



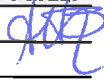
**Verbeterde schatting van log  $K_{oc}$ ,  
BCF en log  $K_{ow}$  waarden voor  
SEDISOIL stoffen**

Paul van Noort

1202337-004

**Titel**Verbeterde schatting van  $\log K_{oc}$ , BCF en  $\log K_{ow}$  waarden voor SEDISOIL stoffen**Opdrachtgever**  
Waterdienst**Project**  
1202337-004**Kenmerk**  
1202337-004-BGS-0021**Pagina's**  
29**Samenvatting**

Ten behoeve van de SEDISOIL en het SEDIAS instrumentaria zijn  $\log K_{oc}$  en  $\log K_{ow}$  waarden berekend uit voornamelijk Abraham solvation vergelijkingen uit de literatuur. Voor stoffen waarvoor geen Abraham solvation parameters beschikbaar zijn, zijn  $\log K_{oc}$  en  $\log K_{ow}$  geschat via molekuulstructuur-activiteitsrelaties (QSARs). Voor  $\log BCF$  was nog geen Abraham solvation vergelijking beschikbaar. Deze is in dit rapport afgeleid uit 223 BCF literatuurdata. Voor die stoffen waarvoor geen Abraham solvation parameters beschikbaar waren zijn  $\log BCF$  waarden berekend langs dezelfde QSAR benadering als voor de  $\log K_{oc}$  berekeningen.

Versie	Datum	Auteur	Paraaf	Review	Paraaf	Goedkeuring	Paraaf
	okt. 2010	Paul van Noort		Jasperien de Weert		Hilde Passier	

**Status**  
definitief

## Inhoud

<b>1</b>	<b>Inleiding</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>De berekening van log <math>K_{oc}</math> en log <math>K_{ow}</math> waarden</b>	<b>2</b>
2.1	Verbindingen met Abraham solvation parameters	2
2.2	Verbindingen zonder Abraham solvation parameters	3
<b>3</b>	<b>De berekening van log BCF waarden</b>	<b>5</b>
3.1	Verbindingen met Abraham solvation parameters	5
3.2	Verbindingen zonder Abraham solvation parameters	5
<b>4</b>	<b>Conclusies</b>	<b>7</b>
<b>5</b>	<b>Referenties</b>	<b>27</b>
<b>6</b>	<b>Referenties bij tabel 2</b>	<b>28</b>

## 1 Inleiding

In Bijlage K van de recente concept-technische handleiding Sedisoil staan voor de organische verbindingen waarden voor  $\log K_{oc}$  en  $\log K_{ow}$  aangegeven. Echter, in dit concept staat dat voor veel  $\log K_{ow}$  waarden de bron niet is aangegeven en voor  $\log K_{oc}$  waarden zijn helemaal geen bronnen vermeld. Voor een schatting van de  $K_{oc}$  wordt in het concept een generieke beschrijving,  $K_{oc} = 0.411K_{ow}$  voorgesteld. Deze beschrijving is echter onnauwkeurig omdat vele organische verbindingen in Sedisoil divers van structuur zijn en polaire en/of (min of meer) zure of basische groepen bevatten. Hierdoor vertonen deze groepen specifieke interacties met water, *n*-octanol en organisch materiaal in bodems en sedimenten dat een generieke beschrijving onnauwkeurig maakt. Om een betere schatting te maken van de  $\log K_{oc}$  kan gebruik gemaakt worden van de Abraham solvation vergelijking. In deze vergelijking is de invloed van de verschillende moleculaire interacties van een organische verbinding met zijn directe omgeving op de grootte van de verdelingscoëfficiënt  $K$  van de verbinding over de twee fases opgenomen.

In dit rapport zijn  $\log K_{oc}$  en  $\log K_{ow}$  waarden afgeleid met de Abraham solvation vergelijking. Voor stoffen waarvan de Abraham solvation parameters niet bekend zijn, zijn  $\log K_{oc}$  en  $\log K_{ow}$  waarden geschat via structuur-activiteitsrelaties. Voor  $\log BCF$  waarden is een Abraham solvation vergelijking afgeleid als alternatief voor de schatting van  $\log BCF$  uit  $\log K_{ow}$  waarden. Voor stoffen waarvan de Abraham solvation parameters niet bekend zijn is eveneens de  $\log BCF$  geschat via structuur-activiteitsrelaties.

## 2 De berekening van log $K_{oc}$ en log $K_{ow}$ waarden

### 2.1 Verbindingen met Abraham solvation parameters

De Abraham solvation vergelijking voor de berekening van de verdelingscoëfficiënt van een organische verbinding over twee fases staat gegeven in vergelijking 1

$$\log K = c_1 + e_1E + s_1S + a_1A + b_1B + vV \quad (1)$$

Hierin is  $E$  een stofspecifiek kenmerk voor de mogelijkheden voor niet-specifieke van der Waalskrachten in de interactie met de (oplosmiddel)omgeving,  $S$  beschrijft de interacties als gevolg van al dan niet geïnduceerde dipool-dipool wisselwerkingen,  $A$  en  $B$  beschrijven de interacties als gevolg van donerende respectievelijk accepterende waterstofbrug-vorming,  $V$  is een maat voor de grootte van de organische verbinding en is daardoor bepalend voor de mate van verbreking van oplosmiddel-oplosmiddel interacties. De coëfficiënten aangegeven met kleine letters zijn specifiek voor elk tweefasen systeem. Voor duizenden stoffen zijn de Abraham solvation parameters beschikbaar evenals de coëfficiënten voor veel tweefasen systemen.

De Abraham solvation vergelijking werd oorspronkelijk voornamelijk toegepast in de farmacochemie, maar vindt inmiddels ook enig toepassing in de milieuchemie. Recent is de Abraham solvation vergelijking afgeleid voor de verdeling van organische verbindingen over water en amorf organisch materiaal, volgens een lineaire isotherm, en aangeduid met  $K_{oc}$ , [1]:

$$\begin{aligned} \text{Log } K_{oc} = & \\ & -0.42(0.14) + 0.53(0.08)E - 0.48(0.15)S - 0.28(0.14)A - 2.46(0.15)B + 3.25(0.10)V \\ n = 117, r^2 = 0.967, \text{ standaard fout} = 0.27 & \quad (2) \end{aligned}$$

De standaardfout voor de afzonderlijke coëfficiënten staat tussen haakjes. Voor het merendeel van de organische verbindingen in Sedisoil zijn de Abraham solvation parameters bekend. Deze verbindingen met de solvation parameters staan weergegeven in Tabel 1. De Abraham solvation parameters zijn afkomstig uit referenties 1, 5, 6, 7, 8 en 9. Voor deze stoffen zijn de log  $K_{oc}$  waarden berekend met vergelijking 2. Hun log  $K_{ow}$  waarden zijn afgeleid met vergelijking 3 uit [2].

$$\text{Log } K_{ow} = 0.088 + 0.562E - 1.054S + 0.034A - 3.46B + 3.814V \quad (3)$$

## 2.2 Verbindingen zonder Abraham solvation parameters

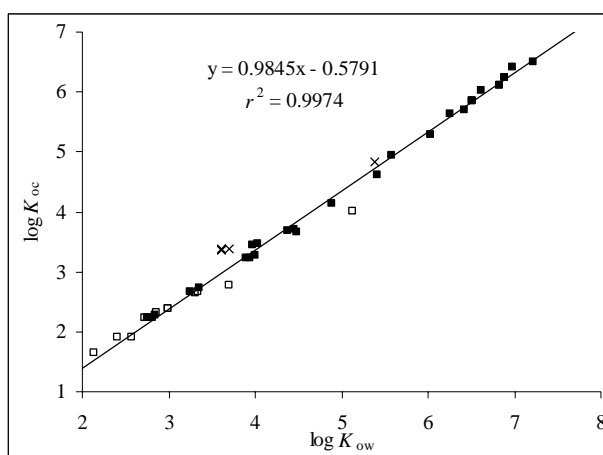
Voor de stoffen waarvan geen Abraham solvation parameters bekend zijn in de literatuur zijn de  $\log K_{oc}$  waarden geschat via structuur-activiteitsrelaties.

De  $\log K_{oc}$  waarden voor de 12 chloorfenolen waarvoor Abraham solvation parameters beschikbaar zijn (Tabel 1), blijken een functie van het totaal aantal chlooratomen ( $N_{Cl}$ ) en het aantal *ortho*-chlooratomen ( $N_{ortho}$ ) zoals aangegeven in vergelijking 4.

$$\begin{aligned} \log K_{oc} &= 1.26(0.04) + 0.66(0.02)N_{Cl} - 0.23(0.04)N_{ortho} \\ r^2 &= 0.991, \text{ standaardfout} = 0.07 \end{aligned} \quad (4)$$

Met deze vergelijking kunnen de  $\log K_{oc}$  waarden geschat worden voor de overige 8 chloorfenolen waarvan de parameters niet bekend zijn.

De  $\log K_{oc}$  waarden van chloorbenzenen en PCBs, afgeleid met vergelijking 2, blijken sterk te correleren met  $\log K_{ow}$  waarden afgeleid met vergelijking 3 (Figuur 1 en vergelijking 5). Dit is niet verbazingwekkend vanwege het ontbreken van zowel sterk polaire groepen als van sterke waterstofbrugvormende groepen in deze chloorbenzenen en PCBs. Voor endrin en hexachloorcyclohexanen wijken ook de waarden weinig af van de regressielijn in Figuur 1. Daarom kan vergelijking 5 gebruikt worden voor het schatten van  $\log K_{oc}$  waarden voor DDT en zijn metabolieten en ook voor aldrin, heptachloor en heptachloorepoxide uit  $\log K_{ow}$  waarden uit [3].



Figuur 1.  $\log K_{oc}$  versus  $\log K_{ow}$  voor chloorbenzenen en PCBs (gesloten vierkanten), chloorfenolen (open vierkanten) en endrin en hexachloorcyclohexanen (kruisjes). De lijn is de lineaire regressielijn voor chloorbenzenen en PCBs.

$$\log K_{oc} = 0.9845 \log K_{ow} - 0.5791 \quad (5)$$

Uit Figuur 1 blijkt dat ook waarden voor chloorfenolen dicht bij de regressielijn liggen. In vergelijking met de chloorfenolen zijn PCDFs en PCDDs minder polair en hebben minder neiging tot waterstofbrugvorming. Voor PCDDs en PCDFs zijn afwijkingen van de regressielijn zeer waarschijnlijk minder groot dan voor chloorfenolen. Daarom zijn  $\log K_{oc}$

waarden voor PCDFs en PCDDs geschat met vergelijking 5 uit log  $K_{ow}$  waarden geschat volgens [4].

