

**Afleiding van 9 ad hoc MTR's  
2008**

concept



## **Afleiding van 9 ad hoc MTR's 2008**

Leonard Oste (Deltares)  
Vincent Mastalerz (Deltares)  
Rineke Keijzers (Ecofide)  
Rene Herwijnen (RIVM)  
Paul Jansen (RIVM)  
Roel Fleuren (RIVM)  
Thomas Haverkamp (RIVM)

**Titel**

Afleiding van 9 ad hoc MTR's 2008

**Opdrachtgever**

Rijkswaterstaat Waterdienst

**Project**

1200235-000

**Kenmerk**

1200235-000-ZWS-0002

**Pagina's**

67

**Trefwoorden**

Ad hoc MTR, normen

**Samenvatting**

Dit rapport beschrijft de afleiding van 9 ad hoc MTR's. Dit gebeurt conform de eenvoudige procedure voor de afleiding van de ad hoc MTR's zoals aangegeven in de VROM-notitie (Inter)nationale Normen Stoffen. Het gaat om de volgende stoffen: 2,3 epoxypropyl-trimethylammonium chloride, Fluorwaterstofzuur, 1-hydroxy-ethylideen-1,1-difosfonzuur (HEDP), Isodecyl alcohol - ethoxylated, Natriumhydroxide, Natriumthiocyanaat, Quarternaire ammoniumverbindingen - enzy-C12-14-alkyldimethylchloriden, Trisodium nitrilotriacetate, Vetalcoholalcoxylaat.

Versie	Datum	Auteur	Paraaf	Review	Paraaf	Goedkeuring	Paraaf
1.0	2009-02-26	Leonard Osté e.a.	<i>LO</i>	M. van den Heuvel	<i>MA</i>	A.G. Segeren	<i>AS</i>
1.1	2009-03-25	Leonard Osté e.a.	<i>LO</i>	M. van den Heuvel	<i>MA</i>	A.G. Segeren	<i>AS</i>

**Status**

concept

Dit document is een concept rapport, niet een definitief rapport, en uitsluitend bedoeld voor discussiedoeleinden. Aan de inhoud van dit rapport kunnen noch door de opdrachtgever, noch door derden rechten worden ontleend.

## Inhoud

<b>1 Inleiding</b>	<b>1</b>
<b>2 Methode</b>	<b>2</b>
2.1 Rapportage van gegevens	2
2.2 Het stappenplan	3
<b>3 Resultaten</b>	<b>4</b>
<b>4 Literatuur</b>	<b>5</b>
<b>Bijlage(n)</b>	
<b>A Rapportageformulier 2,3 epoxypropyl-trimethylammonium chloride</b>	<b>6</b>
<b>B Fluorwaterstofzuur</b>	<b>12</b>
<b>C Rapportageformulier 1-hydroxy-ethylideen-1,1-difosfonzuur (HEDP)</b>	<b>17</b>
<b>D Isodecyl alcohol, ethoxylated</b>	<b>24</b>
<b>E Rapportageformulier Natriumhydroxide</b>	<b>30</b>
<b>F Natriumthiocyanaat</b>	<b>35</b>
<b>G Quarternaire ammoniumverbindingen, benzyl-C12-14-alkyldimethylchloriden</b>	<b>39</b>
<b>H Rapportageformulier Trisodium nitrilotriacetate</b>	<b>45</b>
<b>I Vetalcoholalcoxylaat</b>	<b>51</b>
<b>J Stappenplan (RIVM rapport 601503024, Hansler, Traas en Mennes, 2006)</b>	<b>56</b>

## 1 Inleiding

In 2008 heeft RWS Waterdienst aan Deltares gevraagd om voor de in dit rapport aangegeven stoffen ad hoc MTR's af te leiden. Deltares heeft, samen met adviesbureau Ecofide, het chemisch en ecotoxicologische deel van de ad hoc MTR's uitgevoerd. Het RIVM heeft het MTR<sub>humanaan</sub> berekend en het resultante ad hoc MTR bepaald. In dit rapport wordt de afleiding van alle onderdelen beschreven. De ad hoc MTR's worden over het algemeen gebruikt om de lozingen van deze stoffen in oppervlaktewater te kunnen beoordelen, of om monitoring gegevens van met name bestrijdingsmiddelen te kunnen toetsen.

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, na beoordeling door een interne RIVM toetsgroep, 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<sup>1</sup> 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).

---

<sup>1</sup> QSAR staat voor *Quantitative Structure Activity Relationship* ofwel *kwantitatieve structuur-activiteitsrelaties*: een set van methoden die een *mathematische relatie* probeert te vinden tussen de *belangrijkste eigenschappen* van stoffen of moleculen en hun *biologische en toxicologische activiteit*. Deze *stofeigenschappen* kunnen de vorm, de *hydrofobe eigenschappen* of andere kenmerken van stoffen voorspellen.

## 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), en staat weergegeven in Bijlage H.

### 3 Resultaten

De afgeleide ad hoc MTR's zijn in Tabel 3.1 weergegeven. De achterliggende gegevens en afleidingen staan weergegeven in de bijlagen.

Tabel 3.1 Voorgestelde ad hoc MTR's

Stof	CAS nummer	Oppervlakte water µg/l	Bodem µg/kg dwt	Sediment µg/kg dwt	Lucht µg/m <sup>3</sup>	Grondwater µg/l
2,3-epoxypropyl-Trimethylammonium choride	3033-77-0	0,73	0,059	4,2	Niet afgeleid	0,017
Fluorwaterstofzuur	7664-39-3	1,5 (opgelost fluoride)	11 (toegevoegd)	Niet afgeleid	0,05	1,5 (opgelost fluoride)
1-hydroxy-ethyleen-1,1-difosfonzuur (HEDP)	2809-21-4	1,0	0,89	2,62	Niet afgeleid	1,0
Isodecyl alcohol, ethoxylated	61827-42-7	0,53	10	11	Niet afgeleid	0,53
Natriumhydroxide	1310-73-2	pH effect	Zie water	Zie water	Niet relevant	pH effect
Natrumthiocyanaat	540-72-7	3,6	6200	Niet afgeleid	Niet afgeleid	3,6
Quarternaire ammoniumverbindingen, benzyl-C12-14-alkyldimethyl-, chloriden	85409-22-9	0,054	1,5	1,6	Niet afgeleid	0,054
Trisodium nitrilotriacetate	5064-31-3	930	7,31	2075	Niet relevant	14,8
Vetalcoholalcoxylaat	68439-49-6	0,12	11000	11000	3,64	0,12



## 4 Literatuur

Hansler, R.J., T.P. Traas & W.C. Mennes (2006)

Handreiking voor de afleiding van indicatieve milieukwaliteitsnormen. RIVM report 601503024

Traas, T.P. & D.M. Bontje, 2005

Environmental risk limits for alcohols, glycols, and some other relatively soluble and/or volatile compounds. 2. Integration of human and ecotoxicological risk limits. Report 601501027.

VROM (2004)

(Inter)nationale Normen Stoffen.

## A Rapportageformulier 2,3 epoxypropyl-trimethylammonium chloride

SAMENVATTING		
STOFNAAM		2,3-epoxypropyl-trimethylammonium chloride
CAS-NUMMER		3033-77-0
VOORGESTELDE ad hoc MTR	oppervlaktewater	0,73 µg/L
	grondwater	0,017 µg/L
	lucht	niet afgeleid #
	bodem	0,059 µg/kg dwt
	sediment	4,2 µg/kg dwt
DATUM		6-11-2008

# Omdat de stof een geladen molecuul is, met een lage geschatte dampspanning, wordt het afleiden van een ad hoc MTR<sub>lucht</sub> niet relevant geacht.

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	2,3-epoxypropyl-trimethylammonium chloride
CAS-nummer	3033-77-0
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	Epoxides (Epiwin 3.20) Used for cationisation of starch in the paper industry
Synoniemen	2,3-Epoxypropyl)trimethylammonium chloride; 1-(Trimethylammonio)-2,3-epoxypropane chloride; Glycidyl-trimethyl-ammonium chloride; N,N,N-Trimethyloxiranemethanaminium chloride; N-Glycidyl-N,N,N-trimethylammonium chloride; Trimethylglycidylammonium chloride; beta,gamma-Epoxypropyltrimethylammonium chloride; 2,3-Epoxypropyltrimethylammonium chloride; 2-Oxiranemethanaminium, N,N,N-trimethyl-, chloride (1:1); Ammonium, (2,3-epoxypropyl)trimethyl-, chloride; Glycidyltrimethylammonium chloride; Oxiranemethanaminium, N,N,N-trimethyl-, chloride; EPTAC
Molecuulformule	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> ClNO
Smiles	[Cl-].C[N+](C)(C)CC1CO1
Structuurformule	

**2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN**

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	151,66		EU-RAR
Smeltpunt (°C)	365,75 <b>118-126</b>	smelten kort vastgesteld bij 118°C daarna gemaskeerd door decompositie	EPIwin 3.20 EU-RAR 2008
Kookpunt (°C)	137,31 <b>geen</b>	decompositie tussen 118 en 126°C	EPIwin 3.20 EU-RAR 2008
Dampdruk (Pa)	$5,49 \times 10^{-4}$ <b><math>8,90 \times 10^{-4}</math></b> $<10^{-3}$	Geschat, 25°C	SRC PhysProp Database EPIwin 3.20 EU-RAR 2008
Oplosbaarheid in water (mg/L)	$2,2 \times 10^4$ <b><math>8,52 \times 10^5</math></b> ± $1,67 \times 10^4$	Gebaseerd op fragmenten Flask method, 20°C	EPIwin 3.20 EU-RAR 2008
Log K <sub>ow</sub>	-3,39 <b>-3,93</b> <-1,3	Geschat Shake flask method bij pH4. Concentratie in octanol fase kon niet gemeten worden. Log K <sub>ow</sub> berekening gebaseerd op LOD in octanol en gemeten concentratie in waterfase. De recovery was onvoldoende.	EPIwin 3.20 BioLoom ClogP EU-RAR 2008
Log K <sub>oc</sub> *	-1,02 <b>1,73</b>	QSAR niet hydr. stoffen Experimenteel bepaald op basis van adsorptie aan rioolslib	Handreiking afl. ind. MKN EU-RAR 2008
Henry-coëfficiënt (Pa-m <sup>3</sup> /mol)	$9,16 \times 10^{-10}$ <b><math>1,58 \times 10^{-7}</math></b> $<1,78 \times 10^{-7}$	Geschat, 25°C  Berekend	SRC Physprop Database MW x VP / WS EU-RAR 2008
pKa			

**Vetgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.**

\* 2,3-Epoxypropyl-trimethylammonium chloride is een geladen molecuul, hiervoor wordt een berekende K<sub>oc</sub> minder betrouwbaar geacht. Volgens de handleiding zou de te gebruiken log K<sub>oc</sub> het gemiddelde tussen gemeten waarden en QSAR moeten zijn. Omdat de berekende log K<sub>oc</sub> minder betrouwbaar is en de PNECs voor sediment en bodem in de EU-RAR via equilibrium partitie op basis van de gemeten K<sub>oc</sub> zijn berekend, is de gemeten K<sub>oc</sub> uit de RAR gebruikt in deze ad hoc MTR-afleiding.

**3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU**

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	no data  MITI linear: 0,3360 MITI non-linear: 0,2480 Biowin 1: 0,3280 Biowin 2: 0,0708 Biowin 3: 2,8554 Conclusie: Not biodegradable  <b>inherently biodegradable but not fulfilling the criteria</b>	CERI en BIODEG database  Epiwin 3.20          EU-RAR

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

#### 4. TOXICITEIT

##### 4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	RAR beschikbaar. Daarin vervatte informatie: acute toxiciteit, huid- en oogirritatie, sensibilisatie, subacute orale toxiciteit, genotoxiciteit in vitro en in vivo, dermale carcinogeniteit, geen ontwikkelingstoxiciteit, geen reproductietoxicologie	EU-RAR 2008
Carcinogeniteit	Alleen dermale studie muis	EU-RAR 2008
Mutageniteit	Bacteriële testen, diverse in vivo studies	EU-RAR 2008
Kritische studie oraal	28 dagen rat, LOAEL voor niertoxiciteit 3,16 mg/kg lg/dag	EU-RAR 2008
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar, stof niet vluchtig	EU-RAR 2008

##### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Danio rerio</i>	96	LC50	1992	nominaal, 72.5% EPTAC	EU-RAR 2008
<b>kreftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	24	LC50	46	nominaal, 92% EPTAC	EU-RAR 2008
<i>Daphnia magna</i>	48	LC50	16,4		EU-RAR 2008
<i>Daphnia magna</i>	21 d	NOEC	<b>0,16</b>	nominaal, 72.5% EPTAC	EU-RAR 2008
<b>algen</b>					
<i>Desmodesmus subspicatus</i>	72	EC50	> 1000	nominaal, 71% EPTAC	EU-RAR 2008
<i>Desmodesmus subspicatus</i>	72	NOEC	580	nominaal, 71% EPTAC	EU-RAR 2008

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

#### 5. CLASSIFICATIE & LABELLING

##### 5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen informatie van aanvrager.

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

Classification and labelling proposed in the "final proposal of C&L for the 31st ATP:

R: 45-21/22-41-43-48/22-62-68-52/53, Carc. Cat.2, Muta. Cat. 3 and Repr. Cat. 3.

