database verliep moeizaam, waardoor slechts data uit een beperkt aantal landen en jaren is gebruikt. Mogelijk zijn er dus al meer data aanwezig in EMPODAT, maar daarnaast bevat de RIWA-database gegevens over diverse stoffen. De RIWA-database is op dit moment nog niet gebruikt voor deze studie.

De verhouding tussen de berekende PEC en gemeten MEC is weergegeven in Figuur 3.4. De stoffen waarvan de berekende concentratie de gemeten concentratie sterk overschrijdt, zijn over het algemeen redelijk apolair ($\log K_{ow} > 3$). Deze stoffen bevinden zich bij voorkeur niet zozeer in het oppervlaktewater, maar eerder in het zwevend stof of in de waterbodem. Mogelijk wordt het zuiveringsrendement voor deze stoffen onderschat.

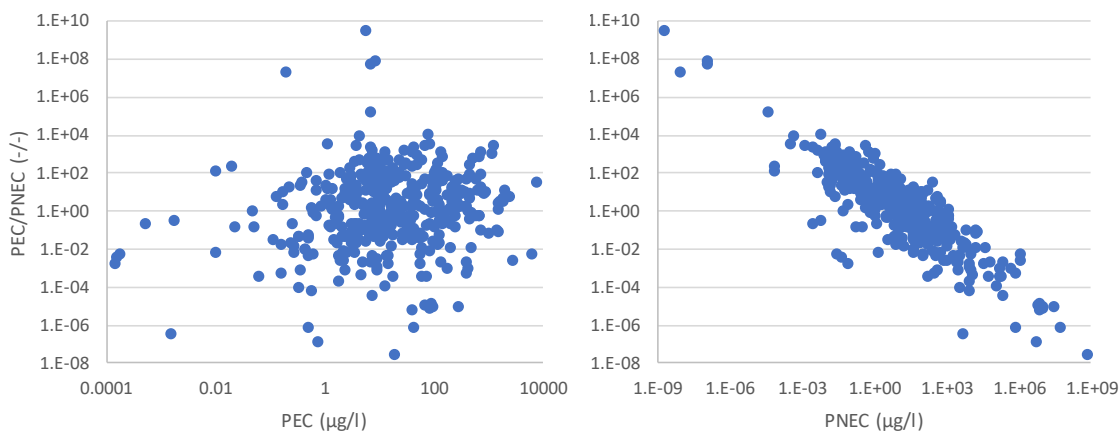
De grootste uitschieter is 2-fenoxyethanol met een $\log K_{OW}$ van 1,2 en een overschatting van de MEC met een factor 6600. De stof is niet vluchtig en de halfwaardetijd voor biodegradatie (berekend door middel van EPI Suite) is met 5,5 dag vergelijkbaar met de overige stoffen. Omdat deze stof niet alleen in de consumentenproducten wordt toegepast, maar ook aanwezig is in lijmiddelen en plastics en wordt toegepast als conserveringsmiddel, zou een onderschatting door de PEC meer voor de hand liggen. Immers, het gebruik in andere producten is niet opgenomen in de PEC-berekening.



Figuur 3.4 Verhouding tussen de PEC (predicted environmental concentration) en de MEC (measured environmental concentration ten opzichte van de $\log K_{OW}$.