Log  $K_{oc}$  waarden voor de 3 ftalaten DBP, DEP en DMP waarvoor Abraham solvation parameters beschikbaar zijn, zijn sterk gecorreleerd zowel met aantal C atomen in de estergroep,  $N_C$ , (vergelijking 6) als met log  $K_{ow}$  (vergelijking 7).

$$\text{Log } K_{oc} = 0.4347N_C + 0.9348 \quad r^2 = 0.9999 \quad (6)$$

$$\text{Log } K_{oc} = 0.8452\log K_{ow} + 0.5831 \quad r^2 = 0.9999 \quad (7)$$

De log  $K_{oc}$  waarden voor dihexyl-, di-isodecyl- en bis(2-ethylhexyl) ftalaat, zonder Abraham solvation parameters, zijn geschat met vergelijking 6. Die voor benzyl butyl ftalaat is geschat met vergelijking 7 uit de log  $K_{ow}$  waarde in [3] omdat benzyl butyl ftalaat niet goed past in de homologe reeks van vergelijking 6.

Voor enkel stoffen waren geen Abraham solvation parameters beschikbaar en kan ook geen schatting van de log  $K_{oc}$  gemaakt worden. Voor maneb, TBT en de 3 organotinverbindingen is een schatting niet mogelijk omdat deze verbindingen op een andere manier dan aan organisch materiaal sorberen aan bodem en sediment. Voor methylzinfos, carbofuran, 2-methyl-4-chloorfenoxiazijnzuur, diethyleenglycol, tetrahydrothiofeen, endosulfansulfaat en de groep PBDEs 28, 47, 99, 100, 153, en 154 kon geen alternatieve manier voor schatting van log  $K_{oc}$  waarden bedacht worden.

### 3 De berekening van log BCF waarden

#### 3.1 Verbindingen met Abraham solvation parameters

In Sedisoil worden via BCFs, vermoedelijk geschat uit  $\log K_{ow}$ , concentraties in organismen berekend. Deze BCFs, wanneer berekend uit  $\log K_{ow}$ , kunnen behept zijn met zeer grote onzekerheden (zie ook Technische handleiding Sedisoil). Een benadering uitgaande van de Abraham solvation vergelijking, zou een grote verbetering kunnen opleveren indien de BCF Abraham solvation vergelijking beschikbaar zou zijn. Omdat deze in de literatuur nog niet voorhanden was is de vergelijking voor  $\log BCF$  zelf afgeleid (vergelijking 8). Deze afleiding is uitgevoerd op basis van 223 waarden (Tabel 2) voor de BCF en de membraan-water verdeling ( $K_{mw}$ ). Data voor de membraan-water verdeling zijn toegevoegd om daardoor een bredere stofgroepverdeling te krijgen. Het gemiddelde verschil tussen de experimentele waarde en de uit vergelijking 8 geschatte waarde is 0.03, waardoor vergelijking 8 geen systematische over of onderschatting geeft van noch  $\log BCF$ , noch  $\log K_{mw}$ .

$$\begin{aligned} \text{Log BCF} = & \\ & 0.219(0.096) + 0.918(0.049)E - 1.014(0.087)S + 0.286(0.091)A - \\ & 3.670(0.084)B + 3.544(0.099)V \end{aligned} \quad (8)$$

$N = 223, r^2 = 0.974, \text{standaardfout} = 0.33 F = 1623$

De berekende  $\log BCF$  waarden staan weergegeven in Tabel 1.

#### 3.2 Verbindingen zonder Abraham solvation parameters

Net als bij de  $\log K_{oc}$  berekeningen is voor die stoffen waarvoor geen Abraham descriptoren beschikbaar zijn, de  $\log BCF$  via structuur-activiteitsrelaties of op grond van specifieke BCF- $K_{ow}$  relaties geschat. Voor de  $\log BCF$  berekeningen zijn hiervoor de onderstaande vergelijkingen gebruikt.

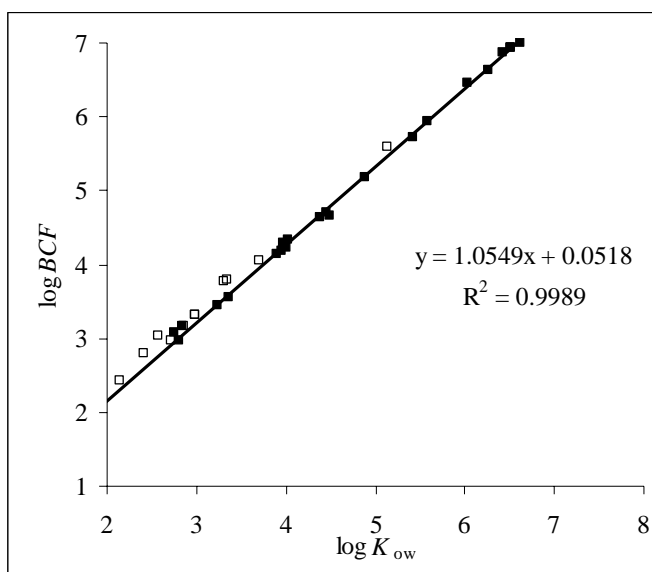
Voor chloorfenolen:

$$\begin{aligned} \text{Log BCF} = & 1.96(0.06) + 0.90(0.04)N_{Cl} - 0.39(0.06)N_{ortho} \\ r^2 = & 0.987, \text{standaardfout} = 0.12 \end{aligned} \quad (9)$$

Voor chloorbenzenen en PCBs (Fig. 2)

$$\text{Log BCF} = 1.0549 \log K_{ow} - 0.0518 \quad r^2 = 0.9989 \quad (10)$$





Figuur 2. Log BCF versus log K<sub>ow</sub> voor chloorbenzenen en PCBs (gesloten vierkanten) en chloorfenolen (open vierkanten). De lijn is de lineaire regressielijn voor chloorbenzenen en PCBs.

Voor ftalaten:

$$\text{Log BCF} = 0.4695N_C + 0.401 \quad r^2 = 1.0000 \quad (11)$$

$$\text{Log BCF} = 0.9128 \log K_{ow} + 0.0211 \quad r^2 = 1.0000 \quad (12)$$

## 4 Conclusies

Voor nauwkeurigere  $\log K_{oc}$ ,  $\log K_{ow}$  en  $\log BCF$  waarden is gebruik gemaakt van de Abraham solvation equation. Voor een groot aantal organische verbindingen zijn de parameters die nodig zijn in deze vergelijking in de literatuur beschikbaar en kunnen de waarden berekend worden. Voor een groot aantal verbindingen waarvoor geen Abraham solvation parameters beschikbaar is, zijn de waarden te schatten op basis van molekuulstructuur-activiteitsrelaties. Hierdoor kan voor deze verbindingen eveneens nauwkeurigere waarden verkregen worden. Er zijn enkele verbindingen waarvan geen parameters bekend zijn en ook geen alternatieve afleiding beschikbaar is. Voor deze verbindingen is een nauwkeurigere schatting van  $\log K_{oc}$ ,  $\log K_{ow}$  en  $\log BCF$  waarden momenteel niet mogelijk.

Tabel 1. Verbeterde schattingen van log  $K_{oc}$  en log  $K_{ow}$  waarden voor organische verbindingen in Sedisoil (bijlage K) evenals log BCF schattingen en Abraham descriptor waarden.

Stofnaam	Bijlage K waarden		Nieuwe schattingen						E	S	A	B	V
	log $K_{ow}$	log $K_{oc}$	log $K_{ow}$	Bron	log $K_{oc}$	Vergelijking	log BCF	Vergelijking					
benzeen	2,13	1,87	2.12	Eq 3	1.63	2	2.27	7	0.608	0.511	0	0.144	0.716
1,2-dihydroxybenzeen (catechol)	0,88	1,85	0.92	Eq 3	0.77	2	1.32	7	0.97	1.07	0.85	0.52	0.834
dodecylbenzeen (i)	8,65		8.57	Eq 3	7.11	2 <sup>a</sup>	8.25	7 <sup>a</sup>	0.57	0.47	0	0.15	2.407
ethylbenzeen	3,15	2,53	3.23	Eq 3	2.57	2	3.30	7	0.613	0.499	0	0.139	0.998
fenol	1,46	1,52	1.6	Eq 3	1.16	2	1.94	7	0.769	0.759	0.716	0.319	0.775
1,4-dihydroxybenzeen (hydrochinon)	0,59	1,95	0.59	Eq 3	0.55	2	1.07	7	1.063	1.27	1.06	0.57	0.834
2-chlooraniline	1,90	2,54	2.13	Eq 3	1.85	2	2.40	7	1.026	0.965	0.253	0.321	0.939
o-cresol	1,95	1,59	2.02	Eq 3	1.56	2	2.29	7	0.774	0.745	0.621	0.357	0.916
m-cresol	1,96	1,72	2.03	Eq 3	1.56	2	2.33	7	0.81	0.775	0.672	0.351	0.916
p-cresol	1,94	1,64	2.02	Eq 3	1.55	2	2.31	7	0.793	0.769	0.664	0.353	0.916
1,2-xyleen	3,12	2,18	3.07	Eq 3	2.47	2	3.15	7	0.663	0.549	0	0.178	0.998
1,3-xyleen	3,20	2,41	3.1	Eq 3	2.47	2	3.16	7	0.625	0.507	0	0.178	0.998
1,4-xyleen	3,15	2,66	3.17	Eq 3	2.52	2	3.23	7	0.615	0.494	0	0.16	0.998
1,3-dihydroxybenzeen (recorcinol)	0,80	1,14	0.8	Eq 3	0.6	2	1.25	7	0.98	1	1.1	0.58	0.834
tolueen	2,73	2,09	2.69	Eq 3	2.1	2	2.80	7	0.606	0.499	0	0.139	0.857
antracene	4,45	4,30	4.46	Eq 3	4.07	2	4.88	7	1.923	1.309	0	0.253	1.454
benzo(a)antracene	5,76	5,79	5.79	Eq 3	5.46	2	6.49	7	2.992	1.7	0	0.33	1.823
benzo(a)pyreen	6,13	5,82	5.97	Eq 3	5.82	2	6.85	7	3.625	1.98	0	0.44	1.954
benzo(g,h,i)peryleen	6,63	6,43	6.73	Eq 3	6.47	2	7.73	7	4.073	1.9	0	0.46	2.084
benzo(k)fluorantheen	6,11	6,24	6.02	<sup>b</sup>	5.75	<sup>b</sup>	6.74	<sup>b</sup>	3.19	1.82	0	0.4	1.95
chryseen	5,81	5,72	5.78	Eq 3	5.47	2	6.49	7	3.027	1.73	0	0.33	1.823