##### 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

**Ad hoc MTR<sub>huuman</sub>**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee, wel RAR beschikbaar	
3	-	
4	Nee	
5	Nee, slechts orale 28 dagenstudie rat	
6	Nee	
7	Ja, in orale 28-dagenstudie rat	Stof veroorzaakt niereffecten LOEL 3,16 mg/kg lg/dag, atrofie in testis en ovariën, NOAEL 10 mg/kg lg/dag
8	Nee	
9	Ja, overall LOEL 3,16 mg/kg lg/dag	
10	Overall AF = 10 x 10 x 10 x 10	Beperkte dataset wijst op hoge toxische potentie ook vwb genotoxiciteit en carcinogeniteit. Extrapolatiefactoren: 10 voor interspecies, 10 intraspecies, 10 voor extrapolatie van subchronisch naar chronisch, 10 voor beperkingen dataset en ernst potentiële effecten
11	Nee	Kies default van 1,5 µg/persoon/dag
12	-	
13	Alleen dermale proef in muis	resultaat positief voor locale tumoren, twijfelachtig voor systemische tumoren
14	Nee	
15	-	
16	-	
17	Stof genotoxisch in vitro en in vivo, op basis van waargenomen positieve mutageniteit in somatische cellen en bereiken van gonaden wellicht stof ook een kiemcelmutageen (conclusie RAR)	
18	ad hoc MTR <sub>huuman</sub> van 0,02 µg/kg lg/dag gebruikt voor integratie huuman en eco.	Neem default, geen TCA nodig vanwege zeer lage vluchtigheid

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> (grond)water**

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja, er is een EU-RAR voor deze stof, de PNECwater is 0,016 mg/L (NOEC voor Daphnia (0,16 mg/L) met een AF van 10).	
2		
3		
4		
5	ad hoc MTR <sub>eco</sub> water van 16 µg/L gebruikt voor integratie huuman en eco.	

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> lucht**

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	Omdat de stof een geladen molecuul is, met een erg lage geschatte dampspanning ( $8,90 \times 10^{-4}$ Pa), wordt het afleiden van een ad hoc MTR <sub>lucht</sub> niet relevant geacht.	

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> bodem**

stap	resultaat	opmerking
1	Ja, er is een EU-RAR voor deze stof, de PNEC <sub>terrestrial</sub> is 0,017 mg/kg <sub>wwt</sub> (berekend op basis van PNEC <sub>water</sub> m.b.v. evenwichtspartitie)	
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: $0,0170 \times 3,33 = 0,057$ mg/kg <sub>dwt</sub>  ad hoc MTR <sub>eco</sub> bodem van 57 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	$K_{p_{\text{bodem/water}}} = 1,81 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.1.  MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> sediment**

stap	Resultaat	opmerking
1	Ja, er is een EU-RAR voor deze stof, de PNEC <sub>sediment</sub> is 0,0313 mg/kg <sub>wwt</sub> (berekend op basis van PNEC <sub>water</sub> m.b.v. evenwichtspartitie)	
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,0313 x 2,71 = 0,085 mg/kg <sub>dwt</sub>  ad hoc MTR <sub>eco</sub> sediment van 85 µg/kg <sub>dwt</sub> gebruikt voor integratie humaan en eco.	Kp <sub>susp/water</sub> = 2,25 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> volgens EUSES 2.1.

**Integratie ad hoc MTR<sub>humaan</sub> en ad hoc MTR<sub>eco</sub>**

stap	resultaat	opmerking
1	PEC <sub>opp. water (opgelost)</sub> = 1,78 mg/L PEC <sub>lucht</sub> = 2,99 x 10 <sup>-10</sup> mg/m <sup>3</sup> PEC <sub>landbouwgrond</sub> = 0,0441 mg/kg wwt PEC <sub>landbouwgrond, poriewater</sub> = 0,0413 mg/L PEC <sub>sediment</sub> = 3,36 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

**Output Humanex-resultaten:**

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:	NO	
<b>2,3-epoxypropyl-trimethylammonium chloride</b>	2.10E-02	N.A.			
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)
<b>MPC eco</b>	1.60E+01	1.60E+01	2.69E-09	5.70E+01	8.50E+01
<b>MPC human</b>	7.26E-01	1.68E-02	1.22E-10	5.89E-02	4.20E+00
<b>Ratio MPC eco/MPC human</b>	2.20E+01	9.50E+02		9.67E+02	2.02E+01
<b>Critical MPC *</b>	7.26E-01	1.68E-02	1.22E-10	5.89E-02	4.20E+00
<b>% importance of total exposure</b>	99.576	0.423	0.000	0.001	
<b>Dominant route of exposure</b>	drw				
<b>% of dominant route</b>	98.795				

## B Fluorwaterstofzuur

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fluorwaterstofzuur
CAS-NUMMER		7664-39-3
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water *	1,5 mg/L (opgelost fluoride)
	lucht *	0,05 µg/m <sup>3</sup>
	bodem * †	11 mg/kg dwt (toegevoegd)
	sediment †	niet afgeleid*
DATUM		7/10/2008

\* Voor dit compartiment bestaat een wettelijke MTR of een EU-RAR waarop de normen gebaseerd kunnen worden -> geen ad-hoc afleiding nodig. Doordat voor deze compartimenten gedegen normen beschikbaar zijn, vindt er geen integratie plaats met humane ad hoc MTR's.

† EU-RAR (2001) van HF geeft aan dat de gemiddelde achtergrond concentratie van fluoride in Nederlandse kleibodems varieert van 80 tot 700 mg/kg (d.w).

\* Doordat er geen ecotoxiciteits-gegevens voor sediment zijn en berekeningen m.b.v. evenwichtspartitie niet mogelijk zijn, vanwege het ontbreken van betrouwbare partitie-coëfficiënten, is er voor sediment geen norm afgeleid (streefwaarde: 500 mg/kg dwt).

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fluorwaterstofzuur
CAS-nummer	7664-39-3
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	Neutral organic (foutieve classificatie in EPIWin) industrial chemical / cleaning, etching agent
Synoniemen	Fluorhydric acid; Hydrofluoric acid; Hydrofluoride; Hydrogen fluoride; Rubigine; Hydrogen fluoride; waterstof fluoride
Molecuulformule	HF
Structuurformule	H—F

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	20,01		EU-RAR (2001)
Smeltpunt (°C)	-83		EU-RAR (2001)
Kookpunt (°C)	19,5		EU-RAR (2001)
Dampdruk (Pa)	103300	bij 20 °C	EU-RAR (2001)
Oplosbaarheid in water (mg/L)	922 133 mengbaar in alle verhoudingen (10 <sup>6</sup> verondersteld)	Exp. 0°C geschat, 25°C	SRC Physprop database Epwin 3.12 EU-RAR (2001)
Log Kow	0,23 -1,4 -1,32	geschat	SRC Physprop database EU-RAR (2001) Bioloom (ClogP)
Log Koc*	-	-	-



Henry-coefficient (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	(Pa- 2,07	58,36 2,07	geschat, 25°C MW x VP / WS	SRC database	Physprop
pKa					

\*: QSARs voor log Koc zijn niet geschikt voor HF. Volgens de EU-RAR:

"In soil (pH < 6) fluor is predominantly found in bound form in fluoride containing minerals as fluorspar, cryolite and apatite, and clay minerals. Therefore, fluoride is immobile in soil, but leaching to the B horizon is possible in soils with a low clay content....In addition, a positive correlation was found between the concentration of fluoride and that of organic carbon in the soil solution, which may indicate that fluoride also forms complexes with carbon."

Over het gedrag van fluorwaterzuur valt in de gangbare databases niks te vinden, maar het is te verwachten dat de sorptie o.a. van de pH afhangt.

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	Fluor is een element en niet afbreekbaar, Conclusie: niet relevant	

### 4. TOXICITEIT

#### 4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Beoordeling in EU-RAR (2001), ad hoc advies RIVM (2001), RIVM (1988), RIVM (1991)	EU-RAR (2001), RIVM (1988), RIVM (2001), RIVM (1991)
Carcinogeniteit	Geen studies beschikbaar, fluoride als niet carcinogeen beschouwd in dier en mens	Idem
Genotoxiciteit	Zie EU-RAR (2001)	Idem
Kritische studie oraal	Overall schatting veilige dosis tav botfluorose bij mens 5 mg/dag voor een volwassene (= 0,07 mg/kg lg/dag)	RIVM (1988), RIVM (1991)
Kritische studie inhalatie	Epidemiologische 10-jaar studie NOAEC 0,48 mg/m <sup>3</sup>	RIVM (2001)

EU-RAR (2001) European Union Risk Assessment Report – Hydrogen Fluoride. European Chemicals Bureau Existing Substances, 1st Priority List no. 8.

RIVM (1998) Basisdocument Fluoriden. RIVM-rapport 758474005.

RIVM (1991) Humaan-toxicologische C-toetsingswaarden. RIVM rapport 725201 005.

RIVM (2001) Advies met betrekking tot de overschrijding van het MTR voor fluoride. RIVM ad hoc advies d.d. 13 april 2001. RIVM/CSR.

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Leuciscus idus</i>	48 uur	LC50	660		IUCLID
Mosquito fish	96 uur	LC50	925		IUCLID
Trout	240 uur	LC50	64		IUCLID
Brown trout	96 uur	LC50	164,5		IUCLID
Rainbow trout	96 uur	LC50	107,5		IUCLID

<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia sp.</i>	48 uur	LC50	270		IUCLID
<b>algen</b>					
<i>Scenedesmus quadricauda</i>	96 uur	NOEC	circa 249	Parameter is aangeduid als "Toxicity threshold:"	IUCLID
<i>Scenedesmus sp.</i>	96 uur	NOEC	95	Toxicity threshold	IUCLID
<b>bacterien</b>					
<i>Escherichia coli</i>	96 uur	NOEC	180	Toxicity threshold	IUCLID
<i>Pseudomonas putida</i>	16 uur	NOEC	circa 231	Toxicity threshold	IUCLID

**Hardheid van water heeft (groot) effect op ecotoxiciteit.**

**Zie voor beschikbare ecotoxiciteitsdata:**

- EU-RAR voor waterstoffluoride (2001)
- Slooff et al. (1988)

**Afgeleide PNEC-waarden voor water in de EU-RAR voor waterstof fluoride (2001):**

- 0,9 mg/L voor hard water
- 0,4 mg/L voor zacht water
- 3,3 mg/L voor hard en zacht water samen

**Afgeleide PNEC-waarden voor water in Slooff et al. (1998):**

- 1,5 mg/L voor hard water (= wettelijk MTR)
- 1 mg/L voor zacht water
- 3,2 mg/L voor hard en zacht water

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

**Ad hoc MTR<sub>huumaan</sub>**

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja	RIVM (1991) en RIVM (2001)
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		

18	ad hoc MTR <sub>humanaan</sub> van 0,07 mg/kg lg/dag en TCA van 0,0016 mg/m <sup>3</sup>	
----	--	--

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> (grond)water**

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja.	www.rivm.nl/rvs; Wettelijk vastgestelde MTR <sub>water</sub> = 1,5 mg/L.
2		
3		
4		
5	Wettelijke MTR <sub>eco</sub> water van 1,5 mg F/L gebruikt	<a href="http://www.rivm.nl/rvs">www.rivm.nl/rvs</a> . Ter info: de drinkwater norm volgens EU Council Directive 98/83/EC is ook 1,5 mg/L

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> lucht**

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja	VROM (1999)
2		
3		
4	MTR <sub>eco</sub> lucht (jaargemiddelde): <b>0,05</b> µg/m <sup>3</sup>	

VROM (1999). Stoffen en Normen. Overzicht van belangrijke stoffen en normen in het milieubeleid.

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> bodem**

stap	resultaat	opmerking
1	Ja, PNEC waarde	EU-RAR (2001)
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	PNEC <sub>eco</sub> bodem <b>11mg/kg</b>	European Union Risk Assessment Report: hydrogen fluoride. Published 2001 De gemiddelde achtergrond concentratie van fluoride in Nederlandse kleibodems varieert van 80 tot 700 mg/kg (d.w). In de testsystemen was de achtergrond concentratie erg laag. De PNEC waarde moet om die reden bij de achtergrond concentratie opgeteld worden.

EU-RAR (2001) European Union Risk Assessment Report – Hydrogen Fluoride. European Chemicals Bureau Existing Substances, 1st Priority List no. 8.

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> sediment**

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	Streefwaarde sediment 500 mg /kg droge stof. RVS website: <a href="http://www.rivm.nl/rvs">www.rivm.nl/rvs</a> .
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	Omdat er geen data beschikbaar zijn en er geen norm via evenwichtspartitie afgeleid kan worden (geen Koc beschikbaar) kan er voor sediment geen ad hoc MTR afgeleid worden.	

