



Rijkswaterstaat

Afleiding van 41 ad hoc MTR's 2007

mei 2008

Colofon

Uitgegeven door:	Rijkswaterstaat Waterdienst WD rapport: 2008.007 ISBN: 978-90-369-1444-4
Telefoon:	06-29382517
Uitgevoerd door:	Margriet Beek – WD/WGKL Dorien ten Hulscher – WD/WGKL Evelyn Heugens – RIVM Paul Janssen - RIVM
Opmaak:	Thieme Deventer - Deventer
Datum:	Mei 2008
Status:	Definitief

Inhoudsopgave

1. Inleiding 5

2. Methode 6

2.1 Rapportage van gegevens 6

2.2 Het stappenplan 6

3. Resultaten 8

4. Referenties 10

Bijlage A	Rapportageformulier di aceton alcohol (DAA), ethanol, furfural, methanol, methyl ethyl keton. 11
Bijlage B	Rapportageformulier 2-chloorallyl alcohol, 2,3-dichloorhydrine, difenylolmethaan, glycerine, glycidol, isopropylether, MIBK, monochloorhydrine, trimethylammoniumchloride. 13
Bijlage C	Rapportageformulier 2-methyl-2H-isothiazol-3-one, 5-chloro-2-methyl-2H-isothiazolin-3-one, natrium lignosulfonaat, natriumbisulfiet, polyethylene polypropyleenglycol. 15
Bijlage D	Rapportageformulier neodecaanzuur 17
Bijlage E	Rapportageformulier 15 bestrijdingsmiddelen 19
Bijlage F	Rapportageformulier 5 bestrijdingsmiddelen 21
Bijlage G	Rapportageformulier tetramethyl ammoniumchloride 23
Bijlage H	Het stappenschema (RIVM rapport 601503024, Hansler, Traas en Mennes, 2006). 25

1. Inleiding

In 2007 is aan het RIZA/Waterdienst gevraagd om voor de in dit rapport aangegeven stoffen ad hoc MTR's af te leiden. De ad hoc MTR's worden over het algemeen gebruikt om de lozingen van deze stoffen in oppervlaktewater te kunnen beoordelen, 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 voltooien 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 MTR_{humaan}) 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 MTR_{eco} kan worden afgeleid; in die gevallen wordt het ad hoc MTR slechts gebaseerd op het ad hoc MTR_{humaan}. Als er gegevens voor het ad hoc MTR ontbreken worden deze in eerste instantie aangevuld via QSAR berekeningen. Over het algemeen geeft dit minder betrouwbare waarden en kunnen de ad hoc MTR's alleen indicatief gebruikt worden.

2.1 Rapportage van gegevens

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

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

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

2.2 Het stappenplan

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

3. Resultaten

De afgeleide ad hoc MTR's zijn in tabel 1 weergegeven. De achterliggende gegevens en afleidingen staan weergegeven in de bijlagen.

Tabel 1

Voorgestelde ad hoc MTR's

Stof	CAS nummer	Oppervlakte- water µg/l	Bodem µg/kg dw	Sediment µg/kg dw	Lucht µg/m3	Grondwater µg/l
Di aceton alcohol (DAA)	123-42-2	942	372	2510	3,20	388
Ethanol	64-17-5	400	218	910	30800	400
Furfural	98-01-1	33	47	103	50	33
Methanol*	67-56-1	190	98	426	816	190
Methyl Ethyl Keton*	78-93-3	850	732	2810	566	412
2-chloorallyl alcohol	5976-47-6	0,45	0,76	1,5	16	0,45
2,3-dichloorhydrine	616-23-9	100	6,85	330	0,028	5,2
difenyolmethaan	2467-02-9	1,6	77	71	0,0013	1,6
glycerine	56-81-5	15000	68000	32000	0,1	15000
glycidol	556-52-5	5,3	3,1	12	0,11	5,3
isopropylether	108-20-3	21	92	240	400	22
MIBK	108-10-1	400	1000	2000	620	310
monochloorhydrine	96-24-2	0,34	0,031	0,77	5,1E-5	0,052
trimethylammoniumchloride	593-81-7	0,012	0,056	0,076	1,3E-6	0,012
2-methyl-2H-isothiazol-3-one	2682-20-4	0,0057	0,0053	0,015	0,00017	0,0057
5-chloro-2-methyl-2H-isothiazolin-3-one	26172-55-4	0,28	0,46	0,95	5,3E-5	0,28
Natrium lignosulfonaat	8061-51-6	0,54	0,38	1,3	0,11	0,54
natriumbisulfiet	7631-90-5	20	1,2	58	-	20
Polyethyleen polypropyleenglycol	9038-95-3	8,2	1,2	58	5,4E-10	0,27
neodecaanzuur	26896-20-8	4,2	360	370	1,4	4,2
antrachinon	84-65-1	0,075	12,8	12,9	0,0462	0,075
Boscalid/nicobifen	188425-85-6	0,55	25	26	0,00987	0,55
clomazone	81777-89-1	0,56	7,1	8,1	2,91E-4	0,56
dimethirimol	5221-53-4	8,7	92	108	0,00872	8,7
fenamidone	161326-34-7	1,25	30	32	0,00359	1,25
fipronil	120068-37-3	0,00007	0,004	0,004	4,03E-4	7E-5
flufenacet	142459-58-3	0,01	0,3	0,32	7,14E-5	0,01
flutriafol	76674-21-0	9,1	89	104	8,03E-6	9,1
metconazool	125116-23-6	0,0095	0,6	0,6	2,64E-4	0,0095
monalide	7287-36-7	0,0262	0,8	0,8	3,37E-6	0,14
oxadixyl	77732-09-3	109	210	400	6,07E-6	109
picoxystrobin	117428-22-5	0,025	1	1	0,00624	0,025
Piperonyl-butoxide	51-03-6	0,00083	0,39	0,39	0,122	8,3E-4
succimer	304-55-2	79	56	181	1,18E-6	96
tricyclazool	41814-78-2	0,47	2,4	3,2	9,09E-6	0,47
acetamiprid	135410-20-7	0,1	0,95	1,1	4,1E-7	0,1
chloorpyrifos-methyl	5598-13-0	2,0E-4	3,6E-2	3,6E-2	3,83E-2	2,0E-4
flonicamid	158062-67-0	120	400	360	1,13E-6	310
methoxyfenozone	161050-58-4	0,18	13,4	13,7	0,0775	0,18
thiamethoxam	153719-23-4	1	0,91	2,6	1,05E-6	1
Tetramethyl ammoniumchloride	75-57-0	15,7	18,2	32,6	1,07E-8	46,2

* de getalswaarden wijken af van de waarden in de bijlage, omdat er voor deze stoffen een door INS gedegen afleiding ligt. (Traas & Bontje, 2005)

4. Referenties

- 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.

**Bijlage A Rapportageformulier di aceton alcohol
(DAA), ethanol, furfural, methanol,
methyl ethyl keton.**

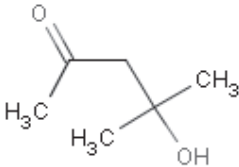
Opdrachtgegevens

Projectnummer	M/601782/07
Opdrachtgever	RIZA
Datum opdracht	14-12-2006
Datum rapportage	14-02-2007
Opdracht	Afleiden van indicatieve milieukwaliteitsnormen voor diaceton alcohol, ethanol, furfural, methanol en methyl ethyl keton

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Di Aceton Alcohol (DAA)
CAS-NUMMER		123-42-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	oppervlaktewater: 9,42E+02 µg/L grondwater: 3,88E+02
	lucht	3,20 µg/m ³
	bodem	3,72E+02 µg/kg dwt
	sediment	2,51E+03 µg/kg dwt
DATUM		26-01-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Di aceton alcohol (DAA)
CAS-nummer	123-42-2
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	alcoholen
Synoniemen	2-Hydroxy-2-methyl-4-pentanone; 2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl-; 4-Hydroxy-4-methyl-2-pentanone; Diacetone alcohol; 2-Methyl-2-pentanol-4-one; 2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl-; 4-Hydroxy-2-keto-4-methylpentane; 4-Hydroxy-4-methyl pentan-2-one; 4-Hydroxy-4-methylpentanone-2; Acetonyldimethylcarbinol; Diacetonalcohol [NI] Diacetone; Diacetone alcohol; Diacetonyl alcohol; Diketone alcohol Dimethyl acetonyl carbinol; EINECS 204-626-7; Pyranton; Pyranton A; Tyranton; 2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl-; 4-Hydroxy-4-methylpentan-2-one; 4-Hydroxy-4-methyl-2-pentanone
Molecuulformule	C6H12O2
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	116,16	Physprop/CHEMFATE SRC
Smeltpunt (°C)	-44	Physprop/CHEMFATE SRC
Kookpunt (°C)	167,9	Physprop/CHEMFATE SRC
Dampdruk (Pa)	227,9 (25 °C) (experimenteel)	Physprop/CHEMFATE SRC
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1E+06 (25 °C) (experimenteel)	Physprop/CHEMFATE SRC
Log Kow	-0,05 (geschat) -0,098 (geschat) -0,34 (geschat)	Biolum ClogP HSDB PhysProp, EPIWin 3.12
Log Koc	0,994 (QSAR)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	0,0265 (berekend)	Berekend: (dampdruk * molecuulgewicht / oplosbaarheid in water)
pKa	geen gegevens	Physprop/CHEMFATE SRC

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	inherently biodegradable: BFA (biodegrades fast with acclimation) readily biodegradable: MITI-I (OECD TG 301C) MITI linear: 0,6026 MITI non-linear: 0,7094 Biowin 1: 0,5151 Biowin 2: 0,3064 Biowin 3: 2,7079	BIODEG CERI 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	OECD/SIDS: relatief beperkte dataset, subacute tox (geen semichronisch, geen chronisch), repro/ontwikkelingsdata beperkt (slechts OECD-screeningstest)	OECD/SIDS 2002
Carcinogeniteit	Niet beschikbaar	Idem
Mutageniteit	Alleen in vitro studies	Idem
Kritische studie oraal	Rat, 44 dagen (gavage), combinatie van herhaalde blootstellingstox (repeated dose toxicity) en repro/ontwikkelingsstudie: 0, 30, 100, 300 & 1000 mg/kg lg/dag, NOAEL 30 mg/kg lg/dag	Idem
Kritische studie inhalatie	Rat, 6 weken (6 uur/dag, 6 dagen/week): 232, 1035 en 4494 mg/m ³ , NOAEC 1035 mg/m³	Idem

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

4.2 Ecotoxiciteit

soort	duur (uur)	parameter	waarde (mg/L)	Opmerking	ref.
vissen					
<i>Carassius auratus</i>	24 uur	LC50	>5000	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	420	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Leuciscus idus melanotus</i>	48 uur	LC50	8930	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Menidia beryllina</i>	96 uur	LC50	420	zout	U.S. EPA ECOTOX Database
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	24 uur	EC50	8750	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
algen					

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

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

Classificatie: Xi; R36

R36: Irriterend voor de ogen.

S2: Buiten bereik van kinderen bewaren.

S24/25: Aanraking met de ogen en de huid vermijden.

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja (OECD/SIDS 2002)	
4	Nee	
5	Nee	
6	Ja	NOAEL repro/developmental in combined repeated dose toxicity and repro/developmental study= 300 mg/kg lg/dag
7	Ja	
8	Ja NOAEL oraal, 30 mg/kg lg/dag uit 44-dagenstudie in ratten NOAEC inhalatie, rat 1035 mg/m ³ uit 6-weeken studie rat (6 uur/dag, 6 dagen/week)	
9	-	
10	1000	
11	Ja	
12	Oraal: 30 µg/kg lg/dag Inhalatie: geconverteerde NOAEC= 221 mg/m ³ (36 uur per week naar 168 uur/week), MTR _{inhal} = 221 µg/m ³	Voor beide afleidingen NOAEL/1000
13	Nee	
14	-	
15	Nee	
16	-	
17	Genotox (bacteriën, zoogdiercel in vitro) negatief	
18	ad hoc MTR _{humaan} van 30 µg/kg lg/dag (oraal) en 221 µg/m ³ (inhalatie) gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log Kow = -0,05 en MW = 116,16 g/mol Ad hoc MTR _{eco} water = 1400 µg/L	Op basis van een 96-u LC van 420 mg/L voor de zoetwatervis <i>Lepomis macrochirus</i> . AF = 300 (AF van 3000 met een factor 10 verlaagd omdat stof een "neutral organic" is met een niet-specifiek werkingsmechanisme (narcose)).
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 1,40E+03 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4	Ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 1,40E+03 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 1,40E+03 µg/L x 0,496 x 0,59 = 410 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 410 x 3,33 = 1364 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 0,496 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} (bodem) van 1,36E+03 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 1,40E+03 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 1,40E+03 µg/L x 1,15 x 0,87 = 1401 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 1401 x 2,71 = 3796 µg/kg dwt	Kp _{susp/water} = 1,15 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} (sediment) van 3,80E+03 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,0347 mg/L PEC _{lucht} = 1,18E-04 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 4,18E-03 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,0143 mg/L PEC _{sediment} = 0,0301 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3.
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Output Humanex-resultaten:

di aceton alcohol (DAA)	TDI (µg/kg bw/d)	TCA (µg/m ³)	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (µg/m ³)	Soil (µg/kg dwt)	Sediment (µg/kg dwt)
MPC eco	1.40E+03	1.40E+03		1.36E+03	3.80E+03
MPC human	9.42E+02	3.88E+02	3.20E+00	3.72E+02	2.51E+03
Ratio MPC eco/MPC human	1.49E+00	3.61E+00		3.67E+00	1.51E+00
Critical MPC	9.42E+02	3.88E+02	3.20E+00	3.72E+02	2.51E+03
% importance of total exposure	90.621	2.467	6.909	0.003	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	89.968				

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Ethanol
CAS-NUMMER		64-17-5
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	4,00E+02 µg/L
	lucht	3,08E+04 µg/m ³
	bodem	2,18E+02 µg/kg dwt
	sediment	9,10E+02 µg/kg dwt
DATUM		26-01-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Ethanol
CAS-nummer	64-17-5
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	alcoholen
Synoniemen	1-Hydroxyethane; Ethanol; Ethyl alcohol; methylcarbionl
Molecuulformule	C ₂ H ₆ O
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	46,07	Mackay fate handbook
Smeltpunt (°C)	-114,7	Mackay fate handbook
Kookpunt (°C)	78,29	Mackay fate handbook
Dampdruk (Pa)	7800 (25 °C)	Mackay fate handbook
Oplosbaarheid in water (mg/L)	volledig mengbaar (25 °C): 1E+06 ingevoerd in EUSES 2.0.3	Mackay fate handbook
Log Kow	-0,31 (experimenteel)	Mackay fate handbook, Bioloom MlogP
Log Koc	0,20 (experimenteel) 0,86 (QSAR) 0,41 (geometrisch gemiddelde Mackay en QSAR)	Mackay fate handbook Sabljic et al. 1995 (QSAR voor niet-hydr. Stoffen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	0,53 (experimenteel)	Mackay fate handbook
pKa	15,9	Mackay fate handbook

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	readily biodegradable: MITI-I (OECD TG 301C) BF (biodegrades fast) en BFA (biodegrades fast with acclimation) MITI linear: 0,7860 MITI non-linear: 0,9339 Biowin 1: 0,8843 Biowin 2: 0,9699 Biowin 3: 3,2573	CERI BIODEG 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	Zeer veel humane data vanuit epidemiologie, betreffen orale inname van alcohol, levereffecten, reproductie-effecten, kanker	RIVM 1997, Gezondheidsraad 2006
Carcinogeniteit	Humane data relevant: ethanol is humaan carcinogeen met mogelijk een genotoxisch werkingsmechanisme (Gezondheidsraad)	Idem
Mutageniteit	Conclusie op basis van data: ethanol mogelijk genotoxisch (Gezondheidsraad)	Idem
Kritische studie oraal	RIVM: provisorische orale MTR afleidbaar op basis van gangbare inname licht-alcoholische dranken, Gezondheidsraad: inhalatienorm afgeleid op basis van epidemiologische risicokarakterisering die aangeeft dat regelmatige orale inname van 10 gram/dag bij vrouwen een 7-10% verhoogd risico op borstkanker geeft	Idem
Kritische studie inhalatie	RIVM: geen norm afgeleid; Gezondheidsraad: inhalatienorm afgeleid op basis van epidemiologische risicokarakterisering die aangeeft dat regelmatige orale inname van 10 gram/dag bij vrouwen een 7-10% verhoogd risico op borstkanker geeft	Idem