Stofnaam	Bijlage K waarden		Nieuwe schattingen						E	S	A	B	V
	log $K_{ow}$	log $K_{oc}$	log $K_{ow}$	Bron	log $K_{oc}$	Vergelijking	log BCF	Vergelijking					
fenanthreen	4,46	4,23	4.4	Eq 3	4.05	2	4.85	7	1.997	1.316	0	0.279	1.454
fluorantheen	5,16	5,18	4.97	Eq 3	4.61	2	5.50	7	2.292	1.486	0	0.255	1.585
indeno(1,2,3-c,d)pyreen	6,70	6,02	6.73	c	6.47	c	7.73	c					
naftaleen	3,30	2,98	3.3	Eq 3	2.85	2	3.58	7	1.24	0.906	0	0.193	1.085
1,1,1-trichloorethaan	2,49	1,97	2.44	Eq 3	1.82	2	2.49	7	0.369	0.41	0	0.09	0.757
1,1,2-trichloorethaan	1,89	1,97	2.09	Eq 3	1.62	2	2.23	7	0.499	0.68	0.13	0.13	0.757
1,1-dichloorethaan	1,79	1,54	1.83	Eq 3	1.31	2	1.93	7	0.322	0.49	0.1	0.1	0.635
1,1-dichlooretheen	2,13	1,78	2.02	Eq 3	1.41	2	2.12	7	0.362	0.34	0	0.05	0.592
1,2-dichloorethaan	1,48	1,49	1.69	Eq 3	1.26	2	1.83	7	0.416	0.64	0.1	0.11	0.635
cis-1,2-dichlooretheen	1,27	1,82	1.78	Eq 3	1.29	2	1.95	7	0.436	0.61	0.11	0.05	0.592
trans-1,2-dichlooretheen	1,09	1,81	1.98	Eq 3	1.38	2	2.13	7	0.425	0.41	0.09	0.05	0.592
1,2-dichloorpropaan	1,99	1,58	2.25	Eq 3	1.71	2	2.33	7	0.371	0.6	0.1	0.11	0.776
1,3-dichloorpropaan	1,99	1,58	1.91	Eq 3	1.54	2	1.97	7	0.408	0.74	0	0.17	0.776
dichloormethaan	1,25	1,22	1.42	Eq 3	0.97	2	1.59	7	0.387	0.57	0.1	0.05	0.494
tetrachlooretheen (Per)	3,40	2,42	3.18	Eq 3	2.43	2	3.33	7	0.639	0.44	0	0	0.837
tetrachloormethaan (Tetra)	2,83	1,75	2.76	Eq 3	2.04	2	2.87	7	0.458	0.38	0	0	0.739
trichlooretheen (Tri)	2,42	2,06	2.62	Eq 3	1.91	2	2.77	7	0.524	0.37	0.08	0.03	0.715
trichloormethaan (chloroform)	1,97	1,66	2.1	Eq 3	1.48	2	2.27	7	0.425	0.49	0.15	0.02	0.617
chlooretheen	1,62	1,56	1.45	Eq 3	0.94	2	1.55	7	0.258	0.38	0	0.05	0.47
chloorbenzeen	2,84	2,34	2.81	Eq 3	2.23	2	2.98	7	0.718	0.656	0	0.056	0.839
1,2-dichloorbenzeen	3,43	2,60	3.24	Eq 3	2.66	2	3.45	7	0.872	0.771	0	0.054	0.961
1,4-dichloorbenzeen	3,44	2,82	3.36	Eq 3	2.73	2	3.55	7	0.825	0.75	0	0.02	0.961
1,2,3-trichloorbenzeen	4,05	3,23	3.89	Eq 3	3.24	2	4.13	7	1.03	0.86	0	0	1.084
1,2,4-trichloorbenzeen	4,02	3,28	3.95	Eq 3	3.24	2	4.17	7	1.022	0.748	0	0.018	1.084
1,3,5-trichloorbenzeen	4,19	3,98	4	Eq 3	3.27	2	4.22	7	0.98	0.73	0	0	1.084

Stofnaam	Bijlage K waarden		Nieuwe schattingen						E	S	A	B	V
	log $K_{ow}$	log $K_{oc}$	log $K_{ow}$	Bron	log $K_{oc}$	Vergelijking	log BCF	Vergelijking					
1,2,3,4-tetrachloorbenzeen	4,60	3,91	4.38	Eq 3	3.68	2	4.64	7	1.18	0.92	0	0	1.2064
1,2,3,5-tetrachloorbenzeen	4,56	3,57	4.45	Eq 3	3.71	2	4.70	7	1.16	0.85	0	0	1.2064
1,2,4,5-tetrachloorbenzeen	4,64	3,77	4.48	Eq 3	3.67	2	4.67	7	0.975	0.714	0	0	1.2064
pentachloorbenzeen	5,17	3,92	4.89	Eq 3	4.14	2	5.18	7	1.33	0.96	0	0	1.329
hexachloorbenzeen	5,73	4,06	5.42	Eq 3	4.61	2	5.73	7	1.49	0.99	0	0	1.451
2-chloorfenol	2,15	1,97	2.14	Eq 3	1.65	2	2.43	7	0.882	0.668	0.538	0.342	0.898
3-chloorfenol	2,50	2,56	2.41	Eq 3	1.91	2	2.81	7	0.909	1.06	0.69	0.15	0.898
4-chloorfenol	2,39	1,93	2.57	Eq 3	1.9	2	3.03	7	1.016	0.794	0.886	0.205	0.898
2,3-dichloorfenol	2,84	2,56	2.85	Eq 3	2.33	2	3.17	7	0.96	0.94	0.48	0.2	1.02
2,4-dichloorfenol	3,06	2,54	2.99	Eq 3	2.38	2	3.32	7	0.96	0.84	0.53	0.19	1.02
2,5-dichloorfenol	3,06	2,83	2.99	Eq 3	2.38	2	3.32	7	0.96	0.88	0.56	0.18	1.02
2,6-dichloorfenol	2,75	2,63	2.72	Eq 3	2.24	2	2.98	7	0.9	0.9	0.38	0.24	1.02
3,4-dichloorfenol	3,33	2,90	3.31	Eq 3	2.65	2	3.77	7	1.02	1.2	0.74	0	1.02
3,5-dichloorfenol	3,62	2,34	3.34	Eq 3	2.66	2	3.80	7	1.02	1.17	0.77	0	1.02
2,3,4-trichloorfenol	3,46	3,08			3.02	4	4.26	9					
2,3,5-trichloorfenol	3,58	3,16			3.02	4	4.26	9					
2,3,6-trichloorfenol	3,77	3,28			2.79	4	3.86	9					
2,4,5-trichloorfenol	3,72	3,36			3.02	4	4.26	9					
2,4,6-trichloorfenol	3,69	3,47	3.7	Eq 3	2.78	2	4.06	7	0.986	0.53	0.84	0.22	1.14
3,4,5-trichloorfenol	4,01	3,54			3.24	4	4.65	9					
2,3,4,5-tetrachloorfenol	4,21	3,87			3.68	4	5.15	9					
2,3,4,6-tetrachloorfenol	4,45	3,10			3.45	4	4.76	9					
2,3,5,6-tetrachloorfenol	3,88	3,34			3.45	4	4.76	9					
pentachloorfenol	5,12	3,20	5.13	Eq 3	4.02	2	5.60	7	1.218	0.88	0.96	0.01	1.387
4-chloor-2-methylfenol (i)	2,78	1,86	2.85	Eq 3	2.27	2	3.16	7	0.89	0.91	0.63	0.22	1.038

Stofnaam	Bijlage K waarden		Nieuwe schattingen						E	S	A	B	V
	log $K_{ow}$	log $K_{oc}$	log $K_{ow}$	Bron	log $K_{oc}$	Vergelijking	log BCF	Vergelijking					
4-chloor-3-methylfenol (i)	3,10	1,86	2.75	Eq 3	2.23	2	3.09	7	0.92	1.02	0.65	0.22	1.038
1-chloornaftaleen	4,00	3,42	4.02	Eq 3	3.47	2	4.34	7	1.419	0.951	0	0.135	1.2078
2-chloornaftaleen	4,14	3,42	3.97	Eq 3	3.45	2	4.30	7	1.45	1	0	0.14	1.2078
2,4,4'-trichloorbifenyl (PCB 28)	5,62	4,61	5.58	Eq 3	4.94	2	5.94	7	1.75	1.35	0	0.055	1.606
2,2',5,5'-tetrachloorbifenyl (PCB 52)	6,09	4,70	6.03	Eq 3	5.3	2	6.45	7	1.92	1.33	0	0	1.642
2,2',4,5,5'-pentachloorbifenyl (PCB 101)	6,80	5,53	6.43	Eq 3	5.7	2	6.87	7	2.06	1.47	0	0	1.765
2,3',4,4',5-pentachloorbifenyl (PCB 118)	7,12	6,35	6.51	Eq 3	5.86	2	6.93	7	2.01	1.67	0	0	1.85
2,2',3,4,4',5'-hexachloorbifenyl (PCB 138)	7,44	5,71	6.82	Eq 3	6.11	2	7.29	7	2.2	1.61	0	0	1.887
2,2',4,4',5,5'-hexachloorbifenyl (PCB 153)	7,75	5,87	6.82	Eq 3	6.11	2	7.29	7	2.2	1.61	0	0	1.887
2,2',3,4,4',5,5'-heptachloorbifenyl (PCB 180)	8,27	5,99	7.22	Eq 3	6.51	2	7.71	7	2.34	1.75	0	0	2.009
som 2,4'- en 4,4'-DDD	6,22	5,18	5.75	Ref 3	5.08	5	6.01	10					
som 2,4'- en 4,4'-DDE	6,96	5,35	5.75	Ref 3	5.08	5	6.01	10					
som 2,4'- en 4,4'-DDT	6,91	5,58	6.19	Ref 3	5.51	5	6.48	10					
aldrin	6,50	3,94	6.5	Ref 3	5.82	5	6.02	10					
dieldrin	5,40	3,99			4.84	<sup>d</sup>	5.13	<sup>d</sup>					
endrin	5,20	3,95	5.38	Eq 3	4.84	2	5.13	7	0.54	1.28	-0.01	0.38	2.007
isodrin					5.82	<sup>e</sup>	6.02	<sup>e</sup>					
alfa-hexachloorcyclohexaan	3,80	3,33	3.7	Eq 3	3.39	2	3.80	7	1.45	0.73	0	0.71	1.5798
beta-hexachloorcyclohexaan	3,78	3,37	3.61	Eq 3	3.36	2	3.72	7	1.45	0.88	0	0.69	1.5798
gamma-hexachloorcyclohexaan	3,72	2,99	3.62	Eq 3	3.37	2	3.73	7	1.45	0.91	0	0.68	1.5798