**Integratie ad hoc MTR<sub>humanaan</sub> en ad hoc MTR<sub>eco</sub>**

stap	resultaat	opmerking
1	Omdat er gedegen MTRs beschikbaar zijn voor bodem, water en lucht, vindt er geen integratie plaats met de humane ad hoc MTR's. Bovendien is dit vanwege het ontbreken van partitievoefficients ook niet mogelijk.	
2		
3		

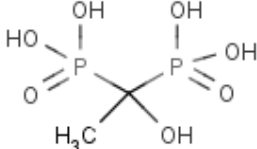
## C Rapportageformulier 1-hydroxy-ethylideen-1,1-difosfonzuur (HEDP)

SAMENVATTING		
STOFNAAM		1-hydroxy-ethylideen-1,1-difosfonzuur (HEDP)*
CAS-NUMMER		2809-21-4
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	1,0 µg/L
	lucht	-**
	bodem	0,89 µg/kg dwt
	sediment	2,62 µg/kg dwt
DATUM		

\* In 2005/6 is voor de groep fosfonaten een ad hoc norm afgeleid voor de hele groep. HEDP maakt hiervan onderdeel uit. In deze afleiding zijn veel gegevens uit het risk assessment report opgesteld door HERA (draft 2004) gebruikt. Gegevens uit de ad hoc afleiding voor fosfonaten zijn meegenomen in deze afleiding.

\*\* Gezien de lage dampdruk en Henry coëfficiënt wordt het afleiden van een luchtnorm niet relevant geacht.

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	1-hydroxy-ethylideen-1,1-difosfonzuur
CAS-nummer	2809-21-4
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	Neutral Organic Hard surface cleaners, laundry detergents, dish wash products
Synoniemen	(1-Hydroxyethylene)diphosphonic acid; 1,1,1-Ethanetriol diphosphonate; 1-Hydroxy-1,1-diphosphonoethane; 1-Hydroxyethane-1,1-bisphosphonic acid; 1-Hydroxyethane-1,1-diphosphonate; 1-Hydroxyethane-1,1-diphosphonic acid; 1-Hydroxyethanediphosphonic acid; 1-Hydroxyethylidene-1,1-bisphosphonate; 1-Hydroxyethylidene-1,1-diphosphonic acid Acetodiphosphonic acid; Ethane-1-hydroxy-1,1-diphosphonate; Ethane-1-hydroxy-1,1-diphosphonic acid; Etidronic acid; Hydroxyethane-1,1-diphosphonic acid; Hydroxyethanediphosphonic acid; Oxyethylidenediphosphonic acid; Phosphonic acid, (1-hydroxyethylidene)bis-; Phosphonic acid, (1-hydroxyethylidene)di-; Phosphonic acid, 1-hydroxy-1,1-ethanediyl ester; HEDP
Molecuulformule	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> O <sub>7</sub> P <sub>2</sub>
Structuurformule	

**2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN**

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	206,03		Ecosar / Epiwin 3.20
Smeltpunt (°C)	88,01	Geschat	Epiwin 3.20
	<b>190-199</b>	Geometrisch gemiddelde van 195 gebruikt. Decompositie bij 228°C	HERA en IUCLID datasheet
Kookpunt (°C)	-	Geen kookpunt vanwege decompositie	
Dampdruk (Pa)	1,65E-8	Geschat, 25°C	Epiwin 3.20
	1,33E-8		HERA (Draft, 2004)
	1,24E-9		HERA
	<b>6.5E-9</b>	Geometrisch gemiddelde van de drie genoemde waarden, omdat het niet duidelijk is of de HERA waarden wel of niet gemeten zijn.	
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>6,9E5</b>	Exp., 20°C	SRC Physprop database
Log Kow	-0,81	Geschat	Epiwin 3.20
	-2,54	Geschat (ClogP)	Bioloom
	<b>-3,49</b>	Gemeten	HERA
Log Koc	-0,55	QSAR fosfaten	Handreiking afleiding ind. MKN
	<b>0.93</b>	HEDP Adsorption coëfficiënt k voor activated sludge = 0,91 – 0,98 → geometrisch gemiddelde = 0,944 % geabsorbeerd aan sludge. 5.6 % in oplossing $K_d = C_s/C_w \rightarrow K_d = 94,4/5.6 = 16.8$ → Dit geeft een Koc = 16.8 x 0.5 (Gehalte actief koolstof in sludge) = 8.43 L. Kg <sup>-1</sup> → log Koc = 0.93	HERA (geeft Freundlich isotherm voor k) Steber and Wierich* (adsorption coëfficiënt)
Henry-coefficient (Pa-m <sup>3</sup> /mol)	5,28E-12	Geschat, 25°C	Epiwin 3.20
	<b>1,94E-12</b>	MW x VP / WS	
pKa	3.66E-16		Euses 2.1

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

\* Steber and Wierich (1986) properties of hydroxyethane diphosphonate affecting its environmental fate: degradability, sludge adsorption, mobility in soils, and bioaccumulation., Chemosphere, 15, 929

**3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU**

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	<b>Not biodegradable</b>	
	No data	CERI and BIODEG database
	MITI linear: 0,1672	
	MITI non-linear: 0,0473	Epiwin 3.12
	Biowin 1: 0,4655	
	Biowin 2: 0,1624	
	Biowin 3: 2,5318	

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

## 4. TOXICITEIT

### 4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Beoordeling door JECFA (2006) als ingrediënt in <i>Peroxyacid Antimicrobial solutions</i> , door RIVM als ingrediënt in Inspexx 200 en door OECD/SIDS (2004) als <i>HEDP and salts</i> . Beschikbare data o.a. toxicokinetiek, subchronisch oraal, chronisch oraal toxonderzoek met Na-Zout, gecombineerde reproductie- en ontwikkelingstoxstudies in rat en konijn. Dinatriumzout wordt therapeutisch gebruikt (humaan) bij ziekte van Paget (idiopathische botaandoening)	1, 2, 3
Carcinogeniteit	2-jaarstudie rat	2
Genotoxiciteit	In vitro	1, 2
Kritische studie oraal	Overall orale NOAEL chronisch in proefdieren <b>19 mg/kg lg/dag</b> . therapeutische startdosering bij de mens 5 mg/kg lg/dag (behandelingsperiode 6 maanden)	HERA
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar (stof zeer weinig vluchtig)	

1. JECFA (2006) Peroxyacid antimicrobial solutions. WHO Food Additives Series no. 54 pp. 87-115.

2. OECD/SIDS (2004) SIDS Initial assessment profile HEDP and salts. SIAM 18, 20-23 April 2004

3. RIVM/RIKILT (2007) Desinfecterende werking Inspexx-200 tijdens slachtproces. Risicobeoordeling in opdracht van VWA. RIVM/SIR rapport no. PORS 11445A00.

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

### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96 uur	LC50	2180	Salinity = 25 ppt	IUCLID
<i>Ictalurus punctatus</i>	96 uur	LC50	695	Results based on % active acid	IUCLID
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	868	Results based on % active acid	IUCLID
<i>Leuciscus idus</i>	48 uur	LC50	207		IUCLID
<i>Leuciscus idus</i>	48 uur	LC50	350	Data refer to 100% active matter	IUCLID
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	3-6 dagen	LC50	200	Results based on % active acid	IUCLID
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	368	Results based on % active acid	IUCLID
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	360		IUCLID
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	14 dagen	LC50	180	Results based on % active acid	IUCLID
<i>Pimephales sp.</i>	96 uur	LC50	2180		IUCLID
<b>kreftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	527	Results based on % active acid	IUCLID
<i>Daphnia magna</i>	24 uur	EC50	100	Data refer to 100% active matter	IUCLID
<i>Daphnia magna</i>	24 uur	EC50	165		IUCLID
<i>Daphnia</i>	28 dagen	NOEC	6,75		HERA
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	<b>0.1</b>	Reproduction rate *	IUCLID
<i>Palaemonetes pugio</i>	96 uur	EC50	1770	Results based on % active acid. Sal 25 ppt	IUCLID

<b>algen</b>					
<i>Algae</i>	96 uur	NOEC	0,74		HERA
<i>Chlorella sp.</i>	48 dagen	NOEC	100		IUCLID
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	96 uur	LC50	3,0		HERA
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	14 dagen	NOEC	13	Was oude naam, nieuwe ingevuld. Results based on % active acid	IUCLID
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	14 dagen	EC50	39	Results based on % active acid	IUCLID
<i>Pseudokirchneriella sp.</i>	21 dagen	NOEC	3		IUCLID
<b>Insecten</b>					
<i>Chironomus tentans</i>	48 uur	EC50	8910	Results based on % active acid	IUCLID
<i>Chironomus tentans</i>	48 uur	NOEC	3925	Results based on % active acid	IUCLID
<b>Tweekleppigen</b>					
<i>Crassostrea virginica</i>	96 uur	EC50	89	Reduction in shell growth; Seawater medium	IUCLID
<b>Bacterien</b>					
<i>Pseudomonas putida</i>	30 min.	NOEC	1000		IUCLID
<b>Bodem</b>					
<i>Eisenia fetida</i>	14 dagen	NOEC	1000 mg/kg	drooggewicht bodem	IUCLID

\* Assumed that this effect is not due to the systemic toxicity of the test compound, but rather to depletion of nutrients caused by HEDP: no concentration/effect correlation was observed in the concentration range 0,1 – 10 mg/l. (IUCLID)

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

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

### Ad hoc MTR<sub>human</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee, wel beoordeling door JECFA (2006) en OECD/SIDS (2004), RIVM (2007)	
3	-	
4	Nee	
5	Ja	
6	Ja	
7	Ja	
8	Ja, 19 mg/kg lg dag uit 2 jaar rat (dinatriumzout)  -therapeutische startdoserings bij de mens 5 mg/kg lg/dag (dinatriumzout)	2-jaarstudie uit OECD SIDS, anemie als kritisch effect (verstoring ijzermetabolisme) Therapeutisch: dinatriumzout in behandeling van ziekte van Paget (=idiopathische botaandoening gekenmerkt door versnelde botstofwisseling leidend tot botfracturen en andere skeletafwijkingen). Door hoge affiniteit met vast calciumfosfaat voorkomt DEHP groei en oplossing van hydroxypapatiet; orale toediening, startdoserings van 5 mg/kg lg per dag, behandelingsperiode maximaal 6 maanden



9	-	
10	op chronische NOAEL: 10 interspecies, 10 intraspecies	
11	Ja	
12	0.19 mg/kg lg/dag	
13	Ja	
14	Nee	
15	-	
16	-	
17	In vitro genotoxiciteit negatief	
18	ad hoc MTR <sub>humaan</sub> van 0.19 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> (grond)water**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee	
4		
5	ad hoc MTR <sub>eco</sub> water van 1,0 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	NOEC daphnia van 0,1 mg/L gebruikt. AF = 100

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> lucht**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4	Ad hoc MTR <sub>eco</sub> lucht wordt gebaseerd op humane tox.	Wordt <u>niet afgeleid</u> vanwege lage dampspanning en Henry coëfficiënt

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> bodem**

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee; ad hoc MTR <sub>eco</sub> bodem Exp. van 1 mg/kg	NOEC worm 1000 mg/kg gebruikt AF = 1000
4		
5		
6	Ja	
7	Evenwichtspartitie: ad hoc MTR <sub>eco</sub> bodem = ad hoc MTR <sub>eco</sub> water x K <sub>p</sub> <sub>bodem/water</sub> x 1000/1700 (RHO <sub>bodem</sub> ) = 1,0 µg/L x 0.453 / 1,7 = 0.27 µg/kg wwt.  Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0.27 x 3,33 = 0.89 µg/kg dwt	K <sub>p</sub> <sub>bodem/water</sub> = 0.453 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> volgens EUSES 2.1.  MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.

8	Ja	
9	Ja	
10	ad hoc MTR <sub>eco</sub> bodem van 0.89 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	Ad hoc MTR <sub>bodemEP</sub> < ad hoc MTR <sub>bodemEXP</sub>

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> sediment**

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ja	
7	Indien er geen ecotox data voor sediment is (=meestal) -> evenwichtspartitie: ad hoc MTR <sub>eco</sub> sediment = ad hoc MTR <sub>eco</sub> water x K <sub>p</sub> <sub>susp/water</sub> x 1000/1150 (RHO <sub>susp. matter</sub> ) = 1,0 µg/L x 1.11 / 1,15 = 0.97 µg/kg wwt.  Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 0.97 x 2,71 = 2.62 µg/kg dwt	K <sub>p</sub> <sub>susp/water</sub> = 1.11 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> volgens EUSES 2.1.  MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8	Nee	
9		
10	ad hoc MTR <sub>eco</sub> sediment van 2.62 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

**Integratie ad hoc MTR<sub>humaan</sub> en ad hoc MTR<sub>eco</sub>**

stap	resultaat	opmerking
1	PEC <sub>opp. water (opgelost)</sub> = 2,88 mg/L PEC <sub>lucht</sub> = 1,77E-12 mg/m <sup>3</sup> PEC <sub>landbouwgrond</sub> = 7.64E-3 mg/kg wwt PEC <sub>landbouwgrond, poriewater</sub> = 0.0287 mg/L PEC <sub>sediment</sub> = 2.49 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

**Output Humanex-resultaten:**

	TDI	TCA	Corrected for TCA:		NO
1-hydroxy-ethylideen-1,1-difosfonzuur	(ug/kg bw/d)	(ug/m3)			
	1.90E+02	N.A.			
	Surface water	Groundwater	Air	Soil	Sediment
	(ug/L)	(ug/L)	(ug/m3)	(ug/kg dwt)	(ug/kg dwt)
MPC eco	1.00E+00	1.00E+00	6.15E-13	8.90E-01	2.62E+00
MPC human	6.59E+03	6.56E+01	4.05E-09	5.72E+01	1.75E+04
Ratio MPC eco/MPC human	1.52E-04	1.52E-02		1.55E-02	1.50E-04
Critical MPC *	1.00E+00	1.00E+00	4.05E-09	8.90E-01	2.62E+00
% importance of total exposure	99.818	0.182	0.000	0.000	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	99.038				

## D Isodecyl alcohol, ethoxylated

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Isodecyl alcohol, ethoxylated
CAS-NUMMER		61827-42-7
VOORGESTELDE ad hoc MTR*	(grond)water	0,53 µg/L
	lucht	niet afgeleid
	bodem	10 µg/kg dwt
	sediment	11 µg/kg dwt
DATUM		7/10/2008

\*: De stof is oppervlakte-actief, waardoor partitie op basis van log  $K_{oc}$  (en afleiding van log  $K_{oc}$  uit log  $K_{ow}$ ) minder betrouwbaar is. Om relatief snel een ad hoc norm af te kunnen leiden, is toch gebruik gemaakt van evenwichts-partitie op basis van log  $K_{oc}$  (berekend uit log  $K_{ow}$ ), waardoor het resultaat voor bodem, lucht en sediment mogelijk minder betrouwbaar is. Het betreft hier een organische verbinding, dat is de reden dat hier wel met  $K_{oc}$  is gewerkt, in tegenstelling tot de zouten natrium thiocynaat en waterstoffluoride.