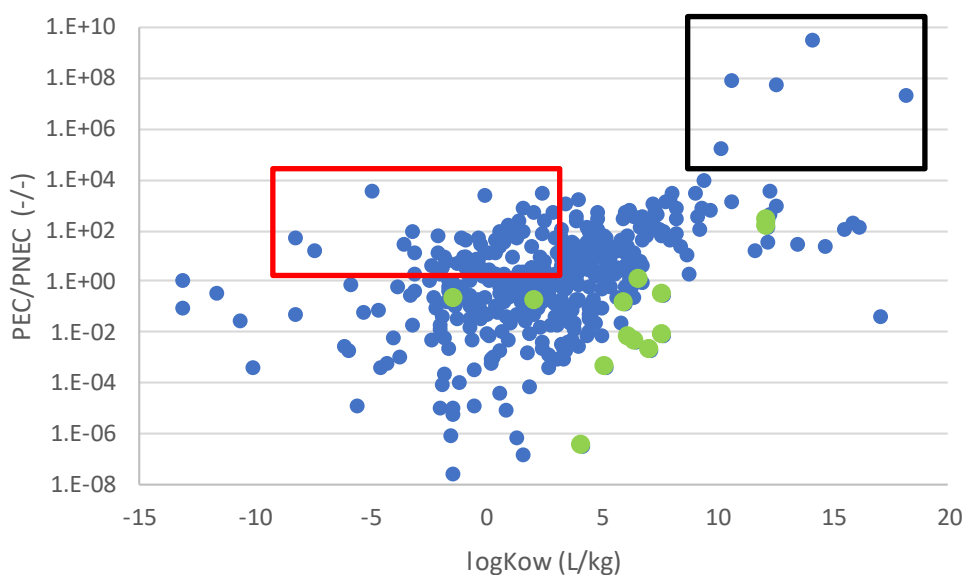
3.7 Vergelijking van PEC met PNEC

Uiteindelijk blijven er 416 stoffen over waarvan een PEC berekend kon worden en een PNEC bekend of berekend is (tabblad 5 - PEC+PNEC). Voor 222 stoffen geldt dat de PEC de PNEC overschrijdt ($PEC/PNEC > 1$). De mate van overschrijding hangt natuurlijk zowel van de PEC als van de PNEC af, maar wordt sterker bepaald door zeer lage PNEC's dan door zeer hoge concentraties (zie Figuur 3.5). Slechts 13 stoffen overschrijden **niet** de ERM-streefwaarde voor de productie van drinkwater van 0,1 $\mu\text{g/l}$ (in groen weergegeven in Figuur 3.6).



Figuur 3.5 PEC:PNEC ratio ten opzichte van de PEC (links) en PNEC (rechts).

De stoffen (met Engelstalige namen omdat ze daarmee in het Excel-bestand zijn opgenomen) met een zeer grote overschrijding ($> 10^5$) van de PNEC zijn 1-hexadecanol hydrogen phosphate, dihexadecyldimethylammonium chloride, dimethicone, castor oil en hydrocarbon waxes (in volgorde van afnemende PNEC-overschrijding). Deze stoffen zijn zeer apolair (laagste $\log K_{OW}$ is 10; zie Figuur 3.6, met zwart blok gemarkeerd), het zuiveringsrendement is hoog, en de concentraties in de waterfase zullen laag zijn. Echter, omdat ook de PNEC's zeer laag zijn (hoogste PNEC is 0,04 ng/l), bestaat er toch een risico dat de concentraties in oppervlaktewater de PNEC overschrijden. Monitoring van deze stoffen zal gezien de lage concentraties erg lastig zijn, maar mogelijk bieden passieve sampling of analyse in een ander compartiment (bijvoorbeeld zuiveringsslib of waterbodem) kansen om zicht te krijgen op de aanwezigheid van deze stoffen.



Figuur 3.6 PEC:PNEC ratio ten opzichte van de $\log K_{OW}$. In het rode blok de stoffen die de PNEC overschrijden en, gezien de $\log K_{OW} < 3$, waarschijnlijk (deels) in de waterfase aanwezig zullen zijn. In het zwarte blok stoffen met een extreem grote overschrijding van de PNEC. In groen weergegeven de 13 stoffen die NIET de ERM streefwaarde van 0,1 $\mu\text{g/l}$ overschrijden.

Ook onder de meer polaire stoffen (hier gedefinieerd als stoffen met $\log K_{OW} < 3$) zijn veel stoffen die de PNEC overschrijden (In Figuur 3.6 rood-gemarkeerd). De 20 stoffen met de hoogste PNEC overschrijding en een $\log K_{OW} < 3$ zijn opgenomen in Tabel 3.1. Onder deze stoffen bevinden zich:

- 6 kleurstoffen;
- 4 oppervlakte-actieve stoffen die volgens PubChem weinig risico opleveren maar wel in hoeveelheden tot 100 000 ton/jaar in de EU worden geproduceerd/geïmporteerd;
- 3 polyethyleen verbindingen die als surfactant/emulsifier worden toegepast.