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

4.2 Ecotoxiciteit

soort	duur (uur)	parameter	waarde (mg/L)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Alburnus alburnus</i>	96	LC50	11000	zout	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Leuciscus idus melanotus</i>	48	LC50	8140	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	LC50	42 ¹	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Oryzias latipes</i>	48	LC50	1350	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Pimephales promelas</i>	96	LC50	13480	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Poecilia reticulata</i>	24	LC50	12500	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48	EC50	2 ¹	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Daphnia obtusa</i>	48	EC50	12900	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Artemia franchiscana</i>	96	LC50	7 ¹	zout	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Artemia salina</i>	24	LC50	695	zout	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	48	LC50	3715	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Nitocra spinipes</i>	96	LC50	7750	zout	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Palaemonetes pugio</i>	96	LC50	4500	zout	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Streptocephalus rubricaudatus</i>	24	LC50	31700	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	7-10 d	NOEC	2 ¹	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Daphnia magna</i>	9-11 d	NOEC	9,6 ¹	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
algen					
<i>Skeletonema costatum</i>	120	EC50	10943	zout	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Skeletonema costatum</i>	120	NOEC	3240	zout	U.S. EPA ECOTOX Dabase
Insecten					
<i>Chironomus tentans</i>	48	LC50	25100	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
Weekdieren					
<i>Corbicula manilensis</i>	96	LC50	>60000	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Helisoma trivolvis</i>	96	LC50	>100	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
Wormen					
<i>Dugesia tigrina</i>	96	LC50	>100	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase
<i>Lumbriculus variegatus</i>	96	LC50	>100	zoet	U.S. EPA ECOTOX Dabase

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

¹Stof is een "neutral organic" met een niet-specifiek werkingsmechanisme (narcose). Vergeleken met de overige waarden zijn deze waarden erg laag.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

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

Classificatie: F; R11

- R11: Licht ontvlambaar.
- S2: Buiten bereik van kinderen bewaren.
- S7: In goed gesloten verpakking bewaren.
- S16: Verwijdert houden van ontstekingsbronnen - Niet roken.
- F: Licht ontvlambaar

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	Opmerking
1	- Ja, 25 mg/kg lg/d (RIVM 1997) - TCA: Inhalatoire kankerrisicoschatting van Gezondheidsraad (2006) komt overeen met MTR van 170 mg/m ³ (gebaseerd op 1300 mg/m ³ als kankerrisico 4.10 ⁻³ zoals gerapporteerd door Gezondheidsraad voor 4 uur/week, 50 weken/jaar, 40 jaar.	Provisorisch MTR afgeleid ivm lekken van ethanol naar bodem. Waarde van 25 mg/kg lg/d gebaseerd op inname van één glas licht-alcoholische drank (RIVM 1997). Arbeidstoxicologische beoordeling door Gezondheidsraad (2006): ethanol beschouwd als genotoxisch carcinogeen, regelmatige inname van 10 gram/dag geeft bij vrouwen een 7-10% verhoogd risico op borstkanker. Één op 10000 per leven (MTR) niveau op basis hiervan: 10 mg/dag; dit valt in het niet bij endogene ethanolproductie. Daarom is deze waarde niet bruikbaar als MTR. Provisorische orale RIVM-waarde handhaven.
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 2,5E+04 µg/kg lg/dag TCA 1,70E+05 µg/m ³ gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	Resultaat	Opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log Kow = -0,31 en MW = 46,07 g/mol Ad hoc MTR _{eco} water = 400 µg/L	Op basis van een 7 – 10 d NOEC van 2 mg/L voor <i>Ceriodaphnia dubia</i> . AF = 5 (AF van 50 met een factor 10 verlaagd omdat stof een “neutral organic” is met een niet-specifiek werkingsmechanisme (narcose)).
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 400 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4	Ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 400 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 400 µg/L x 0,278 x 0,59 = 65,6 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 65,6 x 3,33 = 218 µg/kg dw	K _{pbodem/water} = 0,278 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 218 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 400 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sedimentEP = ad hoc MTR _{eco} water x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 400 µg/L x 0,965 x 0,87 = 336 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 336 x 2,71 = 910 µg/kg dw	K _{psusp/water} = 0,965 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 910 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humanaan} en ac hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,0138 mg/L PEC _{lucht} = 8,32E-04 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 1,67E-03 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,0102 mg/L PEC _{sediment} = 9,9E-03 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

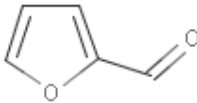
Output Humanex-resultaten:

ethanol	TDI (µg/kg bw/d)	TCA (µg/m3)	Corrected for TCA: NO		
	2.50E+04	1.70E+05			
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (µg/m3)	Soil (µg/kg dwt)	Sediment (µg/kg dwt)
MPC eco	4.00E+02	4.00E+02		2.18E+02	9.10E+02
MPC human	5.12E+05	3.78E+05	3.08E+04	2.03E+05	1.13E+06
Ratio MPC eco/MPC human	7.82E-04	1.06E-03		1.07E-03	8.08E-04
Critical MPC	4.00E+02	4.00E+02	3.08E+04	2.18E+02	9.10E+02
% importance of total exposure	59.886	2.620	37.493	0.002	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	58.752				

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Furfural
CAS-NUMMER		98-01-1
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	33 µg/L
	lucht	50 µg/m ³
	bodem	47 µg/kg dwt
	sediment	103 µg/kg dwt
DATUM		26-01-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Furfural
CAS-nummer	98-01-1
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	aldehydes en ketonen
Synoniemen	2-Furancarboxaldehyde; Furaldehyde; Furfural; 2-Formylfuran; 2-Furaldehyde; 2-Furanaldehyde; 2-Furancarbonal; 2-Furancarboxaldehyde 2-Furfural; 2-Furfuraldehyde; 2-Furyl-methanal; 2-Furylaldehyde 2-Furylcarboxaldehyde; Fural; Furaldehyde; Furale; Furancarbona; Furfuraldehyde; Furfurol; Furfurole; Furfurylaldehyde; Furol; Furole; Furyl-methanal; Pyromucic aldehyde; Quakeral; 2-Furaldehyde; 2-Furancarboxaldehyde
Molecuulformule	C ₅ H ₄ O ₂
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	96,08	Mackay Handbook
Smeltpunt (°C)	-38	Mackay Handbook
Kookpunt (°C)	162	Mackay Handbook
Dampdruk (Pa)	310 (25 °C)	Mackay Handbook
Oplosbaarheid in water (mg/L)	79400 (25 °C)	Mackay Handbook
Log Kow	0,41 (experimenteel)	Mackay Handbook, Bioloom MlogP
Log Koc	1,23 (QSAR)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	0,375 (berekend)	berekend uit oplosbaarheid en dampdruk, Mackay Handbook
pKa	geen gegevens	Mackay Handbook

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	readily biodegradable: MITI-I (OECD TG 301C) BF (biodegrades fast) en BFA (biodegrades fast with acclimation) MITI linear: 0,8623 MITI non-linear: 0,9456 Biowin 1: 0,9864 Biowin 2: 0,9999 Biowin 3: 3,0092	CERI BIODEG 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	Volledig pakket aan toxicologische studies voor orale route (inclusief studies subacuut, subchronisch, beperkt chronisch, reproductie/ontwikkelingstoxicologie) Voor inhalatie-route beperkte data (subacuut, subchronisch)	RAR 2006
Carcinogeniteit	Studies in rat en muis, levertumoren wellicht via niet-genotoxisch mechanisme	Idem
Mutageniteit	Niet genotoxisch op basis van beschikbare testen (conclusie RAR)	Idem
Kritische studie oraal	Rat, subchronisch, NOAEL 53 mg/kg lg/dag	Idem
Kritische studie inhalatie	Rat, subacuut: 20, 40, 80, 160, 320, 640, and 1280 mg/m ³ (6 uur/dag, 5 dagen/week, 4 weken), LOAEL 20 mg/m³	Idem

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

4.2 Ecotoxiciteit

De gegevens in onderstaande tabel komen niet overeen met de data in de RAR (RAR is gebruikt voor de normafleiding).

soort	duur (uur)	parameter	waarde (mg/L)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Gambusia affinis</i>	96	LC50	24	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Lepomis macrochirus</i>	48	LC50	16	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Leuciscus idus melanotus</i>	48	LC50	29	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Pimephales promelas</i>	96	LC50	16,1	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Rasbora heteromorpha</i>	48	LC50	23	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	72	LC50	13	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Americamysis bahia</i>	96	LC50	10,6	zout	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Gammarus pseudolimnaeus</i>	96	LC50	11,9	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
algen					
<i>Chlorococcales</i>	24	EC50	570	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

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

Classificatie: Carc. Cat. 3; R40 - T; R23/25 - Xn; R21 - Xi; R36/37

R21: Schadelijk bij aanraking met de huid.

R23/25: Vergiftig bij inademing en opname door de mond.

R36/37: Irriterend voor de ogen en de ademhalingswegen.

R40: Carcinogene effecten zijn niet uitgesloten.

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

S26: Bij aanraking met de ogen onmiddellijk met overvloedig water afspoelen en deskundig medisch advies inwinnen.

S36/37/39: Draag geschikte beschermende kleding, handschoenen en een beschermingsmiddel voor de ogen/het gezicht.

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

T: Vergiftig

Xn: Schadelijk

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	EU RAR (draft uit 2006)	
3	Ja (EU RAR)	
4	Nee	
5	Ja	
6	Ja	
7	Ja	
8	Ja Oraal: NOAEL subchronisch repeated dose toxicity 53 mg/kg lg/dag Inhalatie: NOAEC subacuut <20 mg/m ³ op basis van lokale effecten in neusslijmvlies (systemische NOAEC 320 mg/m ³)	
9	Zie 8 (inhalatoire LOAEC 20 mg/m ³)	
10	Oraal: 100 (standaard) Inhalatie: 75	Inhalatie: 10 voor gevoelige groepen in populatie, factor van 2,5 voor extrapolatie van proefdier naar mens (conform RAR), 3 voor extrapolatie van LOAEC naar NOAEC (conform RAR)
11	Ja	
12	Oraal: 0,53 mg/kg lg/dag Inhalatie: LOAEC 20 mg/m ³ , gecorrigeerde LOAEC 4 mg/m ³ (30 uur/week naar 168 uur/week). TCA= 50 µg/m ³	Oraal: NOAEL/100 Inhalatie: gecorrigeerde LOAEC/75
13	Ja	
14	Levertumoren in rat, mechanisme daarvoor wellicht niet genotoxisch	
15	-	
16	-	
17	Stof niet genotoxisch geacht op basis van beschikbare testresultaten (EU RAR)	
18	Ad hoc orale MTR _{humaan} van 530 µg/kg lg/dag, TCA 50 µg/m ³ gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja PNEC = 33 µg/L	Draft RAR (PNEC verandert niet meer)
2		
3		
4		
5		
6		
7	Ad hoc MTR _{eco} (water) van 33 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	PNEC = 0,014 mg/kg ww Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: $0,014 \times 3,33 = 0,047 \text{ mg/kg dw}$	Op basis van evenwichtspartitie en PNEC water = 33 µg/L (draft RAR; PNEC's veranderen niet meer) MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 47 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	In de draft-RAR wordt de PNEC voor sediment als niet relevant beschouwd vanwege laag absorberend vermogen.
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 33 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hocMTR _{eco} water x $K_{\text{susp/water}} \times 1000/1150$ (RHO _{susp. matter}) = 33 µg/L x 1,32 x 0,87 = 37,9 µg/kg ww. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: $37,9 \times 2,71 = 103 \text{ µg/kg dw}$	$K_{\text{p,susp/water}} = 1,32 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} (sediment) van 103 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,029 mg/L PEC _{lucht} = 2,02E-04 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 9,04E-04 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 2,17E-03 mg/L PEC _{sediment} = 0,0295 mg/kg ww	EUSES 2.0.3.
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Output Humanex-resultaten:

furfural	TDI (µg/kg bw/d)	TCA (µg/m3)	Corrected for TCA: YES		
	5.30E+02	5.00E+01			
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (µg/m3)	Soil (µg/kg dwt)	Sediment (µg/kg dwt)
MPC eco	3.30E+01	3.30E+01		4.70E+01	1.03E+02
MPC human	7.18E+03	5.37E+02	5.00E+01	7.33E+02	5.26E+04
Ratio MPC eco/MPC human	4.60E-03	6.14E-02		6.41E-02	1.96E-03
Critical MPC	3.30E+01	3.30E+01	5.00E+01	4.70E+01	1.03E+02
% importance of total exposure	92.666	0.420	6.913	0.001	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	90.906				

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Methanol
CAS-NUMMER		67-56-1
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	370 µg/L
	lucht	892 µg/m ³
	bodem	220 µg/kg dwt
	sediment	859 µg/kg dwt
DATUM		26-01-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Methanol
CAS-nummer	67-56-1
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	Neutral organics
Synoniemen	Methanol; Methyl alcohol; Methyl hydrate; Methyl hydroxide; Methylol Monohydroxymethane
Molecuulformule	CH ₃ OH
Structuurformule	$\text{HO} - \text{CH}_3$

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	32,04	Mackay handbook
Smeltpunt (°C)	-98	Mackay handbook
Kookpunt (°C)	64,6	Mackay handbook
Dampdruk (Pa)	16210 (25 °C)	Mackay handbook
Oplosbaarheid in water (mg/L)	volledig mengbaar (25 °C): 1E+06 ingevoerd in EUSES 2.0.3	Mackay handbook
Log Kow	-0,77 (experimenteel)	Mackay handbook, Bioloom MlogP
Log Koc	0,44 (experimenteel) 0,62 (QSAR) 0,52 (geometrisch gemiddelde Mackay en QSAR)	Mackay fate handbook Sablje et al. 1995 (QSAR voor niet-hydr. Stoffen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	0,45 (experimenteel)	Mackay handbook
pKa	15,3 (experimenteel)	SRC PhysProp Database

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	readily biodegradable: MITI-I(OECD TG 301C) BF (biodegrades fast) en BFA (biodegrades fast with acclimation) MITI linear: 0,7784 MITI non-linear: 0,9324 Biowin 1: 0,8910 Biowin 2: 0,9752 Biowin 3: 3,2883	CERI BIODEG 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	Humane data (acuut), relatief beperkte data proefdieren	RIVM 1995
Carcinogeniteit	Geen adequate data beschikbaar	Idem
Mutageniteit	Resultaten deels tegenstrijdig, geen conclusie mogelijk	Idem
Kritische studie oraal	NOAEL 90-dagen 500 mg/kg lg/dag	Idem
Kritische studie inhalatie	TCA = 1,1 mg/m³ , gebaseerd op een chronische NOAEC 133 mg/m ³ (20 uur/week, 7 dagen/week).	Idem

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

4.2 Ecotoxiciteit

soort	duur (uur)	parameter	waarde (mg/L)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Lepomis macrochirus</i>	96	EC50	12700	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	EC50	13000	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Pimephales promelas</i>	96	LC50	28200	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Alburnus alburnus</i>	96	LC50	28000	zout	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Oruzias latipes</i>	48	LC50	1400	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48	LC50	3289	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Artemia salina</i>	24	LC50	9007	zout	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Crangon crangon</i>	96	LC50	1700	zout	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Nitocra spinipes</i>	96	LC50	12000	zout	U.S. EPA ECOTOX Database
algen					
<i>Chlorococcales</i>	24	EC50	12000	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
Weekdieren					
<i>Anodonta imbecillis</i>	48	LC50	37	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Cerastoderma edule</i>	96	LC50	3300	zout	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Mytilus edulis</i>	96	LC50	13400	zout	U.S. EPA ECOTOX Database
Wormen					
<i>Dugesia tigrina</i>	96	LC50	>100	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Lumbriculus variegatus</i>	96	LC50	>100	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van aanvrager.

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

Classificatie: F; R11 - T; R23/24/25-39/23/24/25

R11: Licht ontvlambaar.

R23/24/25: Vergiftig bij inademing, opname door de mond en aanraking met de huid.

R39/23/24/25: Vergiftig: gevaar voor ernstige onherstelbare effecten bij inademing, aanraking met de huid en opname door de mond.

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

S7: In goed gesloten verpakking bewaren.

S16: Verwijderd houden van ontstekingsbronnen - Niet roken.

S36/37: Draag geschikte handschoenen en beschermende kleding.