Stofnaam	Bijlage K waarden		Nieuwe schattingen						E	S	A	B	V
	log $K_{ow}$	log $K_{oc}$	log $K_{ow}$	Bron	log $K_{oc}$	Vergelijking	log BCF	Vergelijking					
(lindaan)													
atrazine	2,61	2,20	2.28	Eq 3	2.45	2	2.16	7	0.94	1.2	0.01	0.94	1.62
methylazinfos (i)	2,75	3,18											
carbaryl	2,36	2,27		Eq 3	2.7	2	2.96	7	1.71	1.34	0.4	0.83	1.541
carbofuran	2,32	1,64											
chlooraan	6,16	4,60	6.00	Ref 3	5.33	5	6.28	10					
endosulfan	3,83	3,11	4.43	Eq 3	4.05	2	4.40	7	1.26	0.88	0.47	0.98	2.082
heptachloor	6,10	4,45	5.27	Ref 3	4.61	5	5.51	10					
heptachloorepoxide	4,98	2,94	5.5	EPIWIN	4.84	5	5.75	10					
maneb	0,62	8,00			-		-						
2-methyl-4-chloorfenoxiazijnzuur (MCPA)	3,25	1,78											
bis(tri-n-butyltin)oxide	4,05				-		-						
trifenyln	3,28	4,34			-		-						
trifenylnhydroxide	3,53				-		-						
benzylbutylftalaat	4,73	3,91	4.6	Ref 3	4.47	7	4.22	12					
bis(2-ethylhexyl)ftalaat	7,60	5,37			7.89	6	7.91	11					
dibutylftalaat (DBP)	4,50	2,98	4.53	Eq 3	4.41	2	4.16	7	0.7	1.322	0	0.929	2.27
diethylftalaat (DEP)	2,42	2,64	2.47	Eq 3	2.69	2	2.28	7	0.729	1.465	0	0.869	1.711
dihexylftalaat (DHP)	6,82	4,65			6.15	6	6.04	11					
di-isodecylftalaat (DIDP)	10,36	5,55			9.63	6	9.79	11					
dimethylftalaat (DMP)	1,60	2,25	1.45	Eq 3	1.8	2	1.34	7	0.78	1.41	0	0.88	1.429
N-butylacetaat (i)	1,78	1,58	1.94	Eq 3	1.61	2	1.75	7	0.079	0.57	0	0.438	1.028
N-butanol (i)	0,88	0,76	0.75	Eq 3	0.49	2	0.76	7	0.224	0.44	0.344	0.52	0.731
acrylonitril	0,25	0,94											

Stofnaam	Bijlage K waarden		Nieuwe schattingen						E	S	A	B	V
	log K <sub>ow</sub>	log K <sub>oc</sub>	log K <sub>ow</sub>	Bron	log K <sub>oc</sub>	Vergelijking	log BCF	Vergelijking					
cyclohexanon	0,81	0,99	0.82	Eq 3	0.86	2	0.79	7	0.403	0.895	0	0.53	0.861
diethyleenglycol (i)	-1,47	3,33											
ethylacetaat (i)	0,73	0,73	0.79	Eq 3	0.66	2	0.68	7	0.106	0.62	0	0.45	0.747
glycol (i)	-1,36		-1.38	Eq 3	-1.07	2	-1.22	7	0.404	0.9	0.58	0.78	0.5078
methanal (i)	0,35		-0.51	Eq 3	-0.42	2	-0.48	7	0.208	0.67	0	0.45	0.406
2-propanol (i)	0,05	0,52	0.15	Eq 3	-0.03	2	0.18	7	0.212	0.36	0.33	0.56	0.59
methanol (i)	-0,77		-0.66	Eq 3	-0.76	2	-0.48	7	0.278	0.44	0.43	0.47	0.308
2-butanon (i)	0,29		0.39	Eq 3	0.37	2	0.32	7	0.166	0.662	0	0.496	0.6879
methyl-tertiair-butylether (MTBE) (i)	0,94	1,12	1.26	Eq 3	0.96	2	1.07	7	0.024	0.279	0	0.54	0.8718
pyridine	0,65	1,93	0.29	Eq 3	0.4	2	0.39	7	0.635	0.843	0	0.532	0.675
styreen	2,95	2,58	2.89	Eq 3	2.38	2	3.05	7	0.849	0.671	0	0.177	0.955
tetrahydrofuraan	0,46	0,47	0.44	Eq 3	0.36	2	0.46	7	0.369	0.537	0	0.48	0.622
tetrahydrothiofeen	1,79	1,40											
tribroommethaan	2,40	2,17	2.67	Eq 3	2.1	2	2.99	7	0.974	0.68	0.15	0.06	0.775
1,2,4-trichloordibenzo-p-dioxine	6,35	5,24	5.77	Ref 4	5.1	5	6.03	10					
1,3,6,8-tetrachloordibenzo-p-dioxine	7,10	5,85	6.22	Ref 4	5.54	5	6.51	10					
1-chloordibenzo-p-dioxine	4,75	3,95	4.87	Ref 4	4.22	5	5.09	10					
2,3,7,8-tetrachloordibenzo-p-dioxine	6,80	5,61	6.22	Ref 4	5.54	5	6.51	10					
2,7-dichloordibenzo-p-dioxine	5,75	4,76	5.32	Ref 4	4.66	5	5.56	10					
2,8-dichloordibenzo-p-dioxine	5,63	4,64	5.32	Ref 4	4.66	5	5.56	10					
2-chloordibenzo-p-dioxine	5,00	4,15	4.87	Ref 4	4.22	5	5.09	10					
1,2,3,4,6,7,8-heptachloordibenzo-p-	8,20	6,58	7.57	Ref 4	6.87	5	7.93	10					



Stofnaam	Bijlage K waarden		Nieuwe schattingen						E	S	A	B	V
	log $K_{ow}$	log $K_{oc}$	log $K_{ow}$	Bron	log $K_{oc}$	Vergelijking	log BCF	Vergelijking					
dioxine													
1,2,3,4,7,8-hexachloordibenzo-p-dioxine	7,80		7.12	Ref 4	6.43	5	7.46	10					
1,2,3,6,7,8-hexachloordibenzo-p-dioxine	8,21	6,42	7.12	Ref 4	6.43	5	7.46	10					
1,2,3,7,8,9-hexachloordibenzo-p-dioxine	8,21		7.12	Ref 4	6.43	5	7.46	10					
1,2,3,4,6,7,8,9-octachloordibenzo-p-dioxine	8,20	6,74	8.02	Ref 4	7.32	5	8.41	10					
1,2,3,7,8-pentachloordibenzo-p-dioxine	6,64	6,09	6.67	Ref 4	5.99	5	6.98	10					
2,3,3',4,4'-pentachloorbifenyl (PCB 105)	6,79	6,13	6.51	Eq 3	5.86	2	6.93	7	2.01	1.67	0	0	1.85
2,3',4,4',5-pentachloorbifenyl (PCB 118)	7,12	6,35	6.51	Eq 3	5.86	2	6.93	7	2.01	1.67	0	0	1.85
3,3',4,4',5-pentachloorbifenyl (PCB 126)	7,23	5,94	6.62	Eq 3	6.02	2	7.00	7	1.97	1.86	0	0	1.936
2,3,3',4,4',5-hexachloorbifenyl (PCB 156)	7,60	6,34	6.89	Eq 3	6.25	2	7.32	7	2.14	1.83	0	0	1.973
2,3,3',4,4',5'-hexachloorbifenyl (PCB 157)	7,60	6,26	6.89	Eq 3	6.25	2	7.32	7	2.14	1.83	0	0	1.973
3,3',4,4',5,5'-hexachloorbifenyl (PCB 169)	7,41	6,01	6.98	Eq 3	6.41	2	7.38	7	2.1	2.03	0	0	2.058
3,3',4,4'-tetrachloorbifenyl (PCB 77)	6,63	5,85	6.26	Eq 3	5.64	2	6.62	7	1.84	1.69	0	0	1.814
1,2,3,4,6,7,8,9-octadibenzofuraan	8,60	6,80	8.002	Ref 4	7.3	5	8.39	10					

Stofnaam	Bijlage K waarden		Nieuwe schattingen						E	S	A	B	V
	log $K_{ow}$	log $K_{oc}$	log $K_{ow}$	Bron	log $K_{oc}$	Vergelijking	log BCF	Vergelijking					
(PCDF 135)													
1,2,3,4,6,7,8-heptachloordibenzofuraan (PCDF 131)	7,92	6,52	7.548	Ref 4	6.85	5	7.91	10					
1,2,3,4,7,8,9-heptachloordibenzofuraan (PCDF 134)	7,92	6,52	7.548	Ref 4	6.85	5	7.91	10					
1,2,3,4,7,8-hexachloordibenzofuraan (PCDF 118)	7,81	6,42	7.094	Ref 4	6.4	5	7.43	10					
1,2,3,6,7,8-hexachloordibenzofuraan (PCDF 121)	7,81	6,42	7.094	Ref 4	6.4	5	7.43	10					
1,2,3,7,8,9-hexachloordibenzofuraan (PCDF 124)	7,81	6,42	7.094	Ref 4	6.4	5	7.43	10					
1,2,3,7,8-pentachloordibenzofuraan (PCDF 94)	6,79	5,65	6.64	Ref 4	5.96	5	6.95	10					
2,3,4,6,7,8-hexachloordibenzofuraan(PCDF 130)	7,92	6,42	7.094	Ref 4	6.4	5	7.43	10					
2,3,4,7,8-pentachloordibenzofuraan(PCDF 112)	6,92	5,65	6.64	Ref 4	5.96	5	6.95	10					