De overige 7 stoffen hebben een functie als oppervlakte-actieve stof, conserveringsmiddel, desinfectans of schuim stabilisator (deze laatste > 100 ton/jaar). Het desinfectans in de lijst is zoutzuur (hydrochloric acid). In praktijk zal deze stof geen enkel risico opleveren omdat het effect op de pH in de zuivering teniet zal worden gedaan en de verhoging van de chlorideconcentratie minimaal zal zijn. Met name body wash, handzeep en badkamerreiniger leveren een bijdrage aan de PEC voor de verschillende stoffen.

Tabel 3.1 20 Polaire stoffen ($\log K_{ow} < 3$) met de hoogste PNEC-overschrijding.

| Stofnaam | CAS | VR ¹ (%) | PEC µg/l | PNEC µg/l | PEC/PNEC | logK _{ow} | ECHA ton/jaar | Functie ² |
|--|------------|------------------------|-------------|--------------|----------|--------------------|------------------|----------------------|
| KLEURSTOFFEN | | | | | | | | |
| C.I. Acid Yellow 3 disodium salt | 8004-92-0 | 1,9 | 24 | 0,39 | 62 | 1,06 | | K |
| FD&C Blue No. 1 | 3844-45-9 | 1,9 | 85 | 0,026 | 3307 | -4,94 | | K |
| FD&C Red 3 | 16423-68-0 | 1,9 | 6,9 | 0,0027 | 2554 | -0,05 | | K |
| D&C Red No. 33 | 3567-66-6 | 1,9 | 11 | 0,18 | 60 | -2,09 | | K |
| FD&C Green No. 3 | 2353-45-9 | 1,9 | 1,2 | 0,014 | 91 | -3,22 | | K |
| D&C Green 5 | 4403-90-1 | 2,3 | 4,4 | 0,0092 | 481 | 2 | | K |
| OPPERVLAKTE ACTIEVE STOFFEN | | | | | | | | |
| Sulfuric acid, mono-C12-18-alkyl esters, sodium salts | 68955-19-1 | 2,0 | 676 | 0,94 | 718 | 1,6 | 10000-100000 | OA |
| Sodium 1-octanesulfonate | 5324-84-5 | 1,9 | 610 | 12 | 52 | -1,09 | 10-100 | OA |
| Sodium dodecyl sulfate | 151-21-3 | 2,0 | 727 | 8,0 | 91 | 1,6 | 1000-10000 | OA |
| Ammonium dodecyl sulfate | 2235-54-3 | 2,9 | 1283 | 0,46 | 2810 | 2,42 | | OA |
| POLYETHYLEEN VERBINDINGEN | | | | | | | | |
| Polysorbate 60 | 9005-67-8 | 1,9 | 109 | 0,69 | 157 | 0,92 | 10-100 | E/OA |
| Polyethylene glycol monodecyl ether | 26183-52-8 | 2,9 | 185 | 2,3 | 79 | 2,42 | | OA |
| Diethylene glycol monolauryl ether sulfate sodium salt | 3088-31-1 | 1,9 | 457 | 5,3 | 86 | 1,14 | | E/OA |
| OVERIGE STOFFEN | | | | | | | | |
| Hydrochloric acid | 7647-01-0 | 75 | 122 | 1,5 | 83 | 0,54 | | D |
| 3-Iodo-2-propynyl-N-butylcarbamate | 55406-53-6 | 3,0 | 40 | 0,17 | 240 | 2,45 | | C |
| Benzalkonium chloride | 8001-54-5 | 5,1 | 2,8 | 0,049 | 56 | 2,93 | | OA |
| Ethanol, 2-[2-[2-(tridecyloxy)ethoxy]ethoxy]-, hydrogen sulfate, sodium salt | 25446-78-0 | 1,9 | 456 | 1,8 | 260 | 1,36 | | OA |
| Imidazolidinyl urea | 39236-46-9 | 1,9 | 17 | 0,31 | 56 | -8,28 | | OA |
| N,N-Bis(2-hydroxyethyl)dodecanamide | 120-40-1 | 4,9 | 543 | 0,95 | 570 | 2,89 | + 100 | SS |
| 5-Chloro-2-methyl-3(2H)-isothiazolone | 26172-55-4 | 1,9 | 283 | 5,7 | 49 | -0,34 | | AC |