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

T: Vergiftig

F: Licht ontvlambaar

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja MTR oraal = 0,5 mg/kg lg/dag, TCA = 1,1 mg/m ³	RIVM (1995)
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 500 µg/kg lg/dag en TCA 1100 µg/m ³ gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log Kow = 0,77 en MW = 32,04 g/mol Ad hoc MTR = 370 µg/L	Op basis van een 48-u LC50 van 37 mg/L voor <i>Anodonta imbecillis</i> . AF = 100 (AF van 1000 met een factor 10 verlaagd omdat stof een "neutral organic" is met een niet-specifiek werkingsmechanisme (narcose)).
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 370 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 370 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 370 µg/L x 0,302 x 0,59 = 65,9 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 65,9 x 3,33 = 220 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 0,302 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} (bodem) van 220 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 370 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 370 µg/L x 0,985 x 0,87 = 317 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 317 x 2,71 = 859 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 0,985 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 859 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 9,15E-03 mg/L PEC _{lucht} = 2,63E-03 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 3,81E-03 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,0216 mg/L PEC _{sediment} = 6,7E-03 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

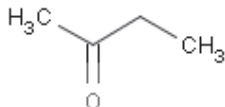
Output Humanex-resultaten:

methanol	TDI (µg/kg bw/d) 5.00E+02	TCA (µg/m3) 1.10E+03	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (µg/m3)	Soil (µg/kg dw)	Sediment (µg/kg dw)
MPC eco	3.70E+02	3.70E+02		2.20E+02	8.59E+02
MPC human	3.10E+03	7.33E+03	8.92E+02	4.24E+03	6.98E+03
Ratio MPC eco/MPC human	1.19E-01	5.05E-02		5.19E-02	1.23E-01
Critical MPC	3.70E+02	3.70E+02	8.92E+02	2.20E+02	8.59E+02
% importance of total exposure	0.138	45.071	54.790	0.002	
Dominant route of exposure	air				
% of dominant route	50.996				

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Methyl Ethyl Keton
CAS-NUMMER		78-93-3
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	oppervlaktewater: 657 µg/L grondwater: 421 µg/L
	lucht	587 µg/m ³
	bodem	745 µg/kg dwt
	sediment	2,35E+03 µg/kg dwt
DATUM		26-01-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Methyl Ethyl Keton
CAS-nummer	78-93-3
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	aldehydes en ketonen
Synoniemen	2-Butanone; MEK; Methyl ethyl ketone; Methyl ethyl ketone; 3-Butanone Acetone, methyl-; Ethyl methyl ketone; Ethylmethylketon [Dutch]; Ketone, ethyl methyl; Meetco; Methyl acetone; Methyl ethyl ketone Butanone
Molecuulformule	CH ₃ CH ₂ COCH ₃
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	72,11	Mackay Handbook
Smeltpunt (°C)	-87	Mackay Handbook
Kookpunt (°C)	79,58	Mackay Handbook
Dampdruk (Pa)	12100 (25 °C)	Mackay Handbook
Oplosbaarheid in water (mg/L)	240000 (25 °C)	Mackay Handbook
Log Kow	0,29 (experimenteel)	Mackay Handbook, Bioloom MlogP
Log Koc	1,47 (experimenteel) 1,53 (experimenteel) 1,17 (QSAR) 1,38 (geometrisch gemiddelde Mackay en QSAR)	Mackay Handbook Sabljic et al. 1995 (QSAR voor niet-hydr. stoffen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	9,71 (experimenteel) 5,76 (experimenteel) 7,48 (geometrisch gemiddelde)	Mackay Handbook
pKa	14,7	Mackay Handbook

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	readily biodegradable: BF (biodegrades fast) en BFA (biodegrades fast with acclimation); BS in 1 v/d 15 testen (biodegrades slow) MITI linear: 0,6656 MITI non-linear: 0,8514 Biowin 1: 0,7200 Biowin 2: 0,8223 Biowin 3: 3,0173	BIODEG 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	Alleen inhalatiedata beschikbaar (proefdieren)	RIVM 1995
Carcinogeniteit	Geen adequate data beschikbaar	Idem
Mutageniteit	Beschikbare studies wijzen op afwezigheid activiteit	Idem
Kritische studie oraal	Geen (route-to-route extrapolatie)	Idem
Kritische studie inhalatie	TCA = 0,875 mg/m³ , gebaseerd op een overall NOAEL 3000 mg/m ³ (7 uur/dag) afkomstig uit studies naar ontwikkelingstoxiciteit.	Idem

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

4.2 Ecotoxiciteit

soort	duur (uur)	parameter	waarde (mg/L)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Carassius auratus</i>	24	LC50	2400	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Cypridon variegatus</i>	96	LC50	> 400 ¹	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Gambusia affinis</i>	96	LC50	5600	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Lepomis macrochirus</i>	48	LC50	5640	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Leuciscus idus melanotus</i>	48	LC50	4600	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Pimephales promelas</i>	96	LC50	3220	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48	EC50	5091	zoet	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Artemia salina</i>	24	LC50	1950	zout	U.S. EPA ECOTOX Database
algen					
<i>Skeletonema costatum</i>	96	EC50	> 500 ¹	zout	U.S. EPA ECOTOX Database

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

¹ Laagste waarde, maar niet gebruikt omdat geen 50% effect is gevonden.

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen info van de aanvrager.

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

Classificatie: F; R11 - Xi; R36 - R66 - R67

R11: Licht ontvlambaar.

R36: Irriterend voor de ogen.

R66: Herhaalde blootstelling kan een droge of een gebarsten huid veroorzaken.

R67: Dampen kunnen slaperigheid en duizeligheid veroorzaken.

S2: Buiten bereik van kinderen bewaren.

S9: Op een goed geventileerde plaats bewaren.

S16: Verwijderd houden van ontstekingsbronnen - Niet roken.

F: Licht ontvlambaar

Xi: Irriterend

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja MTR oraal = 0,19 mg/kg lg/dag (geëxtrapoleerd uit TCA), TCA= 0,875 mg/m ³	RIVM (1995)
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 190 µg/kg lg/dag en TCA van 875 µg/m ³ gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log Kow = 0,29 en MW = 72,107 g/mol Ad hoc MTR _{eco} water = 19500 µg/L	Gebaseerd op een 24-u LC50 van 1950 mg/L voor de kreeftachtige <i>Artemia salina</i> . AF = 100 (AF van 1000 met een factor 10 verlaagd omdat stof een "neutral organic" is met een niet-specifiek werkingsmechanisme (narcose)).
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 1,95E+04 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 1,95E+04 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 1,95E+04 µg/L x 0,937 x 0,59 = 10780 µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 10780 x 3,33 = 35898 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 0,937 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 3,59E+04 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 1,95E+04 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 1,95E+04 µg/L x 1,51 x 0,87 = 25617 µg/kg ww. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 25617 x 2,71 = 69422 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 1,51 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 6,94E+04 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 3,09E-03 mg/L PEC _{lucht} = 2,76E-03 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 1,07E-03 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 1,98E-03 mg/L PEC _{sediment} = 3,6E-03 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:

methyl ethyl keton	TDI (µg/kg bw/d) 1.90E+02	TCA (µg/m3) 8.75E+02	Corrected for TCA: NO		
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (µg/m3)	Soil (µg/kg dwt)	Sediment (µg/kg dwt)
MPC eco	1.95E+04	1.95E+04		3.59E+04	6.94E+04
MPC human	6.57E+02	4.21E+02	5.87E+02	7.45E+02	2.35E+03
Ratio MPC eco/MPC human	2.97E+01	4.63E+01		4.82E+01	2.96E+01
Critical MPC	6.57E+02	4.21E+02	5.87E+02	7.45E+02	2.35E+03
% importance of total exposure	10.978	0.388	88.632	0.001	
Dominant route of exposure	air				
% of dominant route	88.225				

Bijlage B

**Rapportageformulier
2-chloorallylalcohol,
2,3-dichloorhydrine,
difenylolmethaan,
glycerine, glycidol,
isopropylether, MIBK,
monochloorhydrine,
trimethylammoniumchloride.**

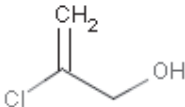
Opdrachtgegevens

Projectnummer	M/601782/07/
Opdrachtgever	RIZA
Datum opdracht	25-01-2007
Datum rapportage	16-03-2007
Opdracht	Afleiden van indicatieve milieukwaliteitsnormen voor 2-chloorallyl alcohol, 2,3-dichloorhydrine, difenylolmethaan, glycerine, glycidol, isopropylether, MIBK, monochloorhydrine, trimethylammoniumchloride

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	2-chloorallylalcohol	
CAS-NUMMER	5976-47-6	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,45
	lucht	16 µg/m ³
	bodem	0,76 µg/kg dwt
	sediment	1,5 µg/kg dwt
DATUM	30-03-2007	

1. IDENTITEIT

Stofnaam	2-chloorallylalcohol
CAS-nummer	5976-47-6
Stofgroep (EPIWin 3.12)	vinyl/allyl haliden vinyl/allyl alcoholen
Synoniemen	Chloroallyl alcohol; 2-Chloro-2-propen-1-ol; 2-Chloro-2-propenol; 2-Chloroallyl alcohol; 2-Chloropropenol; beta-Chloroallyl alcohol; 2-Propen-1-ol, 2-chloro-
Molecuulformule	C ₃ H ₅ Cl O
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	92,53	EPIWin 3.12
Smeltpunt (°C)	-59,8 (geschat)	EPIWin 3.12
Kookpunt (°C)	117,5 (geschat)	EPIWin 3.12
Dampdruk (Pa)	1067,6 (geschat)	EPIWin 3.12, SRC PhysProp Database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	70717 (geschat uit fragmentent) 99070 (geschat uit log Kow) 99100 (geschat)	EPIWin 3.12 SRC PhysProp Database
Log Kow	0,61 (geschat)	Bio-Loom ClogP
Log Koc	1,34 (geschat)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coëfficiënt (Pa·m ³ /mol)	1,40 (berekend) 0,25 (geschat)	H = dampdruk*molecuulgewicht/oplosbaarheid in water SRC PhysProp Database
pKa		

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	readily biodegradable: MITI linear: 0,6609 MITI non-linear: 0,6695 Biowin 1: 0,7508 Biowin 2: 0,7231 Biowin 3: 2,9815	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	Geen toxicologische data beschikbaar voor stof zelf; het verwante 3-chloorallylalcohol is metaboliet van het grondontsmettingsmiddel 1,3-dichloorpropeen. EU-dossier van deze stof geeft diverse studies voor 3-choorallylalcohol, nl. 28 dagen oraal rat, 90 dagen oraal rat, genotoxiciteit, tertatogeniteit rat	EU 2003 ¹ EU 2005 ²
Carcinogeniteit	Niet beschikbaar, ook niet voor 3-choorallylalcohol	EU 2003 EU 2005
Mutageniteit	Niet beschikbaar, wel voor 3-chloorallylalcohol	EU 2003 EU 2005
Kritische studie oraal	Niet beschikbaar voor stof zelf. Voor 3-choorallylalcohol: 90 dagen oraal, NOAEL 3 mg/kg lg/dag	EU 2003 EU 2005
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar, ook niet voor 3-chloorallylalcohol	

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

¹ EU (2003) Monograph 1,3-Dichloropropene DAR Volume III, B Toxicology and metabolism (annex B).

² EU (2005) 1,3-Dichloropropene. List of Endpoints d.d. March 2005.

4.2 Ecotoxiciteit

Voor 2-chloorallylalcohol is geen data beschikbaar, maar wel voor het verwante 3-chloorallylalcohol (metaboliet van het grondontsmettingsmiddel 1,3-dichloorpropeen). De data voor 3-chloorallylalcohol zijn hieronder gegeven:

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	Opmerking	ref.
vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,986		EU 2005
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	2,30		EU 2005
algen					
<i>Skeletonema costatum</i>	120 uur	EC50	0,727 ²	groeisnelheid	EU 2005
planten					
<i>Lemna gibba</i>	14 dagen	LC50	0,454²		EU 2005

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

¹ EU (2005). 1,3-Dichloropropene. List of Endpoints d.d. March 2005.

² Resultaat is gebaseerd op initiële gemeten concentratie van 1,3-dichloorpropeen (3-chloorallylalcohol is een metaboliet van 1,3-dichloorpropeen).

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

Geen informatie van de aanvrager.

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Nee (geen HSDB beschikbaar), wel data voor verwante verbinding 3-chloorallyl alcohol (opgenomen in EU-Monograph voor 1,3-dichloorpropeen)	
4	Voor het verwante 3-chloorallyl alcohol: nee	
5	Nee (ook niet voor 3-chloorallyl alcohol)	
6	Voor het verwante 3-chloorallyl alcohol: ja, echter alleen ontwikkelingseffecten onderzocht.	Teratogeniteit rat: maternale toxiciteit en foetotoxiciteit bij ≥ 25 mg/kg lg/dag, NOAEL voor beide: 10 mg/kg lg/dag
7	Ja	
8	Voor het verwante 3-chloorallyl alcohol Oraal: rat 90 dagen, drinkwaterstudie, leveren nierschade bij ≥ 10 mg/kg lg/dag, NOAEL 3 mg/kg lg/dag Inhalatie: geen data	
9	-	
10	300; opbouw: 10 voor interspecies, 10 voor intraspecies, 3 voor extrapolatie subchronisch naar chronisch (hogere factor niet noodzakelijk gezien afwezigheid genotoxiciteits- en daarmee carcinogeniteitsrisico)	
11	Ja	
12	Oraal: 10 $\mu\text{g/kg lg/dag}$ (afgeleid voor het verwante 3-chloorallyl alcohol) Inhalatie: route-to-route extrapolatie, resultaat: 35 $\mu\text{g/m}^3$	
13	Nee	
14	-	
15	-	
16	-	
17	Voor het verwante 3-chloorallyl alcohol: weight of evidence wijst op afwezigheid genotoxiciteit	
18	Ad hoc MTR _{humaan} van 10 $\mu\text{g/kg lg/dag}$ en TCA 35 $\mu\text{g/m}^3$ gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log Kow = 0,61 en MW = 92,53 g/mol Ad hoc MTR _{eco} water = 0,454 $\mu\text{g/L}$	Op basis van een 14-d LC50 voor <i>Lemna gibba</i> van 0,454 mg/L. AF = 1000.
4		
5	ad hoc MTR _{eco} (water) van 0,454 $\mu\text{g/L}$ gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 0,454 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} (bodem) = ad hoc MTR _{eco} (water) x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,454 µg/L x 0,852 x 0,59 = 0,228 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,228 x 3,33 = 0,758 µg/kg dwt	K _p _{bodem/water} = 0,852 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} (bodem) van 0,758 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 0,454 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} (sediment) = ad hoc MTR _{eco} (water) x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,454 µg/L x 1,44 x 0,87 = 0,568 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 0,568 x 2,71 = 1,54 µg/kg dwt	K _p _{susp/water} = 1,44 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} (sediment) van 1,54 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 9,78E-03 mg/L PEC _{lucht} = 8,91E-04 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 9,53E-04 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 1,9E-03 mg/L PEC _{sediment} = 0,0109 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

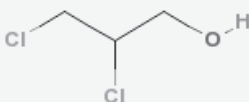
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
2-chloorallylcohol	1.00E+01	3.50E+01				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco	4.54E-01	4.54E-01		7.58E-01	1.54E+00	
MPC human	1.76E+02	3.42E+01	1.61E+01	5.63E+01	6.03E+02	
Ratio MPC eco/MPC human	2.58E-03	1.33E-02		1.35E-02	2.56E-03	
Critical MPC *	4.54E-01	4.54E-01	1.61E+01	7.58E-01	1.54E+00	
% importance of total exposure	52.355	0.603	47.041	0.001		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	50.425					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		2,3-dichloorhydrine
CAS-NUMMER		616-23-9
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	oppervlaktewater: 1,0E+02 µg/L grondwater: 5,2 µg/L
	lucht	0,028 µg/m ³
	bodem	6,85 µg/kg dwt
	sediment	3,3E+02 µg/kg dwt
DATUM		30-03-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	2,3-dichloorhydrine
CAS-nummer	616-23-9
Stofgroep (DEREK)	Vic-dihalide
Synoniemen	2,3-Dichloro-1-propanol ; 2,3-dichloropropan-1-ol ; 2,3-dichloro1-propanol
Molecuulformule	C3H6Cl2O
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	128,99	EPIWin 3.12
Smeltpunt (°C)	-24,89 (geschat)	EPIWin 3.12
Kookpunt (°C)	184	SRC PhysProp
Dampdruk (Pa)	24,5 (geschat)	EPIWin 3.12, SRC PhysProp
Oplosbaarheid in water (mg/L)	60820 (geschat uit fragmenten) 1,509E+05 (geschat uit log Kow; ClogP waarde van 0,35 gebruikt)	EPIWin 3.12
Log Kow	0,35 (geschat)	Bio-Loom ClogP
Log Koc	1,202 (geschat)	Sablje et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	0,0520 (berekend) 3,6E-04 (geschat)	H = dampdruk*molecuulgewicht/oplosbaarheid in water SRC PhysProp Database
pKa	1,0	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	persistent: MITI linear: 0,5399 MITI non-linear: 0,3290 Biowin 1: 0,6221 Biowin 2: 0,1961 Biowin 3: 2,7277	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	Beperkte data, subchronisch oraal rat, geen reproductie- of ontwikkelingstox-data	US-EPA 1990/2004 ¹
Carcinogeniteit	Niet beschikbaar	US-EPA 1990/2004 ¹
Mutageniteit	Beperkte data: bacterieel in vitro, SCE in zoogdiercellen in vitro, geen in vivo data	US-EPA 1990/2004 ¹ , COM 2001 ²
Kritische studie oraal	Rat, 90 dagen gavage, myocardiale degeneratie, hepatotoxiciteit, nefrotoxiciteit, LOAEL 35 mg/kg lg/dag, NOAEL 10 mg/kg lg/dag	US-EPA 1990/2004 ¹
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar	

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

¹ US-EPA (1990/2004) Integrated Risk Assessment System (IRIS) database. Entry for 2,3 dichloropropanol. Last revised 01/11/1990. Review 2004. On line at www.epa.gov/ngispgm3/iris/subst/0465.htm

² COM (2001) Committee on the Mutagenicity of Chemicals in Food, Consumer Products and the Environment - 2,3-dichloropropan- 1-ol (2,3 DCP). DRAFT. <http://www.advisorybodies.doh.gov.uk/pdfs/mut017.pdf>, accessed on 27-02-2007

4.2 Ecotoxiciteit

Geen experimentele gegevens beschikbaar. Ook zijn geen resultaten van Ecosar beschikbaar, omdat EPIWin deze stof indeelt als neutral organic, terwijl deze waarschijnlijk wel reactief is.