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Isodecyl alcohol, ethoxylated
CAS-nummer	61827-42-7
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	Surfactants-nonionic (epiwin 3.12) herbicide, cleaning detergent
Synoniemen	Emulphogene; Ethylan; Igepal; Polyoxyethylated (4) isodecyl alcohol; Polyoxyethylene isodecyl ether; Rhodasurf; Trycol; alpha-Isodecyl-omega-hydroxypoly(oxy-1,2-ethanediyl); Poly(oxy-1,2-ethanediyl), alpha-isodecyl-omega-hydroxy-
Molecuulformule	C <sub>20</sub> H <sub>42</sub> O <sub>6</sub>
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	378,55		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	139,90	geschat	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	410,16	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	$8,58 \times 10^{-7}$	geschat, 25°C	Epiwin 3.12

Oplosbaarheid in water (mg/L)	48,51 (op basis geschatte logK <sub>ow</sub> ) <b>14925 (op basis fragmenten)</b>	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Log Kow	2,12 <b>2,86</b>	geschat geschat (ClogP)	Epiwin 3.12 Bioloom
Log Koc*	<b>2,51</b>	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry-coefficient (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	1,57 x 10 <sup>-6</sup> <b>2,1 x 10<sup>-8</sup></b>	dampdruk/opl.heid MW x VP / WS	Epwin 3.12
pKa	-		

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

\*: De stof is oppervlakte-actief, waardoor partitie op basis van log K<sub>oc</sub> (en afleiding van log K<sub>oc</sub> uit log K<sub>ow</sub>) minder betrouwbaar is. Om toch relatief snel ad hoc normen af te kunnen leiden, is toch gebruik gemaakt van evenwichts-partitie op basis van log K<sub>oc</sub> (berekend uit log K<sub>ow</sub>)

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	no data  MITI linear: 0,0974 MITI non-linear: 0, 0290 Biowin 1: -1,0107 Biowin 2: 0,0000 Biowin 3: 2,4792 <b>Conclusie: not biodegradable</b>	CERI en BIODEG database  Epiwin 3.12

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Beoordeling door HERA (2007) (industrie-project) van geëthoxyleerde alcoholen (C8-C18). Toxiciteit van onderhavige C <sub>20</sub> AE <sub>5</sub> vergelijkbaar. Toxicologische data voor geëthoxyleerde alcoholen (C8-C18) omvatten diverse semichronische studies met vertegenwoordigers uit de groep, drie chronische studies met C <sub>14-15</sub> AE <sub>7</sub> /C <sub>12-13</sub> AE <sub>6,5</sub> , genotoxiciteit, reproductietoxiciteit, ontwikkelingstoxiciteit	HERA 2007
Carcinogeniteit	Twee 2-jaarsstudies rat	Idem
Genotoxiciteit	In vitro en in vivo	Idem
Kritische studie oraal	Overall NOAEL 50 mg/kg lg/dag (chronische studie met C <sub>12-13</sub> AE <sub>6,5</sub> )	Idem
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar	Idem

HERA (2007) Monograph Alcohol Ethoxylates Version 1.0 May 2007. Human & Environmental Risk Assessment on ingredients of European household cleaning products. [http://www.heraproject.com/files/34-F-HERA-AE-HH+ENV%20Final%20Draft%20Report\\_01-05-07.pdf](http://www.heraproject.com/files/34-F-HERA-AE-HH+ENV%20Final%20Draft%20Report_01-05-07.pdf)

## 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Vissen</i>	96	LC <sub>50</sub>	<b>15,922</b>	Alkyl ethoxylates: C = 10 & ethoxylates = 5	ECOSAR
<b>kreftachtigen</b>					
<i>Daphnids</i>	48	LC <sub>50</sub>	<b>15,922</b>	Alkyl ethoxylates: C = 10 & ethoxylates = 5	ECOSAR
<b>algen</b>					

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

Stof valt binnen domein van de QSARs

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR<sub>humaan</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Geen HSDB, wel evaluatie door HERA (2007)	HERA aanpak identiek aan EU-RARs
4	Nee	
5	Ja	
6	Ja	
7	Ja	
8	Ja, oraal overall NOAEL = 50 mg/kg lg/dag (2 jaar rat)  Inhalatie: geen NOAEC beschikbaar	Kritisch effecten in het algemeen: irritatie maagdkanaal verhoogd levergewicht en leverhypertrofie; Kritische effecten zoals waargenomen in 2 jaar rat: verminderde groei, verhoogde orgaangewichten Inhalatie: geen TCA noodzakelijk vanwege geringe vluchtigheid
9	-	
10	100	10 voor inter-, 10 intraspecies extrapolatie, geen extra factor omdat toxiciteit van onderhavige C <sub>20</sub> AE <sub>5</sub> vergelijkbaar geacht wordt met de geteste C <sub>14-15</sub> AE <sub>7</sub> /C <sub>12-13</sub> AE <sub>6,5</sub> (toxiciteit eerder lager dan hoger).
11	Ja	
12	0,5 mg/kg lg/dag	
13	Ja	

14	Negatief	
15	-	
16	-	
17	Beschikbare genotoxiciteitsdata negatief	
18	ad hoc MTR <sub>humaan</sub> van 0,5 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA noodzakelijk vanwege geringe vluchtigheid

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> (grond)water**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	Alleen QSAR getallen
3	Kleine kans op doorvergiftiging (log K <sub>ow</sub> < 3)  LC <sub>50</sub> voor 2 trofische niveaus aanwezig Laagste LC <sub>50</sub> (vis en daphnia) = 15,922 mg/L AF = 3000 + extra factor 10 voor gebruik van QSARs. Ad hoc MTR <sub>eco</sub> water = 15,922/30000 = 0,53 µg/L	Log Kow <3, Bereken ad hoc MTR <sub>eco</sub> Water.
4		
5	Ad hoc MTR <sub>eco</sub> water : 0,53 µg/L wordt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> lucht**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4	Er wordt geen ad hoc MTR <sub>eco</sub> lucht afgeleid vanwege de lage dampspanning en Henry coëfficiënt.	

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> bodem**

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ja	Ad hoc MTR <sub>eco</sub> water: 0,53 µg/L
7	ad hoc MTR <sub>eco</sub> bodem = ad hoc MTR <sub>eco</sub> water x K <sub>p</sub> <sub>bodem/water</sub> x 1000/1700 (RHO <sub>bodem</sub> ) = 0,53 µg/L x 9,84 / 1,7 = 3,07 µg/kg wwt.  Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 3,07 x 3,33 = 10,2 µg/kg dwt	K <sub>p</sub> <sub>bodem/water</sub> = 9,84 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> volgens EUSES 2.1.

8	Nee	Ad hoc MTR <sub>bodem</sub> = ad hoc MTR <sub>bodem ep</sub> = 10 µg/kg dwt
9		
10	ad hoc MTR <sub>eco</sub> bodem 10 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> sediment**

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ja	Ad hoc MTR <sub>eco</sub> water: 0,53 µg/L
7	ad hoc MTR <sub>sedimentEP</sub> = ad hoc MTR <sub>eco</sub> water x K <sub>p</sub> <sub>susp/water</sub> x 1000/1150 (RHO <sub>susp. matter</sub> ) = 0,53 µg/L x 8,94 / 1,15 = 4,12 µg/kg wwt.  Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 4,12 x 2,71 = 11,2 µg/kg dwt	K <sub>p</sub> <sub>susp/water</sub> = 8,94 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> volgens EUSES 2.1.
8	Nee	Ad hoc MTR sediment = ad hoc MTR <sub>sedimentEP</sub> = 11 µg/kg dwt
9		
10	ad hoc MTR <sub>eco</sub> sediment van 11 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

**Integratie ad hoc MTR<sub>humaan</sub> en ad hoc MTR<sub>eco</sub>**

stap	resultaat	opmerking
1	PEC <sub>opp. water (opgelost)</sub> = 2,84 mg/L PEC <sub>lucht</sub> = 4,4 x 10 <sup>-11</sup> mg/m <sup>3</sup> PEC <sub>landbouwgrond</sub> = 2,04 mg/kg wwt PEC <sub>landbouwgrond, poriewater</sub> = 0,353 mg/L PEC <sub>sediment</sub> = 25,7 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Output Humanex-resultaten:	TDI	TCA	Corrected for TCA:			NO
Isodecyl alcohol, ethoxylated	(ug/kg bw/d)	(ug/m3)				
	5.00E+02	N.A.				
	Surface water	Groundwater	Air	Soil	Sediment	
	(ug/L)	(ug/L)	(ug/m3)	(ug/kg dwt)	(ug/kg dwt)	
<b>MPC eco</b>	5.30E-01	5.30E-01	8.21E-12	1.00E+01	1.10E+01	
<b>MPC human</b>	1.10E+04	1.36E+03	1.70E-07	2.58E+04	3.05E+05	
<b>Ratio MPC eco/MPC human</b>	4.83E-05	3.88E-04		3.87E-04	3.61E-05	



<b>Critical MPC *</b>	5.30E-01	5.30E-01	1.70E-07	1.00E+01	1.10E+01
<b>% importance of total exposure</b>	82.269	17.719	0.000	0.012	
<b>Dominant route of exposure</b>	drw				
<b>% of dominant route</b>	62.782				

## E Rapportageformulier Natriumhydroxide

SAMENVATTING		
<b>STOFNAAM</b>		<b>Natriumhydroxide</b>
<b>CAS-NUMMER</b>		<b>1310-73-2</b>
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>(grond)water</b>	<b>pH effect *</b>
	<b>lucht</b>	<b>niet relevant</b>
	<b>bodem</b>	<b>Zie water</b>
	<b>sediment</b>	<b>Zie water</b>
<b>DATUM</b>		<b>24-12-2008</b>

\* De toxiciteit van NaOH is afhankelijk van de buffercapaciteit van het ontvangende compartiment. pH concentraties van effluënten moeten binnen de range van 6.5 en 9.0 vallen. (Wet milieubeheer & Wet verontreiniging oppervlaktewater). Bij contact van NaOH met water vind een volledige dissociatie plaats waarbij Na<sup>+</sup> en OH<sup>-</sup> ionen ontstaan. De buffercapaciteit van het compartiment bepaalt of de pH zal toenemen als gevolg van het vrijkomen van de OH<sup>-</sup> ionen tot boven de wettelijk vastgestelde pH grenzen. De vergunningverlener moet NaOH handhaven door controle van de pH van effluënten of het ontvangende water.