¹ VR = Verwijderingsrendement bij zuivering

² K = kleurstof, OA = oppervlakte-actieve stof, E = emulgator, D = desinfectant, C = conserveringsmiddel, AC = antimicrobieel conserveringsmiddel, SS = schuim stabilisator.

4 Conclusies en aanbevelingen

Er zijn gegevens verzameld over:

- het voorkomen van stoffen in consumentenproducten;
- het gebruik van producten (om het voorkomen van stoffen in oppervlaktewater te schatten);
- de aanwezigheid van stoffen in oppervlaktewater (gemeten concentraties);
- de toxiciteit van stoffen.

Het aantal stoffen dat bij deze exercitie in beeld is gekomen loopt in de duizenden. De stoffen zijn, afhankelijk van de beschikbaarheid van gegevens over de stoffen, in verschillende lijsten opgenomen (Excel-bestand Opkomende stoffen uit consumentenproducten_Deltares 2019). Binnen elke lijst zijn de stoffen geordend op basis van de verwachte concentratie in oppervlaktewater, de toxiciteit van de stof, of de verhouding tussen deze beide gegevens. De stoffen die het hoogste risico vormen, verschijnen daardoor bovenaan de lijst.

Bij elk van de hierboven genoemde punten is sprake van onvolledige data of twijfel aan de juistheid van data. Dit laatste speelt bij het schatten van de te verwachten concentraties, maar ook bij het gebruik van QSAR's (quantitative structure activity relationships) voor het schatten van de eigenschappen en toxiciteit van stoffen. Op dit moment is het daardoor nog niet verantwoord om stoffen (of de producten waaruit deze stoffen afkomstig zijn) te prioriteren op basis van het risico voor het watersysteem.

Er zijn diverse mogelijkheden om de kwaliteit en het aantal gegevens vergroten. Deze zijn in onderstaande lijst met vervolgacties opgenomen en toegelicht. De meeste acties zijn concreet en eenvoudig uit te voeren. Naar verwachting biedt de dataset na uitvoering voldoende informatie om een prioritering van stoffen en/of productcategorieën mogelijk te maken.

Aanbevelingen voor mogelijke vervolgacties

Aanvullen huidige gegevens (in volgorde van prioriteit en uitvoering)

- Actie: nagaan of alle ingrediënten wel in Cosing (Cosmetic ingredient database) aanwezig zijn (en dus in de EU zijn toegelaten).
- Actie: Gebruikscijfers waar mogelijk aanvullen met beschikbare gegevens, en voor de overige producten een schatting maken van het gebruik.
- Actie: alle producten meenemen in de data-analyse, maar daarbij wel rekening houden met de frequentie waarmee een stof als ingrediënt wordt vermeld.
- Actie: Controleren of stoffen die vaak in wetenschappelijke publicaties of algemene media worden genoemd in de dataset aanwezig zijn.
- Actie: Koppelen van meetgegevens van RIWA.
- Actie: Voor specifieke stoffen controleren of EMPODAT data bevat (voor de huidige studie langere periode en meer landen dan voor huidige studie was opgevraagd).
- Actie: Gemeten concentraties in effluenten opzoeken (EMPODAT, Watson database van de Emissieregistratie)
- Actie: Controleren of PEC de oplosbaarheid van stoffen niet overschrijdt.
- Actie: Valideren van PEC (predicted environmental concentration) met monitoringsgegevens.