Stofnaam	Bijlage K waarden		Nieuwe schattingen						E	S	A	B	V
	log $K_{ow}$	log $K_{oc}$	log $K_{ow}$	Bron	log $K_{oc}$	Vergelijking	log BCF	Vergelijking					
2,3,7,8-tetrachloordibenzofuraan(PCDF 83)	6,53	5,39	6.186	Ref 4	5.51	5	6.47	10					
Stoffen Handleiding beoordelen waterbodem													
acenaphthene			3.99	Eq 3	3.53	2	4.35	7	1.604	1.05	0	0.2	1.259
acenaphthylene			3.59	Eq 3	3.25	2	4.00	7	1.75	1.14	0	0.26	1.21
9H-fluorene			4.14	Eq 3	3.71	2	4.49	7	1.664	1.12	0	0.252	1.3565
benzo(b)fluoranthene			6.03	Eq 3	5.76	2	6.76	7	3.19	1.82	0	0.4	1.954
benzo(j)fluoranthene			6.03	Eq 3	5.76	<sup>b</sup>	6.76	<sup>b</sup>					
dibenz(a,h)anthracene			7.02	Eq 3	6.76	2	7.98	7	4	2.04	0	0.44	2.192
TBT													
Hexachloorbutadien			4.70	Ref 3	4.05	5	4.91	10					
PBDEs 28 47 99 100 153 154													
endosulfansulfaat			3.66	EPIWIN	3.02	5	3.86	10					
alfa-endosulfan			4.43	Eq 3	4.05	2	4.40	7		1.26	0.88	0.47	0.98
telodrin			4.51	EPIWIN	3.86	5	4.71	10					
delta-HCH			3.76	Eq 3	3.48	2	3.88	7		1.45	0.94	0	0.63

<sup>a</sup> Abraham solvation parameters geschat uit waarden voor ethyl-, propyl-, butyl-, pentyl-, hexyl-, en decylbenzeen.

<sup>b</sup> waarden voor benzo[*b*]fluorantheen.

<sup>c</sup> waarden voor benzo[*ghi*]peryleen.

<sup>d</sup> waarde voor endrin.

<sup>e</sup> waarde voor aldrin.

Tabel 2. Experimentele en geschatte membraan-water verdelingscoëfficiënten (log  $K_{mw}$ ) en bioconcentratiefactoren (log BCF) met Abraham descriptoren.

Ref	<u>log <math>K_{mw}</math></u>	log BCF of log $K_{mw}$			E	S	A	B	V
		Experimenteel	Schatting	Vershil					
1	procaine	2.38	1.78	0.60	1.135	1.36	0.25	1.41	1.9767
1	lidocaine	2.39	2.30	0.09	1.01	1.49	0.11	1.27	2.0589
1	propranolol	3.45	3.04	0.41	1.712	1.8	0.31	1.26	2.148
1	ibuprofen	3.80	4.20	-0.40	0.7	0.92	0.6	0.6	1.7771
2	Cyclopentanone	0.30	0.33	-0.03	0.373	0.86	0	0.52	0.72
2	Butan-1-ol	0.54	0.76	-0.22	0.224	0.44	0.344	0.52	0.7309
2	Cyclohexanone	0.54	0.79	-0.25	0.403	0.895	0	0.53	0.8611
2	Cyclopentanol	0.76	0.80	-0.04	0.427	0.54	0.32	0.56	0.763
2	Cyclohexanol	1.03	1.09	-0.06	0.474	0.65	0.237	0.592	0.9041
2	Pentan-1-ol	1.08	1.25	-0.17	0.219	0.44	0.344	0.52	0.8718
2	Hexan-1-ol	1.72	1.75	-0.03	0.21	0.44	0.344	0.52	1.0127
2	Cycloheptanol	1.27	1.81	-0.54	0.513	0.54	0.32	0.58	1.045
2	4-Fluorophenol	2.32	2.00	0.32	0.67	0.97	0.63	0.23	0.7928
2	Heptane-1-ol	2.38	2.25	0.13	0.202	0.44	0.344	0.52	1.1586
2	Cyclooctanol	1.61	2.37	-0.76	0.578	0.54	0.32	0.58	1.186
2	4-Ethylphenol	2.85	2.62	0.23	0.8	0.9	0.55	0.36	1.057
2	Octan-1-ol	2.66	2.73	-0.07	0.199	0.44	0.344	0.52	1.2945
2	4-Isopropylphenol	3.25	3.05	0.20	0.791	0.89	0.55	0.38	1.198
2	4-tert-Butylphenol	3.53	3.46	0.07	0.81	0.89	0.56	0.41	1.339
3	2,4,6-Trichlorophenol	4.26	4.06	0.20	0.986	0.53	0.84	0.22	1.14
4	2-nitrophenol	2.09	2.02	0.07	0.962	1.086	0.05	0.371	0.9493
4	4-nitrophenol	2.72	2.10	0.62	1.07	1.72	0.82	0.26	0.9493

Ref		log BCF of log $K_{mw}$					E	S	A	B	V
		Experimenteel	Schatting	Vershil							
4	2,4-dichlorophenol	3.55	3.32	0.23	0.96	0.84	0.53	0.19	1.02		
4	2-sec-butyl-4,6-dinitrophenol	3.98	3.67	0.31	1.28	1.77	0.13	0.53	1.687		
4	3,4-dichlorophenol	3.82	3.75	0.07	1.02	1.14	0.85	0.03	1.0199		
4	2,4,6-trichlorophenol	4.03	4.06	-0.03	0.986	0.53	0.84	0.22	1.14		
4	pentachlorophenol	5.17	5.60	-0.43	1.218	0.88	0.96	0.01	1.387		
5	4-Chloroaniline	1.53	2.31	-0.78	1.017	1.128	0.366	0.309	0.9386		
6	2-sec-butyl-4,6-dinitrophenol	3.96	3.67	0.29	1.28	1.77	0.13	0.53	1.687		
6	2,4,6-trichlorophenol	3.99	4.06	-0.07	0.986	0.53	0.84	0.22	1.14		
6	pentachlorophenol	5.10	5.60	-0.50	1.218	0.88	0.96	0.01	1.387		
7	Phenanthrene	4.95	4.85	0.10	1.997	1.316	0	0.279	1.4544		
7	Anthracene	5.20	4.88	0.32	1.923	1.309	0	0.253	1.4544		
7	Pyrene	5.64	5.33	0.31	2.165	1.518	0	0.261	1.5846		
7	Fluoranthene	5.51	5.50	0.01	2.292	1.486	0	0.255	1.5846		
7	Benzo[a]anthracenme	6.36	6.49	-0.13	2.992	1.7	0	0.33	1.823		
7	Chrysene	6.33	6.49	-0.16	3.027	1.73	0	0.33	1.823		
7	Benzo[b]fluoranthene	7.05	6.74	0.31	3.19	1.82	0	0.4	1.95		
7	enzo[e]pyrene	7.01	7.18	-0.17	3.62	1.96	0	0.35	1.95		
7	Benzo[ghi]perylene	7.81	7.73	0.08	4.073	1.9	0	0.46	2.084		
7	Dibenzo[a,h]anthracene	7.66	7.98	-0.32	4	2.04	0	0.44	2.192		
8	Monochlorobenzene	3.00	2.98	0.02	0.718	0.656	0	0.056	0.8388		
8	1,2-Dichlorobenzene	3.64	3.45	0.19	0.872	0.771	0	0.054	0.9612		
8	1,4-Dichlorobenzene	3.57	3.55	0.02	0.825	0.75	0	0.02	0.9612		
8	1,3-Dichlorobenzene	3.71	3.68	0.03	0.852	0.692	0	0.008	0.9612		
8	1,4Dibromobenzene	4.30	4.03	0.27	1.15	0.86	0	0.04	1.066		
8	1,2,3-Trichlorobenzene	4.16	4.13	0.03	1.03	0.86	0	0	1.084		
8	1,2,4-Trichlorobenzene	4.20	4.17	0.03	1.022	0.748	0	0.018	1.0836		

Ref		log BCF of log $K_{mw}$							
		Experimenteel	Schatting	Vershil	E	S	A	B	V
8	1,3,5-Trichlorobenzene	4.32	4.22	0.10	0.98	0.73	0	0	1.084
8	1,2,4,5-Tetrachlorobenzene	4.87	4.66	0.21	0.975	0.714	0	0	1.206
8	1,2,3,5-Tetrachlorobenzene	4.91	4.70	0.21	1.16	0.85	0	0	1.206
8	Pentachlorobenzene	5.26	5.18	0.08	1.33	0.96	0	0	1.329
8	Hexachlorobenzene	5.43	5.73	-0.30	1.49	0.99	0	0	1.451
9	Diethyl phthalate	1.77	2.28	-0.50	0.729	1.465	0	0.869	1.7106
9	Progesterone	3.28	3.32	-0.05	1.45	3.29	0	1.14	2.6215
9	4-phenylphenol	3.69	3.64	0.05	1.56	1.41	0.59	0.45	1.383
9	estradiol	3.79	4.08	-0.29	1.8	1.77	0.86	1.1	2.1988
9	dibutyl ftalaat	4.19	4.16	0.03	0.7	1.322	0	0.929	2.27
10	4-Cyanophenol	2.11	1.89	0.22	0.94	1.63	0.8	0.29	0.9298
10	phenol	1.97	1.94	0.03	0.769	0.759	0.716	0.319	0.7751
10	2-Methylphenol	2.45	2.29	0.16	0.774	0.745	0.621	0.357	0.916
10	4-Methylphenol	2.42	2.31	0.11	0.793	0.769	0.664	0.353	0.916
10	3-Methylphenol	2.34	2.33	0.01	0.81	0.775	0.672	0.351	0.916
10	3-Nitrophenol	2.56	2.34	0.22	1.05	1.57	0.79	0.23	0.949
10	2-chlorophenol	2.73	2.43	0.30	0.882	0.668	0.538	0.342	0.8975
10	2,6-Dimethylphenol	2.47	2.51	-0.04	0.773	0.791	0.408	0.402	1.0569
10	4-Ethylphenol	2.88	2.62	0.26	0.8	0.9	0.55	0.36	1.057
10	2-Ethylphenol	2.81	2.67	0.14	0.831	0.84	0.52	0.37	1.057
10	3-Chlorophenol	2.78	2.81	-0.03	0.909	1.06	0.69	0.15	0.898
10	2,6-dichlorophenol	2.84	2.98	-0.14	0.9	0.9	0.38	0.24	1.02
10	4-chlorophenol	2.89	3.03	-0.14	1.016	0.794	0.886	0.205	0.8975
10	3-Trifluoromethylphenol	3.25	3.04	0.21	0.425	0.87	0.72	0.09	0.9691
10	4-Chloro-3-methylphenol	3.29	3.09	0.20	0.92	1.02	0.65	0.22	1.038
10	4-Propylphenol	3.09	3.10	-0.01	0.793	0.88	0.55	0.37	1.1978