HYDROWIN kan geen hydrolyse voor deze stof berekenen.

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)

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{huuman}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee, wel US-EPA (1990) RfD	Geen nieuwe studies beschikbaar volgens review door US-EPA in 2004
3	Geen HSDB-file beschikbaar	
4	Nee	
5	Nee	
6	Nee	
7	Ja	
8	Oraal: ja, conform US-EPA (1990), NOAEL 10 mg/kg lg/dag rat subchronisch Inhalatie: geen data	
9	-	
10	Oraal: Conform US-EPA (1990) Totale AF=3000, opbouw van deze factor zoals gespecificeerd door US-EPA: 10 intraspecies, 10 interspecies, 30 vanwege ontbreken van chronische studie, van data in tweede species en van reproductie/ontwikkelingstox-data Inhalatie: geen data	Grenswaarde van US-EPA wordt ongewijzigd overgenomen.
11	Nee	
12	Oraal US-EPA RfD overgenomen=3 µg/kg lg /dag Inhalatie: route-to-route extrapolatie, resultaat 10 µg/m ³	
13	Nee	
14	Nee	
15	Nee	
16	-	
17	Mutageniteit beoordeeld door Engelse expert group van Department of Health (COM 2001), conclusie: in vitro in bacteriën positief, SCE's in vitro positief, geen in vivo data, stof mogelijk mutageen	Hoge factor van 3000 gebruikt in afleiding (hogere factor niet noodzakelijk)
18	ad hoc MTR _{huuman} van 3 µg/kg lg/dag en TCA 10 µg/m ³ gebruikt voor integratie humaan en eco	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	Resultaat	Opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5	Ad hoc MTR _{eco} water wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	Resultaat	Opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4	Ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	Resultaat	Opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	Ad hoc MTR _{eco} bodem wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	Opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	Ad hoc MTR _{eco} (sediment) wordt gebaseerd op humane tox.	

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

stap	Resultaat	Opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,91 mg/L PEC _{lucht} = 5,15E-4 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 0,0382 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,0959 mg/L PEC _{sediment} = 1,97 mg/kg ww	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

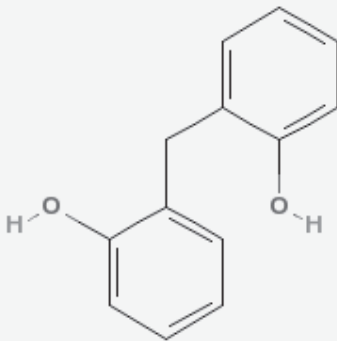
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
2,3-dichloorhydrine	3,00E+00	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco						
MPC human	1,03E+02	5,17E+00	2,78E-02	6,75E+00	3,26E+02	
Ratio MPC eco/MPC human						
Critical MPC *	1,03E+02	5,17E+00	2,78E-02	6,75E+00	3,26E+02	
% importance of total exposure	99,234	0,327	0,439	0,001		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	98,133					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Difenylolmethaan
CAS-NUMMER		2467-02-9
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	1,6 µg/L
	lucht	1,3E-03 µg/m ³
	bodem	77 µg/kg dwt
	sediment	71 µg/kg dwt
DATUM		30-03-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Difenylolmethaan
CAS-nummer	2467-02-9
Stofgroep (EPIWin 3.12)	Fenolen
Synoniemen	2,2'-Dihydroxydiphenylmethane 2,2'-methylenediphenol Bisphenol F
Molecuulformule	C ₁₃ H ₁₂ O ₂
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	200,24	EPIWin 3.12
Smeltpunt (°C)	128,7 (geschat)	EPIWin 3.12
Kookpunt (°C)	351,9 (geschat)	EPIWin 3.12
Dampdruk (Pa)	1,18E-04 (geschat)	EPIWin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	617,6 (geschat uit fragmenten) 701 (geschat uit log Kow)	EPIWin 3.12
Log Kow	2,78 (geschat)	Bio-Loom ClogP
Log Koc	2,65 (geschat)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor phenolen, anilines, benzo-nitriles en nitrobenzenen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	3,83E-05 (berekend)	H = dampdruk*molecuulgewicht/oplosbaarheid in water
pKa	10,00	Bio-Loom

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	inherently biodegradable: MITI linear: 0,2549 MITI non-linear: 0,1913 Biowin 1: 0,9385 Biowin 2: 0,9282 Biowin 3: 2,7946	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	Beperkte data, beoordeeld i.h.k.v. Food Contact Materials door EU-SCF (2003), geen kortdurende of langdurende standaardtoxiciteitstesten beschikbaar, geen reproductie- of ontwikkelingstox-data, wel in vitro screeningsassay oestrogene werking	EU-SCF 2003 ¹
Carcinogeniteit	Niet beschikbaar	EU-SCF 2003 ¹
Mutageniteit	In vitro data (bacteriën, zoordiercellen), in vivo rat lever UDS	EU-SCF 2003 ¹
Kritische studie oraal	Niet beschikbaar, analoge verbinding Bisfenol A: overall NOAEL van 50 mg/kg lg/dag (RAR, 2003) of op basis dezelfde dataset 5 mg/kg lg/dag (EU-SCF 2002), beide NOAELs uit twee-generatie reproductie rat	EU-SCF 2002 ² , RAR 2003 ¹
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar voor Bisfenol F, Bisfenol A 13 weken rat NOAEC 10 mg/m³ (LOAEC 50 mg/m ³ , hyperplasie en ontsteking van neusepitheel, slechts mild effect, ook bij hoogste testconcentratie van 150 mg/m ³)	RAR 2003 ³

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

¹ EU-SCF (2003) Opinion of the Scientific Committee on Food on the 21st additional list of monomers and additives for food contact materials. PM/REF No. 13453 Bis(hydroxyphenyl)methane CAS no. 001333-16-0. Opinion expressed on 5 March 2003).

² EU-SCF (2002) Opinion of the Scientific Committee on Food on Bisphenol A (Expressed on 17 April 2002). SCF/CS/PM/3936 Final, 3 May 2002.

³ RAR (2003) European Risk Assessment Report 4,4'-isopropylidenediphenol (bisphenol-A). Third Priority List, Volume 37. European Commission Joint Research Centre EUR 20843.

4.2 Ecotoxiciteit

Voor difenylolmethaan is geen data beschikbaar, maar voor het verwante bisfenol A zijn PNEC's uit de een EU-RAR aanwezig.

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)

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee, beoordeling door EU-SCF Food Contact Materials (2003), dataset beperkt	Op basis van data aanwezig in EU-SCF (2003) geen ad hoc-MTR afleidbaar
3	Geen HSDB beschikbaar	Verwante stof Bisfenol A is uitgebreid onderzocht en beoordeeld (RAR 2003, EU-SCF 2002), op basis in vitro test is Bisfenol F oestrogeen, net als Bisfenol A, wel minder potent
4	Nee	
5	Nee	
6	Nee	
7	Nee	
8	Oraal: Overall NOAEL voor bisfenol A volgens RAR: 50 mg/kg lg/dag (2-generatie rat) Inhalatie: NOAEC semichronisch rat 10 mg/m ³ (6 uur/dag, 5 dagen/week) (ontleend aan RAR)	NOAEC gecorrigeerd voor beperkte expositieduur: 1,8 mg/m ³ (30 uur/week → 168 uur/week)
9	-	
10	Oraal: 10 interspecies, 10 intraspecies Inhalatie: interspecies 10, intraspecies 10, tijdsduur 1 gezien aard van effect	.
11	-	
12	Oraal: 0.5 mg/lg/dag Inhalatie: 0.018 mg/m ³	
13	Nee	
14	-	
15	Nee	
16	-	
17	Bisfenol F niet genotoxisch op basis van uitgevoerde testen	
18	ad hoc MTR _{humaan} van 500 µg/kg lg/dag (oraal) en TCA van 18 µg/m ³ (inhalatie) gebruikt voor integratie humaan en eco.	Beide waarden afgeleid voor het verwante Bisfenol A.

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja PNECwater voor bisfenol A = 1,6 µg/L	EU-RAR 2003 (bisfenol A)
2		
3		
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 1,6 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	Waarde gebaseerd op het verwante bisfenol A

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	Ja PNECbodem = 23 µg/kg wwt Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: MTR _{eco} bodem = 23 x 3,33 = 76,6 µg/kg dwt	EU-RAR 2003 (bisfenol A)
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 76,6 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	Waarde gebaseerd op het verwante bisfenol A

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Ja PNECsediment = 26 µg/kg wwt Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: MTR _{eco} sediment = 26 x 2,71 = 70,5 µg/kg dwt	EU-RAR 2003 (bisfenol A) berekend dmv equilibrium partitie
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 70,5 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,974 mg/L PEC _{lucht} = 1,15E-07 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 0,387 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,0482 mg/L PEC _{sediment} = 12,3 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

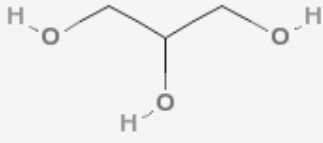
Output Humanex-resultaten:

	TDI	TCA	Corrected for TCA:			NO
difenylolethaan	(ug/kg bw/d)	(ug/m3)				
	5.00E+02	1.80E+01				
	Surface water	Groundwater	Air	Soil	Sediment	
	(ug/L)	(ug/L)	(ug/m3)	(ug/kg dwt)	(ug/kg dwt)	
MPC eco	1.60E+00	1.60E+00		7.66E+01	7.05E+01	
MPC human	1.11E+04	5.47E+02	1.31E-03	1.44E+04	4.28E+05	
Ratio MPC eco/MPC human	1.45E-04	2.92E-03		5.32E-03	1.65E-04	
Critical MPC *	1.60E+00	1.60E+00	1.31E-03	7.66E+01	7.05E+01	
% importance of total exposure	93.120	6.865	0.009	0.007		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	63.199					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Glycerine
CAS-NUMMER		56-81-5
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	1,5E+04 µg/L
	lucht	0,10 µg/m ³
	bodem	6,8E+04 µg/kg dwt
	sediment	3,2E+04 µg/kg dwt
DATUM		30-03-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Glycerine
CAS-nummer	56-81-5
Stofgroep (EPIWin 3.12)	Neutral organics
Synoniemen	Glycerine; Glycerol; 1,2,3-Propanetriol; glyceritol; glycyalcohol; glyrol; glysanin; opthalgan; osmoglyn; propanetriol; trihydroxypropane; 1,2,3-trihydroxypropane
Molecuulformule	C ₃ H ₈ O ₃
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	92,10	SRC PhyspProp
Smeltpunt (°C)	18,2	SRC PhyspProp
Kookpunt (°C)	290	SRC PhyspProp
Dampdruk (Pa)	0,02 (experimenteel, 25 °C)	SRC PhyspProp
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1E+06 (experimenteel, 25°C)	SRC PhyspProp
Log Kow	-1,76 (experimenteel)	Bio-Loom MlogP
Log Koc	0,1048 (geschat)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	1,75E-03 (experimenteel)	SRC PhyspProp
pKa	14,4	SRC PhyspProp

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	readily biodegradable: readily biodegradable (MITI-I (OECD TG 301C)) BF (biodegrades fast) en BFA (biodegrades fast with acclimation) MITI linear: 0,9697 MITI non-linear: 0,9744 Biowin 1: 1,1799 Biowin 2: 0,9937 Biowin 3: 3,4756	CERI BIODEG 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	Complete dataset bestaand uit data van oude tot zeer oude datum, concludeert OECD/SIDS (2002). Stof wordt gevormd in normale vetstofwisseling mens en dier (vet=triglyceride van vetzuren). Na orale opname omzetting in lever naar CO ₂ en water of omzetting naar glucose en glycogeen via standaard metabolisme. Gebruik in tal van producten, oa voedingsmiddelen, hoestsiroop, tandpasta. ADI van JECFA: not specified. Ook klinisch gebruik bij behandeling van diverse aandoeningen. Normaal serum glycerol in mens in rust 0,05 mmol/liter, 0,3 mmol/liter in toestand van langdurige lipolyse bij langdurige inspanning of calorische restrictie. Glycerol wordt in sportwereld gebruikt voor inductie van hyperhydratie (verhoogde watervasthouding) met het oog op verbetering prestaties (orale dosering 1 g/kg lg in combinatie met drinken van 1,5 liter drank)	OECD/SIDS 2002 ¹ Robergs & Griffin 1998 ² , Wagner 1999 ³ , JECFA 2002 ⁴
Carcinogeniteit	Beperkte data	OECD/SIDS 2002 ¹
Mutageniteit	In vitro data (bacteriën, zoordiercellen), in vivo data van beperkte kwaliteit	OECD/SIDS 2002 ¹
Kritische studie oraal	Overall NOAEL 2-jaar rat in voederstudie: 20% (10000 mg/kg lg/dag)	OECD/SIDS 2002 ¹
Kritische studie inhalatie	Rat, 13 weken inhalatie aerosol, 6 uur/dag, 5 dagen/week, geen systemische effecten, locale irritatie epiglottis (strotklepje) bij 662 mg/m ³ , NOAEC 165 mg/m³ .	OECD/SIDS 2002 ¹

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

¹ OECD/SIDS (2002) Glycerol - SIDS Initial Assessment Report For SIAM 14 Paris, France, 26-28 March 2002.