- Actie: Controleren kwaliteit van QSAR's in ECOSAR (Achtergronddocumenten in Help-functie).
- Actie: Nagaan of in REACH-dossiers aanvullende informatie beschikbaar is.
- Actie: Stoffen zonder CAS-nummer proberen te koppelen aan een CAS-nummer.
- Actie: Toxiciteitsgegevens (metingen) uit ECOTOX Knowledgebase (onder beheer bij US-EPA) koppelen aan stoffen. Mogelijk zijn er binnen NORMAN ook nog meer toxiciteitsgegevens beschikbaar (voor stoffen waar nog geen PNEC voor berekend is). Omrekenen naar PNEC-waarden is mogelijk te tijdsintensief om uit te voeren.

Koppelen van stoffen op basis van functie en van functionele groep

Het aantal stoffen dat in producten wordt toegepast is enorm. De lijst met functies van stoffen, denk aan oppervlakte-actieve stof, geurstof of conserveringsmiddel, is veel korter. Stoffen met dezelfde functie hebben naar verwachting vergelijkbare eigenschappen en mogelijk een vergelijkbare toxiciteit. Door deze informatie te koppelen aan de overige informatie, wordt helder welke functie de stoffen hebben die bovenaan in de lijsten verschijnen. Mogelijk kan door het koppelen van functies aan stoffen een generieke PNEC worden toegekend aan stoffen zonder toxiciteitsgegevens. Daarnaast kunnen er alternatieven naar voren komen, in de vorm van stoffen met dezelfde functie maar een beperkter toxisch effect.

Daarnaast kunnen stoffen aan bekende risicostoffen gekoppeld worden op basis van de chemische structuur (chemical similarity). Bij het RIVM is een AIO op dit onderwerp werkzaam, dit biedt kansen om de door hem ontwikkelde tools ook op de ingrediënten van consumentenproducten toe te passen.

5 Literatuurlijst

Baken, K. (2018). Tools for human health risk assessment of emerging chemicals. KWR-rapport BTO 2018.030. KWR Watercycle Research Institute, Nieuwegein.

Biesterbos, J.W.H., T. Dudzina, C.J.E. Delmaar, M.I. Bakker, F.G.M. Russel, N. von Goetz, P.T.J. Scheepers, N. Roeleveld (2013). Usage patterns of personal care products: Important factor for exposure assessment. *Food and Chemical Toxicology*, Vol. 55, pp. 8-17.

De Poorter, L.R.M., R. van Herwijnen, P.J.C.M. Janssen, C.E. Smit (2005). Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu (RIVM). Rapport 2015-0057.

Diamond, J.M., H.A. Latimer II, K.R. Munkittrick, K.W. Thornton, S.M. Bartell, K.A. Kidd (2011). Prioritizing contaminants of emerging concern for ecological screening assessments. *Environ. Tox. Chem.*, Vol. 30 (11), pp. 2385-2394.

Dionisio, K.L., K. Phillips, P.S. Price, C.M. Grulke, A. Williams, D. Biryol, T. Hong, K.K. Isaacs (2018). Data Descriptor: The chemical and products database, a resource for exposure-relevant data on chemicals in consumer products. *Sci. Data*, Vol. 5:180125.

Dulio, V. & P.C. von der Ohe (2013). NORMAN Prioritisation framework for emerging substances. NORMAN Association, ISBN 978-2-9545254-0-2.

EC (2003). Technical Guidance Document on Risk Assessment in support of the Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for New Notified Substances, Commission Regulation (EC) No 1488/94 on Risk Assessment for Existing Substances and Directive 98/8/EC of the European Parliament and of the Council concerning the placing of biocidal products on the market. Part II. Office for Official Publications of the EC, Luxembourg.

ECHA (2015). Recommendation of the BPC ad hoc working group on environmental exposure. Defaults for laundry washing frequency for the calculation of emissions of in-can preservatives (PT 6.1). Word-document.

ECOSAR, US-EPA (s.d.) ECOlogical Structure-Activity Relationship Model Version 2.0, U.S. Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.