Ref		log BCF of log $K_{mw}$			E	S	A	B	V
		Experimenteel	Schatting	Vershil					
10	2-Propylphenol	3.13	3.14	-0.01	0.822	0.86	0.52	0.37	1.198
10	2,4-Dichlorophenol	3.54	3.32	0.22	0.96	0.84	0.53	0.19	1.02
10	2-sec-Butylphenol	3.47	3.44	0.03	0.819	0.91	0.52	0.41	1.339
10	4-tert-Butylphenol	3.43	3.46	-0.03	0.81	0.89	0.56	0.41	1.339
10	2-tert-Butylphenol	3.51	3.47	0.04	0.823	0.92	0.52	0.4	1.339
10	2-Phenylphenol	3.40	3.49	-0.09	1.55	1.4	0.56	0.49	1.383
10	4-Phenylphenol	3.24	3.64	-0.40	1.56	1.41	0.59	0.45	1.383
10	4-tert-Pentylphenol	3.64	3.96	-0.32	0.81	0.89	0.56	0.41	1.48
10	2,4,6-trichlorophenol	3.61	4.06	-0.45	0.986	0.53	0.84	0.22	1.14
11	Lidocaine	2.06	2.30	-0.24	1.01	1.49	0.11	1.27	2.0589
11	Salicylic acid	2.50	2.50	0.00	0.89	0.84	0.71	0.38	0.9904
11	Propranolol	3.24	3.04	0.20	1.712	1.8	0.31	1.26	2.148
12	pyrene	5.15	5.33	-0.18	2.165	1.518	0	0.261	1.5846
13	2-Monochlorobiphenyl	4.83	4.76	0.07	1.49	1.03	0	0.165	1.361
13	2,4'-Dichlorobiphenyl	6.06	5.35	0.71	1.62	1.19	0	0.11	1.483
13	2,2',5,5'-Tetrachlorobiphenyl	6.96	6.45	0.51	1.92	1.33	0	0	1.642
13	2,3,4,5-Tetrachlorobiphenyl	7.15	6.54	0.61	1.88	1.51	0	0	1.728
13	3,3',4,4'-Tetrachlorobiphenyl	6.96	6.62	0.34	1.84	1.69	0	0	1.814
13	2,2',4,4',6,6'-Hexachlorobiphenyl	7.65	7.06	0.59	2.3	1.33	0	0	1.716
13	2,2',3,3',4,4'-Hexachlorobiphenyl	7.88	7.29	0.59	2.2	1.61	0	0	1.887
13	2,2',3,3',4,4',5,5'-Octachlorobiphenyl	8.37	8.13	0.24	2.48	1.89	0	0	2.132
14	butylamine	0.97	0.61	0.36	0.224	0.35	0.16	0.61	0.772
14	2-butoxyethanol	0.83	0.73	0.10	0.201	0.5	0.3	0.83	1.0714
14	1-butanol	0.88	0.94	-0.06	0.267	0.447	0.333	0.48	0.731
14	3-pentanol	1.21	1.09	0.12	0.182	0.406	0.274	0.56	0.872
14	propylacetate	1.25	1.22	0.03	0.1035	0.581	0	0.45	0.88775

Ref		log BCF of log $K_{mw}$					E	S	A	B	V
		Experimenteel	Schatting	Vershil							
14	aniline	0.90	1.60	-0.70	0.996	0.985	0.254	0.41	0.8162		
14	1-hexanol	2.03	1.93	0.10	0.257	0.447	0.333	0.48	1.013		
14	3-nitroaniline	1.37	1.93	-0.56	1.2	1.71	0.4	0.35	0.9904		
14	nitrobenzene	1.85	1.96	-0.11	0.829	1.138	0	0.28	0.891		
14	quinoline	2.03	2.12	-0.09	1.268	0.97	0	0.54	1.044		
14	2-nitrotoluene	2.30	2.56	-0.26	0.866	1.11	0	0.27	1.032		
14	octylamine	3.04	2.58	0.46	0.187	0.35	0.16	0.61	1.3356		
14	dimethylaniline	2.31	2.63	-0.32	0.957	0.84	0	0.41	1.098		
14	chlorobenzene	2.90	3.01	-0.11	0.801	0.654	0	0.07	0.8388		
14	4-Chloro-3-methylphenol	3.34	3.09	0.25	0.92	1.02	0.65	0.22	1.038		
14	p-xylene	3.15	3.20	-0.05	0.587	0.502	0	0.16	0.998		
14	2-Phenylphenol	3.46	3.49	-0.03	1.55	1.4	0.56	0.49	1.383		
14	dibutyl ftalaat	4.74	4.16	0.58	0.7	1.322	0	0.929	2.27		
14	1,3,5-trichlorobenzene	3.95	4.22	-0.27	0.98	0.73	0	0	1.084		
<b>Log BCF</b>											
15	1,3,5-trichlorobenzene	4.00	4.22	-0.22	0.98	0.73	0	0	1.084		
15	hexachlorobenzene	5.68	5.73	-0.05	1.49	0.99	0	0	1.451		
15	1,2,3-trichlorobenzene	4.28	4.13	0.14	1.03	0.86	0	0	1.084		
15	pentachlorobenzene	5.44	5.18	0.26	1.33	0.96	0	0	1.329		
15	1,2,3,4 tetrachlorobenzene	4.92	4.63	0.29	0.942	0.715	0	0	1.2064		
16	2,2',5,5'-Tetrachlorobiphenyl	6.35	6.45	-0.10	1.92	1.33	0	0	1.64224		
16	2,2',5-Trichlorobiphenyl	5.78	5.83	-0.05	1.78	1.19	0	0.055	1.520		
16	Chrysene	6.46	6.49	-0.03	3.027	1.73	0	0.33	1.823		
16	Benzo[a]anthracene	6.54	6.49	0.05	2.992	1.7	0	0.33	1.823		



Ref		log BCF of log $K_{mw}$							
		Experimenteel	Schatting	Vershil	E	S	A	B	V
16	Benzo[e]pyrene	7.23	7.18	0.05	3.62	1.96	0	0.35	1.95
16	2,3',5,5'-Tetrachlorobiphenyl	6.70	6.54	0.16	1.88	1.51	0	0	1.72792
16	2,4,4'-Trichlorobiphenyl	6.11	5.94	0.17	1.75	1.35	0	0.055	1.606
16	Fluoranthene	5.67	5.50	0.17	2.292	1.486	0	0.255	1.5846
16	2,2',4,5,5'-Pentachlorobiphenyl	7.05	6.87	0.18	2.06	1.47	0	0	1.76464
16	Phenanthrene	5.07	4.85	0.22	1.997	1.316	0	0.279	1.4544
16	3,3',4,4'-Tetrachlorobiphenyl	6.87	6.62	0.25	1.84	1.69	0	0	1.8136
16	Anthracene	5.15	4.88	0.27	1.923	1.309	0	0.253	1.4544
16	2,3',4,4',5-Pentachlorobiphenyl	7.20	6.93	0.27	2.01	1.67	0	0	1.85032
16	2,2',3,4,4',5'-Hexachlorobiphenyl	7.58	7.29	0.29	2.2	1.61	0	0	1.88704
16	Benzo[ghi]perylene	8.04	7.73	0.31	4.073	1.9	0	0.46	2.084
16	2,3,3',4,4',5-Hexachlorobiphenyl	7.68	7.32	0.36	2.14	1.83	0	0	1.97272
16	3,3',4,4',5-Pentachlorobiphenyl	7.38	7.00	0.38	1.97	1.86	0	0	1.936
16	pyrene	5.78	5.33	0.45	2.165	1.518	0	0.261	1.5846
16	3,3',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl	7.87	7.38	0.49	2.1	2.03	0	0	2.0584
16	Benzo[b]fluoranthene	7.27	6.74	0.53	3.19	1.82	0	0.4	1.95
17	Pentachlorophenol	5.84	5.60	0.25	1.218	0.88	0.96	0.01	1.387
18	4-chloro-3-methylphenol	3.30	3.09	0.21	0.92	1.02	0.65	0.22	1.038
18	pentachlorobenzene	5.48	5.18	0.30	1.33	0.96	0	0	1.329
18	1,2,3,4-tetrachlorobenzene	5.10	4.63	0.47	0.942	0.715	0	0	1.2064
18	hexachlorobenzene	6.47	5.73	0.74	1.49	0.99	0	0	1.451
19	nitrobenzene	1.47	2.01	-0.54	0.846	1.138	0	0.269	0.8906
19	3-Nitrotoluene	2.31	2.65	-0.34	0.874	1.1	0	0.25	1.032
19	2-Nitrotoluene	2.28	2.56	-0.28	0.866	1.11	0	0.27	1.032
19	4-Nitrotoluene	2.37	2.54	-0.17	0.918	1.194	0	0.264	1.0315
19	1-Chloro-4-nitrobenzene	2.46	2.61	-0.15	0.98	1.17	0	0.25	1.013