<http://www.inchem.org/documents/sids/sids/56815.pdf> Accessed on 27-02-2007

² Robergs RA, Griffin, SE (1998) Glycerol. Biochemistry, pharmacokinetics and clinical and practical applications. Sports Medicine 26 (3), 15-167. (Abstract)

³ Wagner DR (1999) Hyperhydrating with glycerol: implications for athletic performance. Journal of the American Dietetic Association 99 (2), 207-212 (Abstract)

⁴ JECFA (2002) http://www.inchem.org/documents/jecfa/jecval/jec_925.htm. Accessed on 27-02-2007.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	Opmerking	ref.
vissen					
<i>Carassius auratus</i>	24 uur	LC50	>5000		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Leuciscus idus melanotus</i>	48 uur	LC50	> 10000		U.S. EPA ECOTOX Database
kreftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	24 uur	EC50	> 10000		U.S. EPA ECOTOX Database
algen					
<i>Microcystis aeruginosa</i>		NOEC (=LOEC/2)	1450	Aangenomen dat het effect percentage tussen 10 en 20% ligt.	eTox-Base

Dikgedrukte 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)

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee, ADI JECFA unspecified (unlimited), OECD/SIDS (2002)	MTR-afleiding dient rekening te houden met normale fysiologische aanwezigheid in lichaam
3	-	
4	Nee	
5	Ja	
6	Ja	
7	Ja	
8	Ja, OECD/SIDS Oraal 2-jaar rat NOAEL 10000 mg/kg lg/dag Inhalatie 13 weken rat NOAEC 165 mg/m ³ (aerosol)	
9	-	
10	Oraal: 100 Inhalatie: 100	Oraal: 10 inter species, 10 intraspecies Inhalatie: 10 interspecies, 10 intraspecies
11	Nee	
12	Oraal: 100 mg/kg lg/dag Inhalatie: 1,6 mg/m ³	Ruwe schattingen voor normale fysiologische aanwezigheid: rustmetabolisme 5 mg/kg lg, toestand van verhoogde lipolyse 30 mg/kg lg (geschat op basis van serumniveaus en homogene verdeling over lichaam aannemend). Cf. orale dosering 1000 mg/kg lg voor verbetering prestatievermogen in sport.
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 1,00E+05 µg/kg lg/dag (oraal) en TCA van 1,6E+03 µg/m ³ (inhalatie) gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log Kow = 1,76 en MW = 92,10 g/mol Ad hoc MTR _{eco} water = 1,45E+04 µg/L	Op basis van een NOEC voor algen van 1450 mg/L (blootstellingsduur onbekend). AF = 100. (AF van 1000 met een factor 10 verlaagd omdat stof een "neutral organic" is met een niet-specifiek werkingsmechanisme (narcose)).
4		
5	ad hoc MTR _{eco} (water) van 1,45E+04 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 1,45E+04 µg/L	
7	Ad hoc MTR _{eco} (bodem) = ad hoc MTR _{eco} (water) x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 1,45E+04 µg/L x 0,238 x 0,59 = 2,03E+03 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 2,03E+03 x 3,33 = 6,76E+03 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 0,238 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} (bodem) van 6,76E+03 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 1,45E+04 µg/L	
7	Ad hoc MTR _{eco} (sediment) = ad hoc MTR _{eco} (water) x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 1,45E+04 µg/L x 0,932 x 0,87 = 1,18E+04 µg/kg wwv. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 1,18E+04 x 2,71 = 3,18E+04 µg/kg dw	Kp _{susp/water} = 0,932 m³/m³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} (sediment) van 3,18E+04 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,123 mg/L PEC _{lucht} = 3,68E-09 mg/m³ PEC _{landbouwgrond} = 1,34E-03 mg/kg wwv PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 9,6E-03 mg/L PEC _{sediment} = 0,0846 mg/kg wwv	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

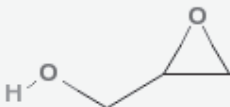
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:		NO
glycerine	1.00E+05	1.60E+03			
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)
MPC eco	1.45E+04	1.45E+04		6.76E+03	3.18E+04
MPC human	3.45E+06	2.69E+05	1.03E-01	1.23E+05	7.28E+06
Ratio MPC eco/MPC human	4.20E-03	5.38E-02		5.49E-02	4.37E-03
Critical MPC *	1.45E+04	1.45E+04	1.03E-01	6.76E+03	3.18E+04
% importance of total exposure	99.409	0.590	0.001	0.000	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	98.626				

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Glycidol
CAS-NUMMER		556-52-5
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	5,3 µg/L
	lucht	0,11 µg/m ³
	bodem	3,1 µg/kg dwt
	sediment	12 µg/kg dwt
DATUM		30-03-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Glycidol
CAS-nummer	556-52-5
Stofgroep (EPIWin 3.12)	Epoxides
Synoniemen	Glycidol; 2,3-Epoxy-1-propanol; 3-Hydroxy-1,2-epoxypropane; Glycidol 2,3-Epoxy-1-propanol; 2,3-epoxypropan-1-ol; oxiranemethanol
Molecuulformule	C ₃ H ₆ O ₂
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	74,08	SRC PhysProp Database
Smeltpunt (°C)	-42,71 (geschat)	EPIWin 3.12
Kookpunt (°C)	124 (geschat)	EPIWin 3.12
Dampdruk (Pa)	745 (geschat)	EPIWin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1E+06 (25°C, experimenteel)	SRC PhysProp Database
Log Kow	-0,95 (experimenteel)	Bio-Loom MlogP
Log Koc	0,526 (geschat)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	0,0552 (berekend)	H = dampdruk*molecuulgewicht/oplosbaarheid in water SRC PhysProp Database
	5,9E-04 (geschat)	
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	readily biodegradable: readily biodegradable (MITI-I (OECD TG 301C)) MITI linear: 0,7359 MITI non-linear: 0,8606 Biowin 1: 0,5236 Biowin 2: 0,4122 Biowin 3: 3,1868	CERI 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	Stof onderzocht op carcinogeniteit en genotoxiciteit, klassificatie door IARC in groep 2A, op lijst van carcinogene stoffen (EU, SZW)	IARC 2000 ¹ , SZW 2004 ²
Carcinogeniteit	Bioassays in muis, rat en hamster	IARC 2000 ¹ , CPD 2006 ³
Mutageniteit	Diversiteit aan testen: stof genotoxisch (IARC)	IARC 2000 ¹
Kritische studie oraal	2-jaar rat tumorincidenties verhoogd in diverse organen, Cancer Potency Database TD50= 4,28 mg/kg lg/dag	CPD 2006 ³
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar	

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

¹ IARC (2000) Some Industrial Chemicals. IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risk of Chemicals to Humans, vol. 77. Lyon, France: International Agency for Research on Cancer. 529 pp.

² SZW (2004) SZW-Lijst van kankerverwekkende stoffen en processen. Staatscourant 6 september 2004 nr. 170, pagina 12.

³ CPD (2006) Cancer Potency Database. Berkeley University of California.
<http://potency.berkeley.edu/chempages/GLYCIDOL.html> Accessed on 05-03-2007

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
kreeftachtigen					
algen					
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	96 uur	EC50	144,7		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	96 uur	EC50	53,31		U.S. EPA ECOTOX Database

Dikgedrukte 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)

Classificatie: Carc. Cat. 2; R45 - Muta. Cat. 3; R68 - Repr. Cat. 2; R60 - T; R23 - Xn; R21/22 - Xi; R36/37/38

R45:	Kan kanker veroorzaken.
R60:	Kan de vruchtbaarheid schaden.
R21/22:	Schadelijk bij aanraking met de huid en bij opname door de mond.
R23:	Vergiftig bij inademing.
R36/37/38:	Irriterend voor de ogen, de ademhalingswegen en de huid.
R68:	Onherstelbare effecten zijn niet uitgesloten.
S53:	Blootstelling vermijden - voor gebruik speciale aanwijzingen raadplegen.
S45:	Bij een ongeval of indien men zich onwel voelt, onmiddellijk een arts raadplegen (indien mogelijk hem dit etiket tonen).
Carc. Cat. 2:	Carcinogeen Categorie 2
Muta. Cat. 3:	Mutageen Categorie 3
Repr. Cat. 2:	Reprotoxisch Categorie 2
T:	Vergiftig
Xn:	Schadelijk
Xi:	Irriterend

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee, wel IARC (2000)	Genotoxisch carcinogeen, IARC groep 2A
3	Nee	
4	Nee	
5	Ja	
6	Beperkt, alleen ontwikkelingseffecten onderzocht	
7	Nee	
8	Nee	Kwantitatieve kankerrisicoschatting dmv lineaire extrapolatie op basis van TD50
9	-	
10	-	
11	-	
12	-	
13	Ja	
14	Ja	
15	Ja, obv orale TD50 van 4,28 mg/kg lg/dag, resultaat 0,856 µg/kg lg/dag Inhalatie: contra-indicatie voor route-to-route extrapolatie ivm first pass-metabolisme in lever	Inhalatoire carcinogene potentie naar verwachting groot (zie bv. ethyleenoxide). Berekende concentratie in lucht (output Humanex) echter relatief laag (lager dan resultaat route-to-route berekening obv van orale waarde)
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,856 µg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log Kow = -0,95 en MW = 74,08 Ad hoc MTR _{eco} water = 5,33 µg/L	Op basis van een 96-u EC50 van 53,31 mg/L voor algen. AF = 10000.
4		
5		
6		
7	Ad hoc MTR _{eco} water van 5,33 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 5,33 µg/L	
7	Ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 5,33 µg/L x 0,301 x 0,59 = 0,944 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,944 x 3,33 = 3,14 µg/kg dw	Kp _{bodem/water} = 0,301 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 3,14 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 5,33 µg/L	
7	Ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 5,33 µg/L x 0,984 x 0,87 = 4,56 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 4,56 x 2,71 = 12,4 µg/kg dw	Kp _{susp/water} = 0,984 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} (sediment) van 12,4 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humanaan} en ac hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	$PEC_{opp. \text{ water (opgelost)}} = 0,0339 \text{ mg/L}$ $PEC_{lucht} = 1,38E-04 \text{ mg/m}^3$ $PEC_{landbouwgrond} = 1,89E-03 \text{ mg/kg wwt}$ $PEC_{landbouwgrond, poriewater} = 0,0107 \text{ mg/L}$ $PEC_{sediment} = 0,0248 \text{ mg/kg wwt}$	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

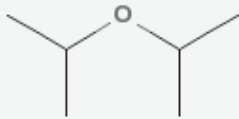
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
glycidol	8.56E-01	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco	5.33E+00	5.33E+00		3.14E+00	1.24E+01	
MPC human	2.74E+01	8.64E+00	1.11E-01	5.00E+00	6.14E+01	
Ratio MPC eco/MPC human	1.95E-01	6.17E-01		6.28E-01	2.02E-01	
Critical MPC *	5.33E+00	5.33E+00	1.11E-01	3.14E+00	1.24E+01	
% importance of total exposure	92.283	1.753	5.963	0.001		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	91.556					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Isopropylether
CAS-NUMMER		108-20-3
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	oppervlaktewater: 21 µg/L grondwater: 22 µg/L
	lucht	4,0E+02 µg/m ³
	bodem	92 µg/kg dwt
	sediment	2,4E+02 µg/kg dwt
DATUM		30-03-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Isopropylether
CAS-nummer	108-20-3
Stofgroep (EPIWin 3.12)	Neutral organics
Synoniemen	Isopropyl ether; 2-Isopropoxypropane; Diisopropyl ether; DIPE; Di-isopropyl ether; Isopropylether; Isopropyl ether ; DIISOPROPYLETHERAR DIISOPROPYLETHER; Iso-Propyl Ether; bis(isopropyl)ether; diisopropyloxyde; ether, isopropyl; 2-isopropoxypropane; propane, 2,2'-oxybis-
Molecuulformule	C ₆ H ₁₄ O
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	102,174	Mackay et al. 2006
Smeltpunt (°C)	-85,4	Mackay et al. 2006, selected value
Kookpunt (°C)	68,4	Mackay et al. 2006, selected value
Dampdruk (Pa)	20000 (25°C)	Mackay et al. 2006, selected value
Oplosbaarheid in water (mg/L)	7900 (25°C)	Mackay et al. 2006, selected value
Log Kow	1,52 (experimenteel)	Bio-Loom MlogP
Log Koc	1,81 (berekend)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coëfficiënt (Pa·m ³ /mol)	258,7 (berekend) 208,8 (batch air stripping-IR) 212,4 (exponential saturator EXPSAT technique) 231 (EPICS-static headspace method-GC/FID) 217 (geometrisch gemiddelde experimentele waarden uit Mackay et al. 2006) 259,4 (25°C, experimenteel)	Mackay et al. 2006, selected value Mackay et al. 2006 SRC PhysProp Database
pKa	-4,3	SRC PhysProp Database

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	persistent: Not readily biodegradable (MITI-I (OECD TG 301C)) BS (biodegrades slow) and BSA (biodegrades slow with acclimation) MITI linear: 0,3099 MITI non-linear: 0,3423 Biowin 1: 0,3515 Biowin 2: 0,1334 Biowin 3: 2,9647	CERI BIODEG 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	Geen bestaande beoordelingen door (inter)nationale instanties, beschikbare toxicologische data beperkt (op basis van HSDB). RfD afleiding beschikbaar voor het verwante ethyl ether (US-EPA 1993)	HSDB 2005 ¹
Carcinogeniteit	Geen data	HSDB 2005 ¹
Mutageniteit	Enkele testen: bacterieel, gist, zoogdiercel in vitro (HSDB)	HSDB 2005 ¹
Kritische studie oraal	Niet beschikbaar. Verwante stof ethylether: rat, 90 dagen NOAEL 500 mg/kg lg/dag	US-EPA 1993 ²
Kritische studie inhalatie	Rat, 90-dagen inhalatie NOAEC 480 ppm (2040 mg/m ³) (6 uur/dag, 5 dagen/week)	HSDB 2005 ¹

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

¹ HSDB (2005) data file ISOPROPYL ETHER CASRN: 108-20-3, Complete Update on 2005-06-24.

² US-EPA (1993) IRIS-file voor ethyl ether (CAS 60-29-7). Oral RfD assessment, last revised 07/01/1993.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Carassius auratus</i>	24 uur	LC50	380		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	7000		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Menidia beryllina</i>	96 uur	LC50	6600		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	786		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	91,7		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	900		U.S. EPA ECOTOX Database
kreeftachtigen					
algen					

Dikgedrukte 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)

Classificatie: F; R11 - R19 - R66 - R67

R11:	Licht ontvlambaar.
R19:	Kan ontplofbare peroxiden vormen.
R66:	Herhaalde blootstelling kan een droge of een gebarsten huid veroorzaken.
R67:	Dampen kunnen slaperigheid en duizeligheid veroorzaken.
S2:	Buiten bereik van kinderen bewaren.
S9:	Op een goed geventileerde plaats bewaren.
S16:	Verwijderd houden van ontstekingsbronnen - Niet roken.
S29:	Afval niet in de gootsteen werpen.
S33:	Maatregelen treffen tegen ontladingen van statische elektriciteit.
F:	Licht ontvlambaar.

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	Stof lijkt op ethylether (is net als deze acuut neurotoxisch); voor ethylether US-EPA RfD beschikbaar
3	Ja	
4	Nee	
5	Nee	
6	Ontwikkelingseffecten in 2 inhalatiestudies in rat, geen reproductie (HSDB 2005)	NOAECs in rattenstudies: 385 en 430 ppm (LOAECs 3240 en 3095 ppm)
7	Ja	
8	Inhalatie: uit 90-dagen inhalatiestudie rat NOAEC 480 ppm (=2040 mg/m ³), (6 uur/dag, 5 dagen/week), omgerekend naar continue expositie NOAEC _{adj} = 364 mg/m ³ (HSDB) Oraal: geen studies beschikbaar, 90-dagen NOAEL voor ethylether 500 mg/kg lg/dag (US-EPA 1993)	Kritisch effect: verhoogd lever- en niergewicht, leverhypertrofie Kritisch effect: groeivertraging
9	-	
10	Inhalatie: 1000 Oraal: 3000	10 interspecies, 10 intraspecies, 10 beperkte duur/beperkte data. Conform US-EPA
11	-	
12	Inhalatie: 364 µg/m ³ Oraal: 0,2 mg/kg lg/dag (=RfD van US-EPA)	US-EPA RfD voor ethylether bruikbaar als orale ad hoc-waarde
13	Nee	
14	-	
15	-	
16	-	
17	Beschikbare testen (bacterie, gist, zoogdiercel in vitro) negatief (HSDB)	
18	ad hoc MTR _{humaan} van 200 µg/kg lg/dag (oraal) en TCA van 400 µg/m ³ (inhalatie) gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log Kow = 1,52 en MW = 102,174 g/mol Ad hoc MTR _{eco} water = 91,7 µg/L	Op basis van een 96-u LC50 voor <i>Pimephales promelas</i> van 91,7 mg/L. AF = 1000. (AF van 10000 met een factor 10 verlaagd omdat stof een "neutral organic" is met een niet-specifiek werkingsmechanisme (narcose)).
4		
5	Ad hoc MTR _{eco} water van 91,7 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 91,7 µg/L	
7	Ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 91,7 µg/L x 2,16 x 0,59 = 117 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 117 x 3,33 = 388 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 2,16 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 388 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 91,7 µg/L	
7	Ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 91,7 µg/L x 2,52 x 0,87 = 201 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 201 x 2,71 = 545 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 2,52 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 545 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,36E-03 mg/L PEC _{lucht} = 0,0264 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 1,85E-03 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 1,46E-03 mg/L PEC _{sediment} = 2,92E-03 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

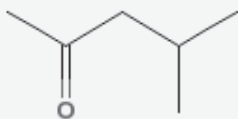
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			YES
isopropylether	2,00E+02	4,00E+02				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco	9,17E+01	9,17E+01		3,88E+02	5,45E+02	
MPC human	2,06E+01	2,21E+01	4,00E+02	9,19E+01	2,36E+02	
Ratio MPC eco/MPC human	4,45E+00	4,15E+00		4,22E+00	2,31E+00	
Critical MPC *	2,06E+01	2,21E+01	4,00E+02	9,19E+01	2,36E+02	
% importance of total exposure	0,011	0,730	99,259	0,000		
Dominant route of exposure	air					
% of dominant route	99,235					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		MIBK
CAS-NUMMER		108-10-1
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	oppervlaktewater: 4,0E+02 µg/L grondwater: 3,1E+02 µg/L
	Lucht	6,2E+02 µg/m ³
	Bodem	1,0E+03 µg/kg dwt
	sediment	2,0E+03 µg/kg dwt
DATUM		30-03-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	MIBK
CAS-nummer	108-10-1
Stofgroep (EPIWin 3.12)	Neutral organics
Synoniemen	4-Methylpentan-2-one; Isobutyl methyl ketone; iso-Butyl methyl ketone; Isopropylacetone; Methyl isobutyl ketone; MIBK; 4-Methyl-2-pentanone Isopropyl acetone; Methyl isobutyl keton; methyl-iso-butyl ketone (iso-butyl methyl ketone); methyl-iso-butyl ketone gr; phenazine methosulphate Methylisobutylketone; 4-Methyl-2-pentanone; Hexone; hexanone
Molecuulformule	C ₆ H ₁₂ O
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	100,16	Mackay et al. 2006
Smeltpunt (°C)	-84	Mackay et al. 2006, selected value
Kookpunt (°C)	116,5	Mackay et al. 2006, selected value
Dampdruk (Pa)	2600	Mackay et al. 2006, selected value
Oplosbaarheid in water (mg/L)	17000	Mackay et al. 2006, selected value
Log Kow	1,31 (experimenteel)	Bio-Loom MlogP
Log Koc	1,70 (berekend)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	39,5 (EPICS-GC/FID) 47,95 (equilibrium headspace-GC) 45,57 (experimenteel) 44,2 (geometrisch gemiddelde)	Mackay et al. 2006
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	readily biodegradable: readily biodegradable (MITI-I (OECD TG 301C)) BF (biodegrades fast, 5 out of 8 tests), BST (biodegrades sometimes, 1 out of 8 tests), BS (biodegrades slow, 2 out of 8 tests) MITI linear: 0,5319 MITI non-linear: 0,7017 Biowin 1: 0,7067 Biowin 2: 0,7565 Biowin 3: 2,9553	CERI BIODEG 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	Orale data beperkt (90 dagen, geen chronisch, geen reproductietoxiciteit of ontwikkelingseffecten), inhalatiedata redelijk compleet (humane vrijwilligerstudies, geen chronische studies, 13-weeken inhalatie, reproductie en ontwikkelingseffecten) (US-EPA 2003)	OECD 1996 ¹ , RIVM 2001 ² , US-EPA 2003 ³
Carcinogeniteit	Geen data	US-EPA 2003 ³
Mutageniteit	Testen: bacterieel, gist, muizelymfoomtest, micronucleus-/cytogenetisch in vivo (US-EPA)	US-EPA 2003 ³
Kritische studie oraal	Rat, oraal 13 weken: NOAEL 250 mg/kg lg/dag (RIVM 2001); conclusie US-EPA (2003) voor deze studie NOAEL > 1000 mg/kg lg/dag (waargenomen afwijkingen geëvalueerd als non-adverse)	RIVM 2001 ² , US-EPA 2003 ³
Kritische studie inhalatie	Rat, 14-weekenstudie NOAEC 1043 mg/m³ (6 uur/dag, 5 dagen/week)	RIVM 2001 ²

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

¹ OECD (1996) SIDS Initial Assessment Report for the 5th SIAM, 28-30 October, 1996 Methyl Isobutyl Ketone.

