



Afleiding van 25 ad hoc MTR's 2006

**Ammoniumperchloraat, RDX, nitro-cellulose, TNT,
nitroglycerine, epichloorhydrinedimethylamine-
copolymeer, 2,2,5,5-tetramethyl-tetrahydrofuran,
carbohydrazide en 17 bestrijdingsmiddelen**

RWS RIZA rapport 2006.036
ISBN 9789036913751

18 december 2006

Colofon

Dit is een uitgave van Rijkswaterstaat
December 2006

Voor meer informatie: Rijkswaterstaat RIZA
Telefoon: 0320 - 298497

Uitgevoerd door: Margriet Beek - RIZA/WIW
Dorien ten Hulscher - RIZA/WIW
Roel Fleuren - RIVM

Druk: Artoos Drukkerijen, Rijswijk

Document: RWS RIZA rapport 2006.036
ISBN 9789036913751

Inhoudsopgave

1	Inleiding	5
2	Methode	6
2.1	Rapportage van gegevens	6
2.2	Het stappenplan	7
3	Resultaten	8
4	Referenties	10
Bijlage A		
	Rapportageformulier munitiegerelateerde stoffen	11
Bijlage B		
	Rapportageformulier epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer	13
Bijlage C		
	Rapportageformulier 2,2,5,5-tetramethyl-tetrahydrofuran	15
Bijlage D		
	Rapportageformulier carbohydrazide	17
Bijlage E		
	Rapportageformulier bestrijdingsmiddelen	19

1 Inleiding

In 2006 is aan het RIZA gevraagd om voor de in dit rapport aangegeven stoffen ad hoc MTR's af te leiden. De ad hoc MTR's worden over het algemeen gebruikt om de lozingen van deze stoffen in oppervlaktewater te kunnen beoordelen. Vijf van de vijf en twintig stoffen zijn munitie-gerelateerde stoffen. Het betreffen: ammoniumperchloraat, RDX, nitro-cellulose, TNT en nitroglycerine. Zeventien stoffen betreffen bestrijdingsmiddelen. De overige stoffen zijn individuele lozingen.

De eenvoudige procedure voor de afleiding van de ad hoc MTR's is doorlopen zoals aangegeven in de VROM-notitie (Inter)nationale Normen Stoffen (VROM, 2004). Dit wil zeggen dat de afgeleide normen de Wetenschappelijke Klankbordgroep van INS hebben gepasseerd. Met het voltooiën van deze rapportage zullen de ad hoc MTR's ingebracht worden voor vaststelling in de Stuurgroep Stoffen.

2 Methode

De ad hoc MTR's zijn afgeleid zoals beschreven in de Handreiking voor de afleiding van indicatieve milieukwaliteitsnormen (Hansler et al., 2006).

De procedure voor het afleiden van het ad hoc MTR is gebaseerd op de integratie van een norm op basis van humaan-toxicologische eindpunten (ad hoc MTRhumaan) en op basis van ecotoxicologische eindpunten (ad hoc MTR eco). Het ad hoc MTR wordt gelijkgesteld aan de meest kritische.

De te volgen aanpak sluit zoveel mogelijk aan bij (inter)nationale gangbare methodieken. Omdat echter een minder uitvoerige literatuursearch naar gegevens wordt uitgevoerd en de gegevens minder zwaar worden getoetst op validiteit, worden strengere onzekerheidsfactoren toegepast dan in de gedegen methode. Voor stoffen waarvoor geen of slechts beperkt humaan-toxicologische gegevens beschikbaar zijn, wordt gewerkt met een standaardwaarde. Voor stoffen waarvoor geen of beperkt ecotoxicologische gegevens beschikbaar zijn, kan het voorkomen dat geen ad hoc MTReco kan worden afgeleid; in die gevallen wordt het ad hoc MTR slechts gebaseerd op het ad hoc MTR humaan. Als er gegevens voor het ad hoc MTR ontbreken worden deze in eerste instantie aangevuld via QSAR berekeningen. Over het algemeen geeft dit minder betrouwbare waarden en kunnen de ad hoc MTR's alleen indicatief gebruikt worden.

2.1 Rapportage van gegevens

Als een ad hoc MTR wordt afgeleid is het in ieder geval altijd noodzakelijk om te documenteren welke informatie is gebruikt en wat de onderliggende overwegingen zijn geweest voor de keuze van onzekerheidsfactoren. Dit gebeurt in zogenaamde rapportageformulieren (zie bijlagen). Hierin zitten in ieder geval elementen van de volgende onderdelen:

1. Geraadpleegde databases/bronnen;
2. Specifieke gegevens over de betreffende stof;
3. Samenvatting van de fysisch-chemische gegevens;
4. Toxicologische gegevens;
5. Ecotoxiciteitsgegevens;
6. Gedrag in het milieu;
7. Berekening van het ad hoc MTR.

Een overzicht van de geraadpleegde databases en bronnen staan weergegeven in Hansler et al. (2006).

2.2 Het stappenplan

De gevolgde procedure wordt beschreven in de vorm van een stappenplan. Via de opeenvolgende stappen wordt vastgesteld welke informatie beschikbaar is, of en welke onzekerheidsfactoren op basis daarvan moeten worden toegepast en op welke wijze het ad hoc MTR wordt afgeleid. Het stappenplan komt terug in het rapportageformulier en is weergegeven in Hansler et al. (2006).

3 Resultaten

De afgeleide ad hoc MTR's zijn in tabel 3 weergegeven. De achterliggende gegevens en afleidingen staan weergegeven in de bijlagen. De ad hoc MTR voor ammoniumperchloraat, RDX, ntro-cellulose, TNT, Nitroglycerine, epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer voor bodem, sediment en lucht worden niet voorgesteld door het ontbreken van betrouwbare getallen/schattingen voor de Koc, dampdruk en molekuulgewicht. Er is daarom gekozen om voor deze stof alleen een geïntegreerde MTR voor water af te leiden, waarbij voor de humane MTR is uitgegaan van de drinkwaternorm.

Tabel 3 Voorgestelde ad hoc MTR's

Stof	CASnummer	Oppervlakte- water	Bodem	Sediment	Lucht	Grond- water
		µg/l	µg/kg s.b.	µg/kg s.b.	µg/m3	µg/l
Ammoniumperchloraat	7790-98-9	7,5	-	-	-	0,751
RDX (hexahydro-1,3,5-trinitro-1,2,3-triazine)	121-82-4	1,67	-	-	-	1,67
Nitro-cellulose	9004-70-0	0,74	-	-	-	6,13X10-3
TNT	118-96-7	0,62	-	-	-	0,62
Nitroglycerine	55-63-0	0,4	-	-	-	0,4
Epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer	25988-97-0	0,05	-	-	-	0,05
2,2,5,5-tetramethyl-tetrahydrofuran	15045-43-9	4,19	0,89	22,9	3,2	0,24
carbohydrazide	497-18-7	0,74	1,76x10-3	1,37	7,66x10-8	4,41x10-3
Allethrin	584-79-2	0,00017	0,093	0,094	0,34	0,00017
Amidosulfuron	120923-37-7	32	63,3	118	0,026	32
Butachloor	23184-66-9	0,00023	0,027	0,028	0,00302	0,00023
Carbetamide	16118-49-3	39,1	167	215	3,1x10-5	50
Crimidine	535-89-7	0,00567	3,63	0,86	0,000119	0,66
Cyazofamid	120116-88-3	0,13	2	8,72	13,3	0,13
Demeton-S	126-75-0	0,031	1,65	0,35	4,27x10-6	0,22
Ethion	563-12-2	1,9x10-6	0,00177	0,00178	0,00273	1,9x10-6
Fenchloorfos	299-84-3	6x10-5	0,013	0,013	0,03	6x10-5
Haloxypop-P-methylester	69806-40-2	1,18	84,7	20,2	0,000939	7,11
Pyraclostrobine	175013-18-0	0,023	6,04	6,12	0,00529	0,023
Sebutylazine	7286-69-3	0,093	7,07	1,67	7,79x10-5	0,57
Sethoxydim	74051-41-9	0,32	26,7	27,3	5,29x10-6	0,32
Tepaloxymid	149979-41-9	78,6	0,00308	0,0769	0,000117	466
Thiofanoxsulfon	39184-59-3	-	-	-	-	-
Triclopyr-BEE	64700-56-7	0,52	9,01	9,94	0,00101	0,52
Vamidotion	2275-23-2	0,19	0,19	0,51	2,33x10-7	0,19

4 Referenties

- Hansler, R.J., T.P. Traas & W.C. Mennes (2006)
Handreiking voor de afleiding van indicatieve milieukwaliteitsnormen. RIVM report 601503024
- VROM (2004) *(Inter)nationale Normen Stoffen*

Bijlagen

.....

Bijlage A	Rapportageformulier munitiegerelateerde stoffen
Bijlage B	Rapportageformulier epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer
Bijlage C	Rapportageformulier 2,2,5,5-tetramethyl-tetrahydrofuran
Bijlage D	Rapportageformulier carbohydrazide
Bijlage E	Rapportageformulier bestrijdingsmiddelen

Bijlage A

Rapportageformulier munitiegerelateerde stoffen

.....

Opdrachtgegevens

Projectnummer	M/601503/05/
Opdrachtgever	RIZA (e-mail M. Beek d.d. 14-07-2005)
Datum opdracht	14-07-2005
Datum rapportage	20-01-2006
Auteur(s)	Fleuren RHLJ, Janssen PJCM
Toetser	Hansler RJ
	Van Raaij MTM (afleiding normen humaan)
Opdracht	Afleiding ad hoc MTRs voor vijf munitie-gerelateerde verbindingen op basis van data verzameld door RIZA (fysisch-chemisch en ecotoxicologisch) en RIVM (humaan-toxicologisch)

Afleiding ad hoc MTRs voor vijf munitie-gerelateerde verbindingen op basis van data verzameld door RIZA (fysisch-chemisch en ecotoxicologisch) en RIVM (humaan-toxicologisch)

Samenvatting

Voor een vijftal stoffen is een geïntegreerd ad hoc MTR afgeleid:

1. Ammoniumperchloraat (CAS nr.: 7790-98-9):

ad hoc $MTR_{\text{water}} = 7,5 \mu\text{g/L}$
ad hoc $MTR_{\text{grondwater}} = 0,751 \mu\text{g/L}$
ad hoc $MTR_{\text{lucht}} = \text{niet relevant}$
ad hoc $MTR_{\text{bodem}} = 4,51 \mu\text{g/kg dwt}$
ad hoc $MTR_{\text{sediment}} = 58,5 \mu\text{g/kg dwt}$

2. RDX (hexahydro-1,3,5-trinitro-1,2,3-triazine) (CAS nr. 121-82-4):

ad hoc $MTR_{\text{water}} = 1,67 \mu\text{g/L}$
ad hoc $MTR_{\text{lucht}} = 5,1 \times 10^{-6} \mu\text{g/m}^3$
ad hoc $MTR_{\text{bodem}} = 8,44 \mu\text{g/kg dwt}$
ad hoc $MTR_{\text{sediment}} = 11 \mu\text{g/kg dwt}$

3. Nitro-cellulose (CAS nr.: 9004-70-0):

ad hoc $MTR_{\text{water}} = 0,74 \mu\text{g/L}$
ad hoc $MTR_{\text{grondwater}} = 6,13 \times 10^{-3} \mu\text{g/L}$
ad hoc $MTR_{\text{lucht}} = \text{niet relevant}$
ad hoc $MTR_{\text{bodem}} = 5,91 \times 10^{-3} \mu\text{g/kg dwt}$
ad hoc $MTR_{\text{sediment}} = 1,81 \mu\text{g/kg dwt}$

4. TNT (CAS nr.: 118-96-7):

ad hoc $MTR_{\text{water}} = 0,62 \mu\text{g/L}$
ad hoc $MTR_{\text{lucht}} = 3,96 \times 10^{-3} \mu\text{g/m}^3$
ad hoc $MTR_{\text{bodem}} = 196 \mu\text{g/kg dwt}$
ad hoc $MTR_{\text{sediment}} = 59,2 \mu\text{g/kg dwt}$

5. Nitroglycerine (CAS nr.: 55-63-0):

ad hoc $MTR_{\text{water}} = 0,4 \mu\text{g/L}$
ad hoc $MTR_{\text{lucht}} = 4,26 \times 10^{-4} \mu\text{g/m}^3$
ad hoc $MTR_{\text{bodem}} = 3,89 \mu\text{g/kg dwt}$
ad hoc $MTR_{\text{sediment}} = 4,58 \mu\text{g/kg dwt}$

Inleiding

In opdracht van het Rijksinstituut voor Integraal Zoetwaterbeheer en Afvalwaterbehandeling (RIZA) is voor een vijftal stoffen een geïntegreerd ad hoc MTR afgeleid op basis van fysisch-chemische en ecotoxicologische gegevens, aangeleverd door RIZA (e-mail mw. M. Beek d.d. 14-07-2005) en humaan-toxicologische ad hoc MTRs,

afgeleid door het RIVM. De afleiding van de humane normen wordt beschreven in Bijlage 1.

Afleiding ad hoc MTRs

Integratie van het MTR_{humaan} en het MTR_{eco} is uitgevoerd m.b.v. EUSES 1.0 en Humanex (versiedatum februari 2005). De fysisch-chemische data van RIZA zijn gebruikt als input voor EUSES 1.0 waaruit vervolgens de partitie-coëfficiënten voor bodem, sediment en lucht volgen en de PECs voor oppervlaktewater, lucht, bodem en sediment. De partitie-coëfficiënten zijn gebruikt voor de berekeningen van ad hoc MTRs voor lucht, bodem en sediment uit het ad hoc MTR voor water. De PECs zijn in Humanex gebruikt voor de integratie van de humane en milieu-ad hoc MTRs.

In enkele datasheets van RIZA wordt de biodegradatie gedefinieerd als halfwaardetijd (bijv. weken of maanden). Deze gegevens zijn niet bruikbaar als input voor EUSES 1.0. Door het gebrek aan betrouwbare gegevens over de afbreekbaarheid zijn op basis van expert judgement (m.b.v. QSAR-modellen) alle stoffen gecategoriseerd als niet afbreekbaar. Dit is een aanname. Deze classificatie is gebruikt als input voor EUSES.

De door het RIVM berekende ad hoc MTR-waarden voor sediment wijken af van die van RIZA. Dit komt omdat RIZA de waterfase in het sediment niet meeneemt in de berekening en het RIVM wel. Omdat de laatste benadering conform de TGD is, zijn de RIVM-normen gebruikt voor integratie van de ecotoxicologische en humane normen.

Resultaten

1. Ammoniumperchloraat (CAS nr.: 7790-98-9):

Fysisch-chemische eigenschappen, gebruikt als input voor EUSES 1.0. Getallen aangeleverd door RIZA, tenzij anders vermeld:

Eigenschap	waarde	ref.
Molekulgewicht (g/mol)	117,49	epiwin
Smeltpunt (°C)	400	EINECS, HSDB, toxnet.nlm.niy.gov
Kookpunt (°C)	-	EINECS
Dampdruk (Pa)	2,81e-11	epiwin
Oplosbaarheid in water (mg/L)	200.000	HSDB toxnet.nlm.niy.gov
Log Kow	-5,84	epiwin
LogKoc	1,985	epiwin
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	2,17e-17	epiwin

Water:

Berekende ad hoc MTR_{water} door RIZA: 7,5 µg/L op basis acute tox *Daphnia pulex*.

Lucht:

6	ad hoc $MTR_{lucht} = ad\ hoc\ MTR_{water} \times K_{p_{lucht/water}} =$ $7,5\ \mu\text{g/L} \times 9,16 \times 10^{-21}\ \text{m}^3/\text{m}^3 \times 1000\ (\text{van L} \rightarrow \text{m}^3)$ $= 6,87 \times 10^{-17}\ \mu\text{g/m}^3$	Aangezien het hier een zout met een heel lage dampspanning betreft ($K_p = 9,16 \times 10^{-21}\ \text{m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0), zullen risico's via lucht te verwaarlozen zijn. Deze norm zal dan ook verder buiten beschouwing worden gelaten.
---	---	--

Bodem:

7	ad hoc $MTR_{bodem} = ad\ hoc\ MTR_{water} \times K_{bodem/water} \times$ $1000/1700\ (RHO_{bodem}) = 7,5\ \mu\text{g/L} \times 1,82 = 13,7$ $\mu\text{g/kg wwt}$. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: $13,7 \times 3,33 = 45,5\ \mu\text{g/kg dwt}$	$K_{bodem/water} = 3,1\ \text{m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
---	---	--

Sediment:

7	ad hoc $MTR_{bodem} = ad\ hoc\ MTR_{water} \times K_{susp/water} \times$ $1000/1150\ (RHO_{susp.\ matter}) = 7,5\ \mu\text{g/L} \times 2,88 =$ $21,6\ \mu\text{g/kg wwt}$. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $21,6 \times 2,71 = 58,5\ \mu\text{g/kg dwt}$ (42 µg/kg dwt volgens RIZA. De waarde van RIVM gebruikt voor integratie humaan en eco).	$K_{susp/water} = 3,31\ \text{m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
---	---	--

Integratie humaan en eco:

1	$PEC_{opp.\ water\ (opgelost)} = 0,325\ \text{mg/L}$ $PEC_{lucht} = 2,87 \times 10^{-18}\ \text{mg/m}^3$ $PEC_{landbouwgrond} = 0,0185\ \text{mg/kg wwt}$ $PEC_{landbouwgrond,\ poriewater} = 0,0101\ \text{mg/L}$ $PEC_{sediment} = 0,841\ \text{mg/kg wwt}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	ad hoc $MTR_{humaan} = 0,7\ \mu\text{g/kg lichaamsgewicht/dag}$ (RIVM, zie Bijlage 1)
3	ad hoc $MTR_{water} = 7,5\ \mu\text{g/L}$ ad hoc $MTR_{grondwater} = 0,751\ \mu\text{g/L}$ ad hoc $MTR_{lucht} = \text{niet relevant}$ ad hoc $MTR_{bodem} = 4,51\ \mu\text{g/kg dwt}$ ad hoc $MTR_{sediment} = 58,5\ \mu\text{g/kg dwt}$	

Humanex-output:

ammoniumperchloraat	TDI (µg/kg bw/d)	TCA (µg/m³)	Corrected for TCA: NO		
	7.00E-01	N.A.			
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (µg/m³)	Soil (µg/kg dwt)	Sediment (µg/kg dwt)
MPC eco	7.50E+00	7.50E+00		4.55E+01	5.85E+01
MPC human	2.42E+01	7.51E-01	2.13E-16	4.51E+00	1.92E+02
Ratio MPC eco/MPC human	3.10E-01	9.99E+00		1.01E+01	3.05E-01
Critical MPC	7.50E+00	7.51E-01	2.13E-16	4.51E+00	5.85E+01
% importance of total exposure	99.432	0.567	0.000	0.001	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	98.643				

TDI Tolerable Daily Intake

TCA Tolerable Concentration in Air

MPC Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment

Corrected for TCA When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Exposure routes

drw drinkwater

2. RDX (hexahydro-1,3,5-trinitro-1,2,3-triazine) (CAS nr. 121-82-4):

Fysisch-chemische eigenschappen, gebruikt als input voor EUSES 1.0.

Getallen aangeleverd door RIZA, tenzij anders vermeld:

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	222,12	epiwin
Smeltpunt (°C)	205,5	SRC PhysProp Database
Kookpunt (°C)	-	
Dampdruk (Pa)	4,1e-9mm Hg (= 5,46E-07 Pa)	SRC PhysProp Database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	59,7	SRC PhysProp Database
Log Kow	0,87	SRC PhysProp Database
LogKoc	1,6-2,2 (gemiddelde = 1,9 gebruikt)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov
Henry-coefficient (Pa·m³/mol)	2,0e-11 atm m³/mol (= 2,03E-06 Pa m³/mol)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov

Water:

1	niet bekend	
2	ja	vis: Lepomis macrochirus LC50: 3700 µg/L
3	kans op doorvergiftiging: nee	
4	ad hoc $MTR_{water} = 500/300 = 1,67 \mu\text{g/L}$	NOEC voor 2 basisgroepen -> $NOEC_{min}/300$

Lucht:

6	ad hoc $MTR_{lucht} = ad\ hoc MTR_{water} \times Kp_{lucht/water} = 1,67\ \mu\text{g/L} \times 8,57 \times 10^{-10}\ \text{m}^3/\text{m}^3 \times 1000\ (\text{van L} \rightarrow \text{m}^3) = 1,43 \times 10^{-6}\ \mu\text{g}/\text{m}^3$	$Kp = 8,57 \times 10^{-10}\ \text{m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0.
---	--	---

Bodem:

7	ad hoc $MTR_{bodem} = ad\ hoc MTR_{water} \times K_{bodem/water} \times 1000/1700\ (RHO_{bodem}) = 1,67\ \mu\text{g/L} \times 1,52 = 2,53\ \mu\text{g/kg wwt}$. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: $2,53 \times 3,33 = 8,44\ \mu\text{g/kg dwt}$	$K_{bodem/water} = 2,58\ \text{m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0, gebaseerd op een gemiddelde $\log K_{oc}$ van 1.9. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
---	---	--

Sediment:

7	ad hoc $MTR_{bodem} = ad\ hoc MTR_{water} \times K_{susp/water} \times 1000/1150\ (RHO_{susp.\ matter}) = 1,67\ \mu\text{g/L} \times 2,43 = 4,05\ \mu\text{g/kg wwt}$. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $4,05 \times 2,71 = 11,0\ \mu\text{g/kg dwt}$ (576 $\mu\text{g/kg dwt}$ volgens RIZA, gebaseerd op de MTR_{water} van 125 $\mu\text{g/L}$. Waarde RIVM gebruikt voor integratie humaan en eco).	$K_{susp/water} = 2,79\ \text{m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0, gebaseerd op een gemiddelde $\log K_{oc}$ van 1.9. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
---	---	---

Integratie humaan en eco:

1	$PEC_{opp.\ water\ (opgelost)} = 0,192\ \text{mg/L}$ $PEC_{lucht} = 1,05 \times 10^{-8}\ \text{mg}/\text{m}^3$ $PEC_{landbouwgrond} = 0,019\ \text{mg/kg wwt}$ $PEC_{landbouwgrond,\ poriewater} = 0,0125\ \text{mg/L}$ $PEC_{sediment} = 0,426\ \text{mg/kg wwt}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	ad hoc $MTR_{humaan} = 3\ \mu\text{g/kg lichaamsgewicht/dag}$ (RIVM, zie Bijlage 1)
3	ad hoc $MTR_{water} = 1,67\ \mu\text{g/L}$ ad hoc $MTR_{lucht} = 5,1 \times 10^{-6}\ \mu\text{g}/\text{m}^3$ ad hoc $MTR_{bodem} = 8,44\ \mu\text{g/kg dwt}$ ad hoc $MTR_{sediment} = 11\ \mu\text{g/kg dwt}$	

Humanex-output:

RDX	TDI (µg/kg bw/d)	TCA (µg/m³)	Corrected for TCA: NO		
	3.00E+00	N.A.			
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (ug/m³)	Soil (µg/kg dw)	Sediment (µg/kg dw)
MPC eco	1.67E+00	1.67E+00		8.44E+00	1.10E+01
MPC human	9.32E+01	6.07E+00	5.10E-06	3.02E+01	6.34E+02
Ratio MPC eco/MPC human	1.79E-02	2.75E-01		2.79E-01	1.73E-02
Critical MPC	1.67E+00	1.67E+00	5.10E-06	8.44E+00	1.10E+01
% importance of total exposure	89.644	10.351	0.002	0.002	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	88.806				

TDI Tolerable Daily Intake

TCA Tolerable Concentration in Air

MPC Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment

Corrected for TCA When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Exposure routes

drw drinkwater

3. Nitro-cellulose (CAS nr.: 9004-70-0):

Fysisch-chemische eigenschappen, gebruikt als input voor EUSES 1.0.
Getallen aangeleverd door RIZA, tenzij anders vermeld:

Eigenschap	Waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	387,30	epiwin
Smeltpunt (°C)	261,99	epiwin
Kookpunt (°C)	605,74	epiwin
Dampdruk (Pa)	1,41e-7 mm Hg = (1,88E-05 Pa)	epiwin
Oplosbaarheid in water (mg/L)	niet mengbaar 1E+06 (RIVM)	HSDB, toxnet.nlm.nih.gov SRC Physprop, epiwin
Log Kow	-4,56	epiwin
LogKoc	1,0	epiwin
Henry-coefficient (Pa·m³/mol)	7,18e-24 atm·m³/ml = (7,18E-19 Pa m³/mol)	

Water:

Berekende ad hoc MTR_{water} door RIZA: 57,9 µg/L op basis acute tox
Selenastrum capricornutum.