Ref		log BCF of log $K_{mw}$							
		Experimenteel	Schatting	Vershil	E	S	A	B	V
19	1,3-Dinitrobenzene	1.87	1.69	0.18	1.027	1.756	0	0.399	1.0648
20	1,3,5,8-tetrachloronaphthalene	5.70	6.27	-0.57	1.81	1.18	0	0	1.575
20	1,3,5,7-tetrachloronaphthalene	5.83	6.27	-0.43	1.81	1.18	0	0	1.575
20	1,2,3,4-tetrachloronaphthalene	5.82	6.20	-0.39	1.81	1.24	0	0	1.575
20	1,4-dichloronaphthalene	4.66	4.97	-0.31	1.57	1.06	0	0.09	1.3302
20	1,3,7-trichloronaphthalene	5.73	5.78	-0.05	1.69	1.12	0	0	1.4526
20	1,8-dichloronaphthalene	5.09	4.84	0.25	1.57	1.12	0	0.11	1.3302
20	2,7-dichloronaphthalene	5.34	5.01	0.34	1.57	1.06	0	0.08	1.3302
20	Pentachlorobenzene	5.53	5.18	0.35	1.33	0.96	0	0	1.329
20	2,3-dichloronaphthalene	5.34	4.91	0.43	1.57	1.12	0	0.09	1.3302
20	2-chloronaphthalene	4.93	4.30	0.63	1.45	1	0	0.14	1.2078
21	1,4-dichlorobenzene	3.56	3.55	0.01	0.825	0.75	0	0.02	0.9612
21	1,2,4,5-Tetrachlorobenzene	4.70	4.66	0.04	0.975	0.714	0	0	1.206
21	1,2,4-trichlorobenzene	4.25	4.17	0.08	1.022	0.748	0	0.018	1.0836
22	1,2,3,5-Tetrachlorobenzene	4.45	4.70	-0.25	1.16	0.85	0	0	1.206
23	methidathion,	2.21	2.96	-0.75	1.28	1.77	0.03	0.91	1.889
23	diazinon,	3.33	3.94	-0.61	0.89	1	0.02	1.16	2.306
23	fenthion,	4.16	4.34	-0.18	1.42	1.75	0	0.67	1.988
23	chloropyrifos	4.61	4.50	0.11	1.29	0.34	-0.37	1.11	2.15
24	Pyrene	5.60	5.33	0.27	2.165	1.518	0	0.261	1.5846
25	2,2',5-Trichlorobiphenyl	5.64	5.83	-0.19	1.78	1.19	0	0.055	1.520
25	2,2',3,5,5',6-Hexachlorobiphenyl	7.07	7.19	-0.12	2.27	1.48	0	0	1.801
25	2,2',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl	7.18	7.29	-0.11	2.2	1.61	0	0	1.887
25	2,2',3,3',6,6'-Hexachlorobiphenyl	6.96	7.06	-0.10	2.3	1.33	0	0	1.716
25	2,2',3,5'-Tetrachlorobiphenyl	6.37	6.45	-0.08	1.92	1.33	0	0	1.642
25	2,2',4,5'-Tetrachlorobiphenyl	6.37	6.45	-0.08	1.92	1.33	0	0	1.642

Ref		log BCF of log $K_{mw}$			E	S	A	B	V
		Experimenteel	Schatting	Vershil					
25	2,2',5,5'-Tetrachlorobiphenyl	6.45	6.45	0.00	1.92	1.33	0	0	1.642
25	2,2',3,3',4,4'-Hexachlorobiphenyl	7.30	7.29	0.01	2.2	1.61	0	0	1.887
25	2,2',3,4,5'-Pentachlorobiphenyl	6.91	6.87	0.04	2.06	1.47	0	0	1.765
25	2,2',3,4,5,5'-Hexachlorobiphenyl	7.34	7.29	0.05	2.2	1.61	0	0	1.887
25	2,5-dichlorobiphenyl	5.42	5.35	0.07	1.62	1.19	0	0.11	1.483
25	2,3',4',5-Tetrachlorobiphenyl	6.61	6.54	0.07	1.88	1.51	0	0	1.728
25	2,2',3',4,5-Pentachlorobiphenyl	6.96	6.87	0.09	2.06	1.47	0	0	1.765
25	2,2',3,4,4',5-Hexachlorobiphenyl	7.41	7.29	0.12	2.2	1.61	0	0	1.887
25	3,3',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl	7.50	7.38	0.12	2.1	2.03	0	0	2.058
25	2,2',4,5,5'-Pentachlorobiphenyl	7.00	6.87	0.13	2.06	1.47	0	0	1.765
25	2,4',5-Trichlorobiphenyl	6.19	5.94	0.25	1.75	1.35	0	0.055	1.606
25	3,3',4,4'-Tetrachlorobiphenyl	6.89	6.62	0.27	1.84	1.69	0	0	1.814
25	3,3',4,4',5-Pentachlorobiphenyl	7.34	7.00	0.34	1.97	1.86	0	0	1.936
26	$\beta$ -hexachlorocyclohexane	3.90	3.72	0.18	1.45	0.88	0	0.69	1.5798
26	$\alpha$ -hexachlorocyclohexane	4.40	3.80	0.60	1.45	0.73	0	0.71	1.5798
26	$\gamma$ -hexachlorocyclohexane	4.40	3.73	0.67	1.45	0.91	0	0.68	1.5798
27	1,2,4-trichlorobenzene	4.18	4.17	0.01	1.022	0.748	0	0.018	1.0836
28	Phenanthrene	4.24	4.85	-0.61	1.997	1.316	0	0.279	1.4544
28	Dibenzo[a,h]anthracene	7.47	7.98	-0.51	4	2.04	0	0.44	2.192
28	Anthracene	4.44	4.88	-0.44	1.923	1.309	0	0.253	1.4544
28	Benzo[e]pyrene	7.00	7.18	-0.18	3.62	1.96	0	0.35	1.95
28	Fluoranthene	5.37	5.50	-0.13	2.292	1.486	0	0.255	1.5846
28	Benzo[ghi]perylene	7.63	7.73	-0.10	4.073	1.9	0	0.46	2.084
28	Chrysene	6.41	6.49	-0.08	3.027	1.73	0	0.33	1.823
28	Benzo[a]anthracene	6.47	6.49	-0.02	2.992	1.7	0	0.33	1.823
28	pyrene	5.55	5.33	0.22	2.165	1.518	0	0.261	1.5846

Ref		log BCF of log $K_{mw}$							
		Experimenteel	Schatting	Vershil	E	S	A	B	V
28	Benzo[b]fluoranthene	7.05	6.74	0.31	3.19	1.82	0	0.4	1.95
28	Benzo[a]pyrene	7.21	6.85	0.36	3.625	1.98	0	0.44	1.954
29	2,2',5,5'-Tetrachlorobiphenyl	5.74	6.45	-0.71	1.92	1.33	0	0	1.642
29	2,2',3,4,5'-Pentachlorobiphenyl	6.16	6.87	-0.71	2.06	1.47	0	0	1.765
29	2,2',4,5,5'-Pentachlorobiphenyl	6.17	6.87	-0.70	2.06	1.47	0	0	1.765
29	2,2',3,3',4,4'-Hexachlorobiphenyl	6.62	7.29	-0.67	2.2	1.61	0	0	1.887
29	2,2',4,5'-Tetrachlorobiphenyl	5.79	6.45	-0.67	1.92	1.33	0	0	1.642
29	2,2',3,5',6-Pentachlorobiphenyl	6.10	6.75	-0.65	2.12	1.35	0	0	1.679
29	2,2',4,4',5-Pentachlorobiphenyl	6.25	6.87	-0.62	2.06	1.47	0	0	1.765
29	2,2',3,3',4,4',5-Heptachlorobiphenyl	7.14	7.71	-0.58	2.34	1.75	0	0	2.009
29	2,3,3',4,4',5-Hexachlorobiphenyl	6.80	7.32	-0.52	2.14	1.83	0	0	1.973
29	2,2',3,4,4',5'-Hexachlorobiphenyl	6.88	7.29	-0.41	2.2	1.61	0	0	1.887
29	2,3,3',4',6-Pentachlorobiphenyl	6.50	6.87	-0.38	2.06	1.47	0	0	1.765
29	2,3,3',4,4'-Pentachlorobiphenyl	6.58	6.93	-0.35	2.01	1.67	0	0	1.850
29	2,2',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl	7.01	7.29	-0.28	2.2	1.61	0	0	1.887
29	2,3',4',5-Tetrachlorobiphenyl	6.27	6.54	-0.26	1.88	1.51	0	0	1.728
29	2,3',4,4',5-Pentachlorobiphenyl	6.68	6.93	-0.25	2.01	1.67	0	0	1.850
29	2,3',4,4'-Tetrachlorobiphenyl	6.31	6.54	-0.22	1.88	1.51	0	0	1.728
30	1,3-dibromobenzene	3.78	4.12	-0.34	1.164	0.79	0	0.04	1.066
30	1,4-dichloronapthalene	4.75	4.97	-0.22	1.57	1.06	0	0.09	1.3302
31	atrazine	1.74	2.16	-0.42	0.94	1.2	0.01	0.94	1.62
31	atrazine	2.16	2.16	0.00	0.94	1.2	0.01	0.94	1.62

Ref		log BCF of log $K_{mw}$			E	S	A	B	V
		Experimenteel	Schatting	Vershil					
	<b>Outliers</b>								
	Log $K_{mw}$								
13	2,2',6,6'-Tetrachlorobiphenyl	7.05	6.12	0.93	1.98	1.11	0	0	1.471
3	Pentachlorophenol	4.68	5.60	-0.92	1.218	0.88	0.96	0.01	1.387
5	2-Chloroaniline	1.53	2.40	-0.87	1.026	0.965	0.253	0.321	0.9386
13	3,3',4,4',5-Pentachlorobiphenyl	8.32	7.00	1.32	1.97	1.86	0	0	1.936
13	3,3',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl	8.42	7.38	1.04	2.1	2.03	0	0	2.058
	Log BCF								
20	2,3',4',5-tetrachlorobiphenyl	5.62	6.54	-0.91	1.88	1.51	0	0	1.728
29	2,2',3,5'-Tetrachlorobiphenyl	5.54	6.45	-0.91	1.92	1.33	0	0	1.642
29	2,2',3',4,5-Pentachlorobiphenyl	6.05	6.87	-0.82	2.06	1.47	0	0	1.765
25	2,2',6,6'-Tetrachlorobiphenyl	5.38	6.12	-0.74	1.98	1.11	0	0	1.471
31	carbamazepine	1.76	3.04	-1.28	3.42	1.52	0.44	1.45	1.811
31	ibuprofen	2.22	4.20	-1.98	0.7	0.92	0.6	0.6	1.7771
31	carbamazepine	2.09	3.04	-0.95	3.42	1.52	0.44	1.45	1.811
31	ibuprofen	2.84	4.20	-1.35	0.7	0.92	0.6	0.6	1.7771
32	1,4-Dibromobenzene	3.15	4.03	-0.88	1.15	0.86	0	0.04	1.066