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Natriumhydroxide
CAS-nummer	1310-73-2
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	Neutral Organic
Synoniemen	Sodium Hydroxide; white caustic solution; sodium hydrate; liquid caustic;
Molecuulformule	NaOH
Structuurformule	Na <sup>+</sup> OH <sup>-</sup>

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	40,00		Epiwin 3.20
Smeltpunt (°C)	318	solid, 100%	EU-RAR (2007)
	140	solution of 80%	
	42	solution of 60%	
	16	solution of 40%	
	-26	solution of 20%	
Kookpunt (°C)	1388	solid, 100%	EU-RAR (2007)
	216	solution of 80%	
	160	solution of 60%	
	128	solution of 40%	
	118	solution of 20%	
Dampdruk (Pa)	2,43E-19	Extrapolated., 25°C	SRC Physpro database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1E6	geschat, 25°C	Epiwin 3.20

	<b>0,78E6</b>	De EU-RAR geeft aan dat NaOH in elke verhouding mengbaar is met water. Boven de 52% NaOH (gewicht) bevindt het mengsel zich in de vaste fase, deze grens wordt daarom als maximum oplosbaarheid gehanteerd. Deze concentratie is berekend op basis van een dichtheid van 1,55 kg/L voor een 52% oplossing bij 20°C (bron: www.handymath.com).	EU-RAR (2007)
Log Kow	-3,88	geschat, 25°C	Epiwin 3.20
	-	De EU-RAR geeft aan dat een log Kow niet relevant is voor NaOH	EU-RAR (2007)
	<b>-1,75</b>	ClogP	Bioloom
Log Koc	0,11	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry-coefficient (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	9,72E-24	dampdruk/opl.heid	Epwin 3.20
	<b>1,25E-23</b>	MW x VP / WS	handleiding
pKa		Dissocieert bij contact met water in Na <sup>+</sup> en OH <sup>-</sup> ionen.	EU-RAR (2007)

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
pH	<b>Addition of NaOH to surface water may increase the pH, depending on the buffer capacity of the water.</b>	EU-RAR (2007)
(Aerobe bio)degradatie	<b>not biodegradable</b>  no data  MITI linear: 0,5931 MITI non-linear: 0,7975 Biowin 1: 0,7285 Biowin 2: 0,9199 Biowin 3: 3,1108	Biodegradatie is niet van toepassing op zouten en metalen.  CERI en BIODEG database  Epiwin 3.20

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Zie EU-RAR (2007)	1
Carcinogeniteit	Geen data (niet relevant geacht)	1
Genotoxiciteit	In vitro	1
Kritische studie oraal	Geen systemische effecten verwacht gezien sterke lokale reacties en buffercapaciteit bloed.	1

Kritische studie inhalatie	Stof niet vluchtig	1
----------------------------	--------------------	---

1. EU (2007) RAR sodium hydroxide

**4.2 Ecotoxiciteit**

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Agonus cataphractus</i>	48 uur	LC50	33-100		E-toxbase
<i>Carassius auratus</i>	24 uur	LC50	160		E-toxbase
<i>Gambusia affinis</i>	96 uur	LC50	125	pH8,3 – 9	E-toxbase
<i>Poecilia reticulata</i>	24 uur	LC50	145		E-toxbase
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	48 uur	LC50	40,38		E-toxbase
<i>Crangon crangon</i>	48 uur	LC50	33-100		E-toxbase
<b>algen</b>					

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

**5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)****Ad hoc MTR<sub>humaan</sub>**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	RAR rapporteert normale natriuminname via dieet van 3-6 gram/dag; NaOH dissocieert bij contact met water tot Na <sup>+</sup> en OH <sup>-</sup> ionen. Via dieet alleen opname van Na <sup>+</sup> . OH <sup>-</sup> wordt geneutraliseerd in gebufferd medium.
3	-	
4	-	
5	-	
6	-	
7	-	
8	-	
9	-	
10	-	
11	-	
12	10% van normale inname via dieet: 600 mg Na/dag, ofwel 8,2 mg Na/kg lg/dag voor volwassene van 70 kg (= 14 mg NaOH/kg lg/dag)	Pragmatische keuze voor TDI
13		
14		
15		
16		
17		

18	ad hoc MTR <sub>humaan</sub> van 14 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	geen TCA nodig vanwege geringe vluchtigheid
----	--	---

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> (grond)water**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	EU-RAR meldt dat geen PNEC kon worden afgeleid. De toxiciteit van NaOH is afhankelijk van de buffercapaciteit van het ontvangende compartiment, het soort organisme en het levensstadium.
2		
3		
4		
5		

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> lucht**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	Geen TCA vanwege geringe vluchtigheid.
3		
4		

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> bodem**

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	EU-RAR geeft aan dat bij emissie naar bodem, opname door bodem deeltjes verwaarloosbaar is. Afhankelijk van de buffer capaciteit van de bodem zal OH <sup>-</sup> geneutraliseerd worden in het porie water of de pH zal toenemen.
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> sediment**

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	EU rar geeft aan dat opname van NaOH door sedimenten verwaarloosbaar is, aangezien NaOH bij contact met water dissocieert tot Na <sup>+</sup> en OH <sup>-</sup> ionen.
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		

**Integratie ad hoc MTR<sub>humanaan</sub> en ad hoc MTR<sub>eco</sub>**

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		

**Output Humanex-resultaten:**

	TDI	TCA	Corrected for TCA:		NO
<b>Natrium hydroxide</b>	(ug/kg bw/d)	(ug/m3)			
	1.40E+04	N.A.			
	<b>Surface water</b>	<b>Groundwater</b>	<b>Air</b>	<b>Soil</b>	<b>Sediment</b>
	(ug/L)	(ug/L)	(ug/m3)	(ug/kg dwt)	(ug/kg dwt)
<b>MPC eco</b>					
<b>MPC human</b>					
<b>Ratio MPC eco/MPC human</b>					
<b>Critical MPC *</b>					
<b>% importance of total exposure</b>					
<b>Dominant route of exposure</b>					
<b>% of dominant route</b>					

## F Natriumthiocyanaat

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Natriumthiocyanaat
CAS-NUMMER		540-72-7
VOORGESTELDE ad hoc MTR*	(grond)water	3,6 µg/L
	lucht <sup>#</sup>	niet afgeleid
	bodem	6,2 x 10 <sup>3</sup> µg/kg dwt
	sediment <sup>+</sup>	niet afgeleid
DATUM		7/10/2008

\*: Let op! Vanwege het ontbreken van betrouwbare partitiec коэффициenten voor deze stof, is integratie van humane en milieu ad hoc normen niet mogelijk. Daarom zijn de normen alleen gebaseerd op ecotoxicologische data. Mogelijk zijn deze normen (met name bodem) niet beschermend genoeg voor de mens.

# Omdat de stof een zout is, waarbij een erg lage dampspanning wordt verwacht, wordt het afleiden van een ad hoc MTR<sub>lucht</sub> niet relevant geacht.

+ Doordat er geen ecotoxiciteits-gegevens voor sediment zijn en berekeningen m.b.v. evenwichtspartitie niet mogelijk zijn, vanwege het ontbreken van betrouwbare partitiec coefficients, is er voor sediment geen norm afgeleid.

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Natriumthiocyanaat
CAS-nummer	540-72-7
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	neutral organic, foute indicatie, correct: thiocyanates insecticide
Synoniemen	Sodium thiocyanate; Thiocyanate sodium; Haimased; Natrium rhodanatum; Natrium; thiocyanat; Natriumrhodanid; Natriumrhodanid; Scyan; Sodium isothiocyanaat; Sodium rhodanate; Sodium rhodanide; Sodium sulfocyanate; Sodium sulfocyanide; Sodium thiocyanate; Sodium thiocyanide; Thiocyanate sodium
Molecuulformule	NaSCN
Structuurformule	$\text{Na}^+ \begin{array}{c} \diagup \\ \text{---} \\ \diagdown \end{array} \text{N} \\ \text{S}^-$

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	82,08		SRC PhysProp database
Smeltpunt (°C)	287		SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	434,39	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	4,97 x 10 <sup>-6</sup>	geschat, 25°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	5,8 x 10 <sup>5</sup>	experimenteel	SRC PhysProp database
Log Kow	-2,52	geschat	SRC PhysProp database
	-0,39	geschat	Bioloom ClogP

Log Koc	0,82*	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking ind. MKN
Henry-coefficient (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	1,61 x 10 <sup>-11</sup> 7,0 x 10 <sup>-8</sup>	dampdruk/opl.heid MW x VP / WS	Epwin 3.12
pKa	-		

\* Thiocynaat is een geladen molecuul, hiervoor wordt een berekende Koc niet betrouwbaar geacht.

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	no data MITI linear: 0,4710 MITI non-linear: 0,5462 Biowin 1: 0,7090 Biowin 2: 0,8650 Biowin 3: 3,0200  Conclusie: not biodegradable	CERI en BIODEG database Epiwin 3.12

### 4. TOXICITEIT

#### 4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Beoordeling door RIVM (2001)	RIVM 2001
Carcinogeniteit	Geen gegevens	Idem
Genotoxiciteit	Geen gegevens	Idem
Kritische studie oraal	NOAEL voor mens uit vrijwilligerstudie 8 mg/persoon/dag	Idem
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar	Idem

RIVM (2001) Re-evaluation of human-toxicological maximum permissible risk levels. RIVM rapport no. 711701025.

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	233		US EPA ECOTOX d-base + e-toxBASE
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	250		U.S. EPA ECOTOX Database + e-toxBASE
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	83		U.S. EPA ECOTOX Database + e-toxBASE
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	87		U.S. EPA ECOTOX Database + e-toxBASE
<b>waterplanten</b>					
<i>Lemna minor</i>	96 uur	NOEC	1080	Pop.groei	U.S. EPA ECOTOX Database + e-toxBASE



## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

### Ad hoc MTR<sub>humaan</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja	RIVM (2001): Op basis van een NOAEL van 8 mg/persoon/dag omgerekend met een lichaamsgewicht van 70 kg en een onzekerheids factor van 10.
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	Ad hoc MTR <sub>humaan</sub> van 0,011 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA noodzakelijk vanwege geringe vluchtigheid

### Ad hoc MTR<sub>eco</sub> (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja: 3,6 µg/l	MTR <sub>eco, water</sub> afgeleid in RIVM rapport 711701020
2		
3		
4		
5	MTR <sub>eco, water</sub> : 3,6 µg/l	

### Ad hoc MTR<sub>eco</sub> lucht

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Omdat de stof een zout is, waarbij een erg lage dampspanning wordt verwacht, wordt het afleiden van een ad hoc MTR <sub>lucht</sub> niet relevant geacht.	
4		

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> bodem**

stap	resultaat	opmerking
1	Ja: 6,2 mg/kg <sub>dwt</sub> Correctie naar Nederlandse standaardbodem is niet mogelijk, omdat het een geladen molecuul betreft, waarvan de sorptie niet van het organisch stofgehalte afhangt.	MTR <sub>eco, bodem</sub> afgeleid in RIVM rapport 711701020. Bodem bevat 2,9% organic matter
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	MTR <sub>eco, bodem</sub> : 6,2 mg/kg dwt	

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> sediment**

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ja, ad hoc MTR <sub>eco</sub> water = 3,6 µg/L	
7	Berekenen ad hoc MTR <sub>eco</sub> sediment m.b.v. evenwichtspartitie kan niet voor deze stof omdat de sorptie hoogstwaarschijnlijk niet organisch stofgerelateerd is (geladen molecuul).  Hierdoor kan er geen norm voor sediment worden afgeleid.	
8		
9		
10	Er kan geen norm voor sediment afgeleid worden.	

**Integratie ad hoc MTR<sub>humaan</sub> en ad hoc MTR<sub>eco</sub>**

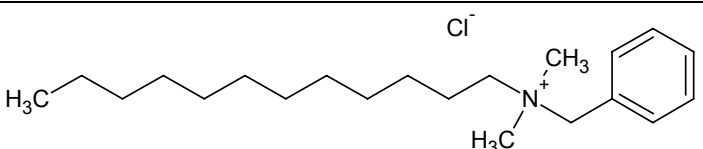
stap	resultaat	opmerking
1	Wegens het ontbreken van betrouwbare partitie coëfficiënten, kunnen de humane en eco normen niet geïntegreerd worden.	
2		
3		

## G Quarternaire ammoniumverbindingen, benzyl-C12-14-alkyldimethylchloriden

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Quarternaire ammoniumverbindingen, benzyl-C12-14-alkyldimethyl-, chloriden
CAS-NUMMER		85409-22-9
VOORGESTELDE ad hoc MTR*	(grond)water	$5,4 \times 10^{-2} \mu\text{g/L}$
	lucht	niet afgeleid
	bodem	1,5 $\mu\text{g/kg dwt}$
	sediment	1,6 $\mu\text{g/kg dwt}$
DATUM		7/10/2008

\*: De stof is geladen, waardoor partitie op basis van  $\log K_{oc}$  (en afleiding van  $\log K_{oc}$  uit  $\log K_{ow}$ ) minder betrouwbaar is. Om relatief snel ad hoc normen af te kunnen leiden, is toch gebruik gemaakt van evenwichts-partitie op basis van  $\log K_{oc}$  ( $\log K_{ow}$ ), hierdoor is het resultaat voor bodem, lucht en sediment mogelijk minder betrouwbaar. Het betreft hier een organische verbinding, dat is de reden dat hier wel met  $K_{oc}$  is gewerkt, in tegenstelling tot de zouten natrium thiocynaat en waterstoffluoride.

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Quaternary ammonium compounds, benzyl-C12-14-alkyldimethyl-, chloriden
CAS-nummer	85409-22-9
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	Surfactants-cationic odoricide
Synoniemen	Alkyldimethylammonium chlorides, benzyl-C12-14-alkyldimethyl-, Benzyl-C12-14-alkyldimethylammonium chlorides; C12-14-alkylbenzylammonium chlorides
Molecuulformule	C <sub>21</sub> H <sub>38</sub> ClN <sub>1</sub>
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	340,00		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	230,18	geschat	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	537,63	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	$2,13 \times 10^{-9}$	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)*	$13,7$ (op basis $\log K_{ow}$ ) $1,42 \times 10^{-4}$ (op basis van	geschat, 25°C	Epiwin 3.12

	fragmenten)		
Log Kow	2,93 <b>3,18</b>	geschat	Epiwin 3.12 Biobloom ClogP
Log Koc <sup>#</sup>	2,67	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry-coëfficiënt (Pa- m <sup>3</sup> /mol)	3,79 x 10 <sup>-8</sup> <b>5,3 x 10<sup>-8</sup></b>	geschat, 25°C MW x VP / WS	Epwin 3.12
pKa			

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

- \* Op basis van read-across met andere soortgelijke quaternaire ammoniumverbindingen blijkt de wateroplosbaarheid behoorlijk hoog te zijn. Vandaar dat er gekozen is voor de oplosbaarheidsschatting op basis van log K<sub>ow</sub>.
- # De stof is geladen, waardoor partitie op basis van log K<sub>oc</sub> (en afleiding van log K<sub>oc</sub> uit log K<sub>ow</sub>) minder betrouwbaar is. Om relatief snel ad hoc normen af te kunnen leiden, is toch gebruik gemaakt van evenwichts-partitie op basis van log K<sub>oc</sub> (log K<sub>ow</sub>), hierdoor is het resultaat voor bodem, lucht en sediment mogelijk minder betrouwbaar.