Lucht:

6	ad hoc $MTR_{lucht} = ad\ hoc\ MTR_{water} \times K_{p\ lucht/water} =$ 57,9 µg/L x 3,03x10 ⁻²² m³/m³ x 1000 (van L -> m³) = 1,75x10 ⁻¹⁷ µg/m³	Aangezien deze stof een heel lage dampspanning heeft ($K_p =$ 3,03 x 10 ⁻²² m³/m³ volgens EUSES 1.0), zullen risico's via lucht te verwaarlozen zijn. Deze norm zal dan ook verder buiten beschouwing worden gelaten.
---	--	--

Bodem:

7	$\text{ad hoc MTR}_{\text{bodem}} = \text{ad hoc MTR}_{\text{water}} \times K_{\text{bodem/water}} \times 1000/1700 (\text{RHO}_{\text{bodem}}) = 57,9 \mu\text{g/L} \times 0,29 = 17,0 \mu\text{g/kg wwt.}$ Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: $17,0 \times 3,33 = 56,7 \mu\text{g/kg dwt}$	$K_{\text{bodem/water}} = 0,5 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
---	---	---

Sediment:

7	$\text{ad hoc MTR}_{\text{bodem}} = \text{ad hoc MTR}_{\text{water}} \times K_{\text{susp/water}} \times 1000/1150 (\text{RHO}_{\text{susp. matter}}) = 57,9 \mu\text{g/L} \times 1,00 = 57,9 \mu\text{g/kg wwt.}$ Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $57,9 \times 2,71 = 157 \mu\text{g/kg dwt}$ (33,6 $\mu\text{g/kg dwt}$ volgens RIZA. De waarde van RIVM gebruikt voor integratie humaan en eco).	$K_{\text{susp/water}} = 1,15 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
---	---	---

Integratie humaan en eco:

1	$\text{PEC}_{\text{opp. water (opgelost)}} = 0,326 \text{ mg/L}$ $\text{PEC}_{\text{lucht}} = 2,79 \times 10^{-22} \text{ mg/m}^3$ $\text{PEC}_{\text{landbouwgrond}} = 7,91 \times 10^{-4} \text{ mg/kg wwt}$ $\text{PEC}_{\text{landbouwgrond, poriewater}} = 2,69 \times 10^{-3} \text{ mg/L}$ $\text{PEC}_{\text{sediment}} = 0,259 \text{ mg/kg wwt}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	Volgens Bijlage 1 was er voor nitrocellulose geen humane norm vast te stellen. Volgens het stappenschema leidt dit tot een $\text{MTR}_{\text{humaan}}$ van 1,5 $\mu\text{g/p/d}$ Dit komt overeen met een ad hoc $\text{MTR}_{\text{humaan}}$ van 2,14E-02 $\mu\text{g/kg lichaamsgewicht/dag}$.
3	$\text{ad hoc MTR}_{\text{water}} = 0,74 \mu\text{g/L}$ $\text{ad hoc MTR}_{\text{grondwater}} = 6,13 \times 10^{-3} \mu\text{g/L}$ $\text{ad hoc MTR}_{\text{lucht}} = \text{niet relevant}$ $\text{ad hoc MTR}_{\text{bodem}} = 5,91 \times 10^{-3} \mu\text{g/kg dwt}$ $\text{ad hoc MTR}_{\text{sediment}} = 1,81 \mu\text{g/kg dwt}$	

Humanex-output:

nitrocellulose	TDI (µg/kg bw/d) 2.14E-02	TCA (µg/m³) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (µg/m³)	Soil (µg/kg dw)	Sediment (µg/kg dw)
MPC eco	5.79E+01	5.79E+01		5.67E+01	1.57E+02
MPC human	7.43E-01	6.13E-03	6.36E-22	5.91E-03	1.81E+00
Ratio MPC eco/MPC human	7.79E+01	9.44E+03		9.60E+03	8.67E+01
Critical MPC	7.43E-01	6.13E-03	6.36E-22	5.91E-03	1.81E+00
% importance of total exposure	99.849	0.151	0.000	0.000	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	99.075				

TDI Tolerable Daily Intake

TCA Tolerable Concentration in Air

MPC Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment

Corrected for TCA When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Exposure routes

drw drinkwater

4. TNT (CAS nr.: 118-96-7):

Fysisch-chemische eigenschappen, gebruikt als input voor EUSES 1.0.
Getallen aangeleverd door RIZA, tenzij anders vermeld:

Eigenschap	Waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	227,13	epiwin
Smeltpunt (°C)	80,1	HSDB, toxnet.nlm.nih.gov
Kookpunt (°C)	240 (explodeert)	HSDB, toxnet.nlm.nih.gov
Dampdruk (Pa)	1,99e-4 mm Hg (= 0,0265 Pa)	HSDB, toxnet.nlm.nih.gov
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1034	epiwin
Log Kow	1,99	epiwin
LogKoc	3,2	HSDB, toxnet.nlm.nih.gov
Henry-coefficient (Pa·m³/mol)	4,57e-7 atm·m³/mol (= 0,0463 Pa m³/mol)	HSDB, toxnet.nlm.nih.gov

Water:

1	niet bekend	
2	ja	vis: <i>Ictalurus punctatus</i> LC50: 2,4 mg/L vis: <i>Oncorhynchus mykiss</i> LC50: 1,2 mg/L vis: <i>Pimephales promelas</i> LC50: 1,2 mg/L vis: <i>Lepomis macrochirus</i> LC50: 1,6 mg/L daphnia: <i>Daphnia magna</i> LC50: 0,98 mg/L alg: <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> IC50: 0,62 mg/L rotifer: <i>Brachionus calyciflorus</i> IC50: 3,19 mg/L rotifer: <i>Brachionus calyciflorus</i> NOEC: 1,0 mg/L
3	kans op doorvergiftiging: nee	
4	ad hoc $MTR_{water} = 0,62/1000 = 0,62 \mu\text{g/L}$	Basisset LC50 + 1 NOEC -> $LC50_{min}/1000$

Lucht:

6	ad hoc $MTR_{lucht} = \text{ad hoc } MTR_{water} \times Kp_{lucht/water} = 0,62 \mu\text{g/L} \times 1,95 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{m}^3 \times 1000 \text{ (van L -> m}^3\text{)} = 1,2 \times 10^{-2} \mu\text{g/m}^3$	$Kp = 1,95 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0.
---	---	--

Bodem:

Op basis EPA-ecotox database:

1	niet bekend	
2	ja	plant: <i>Brassica rapa</i> NOEC: 25 mg/kg (groei) plant: <i>Lepidium sativum</i> NOEC: 25 mg/kg (groei) regenworm: <i>Eisenia andrei</i> LC50: 365 mg/kg (sterfte) regenworm: <i>Eisenia andrei</i> NOEC: 320 mg/kg (sterfte) regenworm: <i>Eisenia andrei</i> LC50: 180 mg/kg (sterfte) regenworm: <i>Eisenia andrei</i> NOEC: 222 mg/kg (sterfte) regenworm: <i>Eisenia andrei</i> LC50: 143 mg/kg (sterfte) regenworm: <i>Eisenia andrei</i> NOEC: 110 mg/kg (sterfte) regenworm: <i>Eisenia andrei</i> NOEC: 55 mg/kg (populatie) regenworm: <i>Eisenia Andrei</i> NOEC: 222 mg/kg (sterfte) nematode: <i>Enchytraeus crypticus</i> EC50: 480 mg/kg (repro) springstaart: <i>Folsomia candida</i> LC50: 402 mg/kg (sterfte) springstaart: <i>Folsomia candida</i> EC50: 315 mg/kg (repro)
3	kans op doorvergiftiging: nee	
5	ad hoc $MTR_{bodem} = 25/300 = 83 \mu\text{g/kg dwt}$ (2,5% organisch koolstof). NL bodem bevat 5,9% organisch koolstof. De ad hoc MTR_{bodem} is daarom $83 \times 5,9/2,5 = 196 \mu\text{g/kg}$.	NOECs voor 2 basisgroepen -> $NOEC_{min}/300$

Sediment:

7	$\text{ad hoc MTR}_{\text{bodem}} = \text{ad hoc MTR}_{\text{water}} \times K_{\text{susp./water}} \times 1000/1150 (\text{RHO}_{\text{susp. matter}}) = 0,62 \mu\text{g/L} \times 35,2 = 21,8 \mu\text{g/kg wwt.}$ Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $21,8 \times 2,71 = 59,2 \mu\text{g/kg dwt}$ (180 $\mu\text{g/kg dwt}$ volgens RIZA. De waarde van RIVM gebruikt voor integratie humaan en eco).	$K_{\text{susp./water}} = 40,5 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
---	--	--

Integratie humaan en eco:

1	$\text{PEC}_{\text{opp. water (opgelost)}} = 0,275 \text{ mg/L}$ $\text{PEC}_{\text{lucht}} = 7,03 \times 10^{-5} \text{ mg/m}^3$ $\text{PEC}_{\text{landbouwgrond}} = 3,2 \text{ mg/kg wwt}$ $\text{PEC}_{\text{landbouwgrond, poriewater}} = 0,114 \text{ mg/L}$ $\text{PEC}_{\text{sediment}} = 13,1 \text{ mg/kg wwt}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	$\text{ad hoc MTR}_{\text{humaan}} = 0,5 \mu\text{g/kg lichaamsgewicht/dag}$ (RIVM, zie Bijlage 1)
3	$\text{ad hoc MTR}_{\text{water}} = 0,62 \mu\text{g/L}$ $\text{ad hoc MTR}_{\text{lucht}} = 3,96 \times 10^{-3} \mu\text{g/m}^3$ $\text{ad hoc MTR}_{\text{bodem}} = 196 \mu\text{g/kg dwt}$ $\text{ad hoc MTR}_{\text{sediment}} = 59,2 \mu\text{g/kg dwt}$	

Humanex-output:

TNT	TDI ($\mu\text{g/kg bw/d}$)	TCA ($\mu\text{g/m}^3$)	Corrected for TCA: NO		
	5.00E-01	N.A.			
	Surface water ($\mu\text{g/L}$)	Groundwater ($\mu\text{g/L}$)	Air ($\mu\text{g/m}^3$)	Soil ($\mu\text{g/kg dwt}$)	Sediment ($\mu\text{g/kg dwt}$)
MPC eco	6.20E-01	6.20E-01		1.96E+02	5.92E+01
MPC human	1.55E+01	6.42E+00	3.96E-03	5.90E+02	2.26E+03
Ratio MPC eco/MPC human	4.01E-02	9.66E-02		3.32E-01	2.62E-02
Critical MPC	6.20E-01	6.20E-01	3.96E-03	1.96E+02	5.92E+01
% importance of total exposure	95.374	3.776	0.579	0.271	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	88.689				

TDI Tolerable Daily Intake

TCA Tolerable Concentration in Air

MPC Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment

Corrected for TCA When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Exposure routes

drw drinkwater

5. Nitroglycerine (CAS nr.: 55-63-0):

Fysisch-chemische eigenschappen, gebruikt als input voor EUSES 1.0.
Getallen aangeleverd door RIZA, tenzij anders vermeld:

Eigenschap	Waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	227,09	epiwin
Smeltpunt (°C)	13,5	HSDB toxnet.nlm.nih.gov
Kookpunt (°C)	-	HSDB toxnet.nlm.nih.gov
Dampdruk (Pa)	2,0e-4 mm Hg (= 0,0267 Pa)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1800	HSDB toxnet.nlm.nih.gov
Log Kow	1,62	HSDB toxnet.nlm.nih.gov
LogKoc	2,2	HSDB toxnet.nlm.nih.gov
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	4,3e-8 atm·m ³ /mol (= 4,4E-03 Pa m ³ /mol)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov

Water:

Berekende ad hoc MTR_{water} door RIZA: 0,4 µg/L op basis acute tox
Selenastrum capricornutum.

Lucht:

6	ad hoc $MTR_{lucht} = ad\ hoc MTR_{water} \times K_{p\ lucht/water} =$ 0,4 µg/L x 1,86x10 ⁻⁶ m ³ /m ³ x 1000 (van L -> m ³) = 7,44x10 ⁻⁴ µg/m ³	$K_p = 1,86 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0.
---	--	---

Bodem:

7	ad hoc $MTR_{bodem} = ad\ hoc MTR_{water} \times K_{bodem/water} \times$ 1000/1700 (RHO_{bodem}) = 0,4 µg/L x 2,92 = 1,17 µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 1,17 x 3,33 = 3,89 µg/kg dw	$K_{bodem/water} = 4,96 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
---	--	--

Sediment:

7	ad hoc $MTR_{bodem} = ad\ hoc MTR_{water} \times K_{susp/water} \times$ 1000/1150 ($RHO_{susp. matter}$) = 0,4 µg/L x 4,23 = 1,69 µg/kg ww. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 1,69 x 2,71 = 4,58 µg/kg dw (3,7 µg/kg dw volgens RIZA. De waarde van RIVM gebruikt voor integratie humaan en eco).	$K_{susp/water} = 4,86 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
---	---	---

Integratie humaan en eco:

1	$PEC_{\text{opp. water (opgelost)}} = 0,321 \text{ mg/L}$ $PEC_{\text{lucht}} = 4,11 \times 10^{-6} \text{ mg/m}^3$ $PEC_{\text{landbouwgrond}} = 0,0506 \text{ mg/kg wwt}$ $PEC_{\text{landbouwgrond, poriewater}} = 0,0174 \text{ mg/L}$ $PEC_{\text{sediment}} = 1,28 \text{ mg/kg wwt}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	$MTR_{\text{humaan}} = 1 \text{ } \mu\text{g/kg lichaamsgewicht/dag}$ (RIVM, zie Bijlage 1)
3	$\text{ad hoc } MTR_{\text{water}} = 0,4 \text{ } \mu\text{g/L}$ $\text{ad hoc } MTR_{\text{lucht}} = 4,26 \times 10^{-4} \text{ } \mu\text{g/m}^3$ $\text{ad hoc } MTR_{\text{bodem}} = 3,89 \mu\text{g/kg dwt}$ $\text{ad hoc } MTR_{\text{sediment}} = 4,58 \text{ } \mu\text{g/kg dwt}$	

Humanex-output:

nitroglycerine	TDI ($\mu\text{g/kg bw/d}$)	TCA ($\mu\text{g/m}^3$)	Corrected for TCA: NO		
	1.00E+00	N.A.			
	Surface water ($\mu\text{g/L}$)	Groundwater ($\mu\text{g/L}$)	Air ($\mu\text{g/m}^3$)	Soil ($\mu\text{g/kg dwt}$)	Sediment ($\mu\text{g/kg dwt}$)
MPC eco	4.00E-01	4.00E-01		3.89E+00	4.58E+00
MPC human	3.32E+01	1.80E+00	4.26E-04	1.72E+01	4.07E+02
Ratio MPC eco/MPC human	1.20E-02	2.22E-01		2.27E-01	1.13E-02
Critical MPC	4.00E-01	4.00E-01	4.26E-04	3.89E+00	4.58E+00
% importance of total exposure	98.450	1.405	0.141	0.004	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	95.022				

TDI Tolerable Daily Intake

TCA Tolerable Concentration in Air

MPC Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment

Corrected for TCA When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Exposure routes

drw drinkwater

Afleiding voorlopige humane MTRs voor vijf munitie-gerelateerde verbindingen

Advies aangevraagd door: Drs. R.J. Hansler (RIVM/SEC)
Datum aanvraag: 17-11-2005
Datum advies: 12-12-2005
Opsteller(s) advies: P.J.C.M. Janssen (RIVM/SIR)
Toetser(s) advies: M.T.M. van Raaij (RIVM/SIR)
Projectnummer RIVM: M/601503/05/UE

1. Inleiding

In verband met een vergunningsverlening door Rijkswaterstaat voor militaire oefeningen door Ministerie van Defensie boven de Vliehors (Vlieland) heeft het RIZA aan RIVM/SEC verzocht om voorlopige humane normen voor de volgende verbindingen:

- ammoniumperchloraat
- hexahydro-135-trinitro-123-triazine
- nitrocellulose
- nitroglycerine
- TNT.

Voor geen van deze stoffen is de humane toxicologie ooit beoordeeld door het RIVM. Teneinde te voldoen aan het verzoek is daarom gezocht in bekende internationale bronnen om te bepalen of andere erkende instanties zoals WHO, US-EPA, US-ATSDR etc. normen hebben afgeleid. Wanneer dergelijke normen beschikbaar zijn, ligt het voor de hand deze normen te gebruiken voor de huidige vraagstelling, tenzij uiteraard de afleiding niet acceptabel geacht wordt. Voor die stoffen waarvoor geen (geschikte) orale normen beschikbaar waren, is gepoogd studies op te sporen in de literatuur op basis waarvan alsnog een voorlopige waarde kon worden afgeleid.

2. Ammoniumperchloraat (CAS 7790-98-9)

Voor wat betreft de lange-termijn orale toxicologie is de werking van het perchloraat-ion de kritische factor. Perchloraat is onlangs beoordeeld door de Amerikaanse National Research Council (NRC 2005). De US-EPA heeft haar afleiding van een RfD voor perchloraat (US-EPA 2005) gebaseerd op dit NRC-document.

Perchloraat verstoort de normale opname van jodium door de schildklier, een effect dat zowel in knaagdieren als mensen is aangetoond. Vergelijking van kortdurende testen wijst erop dat de intiële inhibitie van jodiumopname vergelijkbaar is bij de rat en de mens maar dat vervolgens in de rat sneller compensatie optreedt (dit houdt waarschijnlijk verband met de geringere reservecapaciteit voor de productie van schildklierhormonen bij de rat). In een studie in gezonde menselijke vrijwilligers had een dosering van 0.007 mg

perchloraat/kg lichaamsgewicht per dag gedurende 14 dagen geen nadelig effect op de jodiumopname door de schildklier (LOAEL 0.02 mg/kg lichaamsgewicht). Op basis van deze NOAEL leidde de US-EPA een orale Chronic Reference Dose (RfD) van 0.7 µg/kg lichaamsgewicht/dag. In deze afleiding werd een onzekerheidsfactor van 10 toegepast voor extrapolatie naar gevoelige groepen in de humane populatie. Voor extrapolatie naar chronische expositie werd geen extra factor noodzakelijk geacht omdat de NOAEL geldt voor een precursor van toxiciteit (remming jodiumopname) en bij afwezigheid van dit effect op korte termijn zal zich geen effect op de schildklierfunctie op de lange termijn voordoen.

3. Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,2,3-triazine (CAS 121-82-4)

Deze stof is vooral bekend onder de codenaam RDX. De toxicologie van RDX is beoordeeld door de US-EPA in 1993 en door de ATSDR (een andere Amerikaanse overheidsinstantie) in 1995. Kritische effecten zoals waargenomen in rattenstudies waren neurotoxiciteit en beschadiging van de testes en prostaat. In een chronische studie in ratten deed neurotoxiciteit zich alleen voor bij de hoogste dosering van 40 mg/kg lichaamsgewicht/dag maar ontstekingsreacties in de prostaat traden al op bij 1.5 en 8.0 mg/kg lichaamsgewicht/dag. Daarnaast werden in deze studie ook effecten op lever en nieren waargenomen. De NOAEL in deze studie was 0.3 mg/kg lichaamsgewicht/dag. Op basis van deze NOAEL leidde de US-EPA een chronische RfD af van 0.003 mg/kg lichaamsgewicht. In deze afleiding werd een onzekerheidsfactor van 100 toegepast, opgebouwd uit een factor van 10 voor extrapolatie van proefdier naar mens en een factor 10 voor extrapolatie naar gevoelige groepen in de humane populatie.

4. Nitrocellulose (9004-70-0)

Deze stof is niet beoordeeld door erkende instanties. De beschikbare toxicologische informatie over de stof is uiterst beperkt. De schaarse gegevens (HSDB, Sax) wijzen op een geringe toxische potentie. De beschikbare gegevens zijn echter te beperkt om een norm te kunnen afleiden.

5. Nitroglycerine (CAS 55-63-7)

Voor deze stof zijn geen evaluaties door erkende instanties beschikbaar. De beschikbare toxicologische informatie over de stof wordt samengevat in het handboek Patty's Industrial Hygiene en in documentatie ten behoeve van de Amerikaanse TLV-afleiding (arbeidstoxicologische grenswaarde van AIHA). Nitroglycerine veroorzaakt net als andere alifatische nitraten methemoglobinevorming. Nog belangrijker echter is verwijding van bloedvaten, een werking die ten grondslag ligt aan medische toepassing van de stof in de behandeling van angina pectoris. Voor de orale route worden tabletten toegediend van 300 tot 600 µg maar in bepaalde gevallen worden ook hogere doses toegepast. Als bijwerking van de vaatverwijdende werking treedt vaak hoofdpijn op, een

symptoom dat ook bekend van arbeidsexposities in dynamietfabrieken (dynamiet bestaat uit een mengsel van nitroglycerine en kiezelgoer). Een NOAEL voor de farmacologische werking als vaatverwijdend agens is niet bekend. Een andere medische toepassing betreft de lokale topicale applicatie tegen huidkloven.

Ellis et al. (1984) rapporteren de resultaten van orale toxiciteitsstudies in muis, rat en hond. In de hond was methemoglobinevorming het gevoeligste effect. Bij 12 maanden toediening was het gehalte methemoglobine verhoogd bij alle doseringen, inclusief de laagste van 1 mg/kg lichaamsgewicht/dag. In een 24-maandenstudie in ratten werd eveneens methemoglobinemie gevonden maar daarnaast ook diverse andere effecten. Bij de hoogste dosering van 1% in het voer (resp. 363 en 434 mg/kg lichaamsgewicht/dag in mannetjes en vrouwtjes) waren de incidenties van levercarcinomen verhoogd terwijl bij de lagere doseringen (0.1 en 0.01% in het voer, overeenkomend met respectievelijk 31.5 en 38.1 mg/kg lichaamsgewicht en 3.04 en 3.99 mg/kg lichaamsgewicht/dag in mannetjes en vrouwtjes) nodules of foci waarneembaar waren (dosis-gerelateerde levercarcinogenese). Ook werd fibrose van de galgangen gevonden bij 1% en was bij dit doseringsniveau bovendien de incidentie interstitiële cel-tumoren in de testes verhoogd. Daarnaast was ook pigmentophoping aanwezig in milt en nieren (dit treedt op als secundair effect van methemoglobinevorming). Bij muizen deden zich gedragsveranderingen, groeivertraging en methemoginevorming voor (NOAEL 0.01% in het voer, overeenkomend met respectievelijk 3.04 en 3.99 mg/kg lichaamsgewicht/dag in mannetjes en vrouwtjes).

Nitroglycerine is opgenomen in de Cancer Potency Database van de Universiteit van California. Dit is een database van de resultaten van dierexperimentele carcinogeniteitsstudies. Voor nitroglycerine vermeldt dat databas een TD_{50} van 183 mg/kg lichaamsgewicht/dag.

Voor het afleiden van een voorlopige norm voor nitroglycerine komen de volgende items in aanmerking:

- kwantitatieve schatting van kankerrisico
- De laagste bekende LOAEL van 1 mg/kg lichaamsgewicht/dag (12 maanden hond).

De HSDB-database vermeldt negatieve in vivo genotoxiciteitsstudies, wat erop wijst dat de in ratten waargenomen tumoren ontstaan door niet-genotoxisch werkingsmechanisme. Bijgevolg ligt berekening van een norm op basis van de TD_{50} niet voor de hand. Op basis van de LOAEL van 1 mg/kg lichaamsgewicht/dag kan met een veiligheidsfactor van 1000 een voorlopige orale norm van 1 µg/kg lichaamsgewicht/dag berekend worden. De opbouw van deze factor: 10 voor extrapolatie van proefdier naar mens, 10 voor extrapolatie naar gevoelige individuen in de populatie en 10 voor extrapolatie van LOAEL naar NOAEL en voor de beperkte duur van het experiment.

6. Trinitrotolueen (TNT) (CAS 118-96-7)

TNT kent verschillende isomeren, waarvan 2,4,6-TNT de bekendste is. Deze stof is beoordeeld door de US-EPA (1993) en ATSDR (1995). Daarnaast is er een evaluatie door de WHO/IARC specifiek gericht op classificatie voor carcinogene werking. Deze laatste beoordeling leidde tot plaatsing in Groep 3, wat betekent dat de beschikbare data onvoldoende waren om stof te kunnen classificeren.

Het belangrijkste doelorgaan voor de toxische werking van 2,4,6-TNT is de lever. Bij de productie van de stof hebben zich in het verleden (vóór introductie van beschermende maatregelen) tal van gevallen van leveraandoeningen bij werknemers voorgedaan. Ook in proefdierstudies waren levereffecten dominant. In experimenten uitgevoerd door het Amerikaanse Ministerie van Defensie werd in honden bij doseringen ≥ 0.5 mg/kg lichaamsgewicht/dag over een periode van 26 weken in de lever verhoogd levergewicht, zwelling en vertroebeling van cellen en cirrhose en hemosiderose waargenomen. Bij 0.5 mg/kg lichaamsgewicht/dag was hiervan alleen de celzwelling en - vertroebeling in lichte mate waarneembaar. Op basis van deze LOAEL leidde de US-EPA een chronische RfD af van 0.5 μ g/kg lichaamsgewicht. In deze afleiding werd een totale onzekerheidsfactor van 1000 toegepast, opgebouwd uit niet gespecificeerde subfactoren voor extrapolatie van proefdier naar mens, van gemiddelde individu naar gevoelig individu, van subchronisch naar chronisch en LOAEL naar NOAEL.

7. Conclusie

Voorstel voor voorlopige humane normen:

Ammoniumperchloraat	0.7 μ g/kg lichaamsgewicht/dag
Hexahydro-135-trinitro-123-triazine	3 μ g/kg lichaamsgewicht/dag
Nitrocellulose	geen waarde afleidbaar
Nitroglycerine	1 μ g/kg lichaamsgewicht/dag
TNT	0.5 μ g/kg lichaamsgewicht/dag

8. Referenties

ACGIH (1991) Documentation of the threshold limit values and biological exposure indices. American Conference of Governmental Industrial Hygienists, Cincinnati, Ohio.

ATSDR (1995) Toxicological profile for RDX. Juni 1995.