² RIVM (2001) AD-HOC ADVIES, Betreft: Diisobutylketon (CAS-nummer 108-83-8). Afleiding voorlopige humaan-toxicologische MTR t.b.v. afleiding voorlopige EBVC-humaan. RIVM/CSR advies d.d. 9-1-2001.

³ US-EPA (2003) IRIS-file voor Methyl Isobutyl Ketone (MIBK) (CASRN 108-10-1). Oral RfD assessment, last revised 25/04/2003, Inhalation RfC Assessment, last revised 25/04/2003.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Carassius auratus</i>	24 uur	LC50	460		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Leuciscus idus melanotus</i>	48 uur	LC50	672		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Leuciscus idus melanotus</i>	48 uur	LC50	744		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Leuciscus idus melanotus</i>	48 uur	LC50	707	geometrisch gemiddelde	
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	505		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	540		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	537		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	527	geometrisch gemiddelde	
<i>Pimephales promelas</i>	31 – 33 d	NOEC	57	groei	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Pimephales promelas</i>	31 – 33 d	NOEC	246	overleving	U.S. EPA ECOTOX Database
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	24 uur	EC50	3623		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Daphnia magna</i>	24 uur	EC50	3200		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Daphnia magna</i>	24 uur	EC50	1550		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Daphnia magna</i>	24 uur	EC50	3682		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Daphnia magna</i>	24 uur	EC50	2852	geometrisch gemiddelde	
<i>Artemia salina</i>	24 uur	LC50	1230		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	78		U.S. EPA ECOTOX Database
algen					
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	48 uur	EC50	980	biomass	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	48 uur	EC50	2000	groeisnelheid	U.S. EPA ECOTOX Database
protozoa					
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	48 uur	EC50	4,01	populatiegroei	U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Spirostomum ambiguum</i>	24 uur	LC50	3696		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Spirostomum ambiguum</i>	48 uur	LC50	3676		U.S. EPA ECOTOX Database

Dikgedrukte 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)

Classificatie: F; R11 - Xn; R20 - Xi; R36/37 - R66

R11:	Licht ontvlambaar.
R20:	Schadelijk bij inademing.
R36/37:	Irriterend voor de ogen en de ademhalingswegen.
R66:	Herhaalde blootstelling kan een droge of een gebarsten huid veroorzaken.
S2:	Buiten bereik van kinderen bewaren.
S9:	Op een goed geventileerde plaats bewaren.
S16:	Verwijderd houden van ontstekingsbronnen - Niet roken.
S29:	Afval niet in de gootsteen werpen.
F:	Licht ontvlambaar.
Xn:	Schadelijk.
Xi:	Irriterend.

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja, RIVM 2001 resultaat: voorlopige orale MTR 0,8 mg/kg lg/dag, voorlopige inhalatoire MTR 0,62 mg/m ³	Recentere beoordeling door US-EPA (2003) Resultaat: geen RfD afgeleid, RfC=3 mg/m ³
2	-	
3	-	
4	-	
5	-	
6	-	
7	-	
8	-	
9	-	
10	-	
11	-	
12	-	
13	-	
14	-	
15	-	
16	-	
17	-	
18	Ad hoc MTR _{humaan} van 800 µg/kg lg/dag (oraal) en TCA van 620 µg/m ³ (inhalatie) gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log Kow = 1,31 en MW = 100,16 g/mol Ad hoc MTR _{eco} water = 401 µg/L	Op basis van een 48-u EC50 voor <i>Tetrahymena pyriformis</i> van 4,01 mg/L. AF = 10 (AF van 100 met een factor 10 verlaagd omdat stof een "neutral organic" is met een niet-specifiek werkingsmechanisme (narcose)).
4		
5	Ad hoc MTR _{eco} water van 401 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 401 µg/L	
7	Ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} (water) x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 401 µg/L x 1,71 x 0,59 = 403 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 403 x 3,33 = 1,34E+03 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 1,71 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 1,34E+03 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 401 µg/L	
7	Ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 401 µg/L x 2,16 x 0,87 = 753 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 753 x 2,71 = 2,04E+03 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 2,16 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} (sediment) van 2,04E+03 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 4,24E-03 mg/L PEC _{lucht} = 1,01E-03 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 5,04E-04 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 5,01E-04 mg/L PEC _{sediment} = 7,28E-03 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

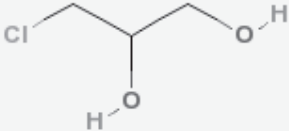
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			YES
MIBK	8.00E+02	6.20E+02				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco	4.01E+02	4.01E+02		1.34E+03	2.04E+03	
MPC human	2.60E+03	3.08E+02	6.20E+02	1.01E+03	4.08E+04	
Ratio MPC eco/MPC human	1.54E-01	1.30E+00		1.32E+00	5.00E-02	
Critical MPC *	4.01E+02	3.08E+02	6.20E+02	1.01E+03	2.04E+03	
% importance of total exposure	33.831	0.213	65.955	0.001		
Dominant route of exposure	air					
% of dominant route	65.890					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Monochloorhydrine
CAS-NUMMER		96-24-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	oppervlaktewater: 0,34 µg/L grondwater: 0,052 µg/L
	lucht	5,1E-05 µg/m ³
	bodem	0,031 µg/kg dwt
	sediment	0,77 µg/kg dwt
DATUM		30-03-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Monochloorhydrine
CAS-nummer	96-24-2
Stofgroep (DEREK)	Haloalkanen (worden in ecotoxicologie als neutral organics geklassificeerd, maar DEREK vindt dat stof mogelijk mutageen en sensibiliserend is: stof beschouwen als equivocal en AF niet verlagen met factor 10).
Synoniemen	3-Chloro-1,2-propanediol; Glycerol-alpha-chlorohydrine; (S)-(+)-3-Chloro-1,2-propanediol; (S)-(+)-Glycerol alpha-monochlorohydrin; (R)-(-)-3-Chloro-1,2-propanediol; (R)-(-)-3-Glycerol alpha-monochlorohydrin S-(+)-3-Chloro-1,2-propanediol; R-(-)-3-Chloro-1,2-propanediol; Glycerol alpha-chlorohydrin; alpha-Chlorohydrine; 3-Chloro-1,2-Propanediol? 3-Chloropropane-1,2-Diol; R-(-)-3-Chloro-1,2-propanediol; S-(+)-3-Chloro-1,2-propanediol; 3-Chloro-1,2-propanediol; (R)-3-Chloro-1,2-propanediol (S)-3-Chloro-1,2-propanediol; R-3-Chloro-1-2-propanediol; S-3-Chloro-1-2-propanediol; R- 3-Chloro-1,2-Propanediol; (S)- 3-Chloro-1,2-Propanediol (R)or(S) 3-Chloro-1,2-propanediol; R-(-)or S-(+)-3-Chloro-1,2-propanediol 3-Chloro-1,2-propanediol(CG); (2R)-3-Chloropropane-1,2-diol (2S)-3-Chloropropane-1,2-diol; R-3-Chloro-1,2-propanediol
Molecuulformule	C ₃ H ₇ ClO ₂
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	110,54	SRC PhysProp
Smeltpunt (°C)	-1,91	epiwin
Kookpunt (°C)	210	epiwin
Dampdruk (Pa)	26,7 (experimenteel, 20°C)	SRC PhysProp
Oplosbaarheid in water (mg/L)	volledig mengbaar (experimenteel, 20 °C): 1E+06 ingevoerd in EUSES 2.0.3	SRC PhysProp
Log Kow	-0,85 (geschat)	Bio-Loom ClogP
Log Koc	0,578 (berekend)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coëfficiënt (Pa·m ³ /mol)	4,16E-03 (berekend, 25°C)	H = dampdruk*molecuulgewicht/oplosbaarheid in water (Dampdruk bij 25°C zoals berekend door EUSES 2.0.3.)
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	readily biodegradable: MITI linear: 0,7548 MITI non-linear: 0,8120 Biowin 1: 0,9010 Biowin 2: 0,8608 Biowin 3: 3,1016	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	Zeer beperkte data, stof bekend als steriliserend in mannelijke ratten (rodent chemosterilant), daarnaast zijn enkele subacute studies uitgevoerd (HSDB 2002)	HSDB 2002 ¹
Carcinogeniteit	Geen data	HSDB 2002 ¹
Mutageniteit	Geen data	HSDB 2002 ¹
Kritische studie oraal	Mannelijke rat, 2 weken: NOAEL 1 mg/kg lg/dag (LOAEL 5 mg/kg lg/dag) kritisch effect inductie steriliteit (testesfunctieverstoring) HSDB (2002) Mannelijke rat 4 weken: NOAEL 0,01 mg/kg lg/dag (LOAEL 0,05 mg/kg lg/dag, kritisch effect verminderde spermaproductie en -motiliteit) (Kwack et al. 2004)	HSDB 2002 ¹ , Kwack et al. 2004 ²
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar	HSDB 2002 ¹

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

¹ HSDB (2002)_ Data file 3-CHLORO-1,2-DIHYDROXYPROPANE CASRN: 96-24-2. Complete Update on 01/14/2002.

² Kwack et al. (2004) Mechanism of antifertility in male rats treated with 3-monochloro-1,2-propanediol (3-mcpd). Journal of Toxicology and Environmental Health Part A vol 67, (nr. 23-24), 2001-2011.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Rasbora heteromorpha</i>	24 uur	LC50	2150		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Rasbora heteromorpha</i>	48 uur	LC50	2100		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Carassius auratus</i>	48 uur	LC50	> 5000		U.S. EPA ECOTOX Database
kreeftachtigen					
algen					
Amfibiën					
<i>Xenopus laevis</i>	48 uur	LC50	2750		U.S. EPA ECOTOX Database

Dikgedrukte 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)

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja	
4	Nee	
5	Nee	
6	Fertiliteit onderzocht in rat, stof bekend als rodent chemosterilant	
7	Nee	
8	Oraal: NOAEL 0,01 mg/kg lg dag 4 weken rat (Kwack et al. 2004) kritisch effect verminderde spermaproductie, verminderde spermamotiliteit Inhalatie: geen data	
9	-	
10	Interspecies 10, intraspecies 10, beperkte dataset/beperkte duur experiment 10	
11	Ja	
12	Oraal 0,01 µg/kg lg/dag Inhalatie: route to route extrapolatie, resultaat 0,035 µg/m ³	
13	Nee	
14	-	
15	-	
16	-	
17	Geen data (HSDB 2002)	
18	Ad hoc MTR _{humaan} van 0,01 µg/kg lg/dag (oraal) en 0,035 µg/m ³ (inhalatie) gebruikt voor integratie humaan en eco.	TCA dmv route to route

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log Kow = -0,85 en MW = 110,54 Ad hoc MTR _{eco} water = 210 µg/L	Op basis van een 48-u LC50 voor <i>Rasbora heteromorpha</i> van 2100 mg/L. AF = 10000.
4		
5	Ad hoc MTR _{eco} water van 210 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 210 µg/L	
7	Ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 210 µg/L x 0,314 x 0,59 = 38,8 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 38,8 x 3,33 = 129 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 0,314 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 129 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 210 µg/L	
7	Ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 210 µg/L x 0,995 x 0,87 = 182 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 182 x 2,71 = 492 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 0,995 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} (sediment) van 492 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Integratie ad hoc MTR_{humanaan} en ac hoc MTR_{eco}

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,0949 mg/L PEC _{lucht} = 1,42E-05 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 2,66E-03 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,0144 mg/L PEC _{sediment} = 0,0704 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 (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
monochloorhydrine	1.00E-02	3.50E-02				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco	2.10E+02	2.10E+02		1.29E+02	4.92E+02	
MPC human	3.39E-01	5.15E-02	5.08E-05	3.12E-02	7.72E-01	
Ratio MPC eco/MPC human	6.19E+02	4.08E+03		4.14E+03	6.37E+02	
Critical MPC *	3.39E-01	5.15E-02	5.08E-05	3.12E-02	7.72E-01	
% importance of total exposure	97.745	1.013	1.241	0.001		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	97.012					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Trimethylammoniumchloride	
CAS-NUMMER	593-81-7	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,012 µg/L
	lucht	1,3E-06 µg/m ³
	bodem	0,056 µg/kg dwt
	sediment	0,076 µg/kg dwt
DATUM	30-03-2007	

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Trimethylammoniumchloride
CAS-nummer	593-81-7
Stofgroep (EPIWin 3.12)	Quaternair ammonium
Synoniemen	Trimethylamine; Trimethylamine hydrochloride; Trimethylammonium chloride; Trimethylamine HCL; trimethylamine (anhydrous); Trimethylamine hydrochloride; Trimethylamine (anhydrous); Trimethyl ammonium chloride; trimethyl amine hydrochloride; Trimethylammoniumchloride; methanamine, N,N-dimethyl-, hydrochloride; trimethylamine monohydrochloride
Molecuulformule	C3 H9 N
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	95,57	SRC PhysProp
Smeltpunt (°C)	277,5	SRC PhysProp
Kookpunt (°C)	312,3 (geschat)	EPIWin 3.12
Dampdruk (Pa)	2,21E-04 (geschat)	EPIWin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1,84E+04 (geschat uit fragmenten) 31,96 (geschat uit log Kow)	EPIWin 3.12 log Kow geschat door BioLoom gebruikt
Log Kow	1,61 (geschat)	Bio-Loom ClogP
Log Koc	1,86 (berekend)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coëfficiënt (Pa·m ³ /mol)	1,15E-06 (berekend)	H = dampdruk*molecuul- gewicht/oplosbaarheid in water
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	inherently biodegradable, fulfilling criteria: MITI linear: 0,4198 MITI non-linear: 0,5200 Biowin 1: 0,7020 Biowin 2: 0,8391 Biowin 3: 2,9880	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	Uitsluitend beperkte data over irritatie, geen toxiciteitsstudies (HSDB 2003, IUCLID 2000), Stof valt onder de groep quaternaire ammoniumverbindingen ('quats'), kritische effect van deze stoffen is irritatie van slijmvliezen, waarschijnlijk bezit onderhavige stof daarvoor een grote potentie	HSDB 2003 IUCLID 2000
Carcinogeniteit	Geen data	HSDB 2003 IUCLID 2000
Mutageniteit	Alleen Ames-test	HSDB 2003 IUCLID 2000
Kritische studie oraal	Niet beschikbaar, informatie over andere quats: NOAELs rat 90 dagen voor benzalkoniumchloride 500 mg/kg voer en voor dialkyldimethylammoniumchloride 400 mg/kg voer (kritisch effect: locale irritatie maagdarmkanaal)	HSDB 2003 IUCLID 2000 RIVM 1991
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar, ook geen informatie over andere quats	HSDB 2003 IUCLID 2000

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

¹ HSDB (2003) HSDB data file Trimethylammoniumchloride.