**3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU**

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	no data MITI linear: 0,2216 MITI non-linear: 0,1448 Biowin 1: 0,8222 Biowin 2: 0,8610 Biowin 3: 2,7682 Conclusie: <b>inherently biodegradable fulfilling criteria</b>	CERI en BIODEG database epiwin 3.12

**Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding.****4. TOXICITEIT****4.1 Humane toxiciteit**

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Beoordeling door RIVM (1991) pakket aan studie op diverse punten beperkt, desondanks ADI afgeleid, nieuwere beoordeling door US-EPA (2006) deels met nieuwere toxicologische studies	RIVM 1991, US-EPA (2006)
Carcinogeniteit	Orale studies in rat en muis (US-EPA)	US-EPA (2006)
Genotoxiciteit	In vitro en in vivo	US-EPA (2006)
Kritische studie oraal	Overall LOAEL 88 mg/kg lg/dag (US-EPA)	US-EPA 2006)
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar	US-EPA (2006)

RIVM (1991) Samenvatting Humane Toxicologie – Benzalkoniumchloride. RIVM/ACT, adopted by the Toxicology Advisory Group 29-01-1991.

US-EPA (2006) Alkyl Dimethyl Benzyl Ammonium Chloride (ADBAC) Risk Assessment. US-EPA Office of Pesticides Antimicrobials Division.

<http://www.regulations.gov/fdmspublic/component/main?main=DocumentDetail&o=09000064801ee9e8>  
(Gerraaspleegd op 10 October 2008)

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
Fish QSAR		LC50	3,236		Ecosar v0.99
<b>kreftachtigen</b>					
Daphnid QSAR		LC50	9,772		Ecosar v0.99

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

Ecosar geeft voor monoalkyl quaternary ammonium surfactants de beperking van maximaal 8 koolstof atomen in de alkyl keten. Bij meer dan 8 koolstof atomen is de stof minder toxisch voor vis, daphnids en slakken. Deze LC50s kunnen dus gezien worden als worst case.

Ingevoerd in ECOSAR:

- Cationic surfactants
- Quaternary ammonium surfactants, mono-alkyl of Sufactants, Cationic (C<16). (tetra-alkyl geeft geen resultaten)
- Water dispersability: 13,7 mg/L
- Average number of carbon: 12

#### 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

##### Ad hoc MTR<sub>humaan</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja US-EPA (2006)	Chronic RfD = 0,44 mg/kg lg/dag
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	Ad hoc MTR <sub>humaan</sub> van 0,44 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	geen TCA noodzakelijk vanwege geringe vluchtigheid

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> (grond)water**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja: QSAR	
3	<p>AF<sub>doorvergiftiging</sub> = 2 (log K<sub>ow</sub> = 3,18)</p> <p>LC<sub>50</sub> QSARs beschikbaar voor 2 trofische niveaus.</p> <p>Laagste LC<sub>50</sub> (daphnid) = 3,236 mg/L</p> <p>AF = 3000 + extra factor 10 voor gebruik van QSAR + factor 2 voor doorvergiftiging = 60000</p> <p>Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub> is: 3,236 mg/L / 60000 = 0,054 µg/L.</p>	
4		
5	Ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> van 0,054 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> lucht**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4	Een Ad hoc MTR <sub>eco</sub> lucht wordt niet afgeleid vanwege de lage dampspanning en lage Henry coëfficiënt.	

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> bodem**

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7	<p>Evenwichtspartitie:</p> <p>ad hoc MTR<sub>eco</sub> bodem = ad hoc MTR<sub>eco, water</sub> x K<sub>p</sub><sub>bodem/water</sub> x 1000/1700 (RHO<sub>bodem</sub>) = 0,054 µg/L x 14,2 / 1,7 = 0,451 µg/kg<sub>wwt</sub>.</p> <p>Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,451 x 3,33 = 1,50 µg/kg<sub>dwt</sub></p>	<p>K<sub>p</sub><sub>bodem/water</sub> = 14,2 m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup> volgens EUSES 2.1.</p> <p>MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.</p>
8		
9		
10	Ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> van 1,5 µg/kg <sub>dwt</sub> voor Dutch standard soil gebruikt voor	

	integratie humaan en eco.	
--	---------------------------	--

**Ad hoc MTR<sub>eco</sub> sediment**

stap	Resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7	<p>evenwichtspartitie:  <math>\text{ad hoc MTR}_{\text{eco, sediment}} = \text{ad hoc MTR}_{\text{eco, water}} \times K_{\text{p}_{\text{susp/water}}} \times 1000/1150</math> (RHO<sub>susp. matter</sub>) = 0,054 µg/L x 12,7 / 1,15 = 0,592 µg/kg<sub>wwt</sub>.</p> <p>Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht:  <math>0,592 \times 2,71 = 1,60 \mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}</math></p>	<p><math>K_{\text{p}_{\text{susp/water}}} = 12,6 \text{ m}^3/\text{m}^3</math> volgens EUSES 2.1.</p> <p>MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.</p>
8		
9		
10	ad hoc MTR <sub>eco</sub> sediment van 1,6 µg/kg <sub>dwt</sub> voor Dutch standard sediment gebruikt voor integratie humaan en eco.	

**Integratie ad hoc MTR<sub>humaan</sub> en ad hoc MTR<sub>eco</sub>**

stap	resultaat	opmerking
1	<p>PEC<sub>opp. water</sub> (opgelost) = 0,67 mg/L            PEC<sub>lucht</sub> = 3,23 x 10<sup>-7</sup> mg/m<sup>3</sup>            PEC<sub>landbouwgrond</sub> = 0,353 mg/kg wwt            PEC<sub>landbouwgrond, poriewater</sub> = 0,0418 mg/L            PEC<sub>sediment</sub> = 8,85 mg/kg wwt</p>	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

**Output Humanex-resultaten:**

	TDI	TCA	Corrected for TCA:	NO	
<b>Quartenaire ammoniumverbindingen, benzyl-C12-14-alkyldimethyl-,chloriden</b>	(ug/kg bw/d) 4.40E+02	(ug/m3) N.A.			
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)
<b>MPC eco</b>	5.40E-02	5.40E-02	2.60E-08	1.50E+00	1.60E+00
<b>MPC human</b>	8.76E+03	5.46E+02	4.22E-03	1.51E+04	3.58E+05
<b>Ratio MPC eco/MPC human</b>	6.17E-06	9.88E-05		9.92E-05	4.47E-06
<b>Critical MPC *</b>	5.40E-02	5.40E-02	4.22E-03	1.50E+00	1.60E+00

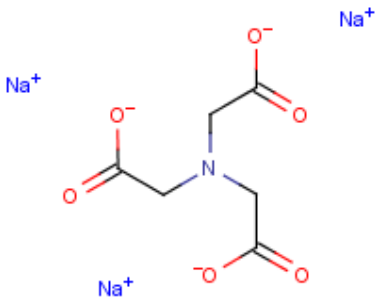
<b>% importance of total exposure</b>	91.654	8.337	0.000	0.008
<b>Dominant route of exposure</b>	drw			
<b>% of dominant route</b>	56.891			



## H Rapportageformulier Trisodium nitrilotriacetate

SAMENVATTING		
<b>STOFNAAM</b>		<b>Trisodium nitrilotriacetate</b>
<b>CAS-NUMMER</b>		<b>5064-31-3</b>
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>Oppervlakte water</b>	<b>930 µg/L</b>
	<b>Grond water</b>	<b>14,8 µg/L</b>
	<b>lucht</b>	<b>niet relevant</b>
	<b>bodem</b>	<b>7,31 µg/kg dwt</b>
	<b>sediment</b>	<b>2075 µg/kg dwt</b>
<b>DATUM</b>		<b>24-12-2008</b>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Trisodium nitrilotriacetate
CAS-nummer	5064-31-3
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	Aliphatic amines
Synoniemen	Acetic acid, nitrilotri-, trisodium salt; Glycine, N,N-bis(carboxymethyl)-, trisodium salt; N,N-Bis(carboxymethyl)glycine, trisodium salt; Nitrilotriacetic acid sodium salt; Trisodium nitrilotriacetate; Sodium nitrilotriacetate; Nitrilotriacetate trisodium salt;
Molecuulformule	C6H6NO6Na3
Structuurformule	
Smiles	[Na]OC(=O)CN(CC(O[Na])=O)CC(O[Na])=O

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	257,09		Epiwin 3.20
Smeltpunt (°C)	410	decompositie boven 200°C	EU-RAR (2007)
Kookpunt (°C)	not applicable 487,76	geschat	EU-RAR (2007) Epiwin 3.20
Dampdruk (Pa)	1,08E-7	Extrapolated., 25°C	SRC Physpro database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1E6 <b>640E+3</b>	geschat, 25°C 20°C	Epiwin 3.20 EU-RAR (2007)
Log Kow	-10,08	geschat, 25°C	Epiwin 3.20

	<b>-1,43</b>	ClogP	Bioloom
Log Koc	0.276	QSAR niet hydr. stoffen	Handleiding afleiding ind. MKN
Henry-coefficient (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	2,77E-11 <b>4,34E-11</b>	dampdruk/oplosbaarheid MW x VP / WS	Epwin 3.20 Handleiding afleiding ind. MKN
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	<b>Not biodegradable</b>  no data  MITI linear: 0,0107 MITI non-linear: 0,0116 Biowin 1: 0,4199 Biowin 2: 0,0539 Biowin 3: 2,3762	Epiwin 3.20  CERIJ and BIODEG database Epiwin 3.20

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Concept RAR van 2 mei 2007, beoordeling tbv classificatie RIVM (2006)	1, 2
Carcinogeniteit	Diverse 2-jaarstudies rat, muis	1
Genotoxiciteit	In vitro, in vivo	1, 2
Kritische studie oraal	Overall orale BMDL10 in proefdieren (voor 10% toename in hyperplasie en dysplasie in urinewegen in rat chronisch) = 5,7 mg/kg lg/dag	1
Kritische studie inhalatie	Stof zeer weinig vluchtig	1

1. EU (2007) Concept RAR NTA human health d.d. 02-05-2007

2. RIVM (2006) Adviesrapport no. 10634A00: Advies met betrekking tot classificatie en labellingsvoorstellen ter ondersteuning van de Nederlandse inbreng in de TC-C&L van het ECB maart 2006. Proj. nr V/320001/06/AA

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Carassius auratus</i>	96 uur	LC50	269,6		e-toxbase
<i>Carassius auratus</i>	96 uur	LC50	257		e-toxbase
<i>Carassius auratus</i>	8 dagen	LC50	243,4		e-toxbase
<i>Carassius auratus</i>	8 dagen	LC50	240,4		e-toxbase
<i>Fundulus heteroclitus</i>	24 uur	LC50	5500		e-toxbase
<i>Fundulus heteroclitus</i>	96 uur	LC50	5500		e-toxbase
<i>Fundulus heteroclitus</i>	7 dagen	LC50	5500		e-toxbase

<i>Ictalurus punctatus</i>	4,5 dagen	LC50	393,5		e-toxbase
<i>Ictalurus punctatus</i>	4,5 dagen	LC50	388,3		e-toxbase
<i>Ictalurus punctatus</i>	8,5 dagen	LC50	384,7		e-toxbase
<i>Ictalurus punctatus</i>	8,5	LC50	329,3		e-toxbase
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	198		e-toxbase
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	252		e-toxbase
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	487		e-toxbase
<i>Morone saxatilis</i>	24 uur	LC50	5500		e-toxbase
<i>Morone saxatilis</i>	96 uur	LC50	5500		e-toxbase
<i>Morone saxatilis</i>	7 dagen	LC50	5500		e-toxbase
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	98,0		e-toxbase
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	23 dagen	LC50	92,3		e-toxbase
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	23 dagen	LC50	120,1		e-toxbase
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	27 dagen	LC50	90,5		e-toxbase
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	27 dagen	LC50	114		e-toxbase
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	127		e-toxbase
<i>Pimephales promelas</i>	224 dagen	NOEC	>54		EU-RAR (2007)
<i>Poecilia reticulata</i>	96 uur	LC50	560-1000		e-toxbase
<i>Stenotomus chrysops</i>	24 uur	LC50	6900		e-toxbase
<i>Stenotomus chrysops</i>	96 uur	LC50	3150		e-toxbase
<i>Stenotomus chrysops</i>	7 dagen	LC50	3150		e-toxbase
<b>kreftachtigen</b>					
<i>Daphnia Magna</i>	21 dagen	NOEC	100		e-toxbase
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	LC50	145		e-toxbase
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	LC50	150		e-toxbase
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	LC50	180		e-toxbase
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	LC50	405		e-toxbase
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	LC50	650		e-toxbase
<i>Gammarus pseudolimnaeus</i>	147 dagen	NOEC	9,3		EU-RAR
<i>Homarus americanus</i>	24 uur	LC50	7100		e-toxbase
<i>Homarus americanus</i>	96 uur	LC50	3800		e-toxbase
<i>Palaemonetes vulgaris</i>	24 uur	LC50	5500		e-toxbase
<i>Palaemonetes vulgaris</i>	96 uur	LC50	4100		e-toxbase
<i>Palaemonetes vulgaris</i>	7 dagen	LC50	1800		e-toxbase
<i>Pagurus longicarpus</i>	24 uur	LC50	5500		e-toxbase
<i>Pagurus longicarpus</i>	96 uur	LC50	5500		e-toxbase
<i>Pagurus longicarpus</i>	7 dagen	LC50	1875		e-toxbase
<b>algen</b>					
Algae sp.	96 uur	NOEC	100		e-toxbase
<i>Navicula seminulum</i>	96 uur	LC50	185		e-toxbase
<i>Navicula seminulum</i>	96 uur	LC50	477		e-toxbase