CPDB (2004) <http://potency.berkeley.edu/cpdb.html>

Ellis, H.V. et al. (1984) subacute and chronic toxicity studies of trinitroglycerin in dogs, rats and mice. *Fundamental and Applied Toxicology* **4**, 248-260.

NRC (2005) US National Research Council – Health implications of perchlorate ingestion.

Patty's Industrial Hygiene and Toxicology. Volume IIB: Toxicology 4th. Revised Edition. G.D. Clayton, F.E. Clayton (eds.), John Wiley and Sons Inc., 1994.

US-EPA (2005) Chronic Reference Dose for perchlorate and perchlorate salts. IRIS-file d.d. 18-02-2005.

US-EPA (1993a) Chronic Reference Dose for Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine (RDX); CASRN 121-82-4. d.d. 01-02-1993.

US-EPA (1993a) Chronic Reference Dose for 2,4,6-trinitrotoluene; CAS 118-96-7. d.d. 01-02-1993

Bijlage B

Rapportageformulier epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer

.....

Opdrachtgegevens

Projectnummer	M/601570/06/AA
Opdrachtgever	RIZA, Margriet Beek
Datum opdracht	05-01-2006
Datum rapportage	13-02-2006
Auteur(s)	R.H.L.J. Fleuren
Toetser	Eric Verbruggen
Opdracht	Afleiden ad hoc MTR waarden voor epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer op basis van door RIZA aangeleverde informatie

Epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer

1. Samenvatting

Door het ontbreken van een betrouwbare waarde voor het molekuulgewicht, Koc en dampdruk konden EUSES 1.0 en Humanex niet gebruikt worden en daardoor konden de humane en milieu ad hoc MTR's voor bodem, sediment en lucht niet berekend worden. De humane ad hoc MTR voor water is gebaseerd op de drinkwater norm. In onderstaande tabel staan de afgeleide ad hoc MTR's voor de verschillende compartimenten.

Stofnaam	epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer		
CAS-nr.	25988-97-0		
ad hoc MTR _{water} (geïntegreerd)	0,05	µg/L	
ad hoc MTR _{grondwater} (geïntegreerd)	0,05	µg/L	
ad hoc MTR _{lucht}	niet te berekenen	µg/m ³	
ad hoc MTR _{bodem}	niet te berekenen	µg/kg dw	
ad hoc MTR _{sediment}	niet te berekenen	µg/kg dw	

2. Inleiding

Door RIZA is opdracht verleend om ad hoc MTR's af te leiden voor de stof epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer op basis van door RIZA aangeleverde fysisch-chemische en ecotoxicologische data.

3. Methodiek

Er is in eerste instantie getracht te werken volgens de methode zoals beschreven in RIVM-rapport 601503024 (Hansler et al., in concept). De fysisch-chemische data zijn afkomstig uit een Material Safety Data Sheet (MSDS, 2003) voor een mengsel van epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer en water (50:50%). Het is daarom niet duidelijk of de gerapporteerde fysisch-chemische data betrekking hebben op het mengsel of op zuiver epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer. Fysisch-chemische data voor de pure stof kunnen dus mogelijk afwijken, maar deze data zijn niet te vinden.

Door het ontbreken van betrouwbare getallen/schattingen voor de Koc, de dampdruk en het molekuulgewicht bleek het niet mogelijk om EUSES 1.0 te gebruiken (voor de schatting van de regionale PEC's). Het gebruik van Humanex (voor de integratie van humane en milieu MTR's) was daardoor ook niet mogelijk.

Er is daarom voor gekozen om voor deze stof alleen een geïntegreerde MTR voor water af te leiden, waarbij voor de humane MTR is uitgegaan van de drinkwaternorm (zie paragraaf 4.5.3).

4. Resultaten

4.1 Identiteit

Stofnaam	Epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer
CAS-nummer	25988-97-0
Stofgroep	niet bekend
Synoniemen	alkylamine-epichlorohydrin, Tramfloc
Molecuulformule	niet bekend
Structuurformule	niet bekend
Evt. bijzonderheden	niet bekend

4.2 Fysisch-chemische eigenschappen

Eigenschap	Waarde	Referentie
Molecuulgewicht (g/mol)	niet bekend ^a	MSDS, 2003
Smeltpunt (°C)	-3 – 0	MSDS, 2003
Kookpunt (°C)	> 100	MSDS, 2003
Dampdruk (Pa)	58 mm Hg @ 38 C = 7,73x10 ³ Pa = 3,33 x10 ³ Pa bij 25 °C ^b	MSDS, 2003
Oplosbaarheid in water (mg/L)	volledig oplosbaar	MSDS, 2003
Log Kow	< 1 ^c	MSDS, 2003
LogKoc	< 1,54 ^d	QSAR (TGD: ECB, 2003)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	onbekend	
Relatieve dichtheid	1,14-1,19	MSDS, 2003
pKa	onbekend	
BCF	onbekend	
(Aerobe bio)degradatie	niet gemakkelijk afbreekbaar	Sicherheidsdatenblad, 2004

- a: Het molecuulgewicht is onbekend, maar wel noodzakelijk als invoer voor EUSES 1.0. Het ontbreken hiervan zorgt er dus mede voor (samen met het ontbreken van een betrouwbaar getal/schatting voor logKoc en dampdruk) dat EUSES 1.0 (en Humanex) niet gebruikt kunnen worden.
- b: omgerekend naar 25 °C m.b.v. EUSES 2.0.3. Het betreft hier echter hoogstwaarschijnlijk de dampdruk a.g.v. het water in de formulering. Het is onwaarschijnlijk dat een polymeer een dergelijke, hoge dampdruk heeft.
- c: Waarde gerapporteerd door RIZA (<10) was niet in overeenstemming met de goede wateroplosbaarheid. Uit MSDS bleek dat het gaat om een K_{ow} van <10, dus een logKow van <1.
- d: Berekend m.b.v. de QSAR voor "non-hydrophobics" uit de TGD, op basis van de log Kow.

4.3 Humaan-toxicologische gegevens

Organisme	Eigenschap	Waarde	Referentie
Rat	LD50	>2000 mg/kg	Sicherheitsdatenblatt, 2004

4.4 Ecotoxicologische gegevens

Organisme	Duur test	Eigenschap	Waarde	Referentie
Vissen				
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,14 mg/L	MSDS, 2003 ^a
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,22 mg/L	MSDS, 2003 ^a
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	0,14 mg/L	MSDS, 2003 ^a
<i>Danio rerio</i>	96 uur	LD50	<1 mg/L	Sicherheitsdatenblatt, 2004
Kreeftachtigen				
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	0,14 mg/L	MSDS, 2003 ^a
Algen				
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	72 uur	EC50 (biomassa)	< 1 mg/L	Sicherheitsdatenblatt, 2004

- a: Tramfloc 860-889 bestaat uit 50% epichloorhydrine-dimethylamine-copolymeer en 50% water. Volgens de MSDS wordt de aquatische toxiciteit een factor 10-100 lager als er 5 -10 mg/L organisch koolstof in het water zit. Dit zou duiden op een hoge logKoc, wat volledig in tegenspraak is met de gerapporteerde logKow en wateroplosbaarheid. De onbetrouwbaarheid van de gerapporteerde waarden van deze parameters (wateroplosbaarheid, logKow, logKoc, dampdruk) neemt hierdoor verder toe.

4.5 Afleiding ad hoc MTR's

In onderstaande tabellen worden de ad hoc MTR's voor de mens en milieu afgeleid. De opbouw van de tabellen correspondeert met de stappenschema's in RIVM rapport 601503024.

4.5.1. Ad hoc MTR_{humaan}

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3	nee -> $aMTR_{\text{humaan}} = 1,5 \mu\text{g/p/d}$	
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13	nee	
14		
15		
16		
17		
18	$aMTR_{\text{humaan}} = 1,5 \mu\text{g/p/d} = 21 \text{ ng/kg}$ lichaamsgewicht/d (uitgaande van een persoon van 70 kg)	

4.5.2 Ad hoc MTR_{eco}

Water compartiment:

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	ja	
3	nee	$\log Kow < 1$
4		
5	$aMTR_{\text{water}} = 0,05 \mu\text{g/L}$	Harde LC50 voor 2 van de 3 basisgroepen aanwezig. MTR gebaseerd op de laagste LC50/3000 (0,14 mg/L)
6		
7		

Lucht compartiment:

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4	ja	
5		
6	geen ad hoc MTR_{lucht}	Doordat er geen Henry coëfficiënt kan worden berekend, kan de adhoc MTR_{lucht} niet berekend worden vanuit de MTR_{water}

Bodem compartiment:

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, $aMTR_{water} = 0,05 \mu\text{g/L}$	
7	ad hoc MTR_{bodem} = niet te berekenen	Omdat er geen betrouwbare Koc beschikbaar is, kan er geen ad hoc MTR_{bodem} berekend worden vanuit de ad hoc MTR_{water} .

Sediment compartiment:

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, $aMTR_{water} = 0,05 \mu\text{g/L}$	
7	ad hoc MTR_{bodem} = niet te berekenen	Omdat er geen betrouwbare Koc beschikbaar is, kan er geen ad hoc $MTR_{sediment}$ berekend worden vanuit de ad hoc MTR_{water} .

4.5.3 Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

Doordat EUSES 1.0 en Humanex niet te gebruiken zijn vanwege het ontbreken van een betrouwbare waarde voor de logKoc, dampdruk en het molekulgewicht, kunnen de humane en milieu ad hoc MTR's voor de compartimenten lucht, bodem en sediment niet berekend worden. Wat betreft het watercompartiment kan de humane ad hoc MTR met die voor milieu vergeleken kunnen worden door de humane MTR om te rekenen naar een drinkwaternorm volgens Annex V van de KaderRichtlijn Water (Lepper, 2004):

$$MTR_{drinkwater} = \frac{MTR_{humaan} \times 0,1 \times \text{lichaamsgewicht}}{DW_{cons}}$$

waarbij:

$MTR_{drinkwater}$ [mg/L] = maximaal toegestane concentratie in drinkwater

MTR_{humaan} [mg/kg bw/d] = maximaal toegestane risico voor de mens

0,1 = omrekeningsfactor uitgaande van 10% van de totale opname van de stof via drinkwater [-]

Lichaamsgewicht = lichaamsgewicht per persoon [70 kg]

DW_{cons} = drinkwaterconsumptie per persoon per dag [2 l/d]

Dit resulteert in een ad hoc MTR_{humaan} voor drinkwater van 75 ng/L. De ad hoc MTR_{eco} voor water is 50 ng/L. De geïntegreerde norm voor water wordt gesteld op de laagste waarde, dus 50 ng/L (= 0,05 µg/l).

6. Conclusies

Door het ontbreken van een betrouwbare waarde voor logK_{oc}, dampdruk en het molekuulgewicht, kon alleen een geïntegreerde norm voor water worden afgeleid:

ad hoc MTR_{water} (geïntegreerd)	0,05	µg/L
ad hoc $MTR_{\text{grondwater}}$ (geïntegreerd)	0,05	µg/L
ad hoc MTR_{lucht}	niet te berekenen	µg/m ³
ad hoc MTR_{bodem}	niet te berekenen	µg/kg dwt
ad hoc MTR_{sediment}	niet te berekenen	µg/kg dwt

Referenties

ECB. 2003. Technical Guidance Document on Risk Assessment. Report 20418 EN. European Commission, European Chemicals Bureau, Ispra, Italy.

Hansler RJ, Traas TP, Mennes WC (in concept). Handreiking voor de afleiding van indicatieve milieukwaliteitsnormen. RIVM-rapport nr. 601503024. Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu, Bilthoven, Nederland.

Lepper P. 2004. Manual of the methodological framework used to derive quality standards for priority substances of the water framework directive. Fraunhofer-Institute Molecular Biology and Applied Biology. Annex 5. 30 pp.

MSDS. 2003. Material Safety Data Sheet for Tramfloc® 860-899.

Sicherheitsdatenblatt. 2004. Sicherheitsdatenblatt für N,N-Dimethyl-2-hydroxypropylammoniumchlorid polymer. Staudinger GMBH, Wels, Austria.

Bijlage C

Rapportageformulier 2,2,5,5-tetramethyl-tetrahydrofuran

.....

Opdrachtgegevens

Projectnummer	M/601570/06/AA
Opdrachtgever	RIZA, Margriet Beek
Datum opdracht	25-04-2006
Datum rapportage	01-05-2006
Auteur(s)	Roel Fleuren, Paul Janssen
Toetser	Eric Verbruggen (milieu), Wim Mennes (humaan)
Opdracht	Afleiden van ad hoc MTR-waarden voor 2,2,5,5-tetramethyl-tetrahydrofuran

2,2,5,5-tetramethyl-tetrahydrofuran

1. Samenvatting

In de onderstaande tabel staan de afgeleide ad hoc MTR-waarden voor 2,2,5,5-tetramethyl-tetrahydrofuran weergegeven.

Stofnaam	2,2,5,5-tetramethyl-tetrahydrofuran	
CAS-nr.	15045-43-9	
ad hoc MTR _{water}	4,19	µg/L
ad hoc MTR _{grondwater}	0,24	µg/L
ad hoc MTR _{lucht}	3,20	µg/m ³
ad hoc MTR _{bodem}	0,89	µg/kg dwt
ad hoc MTR _{sediment}	22,9	µg/kg dwt

Bovenstaande normen zijn gebaseerd op de humane MTR's (= meest kritische MTR's).

2. Inleiding

Op verzoek van RIZA zijn met spoed ad hoc MTR-waarden afgeleid voor 2,2,5,5-tetramethyl-hydrofuran i.v.m. de uitbreiding van een productieproces waarbij deze stof vrijkomt door een bedrijf in Deventer.

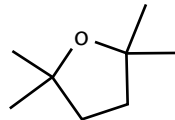
3. Methodiek

De ad hoc MTR-waarden zijn afgeleid zoals beschreven in RIVM-rapport 601503024 (Hansler et al., draft versie, 2006). In het geval van de humane norm is er afgeweken van de in dat rapport vermelde assessment factoren op basis van expert judgement (zie paragraaf 4.5 voor nadere toelichting).

4. Resultaten

Samenvatting	
Stofnaam	2,2,5,5-tetramethyl tetrahydrofuran (TMTHF)
Cas-nummer	15045-43-9

4.1. Identiteit

Stofnaam	2,2,5,5-tetramethyl tetrahydrofuran
CAS-nummer	15045-43-9
Stofgroep	tetrahydrofuran derivaat
Synoniemen	Tetrahydro-2,2,5,5-tetramethylfuran
Molecuulformule	C ₈ H ₁₆ O
Structuurformule	

4.2. Fysisch-chemische eigenschappen

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	128,22 *	epiwin
Smeltpunt (°C)	-	-
Kookpunt (°C)	112	SRC PhysProp
Dampdruk (Pa)	1919 (geschat bij 25 °C)	SRC PhysProp
Oplosbaarheid in water (mg/L)	3391 1627 1630 (geschat bij 25 °C)	epiwin (Water NT) epiwin (WSKOWWIN met LogKow = 2.06) SRC PhysProp
Log Kow	2,68 2,60 2,06 (experimenteel)	epiwin Medchem ClogP SRC PhysProp; Medchem ClogPstar
LogKoc	1,44 1,77	epiwin 3.12 EUSES 1.0
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	26,5 (geschat bij 25 °C) 151	SRC PhysProp EUSES 1.0
Relatieve dichtheid (g/m ³)	-	-
pKa	-	-

* Dikgedrukte waarden zijn als input gebruikt voor EUSES 1.0/Humanex.

4.3. Gedrag en lotgevallen in het milieu

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	7,7	epiwin 3.12
(Aerobe bio)degradatie	niet gemakkelijk afbreekbaar (gebaseerd op Biowin 1 & 2 (-0,0287 & 0,0034), omdat Biowin 5 & 6 (MITI) slechts marginaal over de grens van wel of niet gemakkelijk afbreekbaar zaten (0,5085 & 0,5164)).	epiwin 3.12

4.4. Toxiciteit

4.4.1 Gezondheidseffecten

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	geen gegevens gevonden	-
carcinogeniteit	geen gegevens gevonden	-
mutageniteit	geen gegevens gevonden	-

4.4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	168		e-toxBase
vissen	96 uur	LC50	83,5	QSAR	ecosar
vissen	14 dagen	LC50	152,6	QSAR	ecosar
vissen	30 dagen	ChV	10,86	QSAR	ecosar
cladocera					
Daphnia	48 uur	LC50	89,8	QSAR	ecosar
Daphnia	16 dagen	LC50	4,73	QSAR	ecosar
algen					
groene alg	96 uur	EC50	56,3	QSAR	ecosar
groene alg	96 uur	ChV	5,83	QSAR	ecosar

4.5 MTR (via stappenschema)

$$aMTR_{HUMAAN}$$

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	Wel beoordeling verwante stof tetrahydrofuran (THF) (RIVM-rapport no. 725201005 uit 1991)
2	Nee	
3	Nee	
4	Nee	
5	Nee	
6	Ja (voor THF)	
7	Ja (voor THF)	
8	Ja (voor THF) 295 mg/m ³ uit kortdurende inhalatoire dierstudies	Zoals geconcludeerd in RIVM (1991)
9	Nvt	
10	Totale factor van 1000 werd toegepast in RIVM (1991). Naar verwachting zal metabolisme van tetramethyltetrahydrofuran afwijken (met name hydroxylering methylgroepen). Voor hieruit voortvloeiende onzekerheid extra factor 10. Totale factor dus 10000	Zeer hoge factor van 10000 maakt dat uitkomst beperkte betrouwbaarheid bezit
11	Ja	
12	TDI 1 µg/kg lg/dag, TCL 3,5 µg/m ³ (1/10 van waarden voor THF)	
13	Nee	
14	Nee	
15	Nee	
16	Nvt	
17	Nvt	
18	TDI 1 µg/kg lg/dag, TCL 3,5 µg/m ³	Waarden voor THF gedeeld door extra onzekerheidsfactor van 10

$$aMTR_{ECO} \text{ (grond)water}$$

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	ja	
3	nee	
4		
5	Ad hoc $MTR_{water} = 168 \text{ mg/L} / 10000 = 16,8 \text{ µg/L}$	De QSAR waarden worden niet betrouwbaar genoeg geacht om mee te nemen in de ad hoc MTR afleiding (getuige de 14d LC50 van 153 mg/l voor vissen die hoger uitvalt dan die voor 96 uur (83.5 mg/l)). De adhoc MTR voor het aquatische milieu worden dus gebaseerd op de experimentele LC50 voor vissen van 168 mg/L met een AF 10.000 erover.

$aMTR_{ECO}$ lucht

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4	ja, ad hoc $MTR_{Water} = 16,8 \mu\text{g/L}$	
5		
6	ad hoc $MTR_{lucht} = \text{ad hoc } MTR_{water} \times K_{p_{lucht/water}} = 16,8 \mu\text{g/L} \times 0,0637 \text{ m}^3/\text{m}^3 \times 1000 \text{ (van L} \rightarrow \text{m}^3) = 1070 \mu\text{g/m}^3$	$K_{p_{lucht/water}} = 0,0637 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0.
7	1070 $\mu\text{g/m}^3$ gebruikt voor integratie humaan en eco.	

$aMTR_{ECO}$ bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc $MTR_{Water} = 16,8 \mu\text{g/L}$	
7	ad hoc $MTR_{bodem} = \text{ad hoc } MTR_{water} \times K_{p_{bodem/water}} \times 1000/1700 \text{ (RHO}_{bodem}) = 16,8 \mu\text{g/L} \times 1,16 = 19,6 \mu\text{g/kg wwt.}$ Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: $19,6 \times 3,33 = 65,2 \mu\text{g/kg dwt}$	$K_{p_{bodem/water}} = 1,98 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	ja	
9	ja	
10	65,2 $\mu\text{g/kg dwt}$ bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

$aMTR_{ECO}$ sediment

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc $MTR_{Water} = 16,8 \mu\text{g/L}$	
7	ad hoc $MTR_{bodem} = \text{ad hoc } MTR_{water} \times K_{p_{susp/water}} \times 1000/1150 \text{ (RHO}_{susp. matter}) = 16,8 \mu\text{g/L} \times 2,06 = 34,6 \mu\text{g/kg wwt.}$ Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $34,6 \times 2,71 = 93,8 \mu\text{g/kg dwt}$	$K_{p_{susp/water}} = 2,37 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 1.0. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	93,8 $\mu\text{g/kg dwt}$ sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie $aMTR_{HUMAAN}$ en $aMTR_{ECO}$

stap	resultaat	opmerking
1	$PEC_{opp. \text{ water (opgelost)}} = 3,54 \times 10^{-4} \text{ mg/L}$ $PEC_{lucht} = 2,7 \times 10^{-4} \text{ mg/m}^3$ $PEC_{landbouwgrond} = 2,3 \times 10^{-5} \text{ mg/kg ww}$ $PEC_{landbouwgrond, \text{ poriewater}} = 1,98 \times 10^{-5} \text{ mg/L}$ $PEC_{sediment} = 6,31 \times 10^{-4} \text{ mg/kg ww}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex-output:

2,2,5,5-Tetramethyl tetrahydrofuran	TDI ($\mu\text{g/kg bw/d}$) 1.00E+00	TCA ($\mu\text{g/m}^3$) 3.50E+00	Corrected for TCA: NO		
	Surface water ($\mu\text{g/L}$)	Groundwater ($\mu\text{g/L}$)	Air ($\mu\text{g/m}^3$)	Soil ($\mu\text{g/kg dwt}$)	Sediment ($\mu\text{g/kg dwt}$)
MPC eco	1.68E+01	1.68E+01		6.52E+01	9.38E+01
MPC human	4.19E+00	2.35E-01	3.20E+00	8.93E-01	2.29E+01
Ratio MPC eco/MPC human	4.01E+00	7.16E+01		7.30E+01	4.09E+00
Critical MPC	4.19E+00	2.35E-01	3.20E+00	8.93E-01	2.29E+01
% importance of total exposure	8.517	0.051	91.431	0.000	
Dominant route of exposure	air				
% of dominant route	91.381				
TDI	Tolerable Daily Intake				
TCA	Tolerable Concentration in Air				
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment				
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)				

5. Referenties

Hansler, R.J.; Traas, T.P.; Mennes, W.C. (2006, draft). Handreiking voor de afleiding van indicatieve milieukwaliteitsnormen. RIVM rapport nr. 601503024/2006, RIVM, Bilthoven, Nederland.

EPIWIN, US EPA, (Syracuse Research Corp.): <http://www.epa.gov/opptintr/exposure/docs/episuite.htm>

SRC PhysProp. Physical properties database (Syracuse Research Corp.): <http://www.syrres.com/esc/physdemo.htm>

MEDCHEM, database for experimental (logPstar) and QSAR based logKow: <http://www.daylight.com/cgi-bin/contrib/pcmodels.cgi>

EUSES 1.00. European Union System for the evaluation of Substances.

RIVM (2005). e-toxBase v2.0.

ECOSAR, QSAR based aquatic toxicity database (US EPA). ECOSAR, QSAR based aquatic toxicity database (US EPA): <http://www.epa.gov/opptintr/exposure/docs/episuite.htm>

Vermeire, T.G.; Van Apeldoorn, M.E.; De Fouw, J.C.; Janssen, P.J.C.M. (1991). Voorstel voor de humaan-toxicologische onderbouwing van C-(toetsings)waarden. RIVM rapport nr. 725201005, RIVM, Bilthoven, Nederland

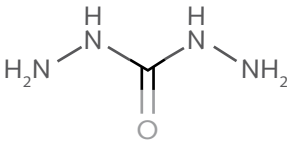
Bijlage D

Rapportageformulier carbohydrazide

Samenvatting		
Stofnaam	Carbohydrazide	
Cas-nummer	497-18-7	
Voorgestelde ad hoc mtr*	(grond)water	Oppervlaktewater: 0,74 µg/L Drinkwater: 4,41x10 ⁻³ µg/L
	Lucht	7,66x10 ⁻⁸ µg/m ³
	Bodem	1,76x10 ⁻³ µg/kg dw
	Sediment	1,37 µg/kg dw

* Voorzichtigheid is geboden met deze normen, aangezien deze gebaseerd zijn op evenwichtspartitie, waarbij gebruik is gemaakt van een op een log Kow van -3,22 gebaseerde log Koc (QSAR). De log Kow van -3.22 valt buiten het applicability domain van deze QSAR, waardoor de berekende log Koc minder betrouwbaar wordt geacht. Gezien de erg lage log Kow is de verwachting dat de stof voor (bijna) 100% in de waterfase zal zitten.