EMPODAT, NORMAN. (s.d.). EMPODAT: database of geo-referenced monitoring and bio-monitoring data on emerging substances in air, water and soil. Export van data op 18 oktober 2019 op <https://www.norman-network.com/nds/empodat/chemicalSearch.php>.

Goldsmith, M.-R., C.M. Grulke, R.D. Brooks, T.R. Transue, Y.M. Tan, A. Frame, R. Edwards, P.P. Egeghy, D.T. Chang, R. Tornero-Velez, K. Isaacs, A. Wang, J.C. Johnson, K. Holm, M. Reich, J. Blackwood, D. Vallerio, L. Phillips, M. Phillips, J. Wambaugh, R. Judson, H. Ozkaynak, T. Buckley, C.C. Dary (2014). Development of a consumer product ingredient database for chemical exposure screening and prioritization. *Food and Chemical Toxicology*, Vol. 65, pp. 269-279.

HERA (2005), HERA - Human & Environmental Risk Assessment on Ingredients of Household Cleaning Products. Guidance Document Methodology.

James, C.A., J.M. Brandenberger, M. Dutch, J. Hardy, D. Lester, D. Norton, S.M. O'Neill, S. Redman, I.R. Schultz, C. Sullivan, J.W. West (2015). Contaminants of emerging concern: A prioritization framework for monitoring in Puget Sound.

Li, D. & S. Suh (2019). Health risks of chemicals in consumer products: A review. *Environment International*. Vol. 123, pp. 580-587.

Osté, L., A. Derksen, E. Smit, R. Berbee, T. ter Laak, N. van Duijnhoven, D. ten Hulscher (2017). Naar een strategie voor opkomende stoffen. Deltares-rapport 1230099-007.

Phillips, K.A., A. Yau, K.A. Favela, K.K. Isaacs, A. McEachran, C. Grulke, A.M. Richard, A.J. Williams, J.R. Sobus, R.S. Thomas, J.F. Wambaugh (2018). Suspect screening analysis of chemicals in consumer products. *Environ. Sci. Technol.*, Vol. 52 (5), pp. 3125-3135.

Posthuma, L., D. de Zwart, L. Osté, R. van der Oost, J. Postma (2016). Ecologische sleutelfactor toxiciteit. Deel 1: Methode voor het in beeld brengen van de effecten van giftige stoffen in oppervlaktewater. STOWA rapport 2016-15 A.

Rotsidou, M. & M.D. Scrimshaw (2015). An approach for prioritizing “down-the-drain” chemicals used in the household. *Int. J. Environ. Res. Public Health*, Vol. 12, pp. 1351-1367.

Sjerps, R., T. ter Laak, A. van Wezel (2014). Prioriteren van chemische bedreigingen voor de (drink)waterketen. KWR Rapport BTO 2014.006. KWR Watercycle Research Institute, Nieuwegein.

Soeteman-Hernández, L.G., E.A. Hogendoorn, J. Bakker, F.A. van Broekhuizen, N.G.M. Palmén, Y.B. de Bruin, M. Kooi, D.T.H.M. Sijm, T.P. Traas (2018). An approach to identify, prioritise and provide regulatory follow-up actions for new or emerging risks of chemicals for workers, consumers and the environment, *Int. J. Risk Assessment and Management*, Vol. 21(3), pp. 248–269.

Stempel, S., M. Scheringer, C.A. Ng, K. Hungerbühler (2012). Screening for PBT chemicals among the “existing” and “new” chemicals of the EU. *Environ. Sci. Technol.*, Vol. 46, pp. 5680-5687.

US EPA (2012). Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.11. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.

Van der Velden-Slootweg, T. & A. Bannink (2018). An update of the lists with compounds that are relevant for the production of drinking water from the river Meuse - 2018. RIWA-Meuse report 201809.

Van Gils et al. (in concept). Europe-wide assessment of ecological risks of mixtures of emerging pollutants by integrated emission, fate, hydrological and impact modelling.

Woutersen, M., K. Smit, W. ter Burg, B. Bokkers, G. Schuur (2015). Prioritisation tool for chemical substances in consumer products. RIVM Report 2015-0194.