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

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

### Ad hoc MTR<sub>humaan</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee, wel concept EU-RAR ihkv Bestaande Stoffen, ook beoordeling tbv classificatie RIVM (2006)	
3	-	
4	Nee	AF1 = 10, AF2=10
5	Ja	AF3 = 1
6	Ja	
7	Ja	AF4 = 1
8	Overall BMDL10 zoals voorgesteld in RAR= 5,7 mg/kg lg/dag	BMDL10 voor toename in hyperplasie/dysplasie in urinewegen en nieren in rat chronisch AF5 = 1
9	-	
10	Interspecies 10, intraspecies 10	10 x 10 x 1 x 1 x 1 = 100
11	Ja	
12	0,057 mg/kg lg/dag	
13	Ja	
14	Ja, niertumoren rat en muis	Conclusie RAR: niet-genotoxisch mechanisme waarschijnlijk. RIVM (2006): geen aanwijzingen voor in vivo mutageniteit
15	Niet relevant geacht gezien waarschijnlijke afwezigheid genotoxische werking	
16	-	
17	Veel genotoxiciteitsdata beschikbaar voor stof	
18	ad hoc MTR <sub>humaan</sub> van 0,057 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege geringe vluchtigheid

### Ad hoc MTR<sub>eco</sub> (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja	EU-RAR PNEC aqua = 0,93 mg/l
2		
3		
4		
5	ad hoc MTR <sub>eco</sub> water van 930 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

### Ad hoc MTR<sub>eco</sub> lucht

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4	Ad hoc MTR <sub>eco</sub> lucht wordt gebaseerd op	Omdat deze stof een zout is wordt

	humane tox.	blootstelling via lucht niet relevant geacht en geen $MTR_{lucht}$ afgeleid.
--	-------------	--

**Ad hoc  $MTR_{eco}$  bodem**

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ja	Ad hoc MTR water is 930 $\mu\text{g/L}$
7	Indien er geen ecotox data voor bodem is (=meestal) -> evenwichtspartitie: ad hoc $MTR_{eco}$ bodem = ad hoc $MTR_{eco}$ water $\times K_{p_{bodem/water}} \times 1000/1700$ ( $RHO_{bodem}$ ) = $930 \mu\text{g/L} \times 0,257 / 1,7 = 140,6 \mu\text{g/kg wwt}$ .  Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: $140,6 \times 3,33 = 468,2 \mu\text{g/kg dwt}$ (tussenstappen niet afronden)	$K_{p_{bodem/water}} = 0,257 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.1.  MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8	Nee	Ad hoc MTR bodem = ad hoc MTR bodem EP
9		
10	ad hoc $MTR_{eco}$ bodem van $468,2 \mu\text{g/kg dwt}$ gebruikt 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 is 930 $\mu\text{g/L}$
7	Indien er geen ecotox data voor sediment is (=meestal) -> evenwichtspartitie: ad hoc $MTR_{eco}$ sediment = ad hoc $MTR_{eco}$ water $\times K_{p_{susp/water}} \times 1000/1150$ ( $RHO_{susp. matter}$ ) = $930 \mu\text{g/L} \times 0,947 / 1,15 = 766,0 \mu\text{g/kg wwt}$ .  Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $766,0 \times 2,71 = 2075,4 \mu\text{g/kg dwt}$ (tussenstappen niet afronden)	$K_{p_{susp/water}} = 0,947 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.1.  MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NL standaard sediment.
8	Nee	Ad hoc MTR sediment = ad hoc MTR sedimentEP

9		
10	ad hoc MTR <sub>eco</sub> sediment van 2075,4 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

**Integratie ad hoc MTR<sub>humaan</sub> en ad hoc MTR<sub>eco</sub>**

stap	resultaat	opmerking
1	PEC <sub>opp. water (opgelost)</sub> = 2,89 mg/L PEC <sub>lucht</sub> = 9,41E-14 mg/m <sup>3</sup> PEC <sub>landbouwgrond</sub> = 3,26E-3 mg/kg ww PEC <sub>landbouwgrond, poriewater</sub> = 0,0216 mg/L PEC <sub>sediment</sub> = 2,08 mg/kg ww	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

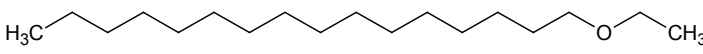
**Output Humanex-resultaten:**

	TDI	TCA	Corrected for TCA:		NO
Trisodium Nitrotriacelate	(ug/kg bw/d)	(ug/m3)			
	5.70E+01	N.A.			
	Surface water	Groundwater	Air	Soil	Sediment
	(ug/L)	(ug/L)	(ug/m3)	(ug/kg dwt)	(ug/kg dwt)
<b>MPC eco</b>	9.30E+02	9.30E+02	3.03E-11	4.68E+02	2.08E+03
<b>MPC human</b>	1.98E+03	1.48E+01	6.44E-11	7.31E+00	4.36E+03
<b>Ratio MPC eco/MPC human</b>	4.70E-01	6.29E+01		6.41E+01	4.75E-01
<b>Critical MPC *</b>	9.30E+02	1.48E+01	6.44E-11	7.31E+00	2.08E+03
<b>% importance of total exposure</b>	99.863	0.137	0.000	0.000	
<b>Dominant route of exposure</b>	drw				
<b>% of dominant route</b>	99.085				

## I Vetalcoholalcoxylaat

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Vetalcoholalcoxylaat
CAS-NUMMER		68439-49-6
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,12 µg/L
	lucht	3,64 µg/m <sup>3</sup>
	bodem	1,1x10 <sup>4</sup> µg/kg dwt
	sediment	1,1x10 <sup>4</sup> µg/kg dwt
DATUM		7/10/2008

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Vetalcoholalcoxylaat
CAS-nummer	68439-49-6
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	Neutral organic pesticide, emulsifier
Synoniemen	(C16-C18) Alkyl alcohol ethoxylate; (C16-C18) Fatty alcohol, ethylene oxide reaction product; (C16-C18)Alkyl alcohol ethoxylate; (C16-C18)Alkyl alcohol, ethoxylate; Aliphatic (C16-C18)alcohol, ethoxylated Cetomacrogolum; Cetomacrogolum; Ethoxylated fatty alcohols (C16-18); Cetareth-10
Molecuulformule	C18H38O
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	270,50		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	49,80		Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	321.63		Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	<b>0,094</b>	geschat, 25° C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>0,0031</b>	geschat, 25° C	SRC PhysProp database
Log Kow	7,92 <b>8,28</b>	geschat geschat	SRC PhysProp database Bioloom ClogP
Log Koc	<b>6,18</b>	QSAR pred. hydrophobics met log K <sub>ow</sub> van 7,5 (upper limit domein van QSAR)	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry-coefficient (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>8,2 x 10<sup>3</sup></b>	MW x VP / WS	Berekend

pKa	-	-	-
-----	---	---	---

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	<b>readily biodegradable</b> MITI linear: 0,7003 MITI non-linear: 0,8206 Biowin 1: 0,3798 Biowin 2: 0,0818 Biowin 3: 2,8911  no data	Epiwin 3.12       CERI en BIODEG database

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Beoordeling door HERA (2007) (industrie project) van geëthoxylerde alcoholen (C8-C18). Toxicologische data omvatten diverse semichronische studies met vertegenwoordigers uit de groep, drie chronische studies met C <sub>14-15</sub> AE <sub>7</sub> /C <sub>12-13</sub> AE <sub>6,5</sub> , genotoxiciteit, reproductietoxiciteit, ontwikkelingstoxiciteit	HERA 2007
Carcinogeniteit	Twee 2-jaarsstudies rat	Idem
Genotoxiciteit	In vitro en in vivo	Idem
Kritische studie oraal	Overall NOAEL 50 mg/kg lg/dag (chronische studie met C <sub>12-13</sub> AE <sub>6,5</sub> )	Idem
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar	Idem
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar	Idem

HERA (2007) Monograph Alcohol Ethoxylates Version 1.0 May 2007. Human & Environmental Risk Assessment on ingredients of European household cleaning products. [http://www.heraproject.com/files/34-F-HERA-AE-HH+ENV%20Final%20Draft%20Report\\_01-05-07.pdf](http://www.heraproject.com/files/34-F-HERA-AE-HH+ENV%20Final%20Draft%20Report_01-05-07.pdf)

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oryzias latipes</i>	24 uur	LC50	6,6		RIVM e-toxBase
<i>Oryzias latipes</i>	6 uur	LC50	>8,0		RIVM e-toxBase
<i>Oryzias latipes</i>	24 uur	LC50	4,0		RIVM e-toxBase
<i>Oryzias latipes</i>	48 uur	LC50	4,5		RIVM e-toxBase
<i>Oryzias latipes</i>	6 uur	LC50	15,0		RIVM e-toxBase
<i>Oryzias latipes</i>	24 uur	LC50	8,0		RIVM e-toxBase
<i>Oryzias latipes</i>	48 uur	LC50	4,6		RIVM e-toxBase
<i>Oryzias latipes</i>	6 uur	LC50	>8,0		RIVM e-toxBase
<i>Oryzias latipes</i>	48 uur	LC50	<b>3,5</b>		RIVM e-toxBase



<b>kreftachtigen</b>					
<b>algen</b>					

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

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

### Ad hoc MTR<sub>huuman</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Geen HSDB, wel evaluatie door HERA (2007)	HERA aanpak identiek aan EU-RARs
4	Nee	
5	Ja	
6	Ja	
7	Ja	
8	Ja, oraal overall NOAEL = 50 mg/kg lg/dag (2 jaar rat)  Inhalatie: geen NOAEC beschikbaar	Kritisch effecten in het algemeen: irritatie maagdarmkanaal verhoogd levergewicht en leverhypertrofie; Kritische effecten zoals waargenomen in 2 jaar rat: verminderde groei, verhoogde orgaangewichten Inhalatie: geen TCA noodzakelijk vanwege geringe vluchtigheid
9	-	
10	100	10 voor inter-, 10 intraspecies extrapolatie, geen extra factor omdat toxiciteit van onderhavige C <sub>20</sub> AE <sub>5</sub> vergelijkbaar geacht wordt met de geteste C <sub>14-15</sub> AE <sub>7</sub> /C <sub>12-13</sub> AE <sub>6.5</sub> (toxiciteit eerder lager dan hoger).
11	Ja	
12	0,5 mg/kg lg/dag	
13	Ja	
14	Negatief	
15	-	
16	-	
17	Beschikbare genotoxiciteitsdata negatief	
18	Ad hoc MTR <sub>huuman</sub> van 0,5 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie huuman en eco.	

### Ad hoc MTR<sub>eco</sub> (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Ja	

4	Doorvergiftiging: $\text{LogK}_{\text{ow}} = 8,28 \rightarrow \text{AF} = 3$  $\text{LC50} / (\text{AF water} \times \text{AFdv}) = 3,5 \text{ mg/l} / (10000 \times 3) = 0,12 \text{ } \mu\text{g/L}$	
5	Ad hoc $\text{MTR}_{\text{eco, water}}$ van $0,12 \text{ } \mu\text{g/L}$ gebruikt voor integratie humaan en eco.	

**Ad hoc  $\text{MTR}_{\text{eco}}$  lucht**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee: Ad hoc $\text{MTR}_{\text{eco}}$ lucht wordt gebaseerd op humane tox.	
3		
4	Nee: Ad hoc $\text{MTR}_{\text{eco}}$ lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

**Ad hoc  $\text{MTR}_{\text{eco}}$  bodem**

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ja	
7	Evenwichtspartitie: ad hoc $\text{MTR}_{\text{eco}}$ bodem = ad hoc $\text{MTR}_{\text{eco}}$ water $\times K_{\text{p bodem/water}} \times 1000/1700$ ( $\text{RHO}_{\text{bodem}}$ ) = $0,12 \text{ } \mu\text{g/L} \times 4,49 \times 10^4 / 1,7$ = $3169 \text{ } \mu\text{g/kg}_{\text{wwt}}$  Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: $3169 \times 3,33 = 1,1 \times 10^4 \text{ } \mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}$	$K_{\text{p bodem/water}} = 4,49 \times 10^4 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.1.  MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc $\text{MTR}_{\text{eco}}$ bodem van $1,1 \times 10^4 \text{ } \mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}$ voor Dutch standard soil gebruikt voor integratie humaan en eco.	