1. Identiteit

Stofnaam	Carbohydrazide
CAS-nummer	497-18-7
Stofgroep	hydrazines (volgens Epiwin 3.12)
Synoniemen	1,3-diaminourea; Carbohydrazide; Carbonic dihydrazide 1,3-Diaminomocovina [Czech]; 1,3-Diaminourea; Carbazic acid, hydrazide; Carbazide; Carbodihydrazide; Carbohydrazide; Carbonic acid, dihydrazide; Carbonohydrazide; Hydrazine, carbonylbis-; Hydrazine, carbonyldi-; Hydrazinecarboxamide, N-amino-; Hydrazinecarboxylic acid, hydrazide; Karbazid [Czech]; Semicarbazide, 4-amino-; Urea, 1,3-diamino-; Urea, N,N'-diamino
Molecuulformule	CH ₆ N ₄ O
Structuurformule	

2. Fysisch-chemische eigenschappen

Eigenschap	Waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	90,09	Epiwin
Smeltpunt (°C)	152-153 (153 gebruikt in EUSES 1.0) 77,88	Chemfinder Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	253,69	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	0.00106 mm Hg = 0,14 Pa 0,00692 mm Hg = 0,92 Pa	SRC PhysProp Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1x10⁶	Chemfinder; Epiwin 3.12
Log Kow	-3,73 -3,22	SRC PhysProp; Epiwin 3.12 ClogP
Log Koc	-0,65 De gebruikte log Kow (-3,22) ligt buiten het applicability domain van de QSAR (-2,0 tot 8,0). Hierdoor is deze log Koc minder betrouwbaar.	Sabljic (non hydrophobic)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	6,37x10 ⁻¹⁵ atm·m ³ /mole (25 °C) = 6,25x10 ⁻¹⁰ Pa·m ³ /mol 8,29x10⁻⁵	Chemfinder Berekend op basis gekozen WS & VP
Relatieve dichtheid (-)	1,02	Chemfinder
pKa	11,81	Chem007 (supplier info)

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

3. Gedrag en lotgevallen in het milieu

Eigenschap	Waarde	ref.
BCF	3	epiwin
(Aerobe bio)degradatie	Persistent Niet gemakkelijk afbreekbaar: MITI linear: 0,07 MITI non-linear: 0,00 Biowin 1: 0,70 Biowin 2: 0,85 Het ontbreken van afbraak in de MITI test komt hoogstwaarschijnlijk doordat de stof toxisch is voor bacteriën.	MSDS; Epiwin 3.12

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. Toxiciteit

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	Waarde	ref.
experimentele gegevens	Er zijn geen bruikbare toxdata te vinden. Volgens een Material Safety Data sheet is de stof gelabeld als irriterend en sensibiliserend voor de huid.	MSDS Accepta
carcinogeniteit	De US-EPA classificeert deze stof als mogelijk carcinogeen.	US EPA
mutageniteit	-	

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
Fish (QSAR)	96 uur	LC50	114	1	Ecosar
Fish (QSAR)	30 dagen	NOEC	11,4	2	Ecosar
Kreeftachtigen					
Daphnid (QSAR)	48 uur	LC50	41	3	Ecosar
Daphnid (QSAR)		NOEC	4,13	4	Ecosar
Algen					
Groenalgen (QSAR)	144 uur	EC50	1,4	5	Ecosar
Groenalgen (QSAR)		NOEC	0,36	6	Ecosar

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Ecosar gebruikt stofgroep hydrazines. Hieronder vallen ook de hydrazides, waar deze stof toe behoort:

- 1 QSAR: N=9, $R^2=0,91$, Domein= stoffen met $\log Kow < 5$ en molekuulgewicht < 1000 -> redelijk betrouwbaar.
- 2 QSAR: gebaseerd op acute tox QSAR voor vissen, gedeeld door 10.
- 3 QSAR: N=4, $R^2=0,46$, Domein= stoffen met $\log Kow < 5$ en molekuulgewicht < 1000 -> $N < 5$ & R^2 =laag -> niet betrouwbaar.
- 4 QSAR: gebaseerd op acute tox QSAR voor daphnia, gedeeld door 10.
- 5 QSAR: N=3, $R^2=0,3$, Domein= stoffen met $\log Kow < 8$ en molekuulgewicht < 1000 -> $N < 5$ & R^2 =laag -> niet betrouwbaar.
- 6: QSAR: gebaseerd op acute tox QSAR voor algen, gedeeld door 4.

Conclusie: Alleen de QSAR voor acute tox voor vissen is bruikbaar. Deze zal dan ook gebruikt worden voor de afleiding van een ad hoc MTR_{water} met de daarbij behorende AF_{water} van 10000.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Xn: Schadelijk

R22: Schadelijk bij opname door de mond

R38: Irriterend voor de huid

R43: Kan overgevoeligheid veroorzaken bij contact met de huid

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

Niet geassocieerd in Annex I van Richtlijn 67/548/EEC. Het is echter niet bekend of deze stof al beoordeeld is m.b.t. classificatie en labelling.

6. ad hoc MTR (via stappenschema)

Ad hoc MTR_{HUMAAN}

Stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Nee, ad hoc MTR _{humaan} = 1,5 µg/p/d = 0,021 µg/kg lg/dag, uitgaande van een persoon van 70 kg.	1,5 µg/persoon/d is de default waarde in de ad hoc methode als er geen bruikbare toxdata beschikbaar zijn.
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	0,021 µg/kg lg/dag gebruikt voor integratie van humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{ECO} (grond)water

Stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	nee, wel QSAR waarden	
3	Nee	Log Kow = -3,22
4	ad hoc MTR _{water} = 11,4 µg/l	LC50 van 114 mg/l voor vissen (QSAR), AF = AF _{water} = 10000
5	11,4 µg/l gebruikt voor integratie van humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{ECO} lucht

Stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4	ja, ad hoc MTR _{Water} = 11,4 µg/L	
5		
6	ad hoc MTR _{lucht} = ad hocMTR _{water} x Kp _{lucht/water} = 11,4 µg/L x 3,5x10 ⁻⁸ m ³ /m ³ x 1000 (van L -> m ³) = 3,99 x10 ⁻⁴ µg/m ³	Kp _{lucht/water} = 3,5x10 ⁻⁸ m ³ /m ³ volgens EUSES 1.0.
7	3,99x10 ⁻⁴ µg/m ³ gebruikt voor integratie van humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{ECO} bodem

Stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{Water} = 11,4 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} (bodem) = ad hocMTR _{eco} (water) x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 11,4 µg/L x 0,207 x 0,59 = 1,39 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 1,39 x 3,33 = 4,62 µg/kg dw	Kp _{bodem/water} = 0,207 m ³ /m ³ volgens EUSES 1.0. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	4,62 µg/kg dw gebruikt voor integratie van humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{ECO} sediment

Stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{Water} = 11,4 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} (sediment) = ad hocMTR _{eco} (water) x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 11,4 µg/L x 0,905 x 0,87 = 8,97 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 8,97 x 2,71 = 24,3 µg/kg dw	Kp _{susp/water} = 0,905 m ³ /m ³ volgens EUSES 1.0. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	24,3 µg/kg dw gebruikt voor integratie van humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{HUMAAN} en ad hoc MTR_{ECO}

Stap	Resultaat	opmerking
1	$PEC_{\text{opp. water (opgelost)}} = 0,327 \text{ mg/L}$ $PEC_{\text{lucht}} = 3,37 \times 10^{-8} \text{ mg/m}^3$ $PEC_{\text{landbouwgrond}} = 2,36 \times 10^{-4} \text{ mg/kg ww}$ $PEC_{\text{landbouwgrond, poriewater}} = 1,94 \times 10^{-3} \text{ mg/L}$ $PEC_{\text{sediment}} = 0,197 \text{ mg/kg ww}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Output Humanex-resultaten:

carbohydrazide	TDI ($\mu\text{g/kg bw/d}$)	TCA ($\mu\text{g/m}^3$)	Corrected for TCA: NO		
	2.14E-02	N.A.			
	Surface water ($\mu\text{g/L}$)	Groundwater ($\mu\text{g/L}$)	Air ($\mu\text{g/m}^3$)	Soil ($\mu\text{g/kg dw}$)	Sediment ($\mu\text{g/kg dw}$)
MPC eco	1.14E+01	1.14E+01		4.62E+00	2.43E+01
MPC human	7.43E-01	4.41E-03	7.66E-08	1.76E-03	1.37E+00
Ratio MPC eco/MPC human	1.53E+01	2.59E+03		2.63E+03	1.77E+01
Critical MPC	7.43E-01	4.41E-03	7.66E-08	1.76E-03	1.37E+00
% Importance of total exposure	99.899	0.091	0.010	0.000	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	99.071				

Bijlage E

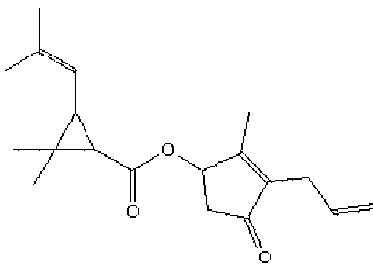
Rapportageformulier bestrijdingsmiddelen

Afleiding ad hoc MTR normen voor 17 bestrijdingsmiddelen

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Allethrin (pyrethroid)	
CAS-NUMMER	584-79-2	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	$1,7 \times 10^{-4} \mu\text{g/L}$
	lucht	$0,34 \mu\text{g/m}^3$
	bodem	$0,093 \mu\text{g/kg dwt}$
	sediment	$0,094 \mu\text{g/kg dwt}$

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Allethrin
CAS-nummer	584-79-2
Stofgroep	Pyrethroiden Insecticide
Synoniemen	Allethrin; Cyclopropanecarboxylic acid, 2,2-dimethyl-3-(2-methylpropenyl)-ester with 2-allyl-4-hydroxy-3-methyl-2-cyclopenten-1-one; (+/-)-Allethrethonyl (+/-)-cis,trans-chrysanthemate; Allethrine; Allyl cinerin I; Cinerin I allyl homolog; Cyclopropanecarboxylic acid, 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)-, 2-methyl-4-oxo-3-(2-propenyl)-2-cyclopentene-1-yl ester; D-Allethrin; ENT 17510; Pynamin; Pyresyn; Cyclopropanecarboxylic acid, 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)-, 2-methyl-4-oxo-3-(2-propenyl)-2-cyclopenten-1-yl ester; (+/-)-3-Allyl-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl) cyclopropylcarboxylate; (+)-trans-Bioallethrin; (+)-trans-Chrysanthemumic acid ester of (+/-)-allethrolone; trans-Allethrin; Allyl cinerin; Allyl homolog of cinerin I; Bioaletrina; Cyclopropanecarboxylic acid, 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)-, 2-methyl-4-oxo-3-(2-propenyl)-2-cyclopenten-1-yl ester, d-trans; D-trans Allethrin; D,L-2-Allyl-4-hydroxy-3-methyl-2-cyclopenten-1-one-D,L-chrysanthemum monocarboxylate; ENT 16275; FDA 1446; FMC 249; Necarboxylic acid; NIA 249; Pallethrine; Pyresin; Pyrethrin; 2-Allyl-4-hydroxy-3-methyl-2-cyclopenten-1-one ester of 2,2-dimethyl-3-(2-methylpropenyl) cyclopropane carboxylic acid; 3-Allyl-2-methyl-4-oxo-2-cyclopenten-1-yl chrysanthemate; 3-Allyl-4-keto-2-methylcyclopentenyl chrysanthemum monocarboxylate; (RS)-3-Allyl-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl (1R,3R)-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropane-carboxylate; (±)-Allethrethonyl (±)-cis,trans-chrysanthemate; 2-Methyl-4-oxo-3-(2-propenyl)-2-cyclopenten-1-yl-2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)cyclopropanecarboxylate; Alleviate; OMS 468; Pyrexcel; Pyrocide; 3-Allyl-2-methyl-4-oxo-2-cyclopenten-1-yl 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)cyclopropanecarboxylate
Molecuulformule	$\text{C}_{19}\text{H}_{26}\text{O}_3$
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	302,42	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	-40	SRC PhysProp
Kookpunt (°C)	140 bij 13,33 Pa 281,5 bij 1x10⁵ Pa	SRC PhysProp; WHO EHC 87 e-Pesticide Manual 12 th ed.
Dampdruk (Pa)	1,6x10⁻⁴ (exp. bij 21 °C)	SRC PhysProp; e-Pesticide Manual 12 th ed.
Oplosbaarheid in water (mg/L)	4,6 (experimenteel) practically insoluble	SRC PhysProp WHO EHC 87
Log Kow	4,78 (experimenteel) 4,96	Epiwin 3.12; SRC PhysProp; ClogPstar e-Pesticide Manual 12 th ed.
LogKoc	3,98 (geschat) 3,49 (geschat) 3,97 (QSAR)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov Epiwin 3.12 Sabljić, 1995 (predominantly hydrophobic)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	1,1x10 ⁻² 1,1x10⁻²	SRC PhysProp; Epiwin 3.12 Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)	1,01 1,01	HSDB toxnet.nlm.nih.gov e-Pesticide Manual 12 th ed.
pKa	-	

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	ref.
BCF	21	Epiwin 3.12
(Aerobe bio)degradatie	niet persistent gemakkelijk afbreekbaar	HSDB toxnet.nlm.nih.gov IPCS

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	Waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	-
carcinogeniteit	-	-
mutageniteit	-	-

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Catostomus commersoni</i>	96 uur	LC50	0,0124		PAN
<i>Cyprinus carpio</i>	96 uur	LC50	0,032		PAN
<i>Esox lucius</i>	96 uur	LC50	0,0033		PAN
<i>Gambusia affinis</i>	48 uur	LC50	0,65		PAN
<i>Ictalurus punctatus</i>	96 uur	LC50	0,024 0,0146		PAN e-toxBASE
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,04 0,0225		PAN e-toxBASE
<i>Micropterus salmoides</i>	96 uur	LC50	0,0096 > 0,012		PAN e-toxBASE
<i>Micropterus dolomieu</i>	96 uur	LC50	0,0077		e-toxBASE
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	96 uur	LC50	0,0079 0,0026		PAN e-toxBASE
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,020 0,018		PAN e-toxBASE
<i>Perca flavescens</i>	96 uur	LC50	0,0088 0,0099		PAN e-toxBASE
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	0,061 0,048		PAN e-toxBASE
<i>Salvelinus namaycush</i>	96 uur	LC50	0,016		PAN
kreeftachtigen					
<i>Daphnia pulex</i>	48 uur	EC50	0,021		PAN
<i>Simocephalus serrulatus</i>	48 uur	EC50	0,056		PAN

<i>Gammarus fasciatus</i>	96 uur	LC50	0,0094 0,008		PAN e-toxBase
<i>Gammarus lacustris</i>	96 uur	LC50	0,011		PAN
algen					
Insecten					
<i>Chironomus tentans</i>	24 uur	EC50	0,0095 0,0054		PAN e-toxBase
<i>Chironomus thummi</i>	24 uur	EC50	0,0419		PAN
<i>Aedes aegypti</i>	24 uur	LC50	0,031 0,024		PAN e-toxBase
<i>Pelodytes sp.</i>	96 uur	LC50	0,050		PAN
<i>Pteronarcys californicus</i>	96 uur	LC50	0,0034 0,0021		PAN e-toxBase

Dikgedrukte getallen zijn meegenomen in de ad hoc MTR afleiding.

Data met als referentie "PAN" zijn aangeleverd door RIZA.

Gezien de hoeveelheid data per taxon zou de assessment factor mogelijk omlaag kunnen. Dit zou leiden tot een lagere ad hoc MTR_{eco} (water). Hoe dit zou moeten is echter niet beschreven in de ad hoc methodiek. Daarom is bij de afleiding van de ad hoc MTR de handleiding van de ad hoc methodiek gevolgd met bijbehorende assessment factoren.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen informatie van aanvrager. Volgens <http://www.sciencelab.com/page/S/PVAR/10408/SLA4060> is allethrin als volgt geclassificeerd:

Xn: Schadelijk

N: Milieugevaarlijk

R20/22: Schadelijk bij inademing en opname door de mond.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

R20/22: Schadelijk bij inademing en opname door de mond.

R50/53: Zeer vergiftig voor in het water levende organismen; kan in het aquatisch milieu op lange termijn schadelijke effecten veroorzaken.

S2: Buiten bereik van kinderen bewaren.

S36: Draag geschikte beschermende kleding.

S60: Deze stof en de verpakking als gevaarlijk afval afvoeren.

S61: Voorkom lozing in het milieu. Vraag om speciale instructies/veiligheidskaart.

Xn: Schadelijk

N: Milieugevaarlijk

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	JMPR (1965), IPCS-EHC nr. 87 (1989)	Geen ADI/TDI afgeleid
3	Data uit EHC bruikbaar	
4	Nee	
5	Ja	
6	Ja (onwikkeling) nee (reproductie)	
7	Ja	
8	Ja: NOAEL rat 2 jaar = 5,9 mg/kg lg/dag	Conclusie RIVM o.b.v. gepresenteerde informatie in EHC
9	-	
10	Standaardfactor 100	
11		
12	0,06 mg/kg lg/dag	
13	Ja	
14	Nee	
15	Nvt	
16	Nvt	
17	Nvt	
18	Ad hoc MTR _{humaan} = 0,06 mg/kg lg/dag	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Ja, log K _{ow} = 4,78	AF _{doorvergiftiging} = 5
4	Ad hoc MTR _{water} = 0,17 ng/L	Op basis van LC50 van 0,0026 mg/L voor <i>O. kisutch</i> . AF = AF _{water} x AF _{doorvergiftiging} = 3000 x 5 = 15000
5	0,17 ng/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 1,7x10 ⁻⁴ µg/L	
7	ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{water} x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 1,7x10 ⁻⁴ µg/L x 280 x 0,59 = 0,028 µg/kg dwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,028 x 3,33 = 0,093 µg/kg dwt	K _p _{bodem/water} = 280 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	ja	
9	ja	
10	0,093 µg/kg dwt bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 1,7x10 ⁻⁴ µg/L	
7	ad hoc MTR _{sediment} = ad hoc MTR _{water} x	K _p _{susp/water} = 234 m ³ /m ³ volgens EUSES

	$Kp_{\text{ausp/water}} \times 1000/1150 (RHO_{\text{ausp, matter}}) = 1,7 \times 10^{-4} \mu\text{g/L} \times 234 \times 0,87 = 0,035 \mu\text{g/kg wwt}$ Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $0,035 \times 2,71 = 0,094 \mu\text{g/kg dw}$	2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	0,094 $\mu\text{g/kg dw}$ sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,0453 mg/L PEC _{lucht} = $1,86 \times 10^{-4} \text{ mg/m}^3$ PEC _{landbouwgrond} = 12,4 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,0755 mg/L PEC _{sediment} = 16 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex-output:

Allethrin	TDI (ug/kg bw/d) 6.00E+01	TCA (ug/m3) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)
MPC eco	1.70E-04	1.70E-04		9.30E-02	9.40E-02
MPC human	8.32E+01	1.39E+02	3.42E-01	7.46E+04	9.01E+04
Ratio MPC eco/MPC human	2.04E-06	1.23E-06		1.25E-06	1.04E-06
Critical MPC	1.70E-04	1.70E-04	3.42E-01	9.30E-02	9.40E-02
% importance of total exposure	50.252	36.573	12.766	0.409	
Dominant route of exposure	fish				
% of dominant route	50.252				

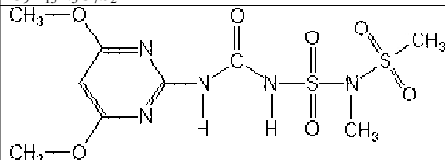
TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Amidosulfuron (sulfonylurea)	
CAS-NUMMER	120923-37-7	
VOORGESTELDE ad hoc MTR*	(grond)water	32 µg/L
	lucht	0,026 µg/m ³
	bodem	63,3 µg/kg dwt
	sediment	118 µg/kg dwt

*: Let op! Deze normen zijn in grote mate afhankelijk van de pH van het milieu (zie de grote verschillen in wateroplosbaarheid bij verschillende pH's), aangezien deze invloed heeft op de verdeling van de stof over de compartimenten.

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Amidosulfuron
CAS-nummer	120923-37-7
Stofgroep	Sulfonylureas Herbicide
Synoniemen	amidosulfuron; HOE 075032; N-((((4,6-dimethoxy-2-pyrimidinyl)amino)-carbonyl)amino)sulfonyl)-N-methylmethanesulfonamide
Molecuulformule	C ₉ H ₁₅ N ₅ O ₇ S ₂
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	369,4	Dossier
Smeltpunt (°C)	158-162 160-163 160 (gemiddelde)	Dossier e-Pesticide Manual 12 th ed.
Kookpunt (°C)		
Dampdruk (Pa)	1,3x10 ⁻⁵ 2,2 x10 ⁻⁵ 2,2 x10⁻⁵ (experimenteel)	Dossier e-Pesticide Manual 12 th ed. SRC PhysProp
Oplosbaarheid in water (mg/L)	9 (pH=5,8) – 13500 (pH=10) 3,3 (pH 3), 9 (pH 5,8) , 13500 (pH 10)	Dossier e-Pesticide Manual 12 th ed.
Log Kow	1,60 1,63 (pH 2, 20 °C) 1,63 (experimenteel)	Dossier e-Pesticide Manual 12 th ed. SRC PhysProp; ClogPstar
LogKoc	1,43 1,0 1,86 (QSAR)	www.lua.nrw.de epiwin Sabljić, 1995 (agricultural)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	5,34 x10 ⁻⁴ (20 °C) 5,34 x10 ⁻⁴ (20 °C) 5,33 x10 ⁻⁴ (25 °C, geschat) 9,0x10⁻⁴	Dossier e-Pesticide Manual 12 th ed. SRC PhysProp Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)	1,51 1,5	Dossier e-Pesticide Manual 12 th ed.
pKa	3,58 3,58 3,58 (experimenteel)	Dossier e-Pesticide Manual 12 th ed. SRC PhysProp

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met als referentie "Dossier" en "www.lua.nrw.de" zijn aangeleverd door RIZA.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	3,59	epiwin
(Aerobe bio)degradatie	DT50>365 d; DT50:14-29 d inherent afbreekbaar: MITI linear: 0,0136 MTTI non linear: 0,0050 Biowin 1: 0,84 Biowin 2: 0,91	Dossier; www.lua.nrw.de epiwin

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met als referentie "Dossier" en "www.lua.nrw.de" zijn aangeleverd door RIZA.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit	-	-
mutageniteit	-	-

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96 uur	LC50	>94		Dossier
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	>100		Dossier
<i>Oncorhynchus myiss</i>	96 uur	LC50	>320		Dossier
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	10		Dossier
kreeftachtigen					
<i>Daphnid magna</i>	48 uur	EC50	36		Dossier
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,32		Dossier
algen					
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	96 uur	EC50	47		Dossier
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	96 uur	NOEC	3,2		Dossier

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met als referentie "Dossier" zijn aangeleverd door RIZA. Deze getallen zijn ook terug te vinden in de e-toxBase.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info aanvrager

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

Stof niet gevonden in ESIS database.

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humanaan}

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja CTB-beoordeling (1997) obv evaluatie door Weterings Consultancy	
3	Nvt	
4	Nee	
5	Ja	
6	Ja	
7	Ja	
8	Ja 19,5 mg/kg lg/dag 2 jaar rat	Conclusie CTB
9	Nvt	
10	100	Vastgesteld door CTB
11	Nvt	
12	0,2 mg/kg lg/dag	ADI-vaststelling CTB
13	Ja	
14	Nee	
15	Nvt	
16	Nvt	
17	Nvt	
18	0,2 mg/kg lg/dag	Waarde vastgesteld door CTB

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log Kow = 1,63	
4	Ad hoc MTR _{water} = 0,032 mg/l (factor 10)	Op basis van NOEC van 0,32 mg/L voor <i>D. magna</i> . AF = AF _{water} = 10
5	0,032 mg/l gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 32 µg/L	
7	ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{water} x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 32 µg/L x 1,01 x 0,59 = 19 µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 19 x 3,33 = 63,3 µg/kg dw	K _{p,bodem/water} = 1,01 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	ja	
9	ja	
10	63,3 µg/kg dwt bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 32 µg/L	
7	ad hoc MTR _{sediment} = ad hoc MTR _{water} x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 32 µg/L x 1,57 x 0,87 = 43,7 µg/kg ww.	K _{p,susp/water} = 1,57 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3.

	Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 43,7 x 2,71 = 118 µg/kg dw	MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	Ja	
9	Ja	
10	118 µg/kg dw sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	Resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,805 mg/L PEC _{lucht} = 4,71 x 10 ⁻⁵ mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 4,16 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 7,02 mg/L PEC _{sediment} = 1,02 mg/kg ww	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

Amidosulfuron	TDI (ug/kg bw/d) 2.00E+02	TCA (ug/m3) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)
MPC eco	3.20E+01	3.20E+01		6.33E+01	1.18E+02
MPC human	4.37E+02	3.81E+03	2.56E-02	7.41E+03	1.70E+03
Ratio MPC eco/MPC human	7.32E-02	8.39E-03		8.55E-03	6.94E-02
Critical MPC	3.20E+01	3.20E+01	2.56E-02	6.33E+01	1.18E+02
% importance of total exposure	0.167	99.694	0.131	0.008	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	54.824				

TDI Tolerable Daily Intake
TCA Tolerable Concentration in Air
MPC Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Butachloor (chlooracetanilide)	
CAS-NUMMER	23184-66-9	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	$2,30 \times 10^{-4} \mu\text{g/L}$
	lucht	$3,02 \times 10^{-3} \mu\text{g/m}^3$
	bodem	0,027 $\mu\text{g/kg dwt}$
	sediment	0,028 $\mu\text{g/kg dwt}$

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Butachloor
CAS-nummer	23184-66-9
Stofgroep	Chlooracetanilides Herbicide
Synoniemen	Butanex, Butanox, CP 53619, Lambast, Machete, Pillarsete, <i>N</i> -butoxymethyl-2-chloro-2',6'-diethylacetanilide; <i>N</i> -(butoxymethyl)-2-chloro- <i>N</i> -(2,6-diethylphenyl)acetamide
Molecuulformule	$\text{C}_{17}\text{H}_{26}\text{ClNO}_2$
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	311,86	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	<-5 (selected value, gebruikt in EUSES) <-10 -2,8 tot 1,7	Mackay Handbook Mackay Handbook e-Pesticide Manual 12th ed.
Kookpunt (°C)	156 156 (bij 0,5 mm Hg)	Mackay Handbook e-Pesticide Manual 12th ed.
Dampdruk (Pa)	$6,0 \times 10^{-4}$ (selected value) $2,4 \times 10^{-4}$ $3,9 \times 10^{-4}$ (experimenteel)	Mackay Handbook e-Pesticide Manual 12th ed. SRC PhysProp
Oplosbaarheid in water (mg/L)	23 (selected value) 23 (experimenteel bij 24 °C) 20 (bij 20 °C)	Mackay Handbook SRC PhysProp e-Pesticide Manual 12th ed.
Log Kow	4,50 4,50 (experimenteel)	Epiwin 3.12 Medchem ClogPstar; SRC PhysProp; Mackay Handbook
LogKoc	2,89 (mean) 3,75 (QSAR)	Mackay Handbook Sabljic, 1995 (predominantly hydrofobic)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	$8,14 \times 10^{-3}$ (selected value) $3,74 \times 10^{-3}$ $5,17 \times 10^{-3}$ $8,14 \times 10^{-3}$	Mackay Handbook e-Pesticide Manual 12th ed. SRC PhysProp Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)	1,07	Mackay Handbook
pKa	-	

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	582 1,10 (zoetwater schelpdier) – 115 (berekend) 269 (<i>Cyprinus carpio</i> – vis)	Epiwin 3.12 Mackay Handbook e-toxBase
(Aerobe bio)degradatie	halfwaardetijd dagen-maanden niet gemakkelijk afbreekbaar MITI linear: 0,075 MITI non-linear: 0,018 Biowin 1: 0,57 Biowin 2: 0,27	Mackay Handbook Epiwin 3.12

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit		
mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Anguilla japonica</i>	48 uur	LC50	0,29		PAN
<i>Ctenopharyngodon idella</i>	48 uur	LC50	0,24		PAN
<i>Cyprinus carpio</i>	96 uur	LC50	0,1		PAN
<i>Gambusia affinis</i>	48 uur	LC50	1,195 0,9		PAN e-toxBase
<i>Hypophthalmichthys nobilis</i>	48 uur	LC50	0,58		PAN
<i>Misgurnus anguillicaudatus</i>	48 uur	LC50	0,89		PAN
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	0,563 0,28		PAN
<i>Tilapia mossambica</i>	48 uur	LC50	0,88		PAN
<i>Tilapia sp.</i>	48 uur	LC50	0,996 0,966		PAN e-toxBase
<i>Trichogaster pectoralis</i>	96 uur	LC50	3		PAN
kreftachtigen					
<i>Macrobrachium rosenbergii</i>	48 uur	LC50	7,71		PAN
<i>Americamysis bahia</i>	96 uur	LC50	0,271 0,230	zoutwater	PAN e-toxBase
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	48 uur	LC50	3		PAN
<i>Daphnia magna</i>	96 uur	LC50	1,05		PAN
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	7 dagen	NOEC MATC	0,76 0,76	MATC/√2 = NOEC = 0,54	PAN e-toxBase
algen					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	72 uur	EC50	0,00116		PAN
Amfibieën					
<i>Bufo bufo japonicus</i>	96 uur	LC50	1,8		PAN
<i>Rana limnocharis</i>	48 uur	LC50	1,621		PAN
Insecten					
<i>Psephenus herrichi</i>	-	LT50	0,901		PAN
<i>Hydropsyche bifida</i>	7 dagen	LC50	0,385		e-toxBase
Mollusken					
<i>Corbicula manilensis</i>	48 uur	LC50	20 > 20		PAN e-toxBase
<i>Elimia virginica</i>	7 dagen	LC50	0,136		e-toxBase
<i>Leptoxis carinata</i>	7 dagen	LC50	0,370		e-toxBase
<i>Physa heterostrophia</i>	7 dagen	LC50	0,436		e-toxBase

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met als referentie "PAN" zijn aangeleverd door RIZA.

Gezien de hoeveelheid data per taxon zou de assessment factor mogelijk omlaag kunnen. Dit zou leiden tot een lagere ad hoc MTR_{eco} (water). Hoe dit zou moeten is echter niet beschreven in de ad hoc methodiek. Daarom is bij de afleiding van de ad hoc MTR de handleiding van de ad hoc methodiek gevolgd met bijbehorende assessment factoren.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

Niet geclassificeerd in Annex I van Richtlijn 67/548/EEC. Het is echter niet bekend of deze stof al beoordeeld is m.b.t. classificatie en labelling.

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

ad hoc MTR_{humaan}

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja, beoordeling door Japanese Ministry of Health	Zoals gerapporteerd op: http://www.soc.nii.ac.jp/pssj2/gakkaisi/tec_info/butachlo.pdf
3	Nee	
4	Nee	
5	Ja	
6	Ja	
7	Ja	
8	Ja 1 mg/kg lg/dag 2 jaar rat	Zoals geconcludeerd in bovenstaande review
9	Nvt	
10	100	Zoals geconcludeerd in bovenstaande review
11	Nee	
12	0,01 mg/kg lg dag	ADI zoals geconcludeerd in bovenstaande review
13	Ja	
14	Ja	
15	Nee (gepresenteerde informatie in review onvoldoende)	
16	Nvt	
17	Genotoxiciteit negatief, mechanisme wellicht niet-genotoxisch	Zoals geconcludeerd in bovenstaande review
18	0,01 mg/kg lg dag	ADI zoals geconcludeerd in bovenstaande review

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Ja, log K _{ow} = 4,5	AF _{doorvergiftiging} = 5
4	Ad hoc MTR _{water} = 0,23 ng/l	Op basis van EC50 van 0,00116 mg/L voor <i>S. capricornutum</i> . AF = AF _{water} x AF _{doorvergiftiging} = 1000 x 5 = 5000
5	0,23 ng/l gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 2,3x10 ⁻⁴ µg/L	
7	ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{water} x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 2,3x10 ⁻⁴ µg/L x 60,1 x 0,59 = 8,13x10 ⁻³ µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 8,13x10 ⁻³ x 3,33 = 0,027 µg/kg dw	K _{podem/water} = 60,1 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	Ja	
9	Ja	
10	0,027 µg/kg dw bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	

3		
4		
5		
6	ja, ad hoc $MTR_{water} = 2,3 \times 10^{-4} \mu\text{g/L}$	
7	ad hoc $MTR_{bodem} = \text{ad hoc } MTR_{water} \times K_{\text{usp/water}} \times 1000/1150 (RHO_{\text{usp, matter}}) = 2,3 \times 10^{-4} \mu\text{g/L} \times 50,8 \times 0,87 = 0,01 \mu\text{g/kg wwt}$. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $0,01 \times 2,71 = 0,028 \mu\text{g/kg dwt}$	$K_{p,\text{usp/water}} = 50,8 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	0,028 $\mu\text{g/kg dwt}$ sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	$PEC_{\text{opp. water (opgelost)}} = 1,59 \text{ mg/L}$ $PEC_{\text{lucht}} = 4,57 \times 10^{-4} \text{ mg/m}^3$ $PEC_{\text{landbouwgrond}} = 331 \text{ mg/kg wwt}$ $PEC_{\text{landbouwgrond, poriewater}} = 9,38 \text{ mg/L}$ $PEC_{\text{sediment}} = 112 \text{ mg/kg wwt}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

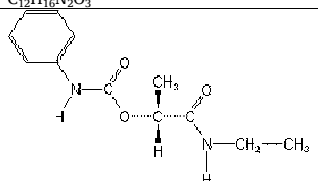
Butachloor	TDI ($\mu\text{g/kg bw/d}$) 1.00E+01	TCA ($\mu\text{g/m}^3$) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water ($\mu\text{g/L}$)	Groundwater ($\mu\text{g/L}$)	Air ($\mu\text{g/m}^3$)	Soil ($\mu\text{g/kg dwt}$)	Sediment ($\mu\text{g/kg dwt}$)
MPC eco	2.30E-04	2.30E-04		2.70E-02	2.80E-02
MPC human	1.05E+01	6.19E+01	3.02E-03	7.16E+03	2.27E+03
Ratio MPC eco/MPC human	2.19E-05	3.72E-06		3.77E-06	1.23E-05
Critical MPC	2.30E-04	2.30E-04	3.02E-03	2.70E-02	2.80E-02
% importance of total exposure	21.987	76.931	0.880	0.201	
Dominant route of exposure	root				
% of dominant route	23.657				

TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Carbetamide (carbamaat)	
CAS-NUMMER	16118-49-3	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	oppervlaktewater: 39,1 µg/L grondwater: 50 µg/L
	lucht	$3,1 \times 10^{-5}$ µg/m ³
	bodem	167 µg/kg dwt
	sediment	215 µg/kg dwt

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Carbetamide
CAS-nummer	16118-49-3
Stofgroep	Carbamaten Herbicide
Synoniemen	Carbanilic acid, (1-ethylcarbamoyl)ethyl ester, D-(-); Carbetamex; carbetamide; Ethyl-2-(((phenylamino)carbonyl)oxy)propanamide; Ethyl-2-(((phenylamino)carbonyl)oxy)propanamide, D-isomer; Ethyllactamide carbanilate (ester); Leguarame; Legurame; N-ethyl-2-(((phenylamino)carbonyl)oxy)propanamide; Phenyl-1-(ethylcarbamoyl-1)ethylcarbamate, d isomer;
Molecuulformule	C ₁₂ H ₁₆ N ₂ O ₃
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	236,27	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	119	SRC PhysProp Database
	119	e-Pesticide Manual 12 th ed.
Kookpunt (°C)	393	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	$1,89 \times 10^{-4}$ (geschat bij 25 °C)	SRC PhysProp Database
	$9,3 \times 10^{-5}$	Epiwin 3.12
	verwaarloosbaar (bij 20 °C)	e-Pesticide Manual 12 th ed.
Oplosbaarheid in water (mg/L)	2505	Epiwin 3.12
	3500 (experimenteel)	SRC PhysProp
	±3500 (20 °C)	e-Pesticide Manual 12 th ed.
Log Kow	1,63	Epiwin 3.12; SRC PhysProp
	1,35	Medchem ClogP
LogKoc	2,2	Epiwin 3.12
	1,7	Sabljić, 1995 (agricultural)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	$1,46 \times 10^{-5}$	SRC PhysProp Database
	$1,28 \times 10^{-5}$	Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)	-	
pKa	-	

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	3,59	Epiwin 3.12
(Aerobe bio)degradatie	niet gemakkelijk afbreekbaar (inherent afbreekbaar): MITI linear: 0,13	Epiwin 3.12

	MITI non linear: 0,12 Biowin 1: 1,05 Biowin 2: 0,99	
--	---	--

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit		
mutageniteit		

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Rasbora heteromorpha</i>	96 uur	LC50	165		PAN
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>		EC50	50		e-toxBase
algen					
<i>Chlorella vulgaris</i>		EC50	210		e-toxBase
<i>Scenedesmus subspicatus</i>		EC50	520		e-toxBase
<i>Chaetoceros calcitrans</i>	21 dagen	EC50	0,096	zoutwater	e-toxBase
<i>Isochrysis galbana</i>	21 dagen	EC50	0,037	zoutwater	e-toxBase
Mollusken					
<i>Crassostrea gigas</i>	9 dagen	EC10	4,2	zoutwater	PAN

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met als referentie "PAN" zijn aangeleverd door RIZA.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

Niet geclassificeerd in Annex I van Richtlijn 67/548/EEC. Het is echter niet bekend of deze stof al beoordeeld is m.b.t. classificatie en labelling.

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

stap	resultaat	opmerking
1	ja RIVM 1992	Beoordeling uitgebracht als RIVM/ACT adviesrapport no. 92/679/108/015
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	0,03 mg/kg lg/dag	Voorlopige ADI zoals voorgesteld in bovenstaand adviesrapport

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	ja	
3	Nee. Log Kow = 1,35	
4	Ad hoc MTR _{water} = 0,050 mg/l	Op basis van de EC50 van 50 mg/l voor <i>D. magna</i> . AF = AF _{water} = 1000
5	0,050 mg/l gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 50 µg/L	
7	ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{water} x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 50 µg/L x 1,7 x 0,59 = 50 µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 50 x 3,33 = 167 µg/kg dw	K _{bodem/water} = 1,7 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	ja	
9	ja	
10	167 µg/kg dw bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 50 µg/L	
7	ad hoc MTR _{sediment} = ad hoc MTR _{water} x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 50 µg/L x 2,15 x 0,87 = 93,5 µg/kg ww.	K _{susp/water} = 2,15 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3.

	Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 93,5 x 2,71 = 253 µg/kg dw	MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	253 µg/kg dw sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,703 mg/L PEC _{lucht} = 5,57x10 ⁻⁷ mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 5,8 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 5,79 mg/L PEC _{sediment} = 1,26 mg/kg ww	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

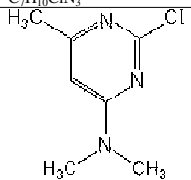
	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA: NO		
Carbetamide	3.00E+01	N.A.			
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)
MPC eco	5.00E+01	5.00E+01		1.67E+02	2.53E+02
MPC human	3.91E+01	3.22E+02	3.10E-05	1.06E+03	2.15E+02
Ratio MPC eco/MPC human	1.28E+00	1.55E-01		1.58E-01	1.18E+00
Critical MPC	3.91E+01	5.00E+01	3.10E-05	1.67E+02	2.15E+02
% importance of total exposure	0.057	99.931	0.003	0.008	
Dominant route of exposure	bladgewassen				
% of dominant route	67.072				

TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Crimidine	
CAS-NUMMER	535-89-7	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	oppervlaktewater: $5,67 \times 10^{-3}$ µg/L grondwater: 0,66 µg/L
	lucht	$1,19 \times 10^{-4}$ µg/m ³
	bodem	3,63 µg/kg dwt
	sediment	0,86 µg/kg dwt

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Crimidine
CAS-nummer	535-89-7
Stofgroep	Pyrimidines Rodenticide
Synoniemen	2-Chloro-4-(dimethylamino)-6-methylpyrimidine; 2-chloro-N,N,6-trimethyl-4-pyrimidinamine; Castrix; Crimidine; Crimitox
Molecuulformule	C ₇ H ₁₀ ClN ₃
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	171,63	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	87	HSDB toxnet.nlm.nih.gov
	87	SRC PhysProp
	87	e-Pesticide Manual 12 th ed.
Kookpunt (°C)	140-147 bij 533 Pa 140-147 bij 533 Pa (144 in EUSES) 140-147 bij 533 Pa	HSDB toxnet.nlm.nih.gov SRC PhysProp e-Pesticide Manual 12 th ed.
Dampdruk (Pa)	3,09 (geschat)	SRC PhysProp Database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	93600 9400 (experimenteel bij 20 °C) 9400 (20 °C)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov SRC PhysProp e-Pesticide Manual 12 th ed.
Log Kow	1,31 1,84	SRC PhysProp; epiwin Medchem ClogP
LogKoc	1,34 1,95 (QSAR)	Epiwin 3.12 Sabljić, 1995 (agricultural)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	$3,84 \times 10^{-3}$ $5,6 \times 10^{-2}$	SRC PhysProp Database Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)	-	
pKa	-	

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	2	Epiwin 3.12
(Aerobe bio)degradatie	Niet gemakkelijk afbreekbaar MITI linear: 0,17 MITI non linear: 0,047	Epiwin 3.12

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit		
mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Carassius auratus</i>		EC50	>500		e-toxBase
<i>Fish</i>	96 uur	LC50	180		ecosar
<i>Fish</i>	30 dagen	NOEC	22,6		ecosar
cladocera					
<i>Daphnid</i>	48 uur	LC50	191		ecosar
algen					
<i>Groen algen</i>	96 uur	EC50	118		ecosar
<i>Groen algen</i>	96 uur	ChV	10,8	ChV = MATC NOEC = MATC/√2 = 7,64	ecosar

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

QSARs op basis van "neutral organics"-klasse. De N-atomen zouden erop kunnen duiden dat deze stof reactiever is dan ingeschat wordt door ECOSAR. ECOSAR is minder geschikt voor stoffen met een specifiek werkingsmechanisme zoals bestrijdingsmiddelen.

Echter, gezien de gemeten EC50 van >500 mg/L uit de e-toxBase lijkt het erop dat de indeling van crimidine in de klasse "neutral organics" betrouwbaar is. Daarom worden de resultaten van de QSAR's ook meegenomen in de ad hoc MTR-bepaling.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

R28: Zeer vergiftig bij opname door de mond.

S1/2: Achter slot en buiten bereik van kinderen bewaren.

S37/37: Draag geschikte handschoenen en beschermende kleding.

S45: Bij een ongeval of indien men zich onwel voelt, onmiddellijk een arts raadplegen (indien mogelijk hem dit etiket tonen).

T+: Zeer vergiftig

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Nee	
4	Nee	Blijkt EU-classificatiesysteem zijn eer wel dierexperimentele toxicologische data (niet beschikbaar)
5	Onbekend	
6	Onbekend	
7	Onbekend	
8	Onbekend	
9	Onbekend	MTIL ¹ = 1,5 µg/p/d
10	-	
11	-	
12	-	
13	Onbekend	
14	Onbekend	
15	-	
16	-	
17	Onbekend	
18	Default 1,5 µg/p/d	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Nee	
4	Ad hoc MTR _{water} = 0,0764 mg/L	Op basis van een QSAR-NOEC van 7,64 mg/L voor groenalgen. $AF = AF_{water} = 100$
5	0,0764 mg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 76,4 µg/L	
7	ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{water} x $K_{bodem/water} \times 1000/1700$ (RHO_{bodem}) = 76,4 µg/L x 2,87 x 0,59 = 129 µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 129 x 3,33 = 430 µg/kg dw	$K_{bodem/water} = 2,87 m^3/m^3$ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	Ja	
9	Ja	
10	430 µg/kg dwt bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	resultaat	Opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		

¹ MTIL = maximum threshold intake level (zie hoofdstuk 2)

5		
6	ja, ad hoc $MTR_{water} = 76,4 \mu\text{g/L}$	
7	ad hoc $MTR_{sediment} = \text{ad hoc } MTR_{water} \times K_{susp/water} \times 1000/1150$ ($RHO_{susp. matter} = 76,4 \mu\text{g/L} \times 3,13 \times 0,87 = 208 \mu\text{g/kg wwt}$. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $208 \times 2,71 = 564 \mu\text{g/kg dwt}$	$K_{p,susp/water} = 3,13 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	564 $\mu\text{g/kg dwt}$ sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	Opmerking
1	$PEC_{opp. water (opgelost)} = 0,0675 \text{ mg/L}$ $PEC_{lucht} = 1,42 \times 10^{-3} \text{ mg/m}^3$ $PEC_{landbouwgrond} = 13,2 \text{ mg/kg wwt}$ $PEC_{landbouwgrond, poriewater} = 7,84 \text{ mg/L}$ $PEC_{sediment} = 3,34 \text{ mg/kg wwt}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

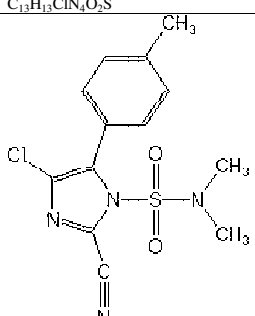
	TDI ($\mu\text{g/kg bw/d}$)	TCA ($\mu\text{g/m}^3$)	Corrected for TCA:		
Crimidine	2.14E-02	N.A.	NO		
	Surface water ($\mu\text{g/L}$)	Groundwater ($\mu\text{g/L}$)	Air ($\mu\text{g/m}^3$)	Soil ($\mu\text{g/kg dwt}$)	Sediment ($\mu\text{g/kg dwt}$)
MPC eco	7.64E+01	7.64E+01		4.30E+02	5.64E+02
MPC human	5.67E-03	6.58E-01	1.19E-04	3.63E+00	8.60E-01
Ratio MPC eco/MPC human	1.35E+04	1.16E+02		1.18E+02	6.55E+02
Critical MPC	5.67E-03	6.58E-01	1.19E-04	3.63E+00	8.60E-01
% importance of total exposure	0.030	99.596	0.334	0.039	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	88.460				

TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Cyazofamid	
CAS-NUMMER	120116-88-3	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,13 µg/L
	lucht	13,3 µg/m ³
	bodem	2,00 µg/kg dwt
	sediment	8,72 µg/kg dwt

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Cyazofamid
CAS-nummer	120116-88-3
Stofgroep	sulfonamides, imidazolen Fungicide
Synoniemen	1H-Imidazole-1-sulfonamide, 4-chloro-2-cyano-N,N-dimethyl-5-(4-methylphenyl)-, 4-Chloro-2-cyano-N,N-dimethyl-5-p-tolylimidazole-1-sulfonamide-, Cyazofamid
Molecuulformule	C ₁₃ H ₁₃ ClN ₄ O ₂ S
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	324,8	Dossier
Smeltpunt (°C)	152,7 152,7	Dossier e-Pesticide Manual 12 th ed.
Kookpunt (°C)		
Dampdruk (Pa)	<1,33x10 ⁻⁸ (1,33x10 ⁻⁸ in EUSES 1.0) 1.3x10 ⁻⁵ (25, 30, 35 °C)	Dossier; EU Document e-Pesticide Manual 12 th ed.
Oplosbaarheid in water (mg/L)	107 (pH=7) 0,121 (pH 5, 20 °C) 0,107-0,121 (bij pH 5, 7 en 9)	Dossier e-Pesticide Manual 12 th ed. EU Document
Log Kow	3,2 3,2 (25 °C)	Dossier; EU Document e-Pesticide Manual 12 th ed.
LogKoc	2,9-3,5 2,9-3,4 2,59 (QSAR) 3,06 (geomean) Kom: 620, 890, 386, 480, 849, 661, 692 L/kg (geomean 631 L/kg)	EPA pesticide fact sheet e-Pesticide Manual 12 th ed. Sabljić, 1995 (agricultural) e-toxBASE
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	6,7x10 ⁻³ < 4,03x10 ⁻² < 3,57x10 ⁻²	Dossier EU Document Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)	1,446	Dossier

pKa	no pKa (pH range 2-12)	EPA pesticide fact sheet
-----	------------------------	--------------------------

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met als referentie "Dossier" en "EU Document" zijn aangeleverd door RIZA.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	ref.
BCF	286 (vis)	EU Document
(Aerobe bio)degradatie	aquatische halfwaardetijd (aeroob): 14-18 dagen aquatische halfwaardetijd (anaeroob): 5-6 dagen belangrijke persistenten metaboliet: CTCA DT50 bodem: 6,8, 7,4, 4,3, 4,6, 5,2, 5, 3,7, 4,1, 18, 4,1, 5,6, 9,7, 3,6 d (geomean 5,6 d) DT50 water/sediment: 18, 9,6, 15, 11 d (geomean 13 d) niet gemakkelijk afbreekbaar inherent afbreekbaar: MITI linear: -0.1011 MITI non linear: 0.0025 Biowin 1: 0,77 Biowin 2: 0.83	EPA pesticide fact sheet e-toxBase EU Document Epiwin 3.12

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met als referentie "EU Document" zijn aangeleverd door RIZA.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	Waarde	ref.
experimentele gegevens	Zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

Species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
Vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	>0,1		Dossier
<i>Oncorhynchus mykiss</i>			0,56	vermoedelijk LC50	EU Doc
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	>0,16		Dossier
<i>Cyprinus carpio</i>	96 uur	LC50	>0,13		Dossier
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	28 dagen	NOEC	0,13		Dossier EU Doc
kreeftachtigen					
<i>Daphna magna</i>	48 uur	EC50	>0,10		Dossier
<i>Daphna magna</i>			0,19	vermoedelijk EC50	EU Doc
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,114		Dossier
<i>Daphnia magna</i>			0,11	vermoedelijk NOEC	EU Doc
algen					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	72 uur	EC50	0,025		Dossier EU Doc
<i>Selenastrum capricornutum</i>	72 uur	NOEC	0,0025		e-toxBase
sediment organismen					
<i>Chironomus riparius</i>		NOEC	0,1		EU Doc
bodemorganismen					
regenworm	14 d	LC50	>1000 mg/kg bodem	metaboliet CCIM, LC50: 56 mg/kg bodem	EU Doc
regenworm	8 wk	NOEC	4 mg/kg dwt	metaboliet	EU Doc

			bodem	CTCA NOEC: 1 mg/kg bodem	

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met als referentie "Dossier" en "EU Document" zijn aangeleverd door RIZA. Het merendeel van deze getallen staat ook in de e-toxBASE.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

Stof niet gevonden in ESIS database.