## 5 Referenties

1. P.C.M. van Noort, J.J.H. Haftka, J.R. Parsons. Updated Abraham solvation parameters for polychlorinated biphenyls. *Environ. Sci. Technol.* 2010, 44, 7037–7042.
2. M.H. Abraham, A.J.M. Al-Hussaini. Solvation parameters for the 209 PCBs: calculation of physicochemical properties. *J. Environ. Monit.* 2005, 7, 295–301.
3. D. Mackay, W.Y. Shiu, K.C. Ma. 2000. *Physical-Chemical Properties and Environmental Fate Handbook*. CRC, Boca Raton, FL, USA.
4. P.C.M. van Noort. Estimation of amorphous organic carbon/water partition coefficients, subcooled liquid aqueous solubilities, and n-octanol/water partition coefficients of nonpolar chlorinated aromatic compounds from chlorine fragment constants. *Chemosphere* 74 (2009) 1024–1030.
5. M.H. Abraham, J. Andonian-Haftvan, G.S. Whiting, A. Leo, R.S. Taft. Hydrogen bonding. Part 34. The factors that influence the solubility of gases and vapours into water at 298 K, and a new method for its determination. *J. Chem. Soc. Perkin Trans.* 1994, 2, 1771–1791.
6. M.H. Abraham, H.S. Chadha, G.S. Whiting, R.C. Mitchell. Hydrogen bonding. 32. An analysis of water-octanol and water-alkane partitioning and the  $\Delta\log P$  parameter of Seiler. *J. Pharm. Sci.* 1994, 83, 1085–1100.
7. C.F. Poole, S.A. Atapattu, S.K. Poole, A.K. Bell. Determination of solute descriptors by chromatographic methods. *Anal. Chim. Acta* 2009, 652, 32–53.
8. H.C. Tülp, K.-U. Goss, R.P. Schwarzenbach, K. Fenner. Experimental determination of LSER parameters for a set of 76 diverse pesticides and pharmaceuticals. *Environ. Sci. Technol.* 2008, 42, 2034–2040.
9. M.H. Abraham, K. Enomoto, E.D. Clarke, G. Sexton. Hydrogen bond basicity of the chlorogroup; Hexachlorocyclohexanes as strong hydrogen bond bases. *J. Org. Chem.*, 2002, 67, 4782–4786.

## 6 Referenties bij tabel 2

- 1 Avdeef, A., Box, K.J., Comer, J.E.A., Hibbert, C., Tam, K.Y. 1998. pH-metric logP 10. Determination of liposomal membrane-water partition coefficients of ionizable drugs. *Pharm. Res.* 1998, 15, 209-215.
- 2 Busalla, cited in Spycher, S., Smejtek, P., Netzeva, T.I., Beate I. Escher, B.I. Toward a class-independent quantitative structure-activity relationship model for uncouplers of oxidative phosphorylation. *Chem. Res. Toxicol.* 2008, 21, 911–927.
- 3 Escher, B.I., Berg, M., Mühlemann, J., Schwarz, M.A.A., Hermens, J.L.M. Vaes, W.H.J., René P. Schwarzenbach R.P. Determination of liposome/water partition coefficients of organic acids and bases by solid-phase microextraction. *Analyst*, 2002, 127, 42-48.
- 4 Escher, B. I., Schwarzenbach, R. P. Partitioning of substituted phenols in liposome-water, biomembrane-water, and octanol-water systems. *Environ. Sci. Technol.* 1996, 30, 260-270.
- 5 Escher, B. I. and Schwarzenbach, R. P. Mechanistic studies on baseline toxicity and uncoupling of organic compounds as a basis for modeling effective membrane concentrations in aquatic organisms. *Aquat. Sci.* 2002, 64, 20-35.
- 6 Escher, B. I., Schwarzenbach, R. P., Westall, J. C. Evaluation of liposome-water partitioning of organic acids and bases. 1. Development of a sorption model. *Environ. Sci. Technol.* 2000, 34, 3954-3961.
- 7 Van der Heijden, S.A., Jonker, M.T.O. Evaluation of Liposome-Water Partitioning for Predicting Bioaccumulation Potential of Hydrophobic Organic Chemicals. *Environ. Sci. Technol.* 2009 43, 8854-8859.
- 8 Gobas, F. A. P. C., Lahittete, J. M., Garofalo, G., Shiu, W. Y., Mackay, D. A novel method for measuring membrane-water partition coefficients of hydrophobic organic chemicals: comparison with 1-octanol-water partitioning. *J. Pharm. Sci.* 1988, 77, 265
- 9 Kwon, J.-H., Liljestrand, H. M., Katz, L. E. Partitioning of moderately hydrophobic endocrine disruptors between water and synthetic membrane vesicles. *Environ. Toxicol. Chem.* 2006, 25, 1984-1992.
- 10 Miyoshi, H., Maeda, H., Tokutake, N., Fujita, T. Quantitative analysis of partition behavior of substituted phenols from aqueous phase into liposomes made of lecithin and various lipids. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 1987, 60, 4357-4362.
- 11 Ottiger, C., Wunderli-Allenspach, H. Partition behavior of acids and bases in a phosphatidylcholine liposome-buffer equilibrium dialysis system. *Eur. J. Pharm. Sci.* 1997, 5, 223-231.
- 12 Ikeda, K., YShimizu, Y., Matsui, S., Oguri, T., Sekida, M., Kawata, A., Kusakabe, T. Partition property of pyrene onto synthetic membrane vesicles and the eEffects of natural organic matters. *KSCE J. Civil Eng.* 2008, 12, 91-97.
- 13 Jabusch, T.W., Swackhamer, D.L. Partitioning of polychlorinated biphenyls in octanol/water, triolein/water, and membrane/water systems. *Chemosphere* 2005, 60, 1270-1278.
- 14 Vaes, W. H. J., Ramos, E. U., Verhaar, H. J. M., Cramer, C. J., Hermens, J. L. M. Understanding and estimating membrane/water partition coefficients: Approaches to derive quantitative structure property relationships. *Chem. Res. Toxicol.* 1998, 11, 847
- 15 Belfroid, A., van Wezel, A., Sikkenk, M., van Gestel, K., Seinen, W., Hermens, J. The toxicokinetic behavior of chlorobenzenes in earthworms (*Eisenia Andrei*): Experiments in water. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 1993, 25, 154-165.

- 16 Jonker, M.T.O., van der Heijden, S.A. Bioconcentration factor hydrophobicity cutoff: An artificial phenomenon reconstructed. *Environ. Sci. Technol.* 2007, 41, 7363-7369.
- 17 Kondo, T., Yamamoto, H., Tatarazako, N., Kawabe, K., Koshio, M., Hirai, N., Morita, M. Bioconcentration factor of relatively low concentrations of chlorophenols in Japanese medaka *Chemosphere* 2005, 61, 1299-1304.
- 18 Leslie, H.A., ter Laak, T.L., Busser, F.J.M., Kraak, M.H.S., Hermens, J.L.M. Bioconcentration of organic chemicals: Is a solid-phase microextraction fiber a good surrogate for biota? *Environ. Sci. Technol.* 2002, 36, 5399-5404.
- 19 Zhao, Y.-H., Yuan, X., Ji, G.-D., Lian-Xi Sheng, L.-X. Quantitative structure-activity relationships of nitroaromatic compounds to four aquatic organisms. *Chemosphere*, 1997, 34, 1837-1844.
- 20 Opperhuizen, A., v.d. Velde, E.W., Gobas, F.A.P.C., Liem, D.A.K., v.d. Steen, J.M.D. Relationship between bioconcentration in fish and steric factors of hydrophobic chemicals. *Chemosphere*, 1985, 14, 1871-1896.
- 21 Smith, A.D., Bharath, A., Mallard, C., Orr, D., LS. McCarty, L.S., Ozburn, G.W. Bioconcentration kinetics of some chlorinated benzenes and chlorinated phenols in American flagfish, *Jordanella floridae* (Goode and Bean). *Chemosphere*, 1990, 20, 379-386.
- 22 De Wolf W., Yedema, E.S.E., Seinen, W., Hermens, J.L.M. Bioconcentration kinetics of chlorinated anilines in guppy, *poecilia reticulata*. *Chemosphere*, 1994, 28, 159-167.
- 23 Tsuda, T., Kojima, M., Harada, H., Nakajima, A., Aoki, S. Relationships of bioconcentration factors of organophosphate pesticides among species of fish. *Comp. Biochem. Physiol.* 1997, 116C, 213-218.
- 24 Ter Laak, T.L., Terbekke, M.A., Hermens, J.L.M. Dissolved organic matter enhances transport of PAHs to aquatic organisms. *Environ. Sci. Technol.* 2009, 43, 7212-7217.
- 25 Fox, K., Zauke, G.P., Butte, W. Kinetics of bioconcentration and clearance of 28 polychlorinated biphenyl congeners in Zebrafish. *Ecotoxicol. Environ. Safety* 1994, 28, 99-109.
- 26 Moisey, J., Fisk, A.T., Hobson, K.A., Norstrom, A.J. Hexachlorocyclohexane (HCH) isomers and chiral signatures of  $\alpha$ -HCH in the arctic marine food web of the Northwater Polynya. *Environ. Sci. Technol.* 2001, 35, 1920-1927.
- 27 Geyer, H., Scheunert, I., Korte, F. Relationship between the lipid content of fish and their bioconcentration potential of 1,2,4-trichlorobenzene. *Chemosphere*, 1985, 14, 545-555.
- 28 Muijs, B., Jonker, M.T.O. Temperature-dependent bioaccumulation of polycyclic aromatic hydrocarbons. *Environ. Sci. Technol.* 2009, 43, 4517-4523.
- 29 You, J., Landrum, P. E., Trimble, T. A., Lydy, M. J. Availability of polychlorinated biphenyls in field-contaminated sediment. *Environ. Toxicol. Chem.* 2007, 26, 1940-1948.
- 30 Oliver, B.G., Niimi, A.J. Rainbow trout bioconcentration of some halogenated aromatics from water at environmental concentrations. *Environ. Toxicol. Chem.* 1984, 3, 271-277.
- 31 Zhang, X., Oakes, D., Cui, S., Bragg, L., Servos, M.R., Pawliszyn, J.Z. Tissue-specific in vivo bioconcentration of pharmaceuticals in rainbow trout (*Oncorhynchus mykiss*) using space-resolved solid-phase microextraction. *Environ. Sci. Technol.* 2010, 44, 3417-3422.
- 32 Gobas, F.A.P.C., Clark, K.E., Shiu, W.Y. Bioconcentration of polybrominated benzenes and biphenyls and related superhydrophobic chemicals in fish: role of bioavailability and elimination into the feces. *Environ. Toxicol. Chem.* 1989, 8, 231-245.