**Ad hoc  $\text{MTR}_{\text{eco}}$  sediment**

stap	Resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7	Evenwichtspartitie: ad hoc $\text{MTR}_{\text{eco}}$ sediment = ad hoc $\text{MTR}_{\text{eco}}$ water $\times K_{\text{p susp/water}} \times 1000/1150$ ( $\text{RHO}_{\text{susp}}$ )	$K_{\text{p susp/water}} = 3,74 \times 10^4 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.1.

	$\text{matter}) = 0,12 \mu\text{g/L} \times 3,74 \times 10^4 / 1,15 = 3902 \mu\text{g/kg}_{\text{wwt}}$  Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $3902 \times 2,71 = 1,1 \times 10^4 \mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}$	MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR <sub>eco</sub> sediment van $1,1 \times 10^4 \mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}$ voor Dutch standard sediment gebruikt voor integratie humaan en eco.	

**Integratie ad hoc MTR<sub>humaan</sub> en ad hoc MTR<sub>eco</sub>**

stap	resultaat	opmerking
1	PEC <sub>opp. water (opgelost)</sub> = $8,78 \times 10^{-3} \text{ mg/L}$ PEC <sub>lucht</sub> = $2,48 \times 10^{-3} \text{ mg/m}^3$ PEC <sub>landbouwgrond</sub> = 180 mg/kg wwt PEC <sub>landbouwgrond, poriewater</sub> = $6,81 \times 10^{-3} \text{ mg/L}$ PEC <sub>sediment</sub> = 571 mg/kg wwt	Voor de LogK <sub>ow</sub> is 7,5 gebruikt omdat dit de "upper limit" is van het domein van de in EUSES gebruikte QSAR.
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

**Output Humanex-resultaten:**

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
<b>Vetalcoholalcoxylaat</b>	5.00E+02	N.A.				
<b>MPC eco</b>	1.20E-01	1.20E-01	3.39E-02	1.10E+04	1.10E+04	
<b>MPC human</b>	1.29E+01	9.99E+00	3.64E+00	8.66E+05	2.57E+06	
<b>Ratio MPC eco/MPC human</b>	9.31E-03	1.20E-02		1.27E-02	4.28E-03	
<b>Critical MPC *</b>	1.20E-01	1.20E-01	3.64E+00	1.10E+04	1.10E+04	
<b>% importance of total exposure</b>	7.292	77.772	5.399	9.537		
<b>Dominant route of exposure</b>	root					
<b>% of dominant route</b>	77.478					

## J Stappenplan (RIVM rapport 601503024, Hansler, Traas en Mennes, 2006)

Voor nadere details en uitleg van de voetnoten verwijzen we naar het originele rapport, [www.rivm.nl](http://www.rivm.nl)

Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
<b>START</b>	<b>alle stoffen</b>			
<b>1</b>	Is door het RIVM in de laatste 10 jaar een MTR of daarmee vergelijkbare grootheid afgeleid? (zie <a href="http://www.rivm.nl/">http://www.rivm.nl/</a> )	ja	Baseer ad hoc MTR op deze bestaande MTR of vergelijkbare grootheid.	18
		nee		2
<b>2</b>	Is door een andere instantie in de laatste 10 jaar een MTR of daarmee vergelijkbare grootheid afgeleid? (zie HSDB, ATSDR of CEPA Priority Substances Assessments – Bijlage 2)	ja	Baseer ad hoc MTR op deze bestaande MTR of vergelijkbare grootheid.	18
		nee		3
<b>3</b>	Bevat de HSDB-database (zie Bijlage 2) experimentele toxiciteitsdata van deze stof?	ja		4
		nee	ad hoc MTR = 1,5 µg/p/d1	18
<b>4</b>	Zijn er slechts acute toxiciteits-, irritatie-, corrosiviteits- en/of sensibilisatiegegevens?	ja	ad hoc MTR = 1,5 µg/p/d	18
		nee	AF21 = 10; AF2 = 10	5
	<b>stoffen met experimentele toxiciteitsgegevens</b>			
<b>5</b>	Is een 'life-time'-toxiciteitsstudie aanwezig?	ja	AF3 = 1	6
		nee	AF3 = 10	6

6	Zijn zowel fertiliteits- als pre-/postnatale ontwikkelingseffecten onderzocht?	ja		7
		nee	AF4 = 10	8
<b>Nr</b>	<b>Vraag / Statement</b>	<b>Antw.</b>	<b>Conclusie</b>	<b>Ga naar</b>
7	Zijn biochemische en histopathologische parameters onderzocht?	ja	AF4 = 1	8
		nee	AF4 = 10	8
8	Is afleiding van een overall NOAEL uit dierstudies mogelijk?	ja	AF5 = 1	10
		nee		9
9	Is afleiding van een overall LOAEL uit dierstudies mogelijk?	ja	AF5 = 10	10
		nee	MTIL3= 1,5 µg/p/d	13
10	Bepaal overall AF		Overall AF = AF1 × AF2 × AF3 × AF4 × AF5	11
11	Is overall AF ≤ 1000?	ja		12
		nee	MTIL = 1,5 µg/p/d	13
12	Bepaal MTIL		MTIL = (NOAEL of LOAEL uit dierstudies) / overall AF	13
	<b>evaluatie carcinogeniteit</b>			
13	Is de carcinogeniteit onderzocht?	ja		14
		nee		17
14	Is carcinogeniteit gevonden?	ja		15
		nee	ad hoc MTR = MTIL	18

15	Is 1/104/levenslang risico te bepalen?	ja	bepaal 1/104/levenslang risico	16
		nee	ad hoc MTR = MTIL	18
Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
16	Is $1/10^4$ /levenslangrisico $\leq$ MTIL?	ja	ad hoc MTR = $1/104$ /levenslang risico	18
16	Is $1/10^4$ /levenslangrisico $\leq$ MTIL?	ja	ad hoc MTR = $1/104$ /levenslang risico	18
		nee	ad hoc MTR = MTIL	18
	<b>evaluatie mutageniteit</b>			
17	Is in de chemische structuur van de stof een Structural Alert voor mutageniteit aanwezig?	ja	ad hoc MTR = 1,5 $\mu$ g/p/d	18
		nee	ad hoc MTR = MTIL	18
18	Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTR</i> humana en <i>ad hoc MTR</i> eco			§ 3.4
<b>ad hoc MTR</b> eco(grond)water				
Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
1	Is er een officieel MTR	ja	Er wordt geen ad hoc MTR voor water afgeleid <sup>1</sup>	<b>STOP</b>
		nee		2
2	Zijn er experimentele ecotox-data voor water voor deze stof? (zie Bijlage 2)	ja		3
		nee	Baseer ad hoc MTRwaterop humane tox (§ 3.2)	§ 3.4

3	Bepaal kans op doorvergiftiging: voldoet de stof aan de criteria in Tabel 7?	ja	Bereken AFwateren AFdoorvergiftiging	4
		nee	Bereken ad hoc MTRwater (Tabel 9)	5
<b>Nr</b>	<b>Vraag / Statement</b>	<b>Antw.</b>	<b>Conclusie</b>	<b>Ga naar</b>
4	Deze berekening houdt rekening met additionele effecten als gevolg van bioaccumulatie en doorvergiftiging (DV)		Bereken ad hoc MTRwater met AF = AFwater(Tabel 9) × AFdoorvergiftiging (Tabel 8)	5
5	Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTRhumaan en ad hoc MTReco</i>			§ 3.4
<b>ad hoc MTRcolucht</b>				
1	Is er een officieel MTRcobeschikbaar voor lucht? (zie Bijlage 2 en <a href="http://www.stoffen-&lt;br/&gt;risico.nl">http://www.stoffen- risico.nl</a> )	ja	Er wordt geen ad hoc MTR voor lucht afgeleid <sup>1</sup>	<b>STOP</b>
		nee		2
2	Zijn er experimentele ecotox-data voor lucht voor deze stof? (zie Bijlage 2)	ja		3
		nee	Baseer ad hoc MTRluchtop humane tox (§ 3.2)	§ 3.4
3	Bereken ad hoc MTRlucht	1.	Zoek AFLucht op in Tabel 6	Tabel 6
		2.	ad hoc MTRlucht = LOAEL/AFlucht	4
4	Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTRhumaan en ad hoc MTReco</i>			§ 3.4
<b>ad hoc MTRcobodem</b>				

Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
1	Is door een officiële instantie in de laatste 10 jaar een MTR of vergelijkbaar afgeleid voor bodem? (zie Bijlage 2 en <a href="http://www.stoffenrisico.nl">http://www.stoffenrisico.nl</a> )	ja	Er wordt geen ad hoc MTR voor bodem afgeleid <sup>1</sup>	<b>STOP</b>
		nee		2
Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
2	Zijn er experimentele ecotox-data voor bodem van deze stof? (zie Bijlage 2)	ja		3
		nee		6
3	Bepaal kans op doorvergiftiging: voldoet de stof aan de criteria in Tabel 7?	ja	Bereken AFbodemen AFdoorvergiftiging	4
		nee	Bereken ad hoc MTRbodemEXP (Tabel 10) <sup>2</sup>	5
4	Deze berekening houdt rekening met additionele effecten als gevolg van bioaccumulatie en doorvergiftiging (DV)		Bereken ad hoc MTRbodemEXP met AF = AFbodem(Tabel 10) * AFdoorvergiftiging (Tabel 8)	5
5	Bereken ook ad hoc MTRbodemEP 1			6
6	Zijn er experimentele ecotox-data voor water van deze stof? (zie Bijlage 2)	ja	Bereken ad hoc MTRwater(zie stappenschema ad hoc MTRwater)	7
		nee	Baseer ad hoc MTRbodemop humane tox (§ 3.2)	§3.4
7	Bereken ad hoc MTRbodemEPuit ad hoc MTRwater		ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * $K_p(\text{bodem/water})$ * FbodemNL 2	8



8	Is ad hoc MTRbodempEXP beschikbaar?	ja		9
		nee	ad hoc MTRbodempMTRbodempEP = ad hoc	10
9	Is ad hoc MTRbodempEP < ad hoc MTRbodempEXP ?	ja	ad hoc MTRbodemp = ad hoc MTRbodempEP	10
		nee	ad hoc MTRbodempMTRbodempEXP = ad hoc	10
Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
10	Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTRhumaan en ad hoc MTReco</i>			§ 3.4
<b>ad hoc MTRecosediment</b>				
Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
1	Is door een officiële instantie in de laatste 10 jaar een MTR of vergelijkbaar afgeleid voor sediment? (zie Bijlage 2 en <a href="http://www.stoffen-risico.nl">http://www.stoffen-risico.nl</a> )	ja	Er wordt geen ad hoc MTR voor sediment afgeleid <sup>1</sup>	<b>STOP</b>
		nee		2
2	Zijn er experimentele ecotox-data voor sediment van deze stof? (zie Bijlage 2)	ja		3
		nee		6
3	Bepaal kans op doorvergiftiging: voldoet de stof aan de criteria in Tabel 7?	Ja	Bereken AFsedimenten AFdoorvergiftiging	4
		nee	Bereken ad hoc MTRsedimentEXP <sup>2</sup> (Tabel 11)	5

4	Deze berekening houdt rekening met additionele effecten als gevolg van bioaccumulatie en doorvergiftiging (DV)		Bereken ad hoc MTRsedimentEXP met $AF = AF_{\text{sediment}}(\text{Tabel 11}) * AF_{\text{doorvergiftiging}}(\text{Tabel 8})$	5
5	Bereken ook ad hoc MTRsedimentEP <sup>3</sup>			6
6	Zijn er experimentele ecotox-data voor water van deze stof? (zie Bijlage 2)	ja	Bereken ad hoc MTRwater (zie stappenschema ad hoc MTRwater)	7
		nee	Baseer ad hoc MTRsediment op humane tox (§ 3.2)	§ 3.4
Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
7	Bereken ad hoc MTRsedimentEP uit ad hoc MTRwater		$\text{ad hoc MTRsedimentEP} = \text{ad hoc MTRwater} * K_p(\text{sediment/water}) * F_{\text{sedimentNL}} 1$	8
8	Is ad hoc MTRsedimentEXP beschikbaar?	ja		9
		nee	$\text{ad hoc MTRsedimentMTRsedimentEP} = \text{ad hoc MTRsedimentEP}$	10
9	Is ad hoc MTRsedimentEP < ad hoc MTRsedimentEXP?	ja	$\text{ad hoc MTRsediment} = \text{ad hoc MTRsedimentEP}$	10
		nee	$\text{ad hoc MTRsedimentMTRsedimentEXP} = \text{ad hoc MTRsedimentEXP}$	10
10	Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTR</i> <i>humanaan</i> en <i>ad hoc MTR</i> <i>reco</i>			§ 3.4

**Integratie met humaan:**

Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
1	Bereken de verspreiding van de stof over de milieucapartimenten met EUSES 2.0.3		Gebruik de input voor EUSES 2.0.3 en de default settings (zie par. 2.2.3)	2

<b>2</b>	Input in HUMANEX: • stof-eigenschappen • EUSES 2.0.3-verdeling (fate) • ad hoc MTRhumaan( $\mu\text{g/p/d}$ ) (§3.2) • ad hoc MTReco( $\mu\text{g/L}$ , $\mu\text{g/m}^3$ ) (§3.3)2		Bereken HUMANEX-output: MTRhumaanen MTRecoper compartiment (zie par. 2.2.4)	<b>3</b>
<b>3</b>	Bepaal per compartiment de meest kritische (= laagste) ad hoc MTR-waarde			<b>STOP</b>