Volgens een vertrouwelijk verslag van de schriftelijke vergadering van de EU werkgroep classificatie en labelling (ECBI/39/04-add1 revisie 4):

"not classified"

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja volledige EU beoordeling	
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	0,17 mg/kg lg/dag	ADI zoals voorgesteld door EU

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Ja, log K _{ow} = 3,2	AF _{doorvergiftiging} = 2
4	Ad hoc MTR _{water} = 0,125 µg/l	Op basis van een NOEC van 0,0025 mg/l voor groenalgen. AF = AF _{water} x AF _{doorvergiftiging} = 10 x 2 = 20
5	0,125 µg/l gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	ja	
3	Ja, log K _{ow} = 3,2	AF _{doorvergiftiging} = 2
4	Ad hoc MTR _{bodem} = 2 µg/kg dwt bodem. Test is uitgevoerd in standaard kunstgrond (organisch stofgehalte = 10%). Dit is hetzelfde gehalte als de standaard NL-bodem. Ad hoc MTR _{bodem} = 2 µg/kg dwt.	Op basis van een NOEC van 4 mg/kg dwt voor regenwormen. AF = AF _{bodem} x AF _{doorvergiftiging} = 1000 x 2 = 2000
5	ad hoc MTR _{bodem} (evenwichtspartitie) = ad hoc MTR _{water} x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,125 µg/L x 34,6 x 0,59 = 2,54 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 2,54 x 3,33 = 8,47 µg/kg dwt	K _{podem/water} = 34,6 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
6		
7		
8	ja	
9	nee	
10	2 µg/kg dwt bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		

6	ja, ad hoc $MTR_{water} = 0,125 \mu\text{g/L}$	
7	ad hoc $MTR_{bodem} = \text{ad hoc } MTR_{water} \times K_{susp/water} \times 1000/1150$ ($RHO_{susp. matter} = 0,125 \mu\text{g/L} \times 29,6 \times 0,87 = 3,22 \mu\text{g/kg wwt}$. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $3,22 \times 2,71 = 8,72 \mu\text{g/kg dw}$	$K_{p,susp/water} = 29,6 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	$8,72 \mu\text{g/kg dw}$ sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	$PEC_{opp. water (opgelost)} = 0,0678 \text{ mg/L}$ $PEC_{lucht} = 6,27 \times 10^{-3} \text{ mg/m}^3$ $PEC_{landbouwgrond} = 0,233 \text{ mg/kg wwt}$ $PEC_{landbouwgrond, poriewater} = 0,0114 \text{ mg/L}$ $PEC_{sediment} = 1,64 \text{ mg/kg wwt}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

	TDI ($\mu\text{g/kg bw/d}$)	TCA ($\mu\text{g/m}^3$)	Corrected for TCA: NO		
	Surface water ($\mu\text{g/L}$)	Groundwater ($\mu\text{g/L}$)	Air ($\mu\text{g/m}^3$)	Soil ($\mu\text{g/kg dw}$)	Sediment ($\mu\text{g/kg dw}$)
MPC eco	1.25E-01	1.25E-01		2.00E+00	8.72E+00
MPC human	1.44E+02	2.42E+01	1.33E+01	1.62E+03	1.07E+04
Ratio MPC eco/MPC human	8.70E-04	5.17E-03		1.23E-03	8.18E-04
Critical MPC	1.25E-01	1.25E-01	1.33E+01	2.00E+00	8.72E+00
% importance of total exposure	3.992	0.440	95.566	0.002	
Dominant route of exposure	leaf				
% of dominant route	93.486				

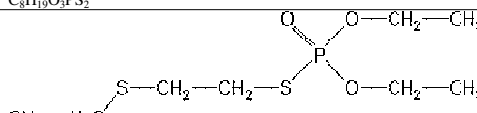
TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Demeton-S (organofosfor)	
CAS-NUMMER	126-75-0	
VOORGESTELDE ad hoc MTR*	(grond)water	oppervlaktewater: 0,031 µg/L grondwater: 0,22 µg/L
	lucht	4,27x10 ⁻⁶ µg/m ³
	bodem	1,65 µg/kg dwt
	sediment	0,35 µg/kg dwt

* Let op!: Normen zijn alleen op humane gegevens gebaseerd (zie ook paragraaf 4)!

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Demeton-S
CAS-nummer	126-75-0
Stofgroep	organothiofosfaten of fosfaatesters Insecticide
Synoniemen	O,O-diethyl S-(2-(ethylthio)ethyl) phosphorothioate; Diethyl S-(2-(ethylthio)ethyl)phosphorothiolate; Diethyl S-(2-(ethylthio)ethyl)phosphorothioate; Diethyl S-ethyl-2-ethylmercaptophosphorothioate; disulfoton oxygen analog; Demeton-S; demeton thiol; Ethanethiol, 2-(ethylthio)-, S-ester with O,O-diethylphosphorothioate; Ethylthionodemeton; Isodemeton; isosystox; Mercaptosfos teolery; Po-systox; Systox thiol; Thiol demeton; Thiol systox;
Molecuulformule	C ₈ H ₁₉ O ₃ PS ₂
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	258,33	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	87	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	128 (133 Pa) 128 (133 Pa)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov e-Pesticide Manual 12 th ed.
Dampdruk (Pa)	0,035 0,035 (20 °C) 0,015 (25 °C, geschat)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov e-Pesticide Manual 12 th ed. SRC PhysProp
Oplosbaarheid in water (mg/L)	2000 2000 (kamer temp)	experim. gegs, Epiwin 3.12, SRC PhysProp e-Pesticide Manual 12 th ed.
Log Kow	2,09	Epiwin 3.12, SRC PhysProp, Medchem ClogP
LogKoc	2,5 2,1 (QSAR)	Epiwin 3.12 Sabljić, 1995 (agricultural)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	2,6x10 ⁻⁹ 8,1x10 ⁻⁵ (geschat) 8,18x10 ⁻⁷	Epiwin 3.12 SRC PhysProp Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)	1,132 1,132	HSDB toxnet.nlm.nih.gov e-Pesticide Manual 12 th ed.
pKa	-	-

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	8	Epiwin 3.12
(Aerobe bio)degradatie	niet gemakkelijk afbreekbaar (inherently biodegradable): MITI linear: 0,35 MITI non linear: 0,17	Epiwin 3.12

	Biowin 1: 0,94 Biowin 2: 1,00	
--	----------------------------------	--

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	Waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit		
mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
kreftachtigen					
algen					

Geen gegevens in e-toxBase.

Ecosar kan voor deze stof niet gebruikt worden, omdat dit programma niet geschikt is voor stoffen met een specifiek werkingsmechanisme, zoals bestrijdingsmiddelen (organofosfaten). Gebruik van Ecosar zou de risico's voor milieu zeer waarschijnlijk onderschatten.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

R27/28: Zeer vergiftig bij aanraking met de huid en bij opname door de mond.

S1/2: Achter slot en buiten bereik van kinderen bewaren.

S28: Na aanraking met de huid onmiddellijk wassen met veel . . . [aan te geven door de fabrikant].

S36/37: Draag geschikte handschoenen en beschermende kleding.

S45: Bij een ongeval of indien men zich onwel voelt, onmiddellijk een arts raadplegen (indien mogelijk hem dit etiket tonen).

T+: Zeer vergiftig

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humana}

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja JMPR 1984	Dossier bevat studies van frauderend lab IBT
3	Nee	
4	Nee	
5	Ongeverifieerde data onbruikbaar	
6	Idem	
7	Idem	
8	Idem	
9	Idem	
10	Nvt	
11	Nvt	
12	Nvt	
13	Nvt	
14	Ongeverifieerde data onbruikbaar	
15	Nvt	
16	Nvt	
17	Ongeverifieerde data onbruikbaar voor evaluatie genotoxiciteit	
18	ad hoc MTR = $1,5 \mu\text{g/p/d}^2 = 1,5/70 \text{ kg} = 0,021 \mu\text{g/kg lg/dag}$	Default, JMPR trok eerdere ADI in (1984)

Verdeling van de stof over de compartimenten

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,514 mg/L PEC _{lucht} = $7,06 \times 10^{-5} \text{ mg/m}^3$ PEC _{landbouwgrond} = 8,34 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 3,56 mg/L PEC _{sediment} = 1,86 mg/kg ww	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

Demeton-S	TDI (ug/kg bw/d) 2.14E-02	TCA (ug/m3) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)
MPC eco					
MPC human	3.11E-02	2.15E-01	4.27E-06	1.65E+00	3.45E-01
Ratio MPC eco/MPC human					
Critical MPC	3.11E-02	2.15E-01	4.27E-06	1.65E+00	3.45E-01
% importance of total exposure	0.272	98.994	0.716	0.018	
Dominant route of exposure	leaf				
% of dominant route	68.205				

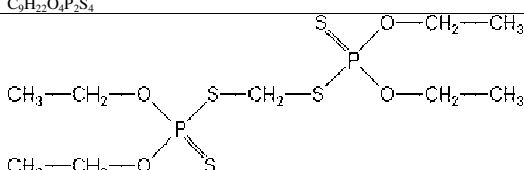
TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

² $\mu\text{g/p/d}$ = microgram per persoon per dag

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Ethion (organofosfor)
CAS-NUMMER		563-12-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	$1,9 \times 10^{-6} \mu\text{g/L}$
	lucht	$2,73 \times 10^{-3} \mu\text{g/m}^3$
	bodem	$1,77 \times 10^{-3} \mu\text{g/kg dwt}$
	sediment	$1,78 \times 10^{-3} \mu\text{g/kg dwt}$

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Ethion
CAS-nummer	563-12-2
Stofgroep	organofosfor verbindingen Acaricide, insecticide
Synoniemen	O,O,O,O'-Tetraethyl S,S-methylene bisphosphorodithioate; O,O,O',O'-tetraethyl S,S'-methylenediphosphorodithioate; Phosphorodithioic acid, S,S'-methylene O,O,O',O'-tetraethyl ester; Rhodiicide; Rhodocide; RP-Thion; S,S-methylene O,O,O',O'-tetraethyl phosphorodithioate; Tetraethyl S,S'-methylene bis(phosphorodithioate); Bis(diethoxyphosphinothioyl) methane; Diethion; bis[S-(diethoxyphosphinothioyl)mercapto] methane; Embathion; Ethanox; Ethiol; Ethion; Ethion 8; Ethodan; Ethopaz; ethyl methylene phosphorodithioate; FMC 1240; Fosfatos E; Fosfono 50; Hylemox; Itopaz; KWIT; Methanedithiol, S,S-diester with O,O-diethyl phosphorodithioate; Methylene O,O,O',O'-tetraethyl phosphorodithioate; Niagra 1240; Nialate; Nialaten; Nialate(R)
Molecuulformule	$\text{C}_9\text{H}_{22}\text{O}_4\text{P}_2\text{S}_4$
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	384,46	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	-12 tot -15 (selected value) -13 (gemiddelde)	Mackay Handbook; e-Pesticide manual 12th ed.
Kookpunt (°C)	164-165 (40 Pa) 164,5 (gemiddelde)	ChemFinder
Dampdruk (Pa)	$1,5 \times 10^{-4}$ (selected value) $2,0 \times 10^{-4}$	Mackay Handbook e-Pesticide manual 12th ed.; SRC Physprop
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1,80 (selected value) 2 (25 °C)	Mackay Handbook e-Pesticide manual 12th ed.; SRC Physprop
Log Kow	5,07 (selected value) 4,28	Mackay Handbook; SRC Physprop e-Pesticide manual 12th ed.
LogKoc	4,19 (selected value) 4,19 4,12 4,21 4,20 (geomean excl. epiwin getal)	Mackay Handbook ATSDR Epiwin 3.12 Sablje, 1995 (predominantly hydrophobic)
Henry-coefficient (Pa-m ³ /mol)	0,0320 (selected value)	Mackay Handbook

	0,0385	e-Pesticide manual 12th ed.; SRC
	0,0320	PhysProp
		Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (g/m ³)	1,22	ChemFinder; e-Pesticide manual 12th ed.
pKa	-	

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	267 589 (geschat) 418-1300 (geschat)	Epiwin 3.12 Mackay Handbook ATSDR
(Aerobe bio)degradatie	halfwaardetijd 4 weken in opp. water halfwaardetijd 8 weken in bodem, veldhalfwaardetijd van 150 d, 90 d in bodem niet gemakkelijk afbreekbaar (inherently biodegradable): MITI linear: 0,13 MITI non linear: 0,017 Biowin 1: 1,19 Biowin 2: 1,00	Mackay Handbook Epiwin 3.12

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit		
mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	48 uur	LC50	0,069	zoutwater	PAN
<i>Carassius auratus</i>	48 uur	LC50	1,1		PAN
<i>Cyprinidae</i>	24 uur	LC50	2,8 0,36	bij 35 °C	PAN e-toxBASE
<i>Cyprinus carpio</i>	72 uur	LC50	1,1		PAN
<i>Gambusia affinis</i>	48 uur	LC50	0,206		PAN
<i>Ictalurus punctatus</i>	96 uur	LC50	7,6		PAN
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,15 0,073		PAN e-toxBASE
<i>Menidia menidia</i>	96 uur	LC50	0,049	zoutwater	PAN
<i>Micropretus salmoides</i>	96 uur	LC50	0,173		PAN
<i>Oncorhynchus clarki</i>	96 uur	LC50	0,805 0,720		PAN e-toxBASE
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,261 0,185		PAN e-toxBASE
<i>Oryzias latipes</i>	48 uur	LC50	5,5		PAN
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	1,3 0,72		PAN e-toxBASE
<i>Poecilia reticulata</i>	96 uur	LC50	0,13		PAN
kreftachtigen					
<i>Penaeus aztecus</i>	48 uur	LC50	0,0024	zoutwater	PAN
<i>Penaeus duorarum</i>	96 uur	LC50	0,015	zoutwater	PAN
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	0,00006 0,000056		PAN e-toxBASE
<i>Daphnia pulex</i>	48 uur	EC50	0,0028		PAN
<i>Gammarus fasciatus</i>	96 uur	LC50	0,0041 0,0018		PAN e-toxBASE

<i>Gammarus lacustris</i>	96 uur	LC50	0,0018		PAN
<i>Palaemonetes kadiakensis</i>	96 uur	LC50	0,0056		
<i>Simocephalus serrulatus</i>	48 uur	EC50	0,0047		PAN
algen					
-	-	-	-	-	-
Insecten					
<i>Chironomus thummi</i>	24 uur	EC50	0,136		
<i>Pteronarcys californicus</i>	96 uur	LC50	0,0028		PAN
Weekdieren					
<i>Crassostrea virginica</i>	96 uur	EC50	0,064 0,059	zoutwater	PAN e-toxBASE
<i>Cipangopaludina malleata</i>	48 uur	LC50	12		PAN
<i>Indoplanorbis exustus</i>	48 uur	LC50	32		PAN
<i>Physella acuta</i>	48 uur	LC50	8,8		PAN
<i>Semisulcospira libertina</i>	48 uur	LC50	10		PAN

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met als referentie "PAN" zijn aangeleverd door RIZA.

Gezien de hoeveelheid data per taxon zou de assessment factor mogelijk omlaag kunnen. Dit zou leiden tot een lagere ad hoc MTR_{eco} (water). Hoe dit zou moeten is echter niet beschreven in de ad hoc methodiek. Daarom is bij de afleiding van de ad hoc MTR de handleiding van de ad hoc methodiek gevolgd met bijbehorende assessment factoren.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

R21: Schadelijk bij aanraking met de huid.

R25: Vergiftig bij opname door de mond.

R50/53: Zeer vergiftig voor in het water levende organismen; kan in het aquatisch milieu op lange termijn schadelijke effecten veroorzaken.

S1/2: Achter slot en buiten bereik van kinderen bewaren.

S25: Aanraking met de ogen vermijden.

S36/37: Draag geschikte handschoenen en beschermende kleding.

S45: Bij een ongeval of indien men zich onwel voelt, onmiddellijk een arts raadplegen (indien mogelijk hem dit etiket tonen).

S60: Deze stof en de verpakking als gevaarlijk afval afvoeren.

S61: Voorkom lozing in het milieu. Vraag om speciale instructies/veiligheidskaart.

T: Vergiftig

N: Milieugevaarlijk

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humanaan}

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja JMPR 1990	Volledige beoordeling door WHO/JMPR
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	0.002 mg/kg lg dag	ADI zoals voorgesteld door JMPR (1990)

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Ja, log K _{ow} is 5,07	AF _{doorvergifting} = 10
4	Ad hoc MTR = 1,9 pg/L	Op basis van een EC50 voor <i>D. magna</i> van 0,000056 mg/L. AF = AF _{water} x AF _{doorvergifting} = 3000 x 10 = 30000
5	1,9 pg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 1,9x10 ⁻⁶ µg/L	
7	ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{water} x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 1,9x10 ⁻⁶ µg/L x 476 x 0,59 = 5,32x10 ⁻⁴ µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 5,32x10 ⁻⁴ x 3,33 = 1,77x10 ⁻³ µg/kg dw	K _{p(bodem)/water} = 476 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	ja	
9	ja	
10	1,77x10 ⁻³ µg/kg dw bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 1,9x10 ⁻⁶ µg/L	
7	ad hoc MTR _{sediment} = ad hoc MTR _{water} x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) =	K _{p(susp)/water} = 397 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3.

	$1,9 \times 10^{-6} \mu\text{g/L} \times 397 \times 0,87 = 6,56 \times 10^{-4} \mu\text{g/kg wwt}$ Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $6,56 \times 10^{-4} \times 2,71 = 1,78 \times 10^{-3} \mu\text{g/kg dw}$	MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	$1,78 \times 10^{-3} \mu\text{g/kg dw}$ sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	$\text{PEC}_{\text{opp. water (opgelost)}} = 0,214 \text{ mg/L}$ $\text{PEC}_{\text{lucht}} = 2,91 \times 10^{-4} \text{ mg/m}^3$ $\text{PEC}_{\text{landbouwgrond}} = 118 \text{ mg/kg wwt}$ $\text{PEC}_{\text{landbouwgrond, porewater}} = 0,421 \text{ mg/L}$ $\text{PEC}_{\text{sediment}} = 141 \text{ mg/kg wwt}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

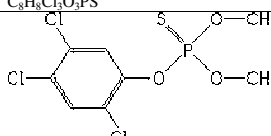
Ethion	TDI (ug/kg bw/d) 2.00E+00	TCA (ug/m3) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)
MPC eco	1.90E-06	1.90E-06		1.77E-03	1.78E-03
MPC human	2.01E+00	3.86E+00	2.73E-03	3.63E+03	4.06E+03
Ratio MPC eco/MPC human	9.47E-10	4.92E-10		4.88E-07	4.39E-07
Critical MPC	1.90E-06	1.90E-06	2.73E-03	1.77E-03	1.78E-03
% importance of total exposure	64.161	31.978	3.092	0.770	
Dominant route of exposure	fish				
% of dominant route	64.161				

TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Fenchloorfos (organofosfor)	
CAS-NUMMER	299-84-3	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	$6 \times 10^{-5} \mu\text{g/L}$
	lucht	$0,030 \mu\text{g/m}^3$
	bodem	$0,013 \mu\text{g/kg dwt}$
	sediment	$0,013 \mu\text{g/kg dwt}$

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fenchloorfos
CAS-nummer	299-84-3
Stofgroep	Organothiofosfaat Insecticide
Synoniemen	O,O-dimethyl O-(2,4,5-trichlorophenyl) phosphorothioate; Dimethyl O-(2,4,5-trichlorophenyl) thiophosphate; Dimethyl (2,4,5-trichlorophenyl) phosphorothionate; dimethyl trichlorophenylthiophosphate; Blitex; Dermafos; Ectoral; Etrolene; Fenchlorfos; Fenchlorphos; Fenclofos; Gesektin K; Korlan; Moorman's medicated RID-EZY; Nankor; Phenol, 2,4,5-trichloro-, O-ester with O,O-dimethyl phosphorothioate; Remelt; Ronnel; Rovon; Trichlorometafos; Trichlormetaphos; Trolene; Viozene
Molecuulformule	$\text{C}_8\text{H}_8\text{Cl}_3\text{O}_3\text{PS}$
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	321,54	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	41 41 (selected value)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov Mackay Handbook
Kookpunt (°C)	97 (0,013 bar) -	HSDB toxnet.nlm.nih.gov Mackay Handbook
Dampdruk (Pa)	0,010 0,009 (geomean of Mackay data) 0,010 (gemeten)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov Mackay Handbook SRC PhysProp
Oplosbaarheid in water (mg/L)	40 0,91 (geomean shake flask data uit Mackay) 1 (gemeten)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov Mackay handbook SRC PhysProp
Log Kow	4,88-5,07 4,88 (gemeten) 5,07 (selected value) 5,07 (gemeten)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov SRC PhysProp Mackay Handbook Medchem ClogPstar
LogKoc	3,3 2,9 (selected value) 4,21 (QSAR) 3,56 (mean Mackay en QSAR)	Epiwin 3.12 Mackay Handbook Sabljic, 1995 (predominantly hydrophobic)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	3,24 (dampdruk/oplosbaarheid) 3,24 (dampdruk/oplosbaarheid) 57,3 (selected value) 3,18	HSDB toxnet.nlm.nih.gov SRC PhysProp Mackay Handbook Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)	1,485 1,48	HSDB toxnet.nlm.nih.gov Mackay Handbook
pKa	-	

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	1599 35481 (gemeten <i>Poecilia reticulata</i>) 4365 (gemeten <i>Poecilia reticulata</i>)	Epiwin 3.12 Mackay Handbook e-toxBase
(Aerobe bio)degradatie	Persistent: MITI linear: -0,054 MITI non linear: 0,0025 Biowin 1: 0,36 Biowin 2: 1,00	Epiwin 3.12

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	Waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit		
mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Ictalurus punctatus</i>	96 uur	LC50	1,6		ecotox
<i>Leiostomus xanthurus</i>	48 uur	EC50	0,32	zoutwater	ecotox
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	1,35 1,3		ecotox e-toxBase
<i>Oncorhynchus clarki</i>	96 uur	LC50	0,308 0,171		ecotox e-toxBase
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,18 0,555		ecotox e-toxBase
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	0,305		ecotox
<i>Poecilia reticulata</i>	24 uur	EC50	0,45	eetgedrag	ecotox
<i>Salmo trutta</i>	48 uur	LC50	0,39		ecotox
<i>Salvelinus fontinalis</i>	48 uur	LC50	0,39		ecotox
<i>Salvelinus namaycush</i>	96 uur	LC50	0,36 0,265		ecotox e-toxBase
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	26 uur	LC50	0,0018		ecotox
<i>Gammarus fasciatus</i>	96 uur	LC50	4,3		ecotox
<i>Penaeus aztecus</i>	48 uur	EC50	0,0052	zoutwater	ecotox
algen					
-	-	-	-	-	-
Mollusken					
<i>Crassostrea virginica</i>	96 uur	EC50	0,170	zoutwater	ecotox
Insecten					
<i>Culex pipiens fatigans</i>	24 uur	LC50	0,0042 0,00122		ecotox e-toxBase

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met als referentie "ecotox" zijn aangeleverd door RIZA. Het merendeel van deze data bevindt zich ook in de e-toxBase.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

R21/22: Schadelijk bij aanraking met de huid en bij opname door de mond.

R50/53: Zeer vergiftig voor in het water levende organismen; kan in het aquatisch milieu op lange termijn schadelijke effecten veroorzaken.

S2: Buiten bereik van kinderen bewaren.
S25: Aanraking met de ogen vermijden.
S36/37: Draag geschikte handschoenen en beschermende kleding.
S60: Deze stof en de verpakking als gevaarlijk afval afvoeren.
S61: Voorkom lozing in het milieu. Vraag om speciale instructies/veiligheidskaart.
Xn: Schadelijk
N: Milieugevaarlijk

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja JMPR 1968	Inclusief ADI-afleiding
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	0,01 mg/kg lg/dag	ADI zoals voorgesteld door JMPR (1968)

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Ja, log K _{ow} = 5,07	AF _{doorvergiftiging} = 10
4	Ad hoc MTR _{water} = 0,06 ng/L	Op basis van een LC50 voor <i>D. magna</i> van 0,0018 mg/L. AF = AF _{water} x AF _{doorvergiftiging} = 3000 x 10 = 30000
5	6x10 ⁻⁵ µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 6x10 ⁻⁵ µg/L	
7	ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{water} x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 6x10 ⁻⁵ µg/L x 109 x 0,59 = 3,85x10 ⁻⁵ µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 3,85x10 ⁻⁵ x 3,33 = 0,013 µg/kg dw	K _{p_{bodem}/water} = 109 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	ja	
9	ja	
10	0,013 µg/kg dw bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 6x10 ⁻⁵ µg/L	
7	ad hoc MTR _{sediment} = ad hoc MTR _{water} x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 6x10 ⁻⁵	K _{p_{susp}/water} = 91,7 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3.

	$\mu\text{g/L} \times 91,7 \times 0,87 = 4,78 \times 10^{-3} \mu\text{g/kg wwt}$. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $4,78 \times 10^{-3} \times 2,71 = 0,013 \mu\text{g/kg dwt}$	MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	0,013 $\mu\text{g/kg dwt}$ sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,184 mg/L PEC _{lucht} = $3,66 \times 10^{-3} \text{ mg/m}^3$ PEC _{landbouwgrond} = 400 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 6,23 mg/L PEC _{sediment} = 25,4 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

Fenchloorfos	TDI ($\mu\text{g/kg bw/d}$) 1.00E+01	TCA ($\mu\text{g/m}^3$) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water ($\mu\text{g/L}$)	Groundwater ($\mu\text{g/L}$)	Air ($\mu\text{g/m}^3$)	Soil ($\mu\text{g/kg dwt}$)	Sediment ($\mu\text{g/kg dwt}$)
MPC eco	6.00E-05	6.00E-05		1.30E-02	1.30E-02
MPC human	1.49E+00	5.05E+01	2.97E-02	1.06E+04	6.32E+02
Ratio MPC eco/MPC human	4.02E-05	1.19E-06		1.22E-06	2.06E-05
Critical MPC	6.00E-05	6.00E-05	2.97E-02	1.30E-02	1.30E-02
% importance of total exposure	9.538	88.962	1.049	0.451	
Dominant route of exposure	root				
% of dominant route	53.714				

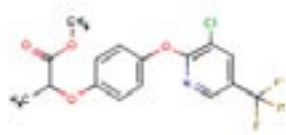
TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Haloxifop-methylester	
CAS-NUMMER	69806-40-2	
VOORGESTELDE ad hoc MTR*	(grond)water	Oppervlaktewater: 1,18 µg/L Grondwater: 7,11 µg/L
	lucht	9,39x10 ⁻⁴ µg/m ³
	bodem	84,7 µg/kg dwt
	sediment	20,2 µg/kg dwt

* Let op!: Normen zijn alleen op humane gegevens gebaseerd (zie ook paragraaf 4)!

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Haloxifop-methylester
CAS-nummer	69806-40-2
Stofgroep	aryloxyphenoxypropionic Herbicide
Synoniemen	Haloxifop-methyl; Haloxifop-methyl ; haloxifop methyl ester; methyl 2-(4-((3-chloro-5-(trifluoromethyl)-2-pyridinyl)oxy)phenoxy)propanoate; Verdict
Molecuulformule	C ₁₆ H ₁₃ ClF ₃ NO ₄
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	375,73	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	56	SRC PhysProp Database
Kookpunt (°C)	> 280 (280 in EUSES 1.0)	e-Pesticide Manual 12 th ed.
Dampdruk (Pa)	8x10 ⁻⁴ 3,28x10 ⁻⁴ (25 °C) 8x10 ⁻⁴ (experimenteel, 25 °C)	ARS Pesticide Properties Database www.arsusda.gov e-Pesticide Manual 12 th ed. SRC PhysProp
Oplosbaarheid in water (mg/L)	9,3 (experimenteel, 25°C) 9,08 (25 °C)	SRC PhysProp Database e-Pesticide Manual 12 th ed.
Log Kow	4,07 (experimenteel) 4,00 4,13	SRC PhysProp Database e-Pesticide Manual 12 th ed. Medchem ClogP
LogKoc	1,8 2,1 3,0 (QSAR) 2,3 (geomean)	ARS Pesticide Properties Database www.arsusda.gov e-Pesticide Manual 12 th ed. Sabljić, 1995 (agricultural)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	0,032 0,032 (geschat, 25 °C) 0,032	ARS Pesticide Properties Database www.arsusda.gov SRC PhysProp Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)	1,372 (20 °C)	e-Pesticide Manual 12 th ed.
pKa		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met referentie "ARS Pesticide Properties Database" zijn door RIZA aangeleverd.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	272 < 17 (<i>Lepomis macrochirus</i> exp.)	Epiwin 3.12 e-toxBase
(Aerobe bio)degradatie	halfwaardetijd: 55 dagen DT50 van parent acid is 9-20.5 dag -> metaboliet: pyridinol niet afbreekbaar: MITI linear: 0,35 MITI non linear: 0,00 Ultimate survey: 1,46	ARS Pesticide Properties Database www.arsusda.gov e-Pesticide Manual 12 th ed. Epiwin 3.12

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit		
mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
kreeftachtigen					
algen					

Geen ecotox data in e-toxBase.

Ecosar kan voor deze stof niet gebruikt worden, omdat dit programma niet geschikt is voor stoffen met een specifiek werkingsmechanisme, zoals bestrijdingsmiddelen. Gebruik van Ecosar zou de risico's voor milieu zeer waarschijnlijk onderschatten.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

Stof niet gevonden in ESIS database.

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humanaan}

stap	Resultaat	opmerking
1	Ja RIVM (1995)	Beoordeling tbv College Toelating Bestrijdingsmiddelen
2	Ja volledige EU-beoordeling 2004	
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	0,65 µg/kg lg/dag	ADI zoals voorgesteld door EU (2004)

Verdeling van de stof over de compartimenten

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,37 mg/L PEC _{lucht} = 1,09x10 ⁻³ mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 30 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 8,25 mg/L PEC _{sediment} = 7,65 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

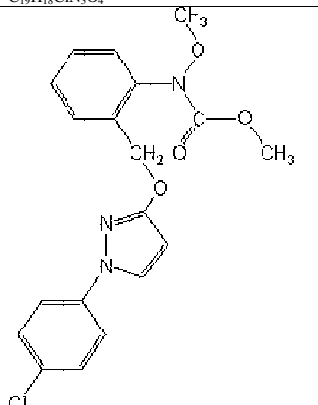
Haloxypop-methylester	TDI (ug/kg bw/d) 6.50E-01	TCA (ug/m3) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)
MPC eco					
MPC human	1.18E+00	7.11E+00	9.39E-04	8.47E+01	2.02E+01
Ratio MPC eco/MPC human				3.72E-02	1.79E-01
Critical MPC	1.18E+00	7.110E+00	9.39E-04	8.47E+01	2.02E+01
% importance of total exposure	16.398	81.075	2.495	0.032	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	31.436				

TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Pyraclostrobin	
CAS-NUMMER	175013-18-0	
VOORGESTELDE aMTR	(grond)water	0,023 µg/L
	lucht	5,29x10 ⁻³ µg/m ³
	bodem	6,04 µg/kg dwt
	sediment	6,12 µg/kg dwt

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Pyraclostrobin
CAS-nummer	175013-18-0
Stofgroep	strobilurines; carbamaten Fungicide
Synoniemen	methyl <i>N</i> -(2-([1-(4-chlorophenyl)-1 <i>H</i> -pyrazol-3-yl]oxymethyl)phenyl)- <i>N</i> -methoxy carbamate
Molecuulformule	C ₁₉ H ₁₈ ClN ₃ O ₄
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	387,82	TD
Smeltpunt (°C)	63,7-65,2 (64,5)	TD; e-Pesticide Manual 12 th ed.
Kookpunt (°C)	-	-
Dampdruk (Pa)	2,6x10 ⁻⁸ (20 °C)	e-Pesticide Manual 12 th ed.
Oplosbaarheid in water (mg/L)	19 1,9 (20 °C)	TD e-Pesticide Manual 12 th ed.
Log Kow	3,99 3,99 (22 °C) 4,86 (geschat)	TD e-Pesticide Manual 12 th ed. Medchem ClogP
LogKoc	3,78 – 4,20 4,19 2,97 (QSAR) 3,65 (geomean QSAR en e-Pesticide Manual data)	e-Pesticide Manual 12 th ed. Epiwin 3.12 Sabljjc, 1995 (agricultural)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	5,3x10 ⁻⁶ 5,3x10 ⁻⁶	TD; e-Pesticide Manual 12 th ed. Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)	3,367	APVMA
pKa		

APVMA=Australian Pesticides and Veterinary Medicines Authority
Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.
 Data met als referentie "TD" en "APVMA" zijn aangeleverd door RIZA.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	247-1195 236	APVMA Epiwin 3.12
(Aerobe bio)degradatie	halfwaardetijd in bodem: 38-137 dagen halfwaardetijd in water: 3 dagen, in anaeroob sediment 33 dagen Niet gemakkelijk afbreekbaar: MITI linear: -0,2129 MITI non-linear: 0,0016	APVMA Epiwin 3.12

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit		
mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,00616		TD
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	>0,0196		TD
<i>C. carpio</i>	96 uur	LC50	>0,0121		TD
<i>O. latipes</i>	96 uur	LC50	>0,032		TD
<i>P. promelas</i>	96 uur	LC50	>0,012		TD
<i>B. rerio</i>	96 uur	LC50	>0,0417		TD
<i>L. idus</i>	96 uur	LC50	>0,0135		TD
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	98 dagen	NOEC-ELS	0,0023		TD
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	0,015		TD
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,004		TD
algen					
<i>P. subcapitata</i>	72 uur	EbC50	0,32		TD
<i>S. subspicatus</i>	72 uur	EbC50	55		TD
Insekten					
<i>Chironomus riparius</i>	28 dagen	NOEC	0,04		TD

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Geen data in de e-toxBASE.

Data met als referentie "TD" zijn aangeleverd door RIZA.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

Stof niet gevonden in ESIS database.

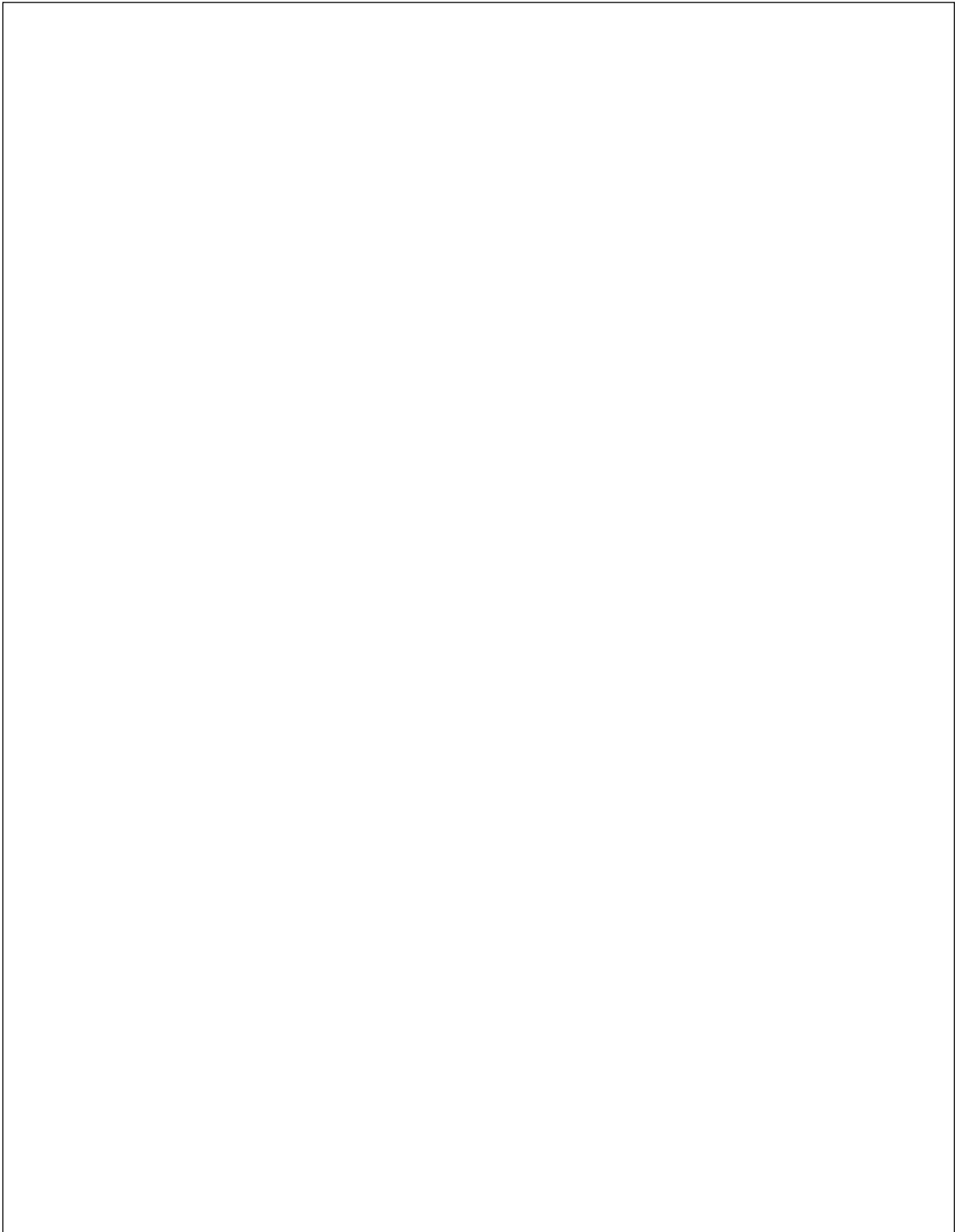
Volgens een vertrouwelijk verslag van de schriftelijke vergadering van de EU werkgroep classificatie en labelling

(ECBI/39/04-add1 revisie 1):

R23: Vergiftig bij inademing

R38: Irriterend voor de huid

R50/53: Zeer giftig voor in het water levende organismen; kan in het aquatisch milieu op lange termijn schadelijke effecten veroorzaken.



6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

ad hoc MTR_{humaan}

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja volledige EU-beoordeling 2001	
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	0,04 mg/kg lg/dag	ADI zoals afgeleid door EU (2001)

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Ja, log K _{ow} = 3,99	AF _{doorvergiftiging} = 2
4	Ad hoc MTR = 23 ng/l	Op basis van een NOEC voor <i>O. mykiss</i> van 0,0023 mg/L. AF = AF _{water} x AF _{doorvergiftiging} = 50 x 2 = 100
5	2,3x10 ⁻³ µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 2,3x10 ⁻³ µg/L	
7	ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{water} x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 2,3x10 ⁻² µg/L x 134 x 0,59 = 1,81 µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 1,81 x 3,33 = 6,04 µg/kg dw	K _{podem/water} = 134 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	ja	
9	ja	
10	6,04 µg/kg dwt bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 2,3x10 ⁻³ µg/L	
7	ad hoc MTR _{sediment} = ad hoc MTR _{water} x	K _{p_{susp}/water} = 113 m ³ /m ³ volgens EUSES

	$K_{\text{dusp/water}} \times 1000/1150 (RHO_{\text{dusp. matter}}) = 2,3 \times 10^{-2} \mu\text{g/L} \times 113 \times 0,87 = 2,26 \mu\text{g/kg wwt}$. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $2,26 \times 2,71 = 6,12 \mu\text{g/kg dw}$	2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	6,12 $\mu\text{g/kg dw}$ sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,67 mg/L PEC _{lucht} = $1,44 \times 10^{-4} \text{ mg/m}^3$ PEC _{landbouwgrond} = 792 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 10 mg/L PEC _{sediment} = 289 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

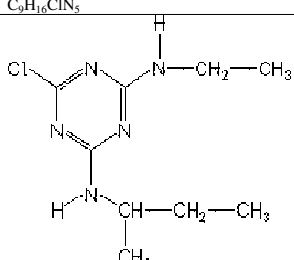
Pyraclostrobin	TDI (ug/kg bw/d) 4.00E+01	TCA (ug/m3) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)
MPC eco	2.30E-02	2.30E-02		6.04E+00	6.12E+00
MPC human	6.14E+01	3.68E+02	5.29E-03	9.54E+04	3.26E+04
Ratio MPC eco/MPC human	3.75E-07	6.26E-08		6.33E-05	1.88E-04
Critical MPC	2.30E-02	2.30E-02	5.29E-03	6.04E+00	6.12E+00
% importance of total exposure	11.851	87.561	0.004	0.584	
Dominant route of exposure	leaf				
% of dominant route	42.686				

TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Sebutylazine	
CAS-NUMMER	7286-69-3	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	oppervlaktewater: 0,093 µg/L grondwater: 0,57 µg/L
	lucht	$7,79 \times 10^{-5}$ µg/m ³
	bodem	7,07 µg/kg dwt
	sediment	1,67 µg/kg dwt

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Sebutylazine
CAS-nummer	7286-69-3
Stofgroep	Chlorotriazines Triazines (volgens epiwin 3.12)
Synoniemen	1,3,5-Triazine-2,4-diamine, 6-chloro-N-ethyl-N'-(1-methylpropyl)-; 1,3,5-Triazine, 2-(sec-butylamino)-4-chloro-6-(ethylamino)-; Butylamino-4-chloro-6-ethylamino-s-triazine; Sebutylazine
Molecuulformule	C ₉ H ₁₆ ClN ₅
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	229,71	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	122,43 159-161 (160)	Epiwin 3.12 e-Pesticide Manual 12th ed.
Kookpunt (°C)	326,44	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	$6,8 \times 10^{-3}$ (geschat)	SRC PhysProp
Oplosbaarheid in water (mg/L)	13,9-47,1 45,6 (25 °C, geschat)	Epiwin 3.12 SRC PhysProp
Log Kow	3,31 2,61 (experimenteel) 3,23 (geschat)	Epiwin 3.12 SRC PhysProp Medchem ClogP
LogKoc	2,65 2,32 (QSAR)	Epiwin 3.12 Sabljić, 1995 (agricultural)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	$3,4 \times 10^{-2}$ $6,0 \times 10^{-4}$ $3,3 \times 10^{-2}$	Epiwin 3.12 SRC PhysProp Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)		
pKa		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	9,8	Epiwin 3.12
(Aerobe bio)degradatie	niet gemakkelijk afbreekbaar: MITI linear: -0,11	Epiwin 3.12

	MITI non linear: 0,00 Ultimate survey: 1,97	
--	--	--

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxicologie

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit		
mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
kreftachtigen					
algen					

Geen gegevens in e-toxBASE.

Ecosar kan voor deze stof niet gebruikt worden, omdat dit programma niet geschikt is voor stoffen met een specifiek werkingsmechanisme, zoals bestrijdingsmiddelen. Gebruik van Ecosar zou de risico's voor milieu zeer waarschijnlijk onderschatten.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

Niet geclassificeerd in Annex I van Richtlijn 67/548/EEC. Het is echter niet bekend of deze stof al beoordeeld is m.b.t. classificatie en labelling.

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humanaan}

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Nee	ad hoc MTR = 1,5 µg/p/d (default)
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	Default: ad hoc MTR = 1,5 µg/p/d = 1,5/70 kg = 0,021 mg/kg lg/dag	

Verdeling van de stof over de compartimenten

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,35 mg/L PEC _{lucht} = 1,13x10 ⁻³ mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 31,3 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 8,22 mg/L PEC _{sediment} = 7,88 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

Sebutylazine	TDI (ug/kg bw/d) 2.14E-02	TCA (ug/m3) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)
MPC eco					
MPC human	9.30E-02	5.66E-01	7.79E-05	7.07E+00	1.67E+00
Ratio MPC eco/MPC human					
Critical MPC	9.30E-02	5.66E-01	7.79E-05	7.07E+00	1.67E+00
% importance of total exposure	2.254	96.999	0.671	0.076	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	76.096				

TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Sethoxydim	
CAS-NUMMER	74051-41-9 74051-80-2 (meest voorkomend)	
VOORGESTELDE ad hoc MTR*	(grond)water	0,32 µg/L
	lucht	5,29x10 ⁻⁶ µg/m ³
	bodem	26,7 µg/kg dwt
	sediment	27,3 µg/kg dwt

*: Let op! Deze normen zijn in grote mate afhankelijk van de pH van het milieu (zie de grote verschillen in wateroplosbaarheid bij verschillende pH's), aangezien deze invloed heeft op de verdeling van de stof over de compartimenten.

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Sethoxydim
CAS-nummer	74051-41-9
Stofgroep	cyclohexene oxime Herbicide
Synoniemen	2-[1-(Ethoximino)butyl]-5-[2-(ethylthio)propyl]-3-hydroxy-2-cyclohexen-1-one; 2-[1-(Ethoximino)butyl]-5-[2-(ethylthio)propyl]-3-hydroxy-2-cyclohexen-1-one; 2-(N-ethoxybutyrimidoyl)-5-(2-ethylthiopropyl)-3-hydroxy-2-cyclohexen-1-one; Aljaden; Alloxol S; AS 9052 O H; BAS 9052; Checkmate; Cyethoxydim; Expand; Fervinal; Nabu; NP 55; Poast; Poast 1.5E; Poast plus; sethodydim; sethoxdim; Sethoxydim; Sethoxydim ; Tritex-extra
Molecuulformule	C ₁₇ H ₂₉ NO ₃ S
Structuurformule	

*: Let op! Deze normen zijn in grote mate afhankelijk van de pH van het milieu (zie de grote verschillen in wateroplosbaarheid bij verschillende pH's), aangezien deze invloed heeft op de verdeling van de stof over de compartimenten.

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	327,49	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	<25 (25 in EUSES 1.0)	SRC PhyProp Database
Kookpunt (°C)	440 >90 °C bij 3x10 ⁻⁵ mm Hg	Epiwin 3.12 e-Pesticide Manual 12th ed.
Dampdruk (Pa)	2,1x10 ⁻⁵ (experimenteel bij 25 °C) < 1,3x10 ⁻⁵	SRC PhyProp Database e-Pesticide Manual 12th ed.
Oplosbaarheid in water (mg/L)	25 (experimenteel bij 20 °C) 25 (pH 4, 20 °C); 4700 (pH 7, 20 °C -> 5040 bij 25 °C)	SRC PhyProp Database e-Pesticide Manual 12th ed.
Log Kow	4,38 (experimenteel)	SRC PhyProp Database; Medchem ClogP star
LogKoc	4,51 (pH 5); 1,65 (pH 7) 3,45	e-Pesticide Manual 12th ed. Epiwin 3.12

	3,15 (QSAR)	Sabljić, 1995 (agricultural)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	2,19x10 ⁻⁶ (geschat bij 25 °C) 1,37x10⁻⁶	SRC PhyProp Database Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)	1,043	ChemFinder; e-Pesticide Manual 12th ed.
pKa	4,58	SRC PhyProp Database; e-Pesticide Manual 12th ed.

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	471	Epiwin 3.12
(Aerobe bio)degradatie	niet gemakkelijk afbreekbaar MITI linear: 0,27 MITI non-linear: 0,068 Biowin 1: 0,75 Biowin 2: 0,27	Epiwin 3.12

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit		
mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

Species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
Vissen					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96 uur	LC50	22 > 145,8 3,5	zoutwater 97,8% purity 18% purity	PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Cyprinus carpio</i>	48 uur	LC50	68 13 0,36	purity onbekend purity onbekend	PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	21 265 1,6	97,3% purity 19% purity	PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Misgurnus anguillicaudatus</i>	48 uur	LC50	5,2 15 1,8	purity onbekend purity onbekend	PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	14 170 1,2	97,3% purity 19% purity	PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Oryzias latipes</i>	48 uur	LC50	4,8 13 1,8	purity onbekend purity onbekend	PAN e-toxBase e-toxBase
kreftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	14 78,1 2,6	97,3% purity 19% purity	PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Americamysis bahia</i>	96 uur	LC50	11 >141,8 0,8	zoutwater 97,8% purity 18% purity	PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Daphnia carinata</i>	3 uur	LC50	9,5 30 3	te korte tijdsduur	PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Daphnia pulex</i>	3 uur	LC50	7,7 >40 1,5	te korte tijdsduur	PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Moina macrocopa</i>	3 uur	LC50	7,1	te korte tijdsduur	PAN

			28 1,8		e-toxBase e-toxBase
Algen					
<i>Navicula pelliculosa</i>	14 d	EC50	>0,27	99,8% purity	e-toxBase
<i>Selenastrum capricornutum</i>	14 d	EC50	>0,302	99,8% purity	e-toxBase
<i>Skeletonema costatum</i>	14 d	EC50	>0,25	zoutwater 99,8% purity	e-toxBase
Planten					
<i>Lemna gibba</i>	14 d	EC50	>0,28	99,8% purity	e-toxBase
Amfibieën					
<i>Bufo bufo japonicus</i>	48 uur	LC50	10,6 15 7,5		PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Rana brevipoda porosa</i>	48 uur	LC50	5,3 7,3 3,8		PAN e-toxBase e-toxBase
Insecten					
<i>Orthetrum albistylum speciosum</i>	48 uur	LC50	7,1 28 1,8		PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Sigara substriata</i>	48 uur	LC50	8,4 35 2		PAN e-toxBase e-toxBase
Weekdieren					
<i>Crassostrea virginica</i>	48 uur	EC50	9,9 >109 0,9	zoutwater 94,5% purity 20,4% purity	PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Cipangopaludina malleata</i>	48 uur	LC50	20 >40 10		PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Indoplanorbis exustus</i>	3 uur	LC50	23 >40 13		PAN e-toxBase e-toxBase

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

De toxdata uit de PAN-database zijn aangeleverd door RIZA.

De verschillende ecotoxdata uit de e-toxBase voor hetzelfde organisme lopen nog al uiteen. Uit de data waarbij de zuiverheid van de test stof wordt vermeld, blijkt dat er in geval van de meest gevoelige L(E)C50's er sprake is van een onzuivere stof (<20%). Waarschijnlijk zit er iets in de formulering dat toxischer is dan sethoxydim zelf. Bij de beoordeling van de toxdata is getracht hier rekening mee te houden. Omdat er voor algen alleen "groter dan"-waarden zijn, waaruit geen exacte EC50 kan worden afgeleid en die onder de laagste LC50 voor vissen liggen, zijn de algen niet meegenomen en is de assessment factor 3000 gekozen.

Gezien het aantal taxonomische groepen waar data voor beschikbaar zijn, zou er mogelijk een lagere assessment factor gekozen kunnen worden.). Hoe dit zou moeten is echter niet beschreven in de ad hoc methodiek. Daarom is bij de afleiding van de ad hoc MTR de handleiding van de ad hoc methodiek gevolgd met bijbehorende assessment factoren.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

Niet geïnclassificeerd in Annex I van Richtlijn 67/548/EEC. Het is echter niet bekend of deze stof al beoordeeld is m.b.t. classificatie en labelling.

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

stap	resultaat	opmerking
1	Ja RIV-beoordeling t.b.v. CTB uit 1983	Document getiteld: 'Sethoxydim – Aanvullende samenvatting toxicologische gegevens' d.d. maart 1983
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8	Ja: NOAEL hond 6 maanden = 1.5 mg/kg lg/dag. AF = 100	Zoals geconcludeerd in bovenstaand RIV-document
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	0,015 mg/kg lg/day	ADI zoals voorgesteld in bovenstaand document

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Ja, log K _{ow} = 4,38	AF _{doorvergiftiging} = 5
4	Ad hoc MTR = 0,32 µg/l	Op basis van een LC50 voor <i>O. latipes</i> van 4,8 mg/L. AF = AF _{water} x AF _{doorvergiftiging} = 3000 x 5 = 15000
5	0,32 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 0,32 µg/L	
7	ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{water} x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,32 µg/L x 42,6 x 0,59 = 8,02 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 8,02 x 3,33 = 26,7 µg/kg dwt	K _{podem/water} = 42,6 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	ja	
9	ja	
10	26,7 µg/kg dwt bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		

6	ja, ad hoc $MTR_{water} = 0,32 \mu\text{g/L}$	
7	ad hoc $MTR_{bodem} = \text{ad hoc } MTR_{water} \times K_{susp/water} \times 1000/1150$ ($RHO_{susp. matter} = 0,32 \mu\text{g/L} \times 36,2 \times 0,87 = 10,1 \mu\text{g/kg wwt}$). Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $10,1 \times 2,71 = 27,3 \mu\text{g/kg dw}$	$K_{p,susp/water} = 36,2 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NL-standaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	27,3 $\mu\text{g/kg dw}$ sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	$PEC_{opp. water (opgelost)} = 1,76 \text{ mg/L}$ $PEC_{lucht} = 5,26 \times 10^{-7} \text{ mg/m}^3$ $PEC_{landbouwgrond} = 262 \text{ mg/kg wwt}$ $PEC_{landbouwgrond, poriewater} = 10,5 \text{ mg/L}$ $PEC_{sediment} = 83,2 \text{ mg/kg wwt}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

Sethoxydim	TDI ($\mu\text{g/kg bw/d}$) 1.50E+01	TCA ($\mu\text{g/m}^3$) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water ($\mu\text{g/L}$)	Groundwater ($\mu\text{g/L}$)	Air ($\mu\text{g/m}^3$)	Soil ($\mu\text{g/kg dw}$)	Sediment ($\mu\text{g/kg dw}$)
MPC eco	3.20E-01	3.20E-01		2.67E+01	2.73E+01
MPC human	1.77E+01	1.06E+02	5.29E-06	8.64E+03	2.57E+03
Ratio MPC eco/MPC human	1.81E-02	3.03E-03		3.09E-03	1.06E-02
Critical MPC	3.20E-01	3.20E-01	5.29E-06	2.67E+01	2.73E+01
% importance of total exposure	19.565	80.280	0.000	0.155	
Dominant route of exposure	leaf				
% of dominant route	23.792				

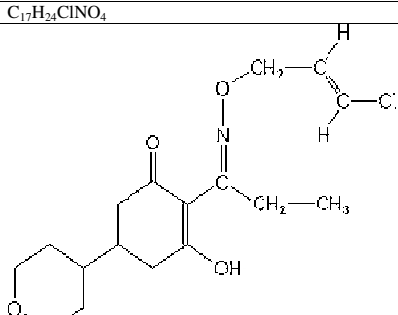
TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Tepaloxymid	
CAS-NUMMER	149979-41-9	
VOORGESTELDE ad hoc MTR*	(grond)water	oppervlaktewater: 78,6 µg/L grondwater: 466 µg/L
	lucht	$1,17 \times 10^{-4}$ µg/m ³
	bodem	$3,08 \times 10^3$ µg/kg dw
	sediment	$7,69 \times 10^2$ µg/kg dw

*: Let op! Deze normen zijn in grote mate afhankelijk van de pH van het milieu (zie de grote verschillen in wateroplosbaarheid bij verschillende pH's), aangezien deze invloed heeft op de verdeling van de stof over de compartimenten.

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Tepaloxymid
CAS-nummer	149979-41-9
Stofgroep	cyclohexene oxim Herbicide
Synoniemen	BAS 620 H
Molecuulformule	C ₁₇ H ₂₄ ClNO ₄
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	341,84	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	72,5-74,4 74	PMRA e-Pesticide Manual 12 th ed.
Kookpunt (°C)	-	
Dampdruk (Pa)	$2,7 \times 10^{-8}$ Pa (25°C) $1,1 \times 10^{-5}$	PMRA e-Pesticide Manual 12 th ed.
Oplosbaarheid in water (mg/L)	430 ; 7250 (pH=6,5; pH=9) 430 (20 °C, pure water)	PMRA e-Pesticide Manual 12 th ed.
Log Kow	1,5; 2,44 (pH=4); 0,20 (pH=7); -1,15 (pH=9) 2,56 Afhankelijk van pH	PMRA Medchem ClogP
LogKoc	0,5-1,8 2,53 2,03 (QSAR met logKow bij pH 7) Afhankelijk van pH	PMRA Epiwin 3.12 Sablje, 1995 (agricultural)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	$8,744 \times 10^{-6}$ $2,15 \times 10^{-5}$	PMRA Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)	1,284	PMRA
pKa	4,58 4,58 (20 °C)	PMRA e-Pesticide Manual 12 th ed.

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

PMRA=Pest Management Regulatory Agency, Canada. Deze data zijn aangeleverd door RIZA.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	0,76-2,3 2,9 (bij geschatte logKow van 3,25)	PMRA Epiwin 3.12
(Aerobe bio)degradatie	halfwaardetijd 3-24 dagen (hydrolyse); 5-9 dagen (bodem); 3-10 maanden (anaeroob) niet gemakkelijk afbreekbaar: MITI linear: 0,23 MITI non linear: 0,015 Biowin 1: 0,29 Biowin 2: 0,002	PMRA Epiwin 3.12

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

PMRA data zijn aangeleverd door RIZA.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit	Categorie 3 carcinogeen (volgens EU Classificatie & Labelling werkgroep – Persoonlijke communicatie)	
mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	>100		TD
<i>Cyprinus carpio</i>	96 uur	LC50	>100		TD
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	83	17.9% purity?	TD
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	28 dagen	NOEC	10		TD
kreftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	>100	17.9% purity?	TD
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	50		TD
algen					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	72 uur	EbC50	74		TD
<i>Selenastrum capricornutum</i>	72 uur	NOEC	15		TD
<i>Anabaena flos-aquae</i>	120 uur	EC50	77		TD
terrestrisch					
<i>Lumbricus sp</i>	?	EC50	23,6 tot >1000 mg/kg	17.9% purity	e-toxBase

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met als referentie "TD" zijn van RIZA afkomstig.

De e-toxBase bevat alleen vertrouwelijke informatie, waarbij de formulering erg onzuiver is (<< 50%). Deze gegevens zijn daarom niet meegenomen.

Vanwege de lage zuiverheid van de teststof, de onbekende testduur en de grote variatie in EC50 getallen voor *Lumbricus sp.* zijn deze gegevens niet meegenomen en is de ad hoc MTR_{eco} (bodem) afgeleid m.b.v. evenwichtspartitie.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

Stof staat niet in ESIS database.

Volgens een vertrouwelijk verslag van de schriftelijke vergadering van de EU werkgroep classificatie en labelling (ECBI/39/04-add1 revisie 1):
R40: Carcinogene effecten zijn niet uitgesloten.
R62: Mogelijk gevaar voor verminderde vruchtbaarheid.
R63: Mogelijk gevaar voor beschadiging van het ongeboren kind.

6. aMTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humanaan}

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja EU-beoordeling 2004	
3		
4		
5		
6		
7		
8	Ja NOAEL 2 jaar rat = 5 mg/kg lg/dag	Zoals geconcludeerd in EU (2004)
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	0,025 mg/kg lg/dag	Provisional ADI zoals voorgesteld door EU (2004)

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log K _{ow} = 0,20 (bij pH 7)	
4	Ad hoc MTR = 1,0 mg/l	Op basis van een NOEC voor <i>Oncorhynchus mykiss</i> van 10 mg/L. AF = AF _{water} = 10
5	1,0 mg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 1000 µg/L	
7	ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{water} x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 1000 µg/L x 3,42 x 0,59 = 2012 µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 2012 x 3,33 = 6699 µg/kg dw	K _{p_{bodem/water}} = 3,42 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	ja	
9	ja	
10	6699 µg/kg dwt bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 1000 µg/L	
7	ad hoc MTR _{sediment} = ad hoc MTR _{water} x	K _{p_{susp/water}} = 3,58 m ³ /m ³ volgens EUSES

	$K_{\text{dusp/water}} \times 1000/1150 (RHO_{\text{usp. matter}}) = 1000 \mu\text{g/L} \times 3,58 \times 0,87 = 3113 \mu\text{g/kg wwt}$ Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $3113 \times 2,71 = 8436 \mu\text{g/kg dwt}$	2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	8436 $\mu\text{g/kg dwt}$ sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,77 mg/L PEC _{lucht} = $2,64 \times 10^{-6}$ mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 21,2 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 10,5 mg/L PEC _{sediment} = 5,65 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA: NO		
Tepraloxymid	2.50E+01	N.A.			
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)
MPC eco	1.00E+03	1.00E+03		6.70E+03	8.44E+03
MPC human	7.86E+01	4.66E+02	1.17E-04	3.08E+03	7.69E+02
Ratio MPC eco/MPC human	1.27E+01	2.15E+00		2.17E+00	1.10E+01
Critical MPC	7.86E+01	4.66E+02	1.17E-04	3.08E+03	7.69E+02
% importance of total exposure	0.070	99.893	0.009	0.028	
Dominant route of exposure	drinkwater				
% of dominant route	53.598				

TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Thiofanoxsulfon	
CAS-NUMMER	39184-59-3	
VOORGESTELDE aMTR	(grond)water	Voor deze stof ontbreekt praktisch elke informatie m.b.t. structuur, fys-chem eigenschappen en tox. Daarom valt voor deze stof geen ad hoc MTR af te leiden.
	lucht	
	bodem	
	sediment	

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Thiofanoxsulfon
CAS-nummer	39184-59-3
Stofgroep	
Synoniemen	
Molecuulformule	
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)		
Smeltpunt (°C)		
Kookpunt (°C)		
Dampdruk (Pa)		
Oplosbaarheid in water (mg/L)		
Log Kow		
Log Koc		
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)		
Relatieve dichtheid (g/m ³)		
pKa		

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF		
(Aerobe bio)degradatie		

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens		
carcinogeniteit		
mutageniteit		

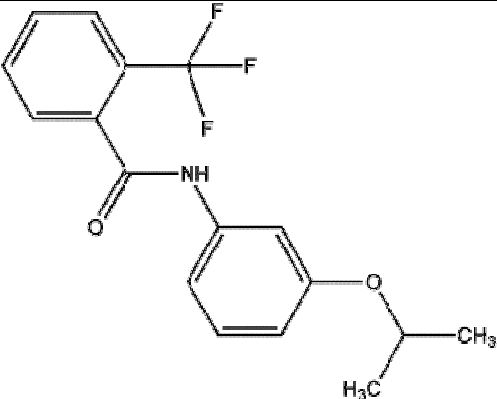
4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
cladocera					
algen					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Trichlopyr-BEE	
CAS-NUMMER	64700-56-7	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,52 µg/L
	lucht	1,01x10 ⁻³ µg/m ³
	bodem	9,01 µg/kg dwt
	sediment	9,94 µg/kg dwt

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Trichlopyr-BEE
CAS-nummer	64700-56-7
Stofgroep	chloropyridinyl verbindingen herbicide
Synoniemen	2-butoxyethyl [(3,5,6-trichloropyridin-2-yl)oxy]acetate; 3,5,6-Trichloropyridinyloxyacetic acid, 2-butoxyethyl ester; Acetic acid, [(3,5,6-trichloro-2-pyridinyl)oxy]-, 2-butoxyethyl ester; Butoxyethyl triclopyr; Crossbow; Crossbow 3L; Turflon D
Molecuulformule	C ₁₃ H ₁₆ Cl ₃ NO ₄
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	356,64	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	147	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	391	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	1,05x10 ⁻⁴ (geschat bij 25 °C)	SRC PhysProp Database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	7 1x10 ⁶ (experimenteel) -> onwaarschijnlijk hoog gezien structuur	pesticideinfo.org SRC PhysProp
Log Kow	4,01 4,49	epiwin; SRC PhysProp Medchem ClogP
LogKoc	1,8 1,45-3,45 3,2 (QSAR) 2,46 (geomean e-toxBASE data en QSAR)	pesticideinfo.org e-toxBASE Sabljić, 1995 (agricultural)
Henry-coëfficiënt (Pa·m ³ /mol)	3,71x10 ⁻⁸ 6,1x10 ⁻³ 5,3x10 ⁻³	Epiwin 3.12 SRC PhysProp Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)		

pKa		
-----	--	--

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	245	Epiwin 3.12
	114	e-toxBase
(Aerobe bio)degradatie	halfwaardetijd 7 dagen (hydrolyse), halfwaardetijd bodem 13 dagen (aeroob), 26 dagen (anaeroob) niet afbreekbaar: MITI linear: 0,48 MITI non linear: 0,08 Ultimate survey: 1,95 DT50 bodem: 0,67 - 291 dagen DT50 water sediment: 0,4 - 391 d	pesticideinfo.org epiwin 3.12 e-toxBase

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit		
mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,61 0,36 0,25		PAN e-toxBase e-toxBase
<i>Menidia berylina</i>	96 uur	LC50	0,58 0,45	zoutwater	PAN e-toxBase
<i>Oncorhynchus gorboscha</i>	96 uur	LC50	1,2		PAN
<i>Oncorhynchus keta</i>	96 uur	LC50	1,7		PAN
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	96 uur	LC50	1,1 0,45		PAN e-toxBase
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	1,4 0,65 0,47		PAN e-toxBase e-toxBase
	76 dagen	NOEC	0,026		e-toxBase
<i>Oncorhynchus nerka</i>	96 uur	LC50	1,4		PAN
<i>Oncorhynchus tshawytscha</i>	96 uur	LC50	2,7		PAN
<i>Pimephales promelas</i>	24 uur	LC50	2,4 2,31		PAN e-toxBase
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	1,8 0,35 0,21		PAN e-toxBase e-toxBase
		NOEC	0,29		e-toxBase
<i>Palaemonetes pugio</i>	96 uur	LC50	2,1 1,7	zoutwater	PAN e-toxBase
algen					
<i>Anabaena flosaqua</i>	24 uur	EC50	1,7 1,97		PAN e-toxBase
		NOEC	0,13		e-toxBase
<i>Navicula pelliculosa</i>	24 uur	EC50	0,1		PAN
		NOEC	0,052		e-toxBase
<i>Selenastrum capricornutum</i>	5 dagen	EC50	4,9		PAN
		NOEC	0,98		e-toxBase
<i>Skeletonema costatum</i>	24 uur	EC50	1,2		PAN

Insecten					
<i>Acroneuria abnormis</i>	1 uur	LC50	320 >320		PAN e-toxBase
<i>Dolophilodes distincta</i>	1 uur	LC50	0,6		PAN
<i>Epeorus vitrea</i>	1 uur	LC50	320 >320		PAN e-toxBase
<i>Heptagenia flavescens</i>	1 uur	LC50	320 >320		PAN e-toxBase
<i>Hydropsyche sp.</i>	1 uur	LC50	310 >310		PAN e-toxBase
<i>Isogenoides sp.</i>	1 uur	LC50	61,7		PAN
<i>Isonychia sp.</i>	1 uur	LC50	320 >320		PAN e-toxBase
<i>Ophiogomphus carolus</i>	1 uur	LC50	320 >320		PAN e-toxBase
<i>Pteronarcys sp.</i>	1 uur	LC50	290 >290		PAN e-toxBase
<i>Pycnopsyche guttifer</i>	1 uur	LC50	290 >290		PAN e-toxBase
<i>Simulium sp.</i>	1 uur	LC50	302 303		PAN e-toxBase
Mollusken					
<i>Crassostrea virginica</i>	96 uur	EC50	0,38 0,32	zoutwater	PAN e-toxBase

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

Data met als referentie "PAN" zijn aangeleverd door RIZA. Deze getallen zijn ook terug te vinden in de e-toxBase.

Gezien de hoeveelheid data per taxon zou de assessment factor mogelijk omlaag kunnen. Dit zou leiden tot een lagere ad hoc MTR_{eco} (water). Hoe dit zou moeten, is echter niet beschreven in de ad hoc methodiek. Daarom is bij de afleiding van de ad hoc MTR de handleiding van de ad hoc methodiek gevolgd met bijbehorende assessment factoren.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

Niet geclassificeerd in Annex I van Richtlijn 67/548/EEC. Het is echter niet bekend of deze stof al beoordeeld is m.b.t. classificatie en labelling.

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

stap	resultaat	opmerking
1	Ja RIVM (1999)	Beoordeling t.b.v. CTB
2	Ja concept beoordeling EU	
3	Nee	
4	Nee	
5	Ja	
6	Ja	
7	Ja	
8	Ja overall NOAEL = 0,5 mg/kg lg/dag	Zoals afgeleid in RIVM (1999)
9	-	
10	100	In RIVM (1999) geen ADI voorgesteld (alleen afleiding overall NOAEL)
11	Ja	
12	0,005 mg/kg ldag	
13	Ja	
14	Nee	
15	-	
16	-	
17	Genotoxiciteit negatief	
18	0,005 mg/kg lg dag	Afgeleid op basis van eerdere overall NOAEL

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Ja, log K _{ow} = 4,49	AF _{doorvergiftiging} = 5
4	Ad hoc MTR _{water} = 0,52 µg/l	Op basis van NOEC voor <i>O. mykiss</i> van 0,026 mg/l. AF = AF _{water} x AF _{doorvergiftiging} = 10 x 5 = 50
5	0,52 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	Ja, ad hoc MTR _{water} = 0,52 µg/L	
7	ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{water} x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,52 µg/L x 8,85 x 0,59 = 2,71 µg/kg wwv. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 2,71 x 3,33 = 9,01 µg/kg dw	Kp _{bodem/water} = 8,85 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	Ja	
9	Ja	
10	9,01 µg/kg dw bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	Ja, ad hoc MTR _{water} = 0,52 µg/L	
7	ad hoc MTR _{sediment} = ad hoc MTR _{water} x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) =	Kp _{susp/water} = 8,11 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3.

	0,52 µg/L x 8,11 x 0,87 = 3,67 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 3,67 x 2,71 = 9,94 µg/kg dw	MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	9,94 µg/kg dw sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,67 mg/L PEC _{lucht} = 2,89x10 ⁻⁴ mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 51,1 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 9,82 mg/L PEC _{sediment} = 13,5 mg/kg wwt	
2	Humanex-output; zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

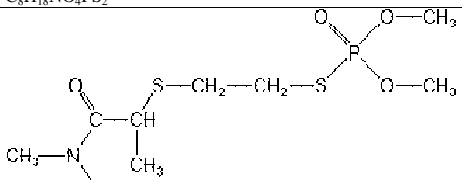
Triclopyr-BEE	TDI (ug/kg bw/d) 5.00E+00	TCA (ug/m3) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)
MPC eco	5.20E-01	5.20E-01		9.01E+00	9.94E+00
MPC human	5.83E+00	3.43E+01	1.01E-03	5.85E+02	1.45E+02
Ratio MPC eco/MPC human	8.92E-02	1.52E-02		1.54E-02	6.88E-02
Critical MPC	5.20E-01	5.20E-01	1.01E-03	9.01E+00	9.94E+00
% importance of total exposure	23.958	75.325	0.684	0.033	
Dominant route of exposure	root				
% of dominant route	25.742				

TDI	Tolerable Daily Intake
TCA	Tolerable Concentration in Air
MPC	Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA	When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Vamidothion	
CAS-NUMMER	2275-23-2	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,19 µg/L
	lucht	2,33x10 ⁻⁷ µg/m ³
	bodem	0,19 µg/kg dwt
	sediment	0,51 µg/kg dwt

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Vamidothion
CAS-nummer	2275-23-2
Stofgroep	Organofosfaten insecticide, acaricide
Synoniemen	Dimethyl phosphorothioate, S-ester with 2-((2-mercaptoethyl)thio)-N-methylpropionamide; Kilval; Trucidor; Vamidoate; Vamidothion;
Molecuulformule	C ₈ H ₁₈ NO ₄ PS ₂
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	287,33	Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	46-48 43	HSDB toxnet.nlm.nih.gov e-Pesticide Manual 12th ed.; SRC PhysProp
Kookpunt (°C)		
Dampdruk (Pa)	negligible negligible (10 ⁻⁶ minimum input waarde EUSES) 1,8 x10 ⁻⁴ (geschat)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov e-Pesticide Manual 12th ed. SRC PhysProp
Oplosbaarheid in water (mg/L)	4x10 ⁶ 4x10 ⁶ (1x10 ⁵ in EUSES = max.) 1x10 ⁶	HSDB toxnet.nlm.nih.gov e-Pesticide Manual 12th ed. SRC PhysProp
Log Kow	0,16 -0,18	Epiwin 3.12; SRC PhysProp Medchem ClogP
LogKoc	0 2,9 1 (QSAR)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov Epiwin 3.12 Sabljić, 1995 (agricultural)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	8,1x10 ⁻¹¹ (geschat) 7,2x10 ⁻¹¹ (4x10 ⁻¹⁰ in EUSES = min.)	HSDB toxnet.nlm.nih.gov; SRC PhysProp Zelf berekend (op basis gekozen WS en VP)
Relatieve dichtheid (-)		
pKa		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF	3	Epiwin 3.12
(Aerobe bio)degradatie	halfwaardetijd (hydrolyse): 91 dagen niet gemakkelijk afbreekbaar (inherent):	HSDB toxnet.nlm.nih.gov Epiwin 3.12

	MITI linear: 0,19 MITI non linear: 0,05 Biowin 1: 1,13 Biowin 2: 1,00	
--	--	--

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	waarde	ref.
experimentele gegevens	zie paragraaf 6 (afleiding humaan)	
carcinogeniteit		
mutageniteit		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Brachiodanio rerio</i>		EC50	590		e-toxBase
<i>Carassius auratus</i>	48 uur	LC50	40 >40		PAN e-toxBase
<i>Cyprinus carpio</i>	48 uur	LC50	40 >40		PAN e-toxBase
<i>Oryzias latipes</i>	48 uur	LC50	40 >40		PAN e-toxBase
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>		EC50	0,19		e-toxBase
<i>Daphnia pulex</i>	3 uur	LC50	10 >10		PAN e-toxBase
<i>Moina macrocopa</i>	3 uur	LC50	10 >10		PAN e-toxBase
algen					
<i>Scenedesmus subspicatus</i>		EC50	1525		e-toxBase
algen		NOEC	100		e-toxBase

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.

De toxdata uit de PAN-database zijn aangeleverd door RIZA.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

5.2 C & L volgens Annex I (gezocht via ESIS op de ECB-website)

R21: Schadelijk bij aanraking met de huid.

R25: Vergiftig bij opname door de mond.

R50: Zeer vergiftig voor in het water levende organismen.

S1/2: Achter slot en buiten bereik van kinderen bewaren.

S36/37: Draag geschikte handschoenen en beschermende kleding.

S45: Bij een ongeval of indien men zich onwel voelt, onmiddellijk een arts raadplegen (indien mogelijk hem dit etiket tonen).

S61: Voorkom lozing in het milieu. Vraag om speciale instructies/veiligheidskaart.

T: Vergiftig

N: Milieugevaarlijk

6. ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja JMPR 1988	
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	0.008 mg/kg lg/dag	ADI zoals vastgesteld door JMPR (1988)

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee	
4	Ad hoc MTR _{water} = 0,19 µg/L	Op basis van EC50 voor <i>D. magna</i> van 0,19 mg/L. AF = AF _{water} = 1000
5	0,19 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 0,19 µg/L	
7	ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{water} x $K_{\text{bodem/water}} \times 1000/1700$ (RHO _{bodem}) = 0,19 µg/L x 0,5 x 0,59 = 0,06 µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,06 x 3,33 = 0,19 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 0,5 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaardbodem.
8	ja	
9	ja	
10	0,19 µg/kg dw bodem gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja, ad hoc MTR _{water} = 0,19 µg/L	
7	ad hoc MTR _{sediment} = ad hoc MTR _{water} x $K_{\text{usp/water}} \times 1000/1150$ (RHO _{usp. matter}) = 0,19 µg/L x 1,15 x 0,87 = 0,19 µg/kg ww. Omrekening naar NL-sediment en op basis	K _p _{usp/water} = 1,15 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden

	van drooggewicht: 0,19 x 2,71 = 0,51 µg/kg dwt	voor de karakteristieken van een NLstandaardsediment.
8	ja	
9	ja	
10	0,51 µg/kg dwt sediment gebruikt als input voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,77 mg/L PEC _{lucht} = 1,37x10 ⁻⁸ mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 3,1 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 10,5 mg/L PEC _{sediment} = 1,59 mg/kg ww	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Humanex output:

Vamidothion	TDI (ug/kg bw/d) 8.00E+00	TCA (ug/m3) N.A.	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)
MPC eco	1.90E-01	1.90E-01		1.90E-01	5.10E-01
MPC human	3.01E+01	1.79E+02	2.33E-07	1.73E+02	8.29E+01
Ratio MPC eco/MPC human	6.31E-03	1.06E-03		1.10E-03	6.15E-03
Critical MPC	1.90E-01	1.90E-01	2.33E-07	1.90E-01	5.10E-01
% importance of total exposure	0.084	99.912	0.000	0.005	
Dominant route of exposure	drinkwater				
% of dominant route	64.171				

TDI Tolerable Daily Intake
TCA Tolerable Concentration in Air
MPC Maximum Permissible Concentration in a specific environmental compartment
Corrected for TCA When 'YES', the TCA is more strict than the MPC for air (based on the ADI)