² IUCLID (2000) Data file Trimethylammoniumchloride.

³ RIVM (1991) Samenvatting Humane Toxicologie – Benzalkoniumchloride. Adopted by Toxicology Advisory Group 29-01-1991

⁴ RIVM (1994) Samenvatting Humane Toxicologie – Dialkyldimethylammoniumchloride. Adopted by Toxicology Advisory Group 29-08-1994

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	Opmerking	ref.
vissen					
kreeftachtigen					
algen					
<i>Microcystis aeruginosa</i>	96 uur	EC50	0,12		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Navicula pelliculosa</i>	96 uur	EC50	0,2		U.S. EPA ECOTOX Database
<i>Pseudokirchneriella</i>	96 uur	EC50	0,19		U.S. EPA ECOTOX Database

Dikgedrukte 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)

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja	
4	Ja, echter voor andere quats wel data	
5	Nee	
6	Nee, voor andere quats wel	
7	Nee, voor andere quats wel	
8	Oraal: NOAEL 90 dagen rat 400 mg/kg (dialkyldimethylammoniumchloride) en 500 mg/kg voer (benzalkoniumchloride) Inhalatie: geen data	Conclusie RIVM (1991, 1994): effecten concentratie-gerelateerd ipv dosis-gerelateerd, delen NOAELs door factor 500, resultaat 'ADI' van respectievelijk 1,0 en 0,8 mg/kg voedsel
9	-	
10	Waarde voor dialkyldimethylammoniumchloride RIVM (1994) overnemen: 0,8 mg/kg voedsel voor de mens komt naar schatting overeen met 0,024 mg/kg lg/dag (conversiefactor 0,03)	
11	-	
12	-	
13	Nee	
14	-	
15	-	
16	-	
17	Ames-test negatief, verder geen data, beschikbare data voor andere quats wijzen niet op genotoxiciteit	
18	Ad hoc MTR _{humaan} van 24 µg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig gezien geringe vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee, log Kow = 1,61 en MW = 95,57 Ad hoc MTR _{eco} water = 0,012 µg/L	Op basis van een 96-u EC50 van <i>Microcystis aeruginosa</i> van 0,12 mg/L. AF = 10000.
4		
5	Ad hoc MTR _{eco} water van 0,012 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 0,012 µg/L	
7	Ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,012 µg/L x 2,36 x 0,59 = 0,0167 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,0167 x 3,33 = 0,0555 µg/kg dwt	Kp _{bodem/water} = 2,36 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	Ad hoc MTR _{eco} bodem van 0,0555 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR _{eco} water = 0,012 µg/L	
7	Ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,012 µg/L x 2,7 x 0,87 = 0,0282 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 0,0282 x 2,71 = 0,0764 µg/kg dwt	Kp _{susp/water} = 2,7 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} (sediment) van 0,0764 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,2 mg/L PEC _{lucht} = 2,27E-09 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 0,0571 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,0412 mg/L PEC _{sediment} = 2,77 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
trimethylammoniumchloride	(ug/kg bw/d) 2.40E+01	(ug/m3) N.A.				
	Surface water	Groundwater	Air	Soil	Sediment	
	(ug/L)	(ug/L)	(ug/m3)	(ug/kg dwt)	(ug/kg dwt)	
MPC eco	1.20E-02	1.20E-02		5.55E-02	7.64E-02	
MPC human	7.05E+02	2.42E+01	1.33E-06	1.10E+02	4.99E+03	
Ratio MPC eco/MPC human	1.70E-05	4.96E-04		5.05E-04	1.53E-05	
Critical MPC *	1.20E-02	1.20E-02	1.33E-06	5.55E-02	7.64E-02	
% importance of total exposure	92.868	7.131	0.000	0.001		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	83.897					

Bijlage C**Rapportageformulier**

**2-methyl-2H-isothiazol-3-one,
5-chloro-2-methyl-2H-isothiazolin-
3-one,
natrium lignosulfonaat,
natriumbisulfiet,
polyethylene polypropyleenglycol.**

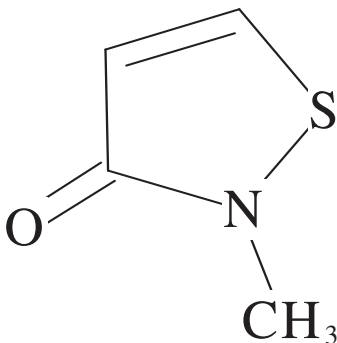
Opdrachtgegevens

Projectnummer	M/601782/07/
Dossiernummer	11128
Opdrachtgever	RIZA
Datum opdracht	22-02-2007
Datum rapportage	29-05-2007
Opdracht	Afleiden van indicatieve milieukwaliteitsnormen voor 2-methyl-2H-isothiazol-3-one, 5-chloro-2-methyl-2H-isothiazolin-3-one, natriumlignosulfonaat, natriumbisulfiet en polyethyleen-polypropyleenglycol

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	2-methyl-2H-isothiazol-3-one	
CAS-NUMMER	2682-20-4	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	5,7E-03 µg/L
	lucht	1,7E-04 µg/m ³
	bodem	5,3E-03 µg/kg dwt
	sediment	0,015 µg/kg dwt
DATUM	29-05-2007	

1. IDENTITEIT

Stofnaam	2-methyl-2H-isothiazol-3-one
CAS-nummer	2682-20-4
Stofgroep volgens EPIwin	Thiazolinone (iso-)
Synoniemen	2-Methyl-3(2H)-isothiazolone, 2-Methyl-4-isothiazolin-3-one, 2-Methyl-4-isothiazolin-3-one calcium chloride, 3(2H)-Isothiazolone, 2-methyl-, Methylisothiazolinone
Molecuulformule	C ₄ H ₅ NOS
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	115,15	epiwin
Smeltpunt (°C)	47,48 (geschat)	epiwin
Kookpunt (°C)	237,75 (geschat)	epiwin
Dampdruk (Pa)	4,13 (geschat)	epiwin
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1,297E+05 (geschat uit log Kow) 9,5876E+05 (geschat uit fragmenten)	epiwin (log Kow van BioLoom ClogP gebruikt) epiwin
Log Kow	-0,11 (geschat) -0,83 (geschat) -0,43 (geschat)	BioLoom ClogP epiwin QSAR4
Log Koc	0,9628 (geschat)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	4,96E-04 (geschat)	H = dampdruk*molecuulgewicht/oplosbaarheid in water
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	MITI linear: 0,3824 MITI non-linear: 0,3269 Biowin 1: 0,6927 Biowin 2: 0,7980 Biowin 3: 2,9447 inherently biodegradable, fulfilling criteria	epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Stof is aanwezig o.a. in biocide Kathon WT (1: 3 mengsel van methylisothiazolinon en 5-chloormethylisothiazolinon). Voor Kathon WT uitgebreid toxicologisch dossier beoordeeld door RIVM i.o.v. CTB in 1995. Stof zelf is beoordeeld door SCCNFP ivm gebruik in cosmetica.	RIVM 1995 ¹ , US-EPA 1998 ² , SCCNFP 2003, 2004
Carcinogeniteit	Voor Kathon WT: 2 jaar rat Voor methylisothiazolinon: geen data	RIVM 1995 ¹
Mutageniteit	Voor Kathon WT (mengsel): bacterieel, genmutatietest in zoogdiercellen in vitro, micronucleus- en cytogenetische test beenmerg in vivo. Oor methylisothiazolinon: Ames-test, in vitro zoogdiercellen chromosoomaberraties en genmutaties, in vivo beenmerg micronucleustest, in vivo UDS in rattelever.	RIVM 1995 ¹ , SCCNFP 2003
Kritische studie oraal	Voor Kathon WT (mengsel): geen overall-NOAEL afleidbaar vgl's (RIVM 1995), 2-jaars drinkwaterproef in rat, NOAEL 2 mg/kg lg/dag (kritisch effect: locale irritatie in maagwand). Voor methylisothiazolinon: 3-maanden drinkwaterstudie, 0, 75, 250 en 1000 mg/kg in drinkwater, groeivertraging en verminderde voedselconsumptie bij 1000 mg/kg, NOAEL 250 mg/kg (19 mg/kg lg/dag)	RIVM 1995 ¹ , SCCNFP 2003
Kritische studie inhalatie	Voor Kathon WT (mengsel): semichronisch inhalatie rat (aerosol), NOAEC 0,027 mg/m³ (kritisch effect: locale irritatie/rhinitis in neusweefsel, LOAEC 0.227 mg/m ³)	RIVM 1995 ¹

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

1. RIVM (1995) Isathiazolinon, 2-methyl. Adviescentrum Toxicologie Adviesrapport nr. 3423, d.d. 13-1-1995. samenvatting en evaluatie in opdracht van het CTB.
2. US-EPA (1998) Reregistration Eligibility Decision – Methylisothiazolinone, List C, Case 3092. EPA738-R-98-012, dated October 1998.
3. SCCNFP (2003) Opinion concerning Methylisothiazolinone. Colipa no. P 94. SCCNFP/0625/02, final.
4. SCCNFP (2004) Opinion concerning Methylisothiazolinone. Colipa no. P 94. SCCNFP/0805/04.

4.2 Ecotoxiciteit

Studies zijn uitgevoerd met de formulering Kathon en de formulering Acticide 14. De actieve stoffen (a.s.) in deze formulering zijn 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on en 2-methyl-2H-isothiazool-3-on. Wanneer alleen het percentage a.s. gegeven is, is bij gebrek aan data voor de individuele stof, aangenomen dat de toxische effecten alleen veroorzaakt worden door 2-methyl-2H-isothiazool-3-on. Wanneer de percentages van beide a.s. zijn gegeven (dit zijn studies met de formulering Acticide 14), is aangenomen dat beide a.s. evenveel bijdragen aan het toxische effect. (Overigens blijkt uit de studiegegevens op de OPP Pesticide Ecotoxicity niet duidelijk welk percentage bij welke actieve stof (a.s.) hoort, maar op CTB site is voor Acticide 14 een verhouding 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on : 2-methyl-2H-isothiazool-3-on gerapporteerd van ca. 3 : 1. Aangenomen is daarom dat het hoogste percentage geldt voor de 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on en het laagste voor 2-methyl-2H-isothiazool-3-on. Dit heeft geen invloed op de berekening van de effectconcentratie.)

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	Opmerking	ref.
vissen					
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,0425	0,30 mg/L (14,17% a.s. formulering)	ecotox
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,00992	0,07 mg/L (14,17% a.s. formulering)	ecotox
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,0269	0,19 mg/L (14,17% a.s. formulering)	
<i>Cyprinodon variegatus</i> (zoutwater)	96 uur	LC50	0,067	0,48 mg/L (10% 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on en 3,9% 2-methyl-2H-isothiazool-3-on formulering)	OPP Pesticide Ecotoxicity database
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	0,0255	0,18 mg/L (14,17% a.s. formulering)	ecotox
<i>Acartia tonsa</i> (zoutwater)	48 uur	LC50	0,0196	0,056 mg/L (35% a.s. formulering)	ecotox
<i>Acartia tonsa</i> (zoutwater)	48 uur	LC50	0,062	0,56 mg/L (10% 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on en 1% 2-methyl-2H-isothiazool-3-on formulering)	ecotox
<i>Americamysis bahia</i> (zoutwater)	96 uur	LC50	0,016	0,33 (3,9% 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on en 1% 2-methyl-2H-isothiazool-3-on formulering)	OPP Pesticide Ecotoxicity database
algen					
<i>Skeletonema costatum</i> (zoutwater)	72 uur	EC50	0,0175	0,050 mg/L (35% a.s. formulering)	ecotox
mollusken					
<i>Crassostrea virginica</i> (zoutwater)	96 uur	EC50	0,0057	0,041 mg/L (3,9% 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on en 10% 2-methyl-2H-isothiazool-3-on formulering)	OPP Pesticide Ecotoxicity database

Dikgedrukte 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)

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	Resultaat	opmerking
1	Nee, wel beoordeling van Kathon WT (1: 3 mengsel van methylisothiazolinon en 5-chloormethylisothiazolinon) door RIVM (1995). Methylisothiazolinon (stof zelf) beoordeeld door SCCNFP (2003, 2004)	RIVM (1995) leidt geen overall-NOEL af vanwege onvoldoende data vwb reproductietoxiciteit.
2	US-EPA (1998) heeft dezelfde dataset beoordeeld voor Kathon WT als biocide, leidde echter ook geen norm af vanwege uitsluitend non-food gebruik.	
3	-	
4	Nee	
5	Oraal: Kathon WT, rat 2 jaar via drinkwater, 2,2; 6,6 en 17,2 mg/kg lg/dag, NOEL 2 mg/kg lg/dag (kritisch effect: locale irritatie in maagwand) Inhalatie: Kathon WT: rat 90 dagen, 0,027; 0,227; 0,886 mg/m ³ (aerosol), 6 uur/dag, 5 dagen/week, NOEC 0,027 mg/m ³ (kritisch effect: locale irritatie/rhinitis in neusweefsel, alleen bij hoogste concentratie systemische effecten)	NOEL als methylisothiazolinon: 0,5 mg/kg lg/dag (gebruik van dit niveau voor ad hoc MTR extra conservatief vanwege gelijktijdige aanwezigheid gechloreerde verbinding). NOEC als methylisothiazolinon: 0,007 mg/m ³ (gebruik van dit niveau voor ad hoc TCA extra conservatief vanwege gelijktijdige aanwezigheid gechloreerde verbinding).
6	Kathon WT: teratogeniteit rat en konijn (studie in konijn echter als onvoldoende geëvalueerd), reproductie beperkt tot 1-generatie-experiment aan het einde van 90-dagen drinkwaterexperiment rat. Conclusie RIVM: onvoldoende data voor Kathon WT Methylisothiazolinon: geen data	
7	Kathon WT: ja, in zowel chronische drinkwaterproef rat als in semichronische experimenten in rat en hond. Methylisothiazolinon: ja in semichronische studie rat	
8	Oraal: chronische NOEL 0,5 mg/kg lg/dag Inhalatie: semichronische NOEC 0,007 mg/m ³	
9	-	
10	Oraal: 10 interspecies, 10 intraspecies, Inhalatie: 10 intraspecies, 3 interspecies i.v.m aard effect, tijdsduur proef 1 i.v.m. aard effect	Extra factor voor repro/ontwikkelingseffecten onnodig in het licht van beschikbare data en conservatieve overall NOEL 0,5 mg/kg lg/dag.
11	Nee	
12	Oraal: 5 µg/kg lg/dag Inhalatie: 0,2 µg/m ³ (afgeronde waarde)	
13	Ja	
14	Nee	
15	-	
16	-	
17	Kathon WT: genotoxiciteit in vitro positief (Ames-test, zoogdiercel in vitro genmutaties), in vivo inconclusive (RIVM 1995) Methylisothiazolinon: Ames-test, clastogeen in zoogdiercellen in vitro, in vivo testen negatief. Conclusie: stof niet genotoxisch SCCNFP (2004)	
18	ad hoc MTR _{humaan} oraal van 5 µg/kg lg/dag en inhalatoir 0,2 µg/m ³ (TCA) gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	ja	
3	nee ad hoc MTR = 5,7E-03 µg/l	Op basis van een 96-u EC50 van 5,7 µg/L a.s. voor <i>Crassostrea virginica</i> (AF 1000)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 5,7E-03 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 5,7E-03 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x Kp _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 5,7E-03 µg/L x 0,475 / 1,7 = 1,6E-03 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 1,6E-03 x 3,33 = 5,3E-03 µg/kg dwt	Kp _{bodem/water} = 0,475 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 5,3E-03 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 5,7E-03 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x Kp _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 5,7E-03 µg/L x 1,13 / 1,15 = 5,6E-03 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 5,6E-03 x 2,71 = 0,015 µg/kg dwt	Kp _{susp/water} = 1,13 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 0,015 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	$PEC_{opp. \text{ water (opgelost)}} = 1,21 \text{ mg/L}$ $PEC_{lucht} = 1,2E-06 \text{ mg/m}^3$ $PEC_{landbouwgrond} = 7,43E-3 \text{ mg/kg wwt}$ $PEC_{landbouwgrond, poriewater} = 0,0266 \text{ mg/L}$ $PEC_{sediment} = 1,06 \text{ mg/kg wwt}$	Volgens EUSES 2.0.3.
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

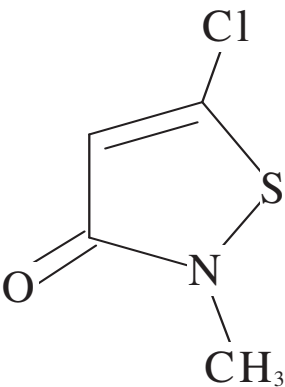
Output Humanex-resultaten:

	TDI ($\mu\text{g/kg bw/d}$)	TCA ($\mu\text{g/m}^3$)	Corrected for TCA:			NO
2-methyl-2h-isothiazol-3-one	5,00E+00	2,00E-01				
	Surface water ($\mu\text{g/L}$)	Groundwater ($\mu\text{g/L}$)	Air ($\mu\text{g/m}^3$)	Soil ($\mu\text{g/kg dwt}$)	Sediment ($\mu\text{g/kg dwt}$)	
MPC eco	5,7E-03	5,7E-03		5,3E-03	1,5E-02	
MPC human	1,7E+02	3,8E+00	1,7E-04	3,5E+00	4,6E+02	
Ratio MPC eco/MPC human	3,3E-05	1,5E-03		1,5E-03	3,2E-05	
Critical MPC *	5,7E-03	5,7E-03	1,7E-04	5,3E-03	1,5E-02	
% importance of total exposure	99,393	0,563	0,044	0,000		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	98,486					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	5-chloro-2-methyl-2H-isothiazolin-3-one	
CAS-NUMMER	26172-55-4	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,28 µg/L
	lucht	5,3E-05 µg/m ³
	bodem	0,46 µg/kg dwt
	sediment	0,95 µg/kg dwt
DATUM	29-05-2007	

1. IDENTITEIT

Stofnaam	5-chloro-2-methyl-2H-isothiazolin-3-one
CAS-nummer	26172-55-4
Stofgroep volgens EPIwin	thiazolinon (iso-); vinyl/allyl halides
Synoniemen	3(2H)-Isothiazolone, 5-chloro-2-methyl-, 4-ISOTHIAZOLIN-3-ONE, 5-CHLORO-2-METHYL-, 5-Chloro-2-methyl-2H-isothiazol-3-one, 5-Chloro-2-methyl-3(2H)-isothiazolone, 5-Chloro-2-methyl-4-isothiazolin-3-one, Methylchloroisothiazolinone; 5-chloro-2-methyl-1,2-thiazol-3-one
Molecuulformule	C ₄ H ₄ ClNOS
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	149,599	chemindustry.com
Smeltpunt (°C)	68,91 (geschat)	epiwin
Kookpunt (°C)	262,46 (geschat)	epiwin
Dampdruk (Pa)	0,72 (geschat)	epiwin
Oplosbaarheid in water (mg/L)	2,341E+04 (geschat uit log Kow)	epiwin (log Kow van BioLoom ClogP gebruikt)
	3,226E+05 (geschat uit fragmenten)	epiwin
Log Kow	0,60 (geschat) -0,34 (geschat) 0,7	BioLoom ClogP epiwin XlogP chemindustry.com
Log Koc	1,332 (geschat)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	3,34E-04	H = dampdruk*molecuulgewicht/oplosbaarheid in water
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	MITI linear: 0,2748 MITI non-linear: 0,0844 Biowin 1: 0,5649 Biowin 2: 0,2752 Biowin 3: 2,6954 persistent	epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	waarde	ref.
Overall beschikbare dataset	Stof is aanwezig in biocide Kathon WT (1: 3 mengsel van methylisothiazolinon en 5-chloormethylisothiazolinon). Voor Kathon WT uitgebreid toxicologisch dossier beoordeeld door RIVM i.o.v. CTB in 1995. Hetzelfde mengsel (1:3) wordt gebruikt in cosmetica. Beoordeling door SCCNFP (1986).	RIVM 1995 ¹ , US-EPA 1998 ² , SCCNFP (1986)
Carcinogeniteit	Kathon WT: 2 jaar rat 5-Chloormethylisothiazolinon: geen data	RIVM 1995 ¹
Mutageniteit	Voor Kathon WT (mengsel): bacterieel, genmutatietest in zoogdiercellen in vitro, micronucleus- en cytogenetische test beenmerg in vivo. Voor 5-chloormethylisothiazolinon: geen data.	RIVM 1995 ¹
Kritische studie oraal	Voor Kathon WT (mengsel): geen overall-NOAEL afleidbaar vgl's (RIVM 1995), 2-jaars drinkwaterproef in rat, NOAEL 2 mg/kg lg/dag (kritisch effect: locale irritatie in maagwand) Voor 5-chloormethylisothiazolinon: geen data.	RIVM 1995 ¹
Kritische studie inhalatie	Voor Kathon WT (mengsel): semichronisch inhalatie rat (aerosol), NOAEC 0,027 mg/m³ (kritisch effect: locale irritatie/rhinitis in neusweefsel, LOAEC 0.227 mg/m ³) Voor 5-chloormethylisothiazolinon: geen data.	RIVM 1995 ¹

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

1. RIVM (1995) Isathiazolinon, 2-methyl. Adviescentrum Toxicologie Adviesrapport nr. 3423, d.d. 13-1-1995. samenvatting en evaluatie in opdracht van het CTB.
2. US-EPA (1998) Reregistration Eligibility Decision – Methylisothiazolinone, List C, Case 3092. EPA738-R-98-012, dated October 1998.
3. SCCNFP (1986) Report by the Scientific Committee on Cosmetology concerning certain preservatives. Colipa no. 45 Mixture of 5-chloro-methylisothiazolinone and 2- Methylisothiazolinone with magnesium chloride and magnesium nitrate.

4.2 Ecotoxiciteit

Studies zijn uitgevoerd met de formulering Acticide 14. De actieve stoffen (a.s.) in deze formulering zijn 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on en 2-methyl-2H-isothiazool-3-on. Wanneer alleen het percentage actieve stof (a.s.) gegeven is, is bij gebrek aan data voor de individuele stof, aangenomen dat de toxische effecten alleen veroorzaakt worden door 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on. Wanneer de percentages van beide a.s. zijn gegeven, is aangenomen dat beide a.s. evenveel bijdragen aan het toxische effect. (Overigens blijkt uit de studiegegevens op de OPP Pesticide Ecotoxicity niet duidelijk welk percentage bij welke a.s. hoort, maar op CTB site is voor Acticide 14 een verhouding 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on : 2-methyl-2H-isothiazool-3-on gerapporteerd van ca. 3 : 1. Aangenomen is daarom dat het hoogste percentage geldt voor de 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on en het laagste voor 2-methyl-2H-isothiazool-3-on. Dit heeft geen invloed op de berekening van de effectconcentratie.)

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Cyprinodon variegatus</i> (zoutwater)	96 uur	LC50	0,0396	0,36 mg/L (11% a.s. formulering)	ecotox
<i>Cyprinodon variegatus</i> (zoutwater)	96 uur	LC50	0,067	0,48 mg/L (10% 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on en 3,9% 2-methyl-2H-isothiazool-3-on formulering)	OPP Pesticide Ecotoxicity database
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,0425	0,3 mg/L (14,17% a.s. formulering)	ecotox
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,296	2,13 mg/L (13,9% a.s. formulering)	ecotox
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,108	0,96 mg/L (11,2% a.s. formulering)	ecotox
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,0269	0,19 mg/L (14,17% a.s. formulering)	ecotox
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,211	1,52 mg/L (13,9% a.s. formulering)	ecotox
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,0283	0,253 mg/L (11,2% a.s. formulering)	ecotox
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	14 d	LC50	0,0113	0,08 mg/L (14,17% a.s. formulering)	OPP Pesticide Ecotoxicity database
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	14 d	NOEC	0,00709	0,05 mg/L (14,17% a.s. formulering)	OPP Pesticide Ecotoxicity database
<i>Pimephales promelas</i>	36 d	NOEC	0,00283	0,02 (14,17% a.s. formulering)	OPP Pesticide Ecotoxicity database
kreeftachtigen					
<i>Acartia tonsa</i> (zoutwater)	48 uur	LC50	0,062	0,56 mg/L (10% 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on en 1% 2-methyl-2H-isothiazool-3-on formulering)	ecotox
<i>Americamysis bahia</i> (zoutwater)	96 uur	LC50	0,016	0,33 (3,9% 5-chloor-2-methyl-2H-isothiazool-3-on en 1% 2-methyl-2H-isothiazool-3-on formulering)	OPP Pesticide Ecotoxicity database
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	48 uur	EC50	0,195	13 mg/L (1,5% a.s. formulering)	ecotox
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	0,146	1,3 mg/L (11,2% a.s. formulering)	ecotox
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	0,1168	0,84 mg/L (13,9% a.s. formulering)	ecotox
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	0,0255	0,18 mg/L (14,17% a.s. formulering)	ecotox
<i>Penaeus duorarum</i> (zoutwater)	96 uur	LC50	0,317	2,3 mg/L (13,8% a.s. formulering)	ecotox
<i>Uca pugilator</i> (zoutwater)	96 uur	LC50	8,14	59 mg/L (13,8% a.s. formulering)	ecotox
<i>Daphnia magna</i>	21 d	NOEC	0,0142	0,1 mg/L (14,17% a.s. formulering)	OPP Pesticide Ecotoxicity database
algen					
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	96 uur	EC50	0,00862	0,062 mg/L (13,9% a.s. formulering)	ecotox
<i>Selenastrum capricornutum</i>	96 uur	EC50	0,0030	0,022 mg/L (13,84% a.s. formulering)	e-toxBase

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	72 uur	NOEC	0,0098	0,07 mg/L (14% a.s. formulering)	ecotox
planten					
<i>Lemna gibba</i>	14 d	EC50	0,626	4,5 mg/L (13,9% a.s. formulering)	OPP Pesticide Ecotoxicity database
<i>Lemna gibba</i>	14 d	NOEC	0,348	2,5 mg/L (13,9% a.s. formulering)	OPP Pesticide Ecotoxicity database
mollusken					
<i>Crassostrea virginica</i> (zoutwater)	48 uur	EC50	0,00389	0,028 mg/L (13,9% a.s. formulering)	ecotox
<i>Crassostrea virginica</i> (zoutwater)	96 uur	EC50	0,0057	0,041 mg/L (3,9% 5-chloor-2- methyl-2H-isothiazool-3-on en 10% 2-methyl-2H-isothiazool-3- on formulering)	OPP Pesticide Ecotoxicity database

Dikgedrukte 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)

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee, wel beoordeling van Kathon WT (1: 3 mengsel van methylisothiazolinon en 5-chloormethylisothiazolinon) door RIVM (1995)	RIVM (1995) leidde geen overall-NOAEL af vanwege onvolledige data vwb teratogeniteit en reprotoxiciteit.
2	US-EPA (1998) heeft dezelfde dataset beoordeeld voor Kathon WT als biocide, leidde echter ook geen norm af vanwege uitsluitend non-food gebruik. SCCNFP (1986) heeft identiek mengsel beoordeeld ivm gebruik in cosmetica.	
3	-	
4	Nee	
5	Oraal: Kathon WT, rat 2 jaar via drinkwater, 2,2; 6,6 en 17,2 mg/kg lg/dag, NOAEL 2 mg/kg lg/dag (kritisch effect: locale irritatie in maagwand) Inhalatie: Kathon WT: rat 90 dagen, 0,027; 0,227; 0,886 mg/m ³ (aerosol), 6 uur/dag, 5 dagen/week, NOAEC 0,027 mg/m ³ (kritisch effect: locale irritatie/rhinitis in neusweefsel)	NOAEL als 5-chloormethylisothiazolinon: 1.5 mg/kg lg/dag (extra conservatisme bij gebruik van deze waarde door gelijktijdige aanwezigheid methylisothiazolinon naar verwachting beperkt) NOAEC als 5-chloormethylisothiazolinon: 0.021 mg/m ³ (extra conservatisme bij gebruik van deze waarde door gelijktijdige aanwezigheid methylisothiazolinon naar verwachting beperkt)
6	Kathon WT: teratogeniteit rat en konijn (studie in konijn echter als onvoldoende geëvalueerd), reproductie beperkt tot 1-generatie-experiment aan het einde van 90-dagen drinkwaterexperiment rat. Conclusie RIVM: onvoldoende data voor Kathon WT 5-Chloormethylisothiazolinon: geen data	
7	Kathon WT: ja, in zowel chronische drinkwaterproef rat als in semichronische experimenten in rat en hond. 5-Chloormethylisothiazolinon: geen data	
8	Oraal: chronische NOAEL 1,5 mg/kg lg/dag Inhalatie: semichronische NOAEC 0,021 mg/m ³	
9	-	
10	Oraal: 10 interspecies, 10 intraspecies, beperkte extra factor van 3 voor onvolledige data repro/ontwikkelingstoxiciteit Inhalatie: 10 intraspecies, 3 interspecies i.v.m aard effect, tijdsduur proef 1 i.v.m. aard effect, beperkte extra factor van 3 voor onvolledige data repro/ontwikkelingstoxiciteit	
11	Nee	
12	Oraal: 5 µg/kg lg/dag Inhalatie: 0,2 µg/m ³ (afgeronde waarde)	
13	Ja	
14	Nee	
15	-	
16	-	
17	Kathon WT: genotoxiciteit in vitro positief (Ames-test, zoogdiercel in vitro genmutaties), in vivo inconclusive. 5-Chloormethylisothiazolinon: Ames-test positief, geen verdere studies beschikbaar (RIVM 1995)	
18	ad hoc MTR _{humaan} oraal van 5 µg/kg lg/dag en inhalatoir 0,2 µg/m ³ (TCA) gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	ja	
3	nee ad hoc MTR _{eco} water = 0,28 µg/L	Op basis van een 36-d NOEC van 2,83 µg/L voor <i>Pimephales promelas</i> . (AF 10)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,28 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,28 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,28 µg/L x 0,844 / 1,7 = 0,14 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,14 x 3,33 = 0,46 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 0,844 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 0,46 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,28 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,28 µg/L x 1,44 / 1,15 = 0,35 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 0,35 x 2,71 = 0,95 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 1,44 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 0,95 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 2,88 mg/L PEC _{lucht} = 8.88E-07 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 0,0245 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,0493 mg/L PEC _{sediment} = 3,32 mg/kg wwt	Volgens EUSES 2.0.3.
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

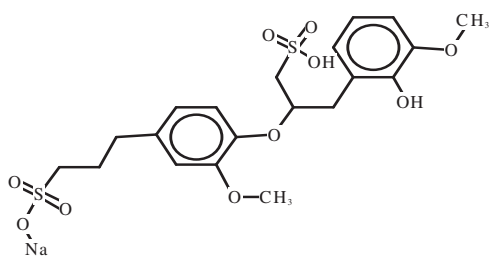
Output Humanex-resultaten:

	TDI (µg/kg bw/d)	TCA (µg/m ³)	Corrected for TCA:			NO
5-chloro-2-methyl-2h-isothiazolin-3-one	5,00E+00	2,00E-01				
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (µg/m ³)	Soil (µg/kg dwt)	Sediment (µg/kg dwt)	
MPC eco	2,8E-01	2,8E-01		4,6E-01	9,5E-01	
MPC human	1,7E+02	2,9E+00	5,3E-05	4,8E+00	6,0E+02	
Ratio MPC eco/MPC human	1,6E-03	9,6E-02		9,7E-02	1,6E-03	
Critical MPC *	2,8E-01	2,8E-01	5,3E-05	4,6E-01	9,5E-01	
% importance of total exposure	98,820	1,162	0,018	0,000		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	97,717					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Natrium lignosulfonaat	
CAS-NUMMER	8061-51-6	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,54 µg/L
	lucht	0,11 µg/m ³
	bodem	0,38 µg/kg dwt
	sediment	1,3 µg/kg dwt
DATUM	29-05-2007	

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Natrium lignosulfonaat
CAS-nummer	8061-51-6
Stofgroep	phenols-acid
Synoniemen	Sodium base spent sulfite liquor Sodium lignin sulfonate Sodium lignosulfite Sodium lignosulfonic acid Sulfonated lignin sodium salt Lignosulfonic acid, sodium salt Polignate Sodium Sodium ligninsulfonate Sodium lignosulfonate Sodium polignate
Molecuulformule	C ₂₀ H ₂₅ O ₁₀ S ₂ Na
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	512,53	epiwin
Smeltpunt (°C)	349,84 (geschat)	epiwin
Kookpunt (°C)	896,54 (geschat)	epiwin
Dampdruk (Pa)	7,9E-25 (geschat)	epiwin
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1052 (geschat uit log Kow)	epiwin (log Kow uit BioLoom Clog P gebruikt)
	889,36 (geschat uit fragmenten)	
Log Kow	-0,29 (geschat) -3,45 (geschat)	BioLoom ClogP epiwin
Log Koc	0.869 (geschat) 0,717 (geschat)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen) Sabljić et al. 1995 (QSAR voor fenolen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	4.55E-25 (geschat)	H = dampdruk*molecuulgewicht/oplosbaarheid in water
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	MITI linear: -0,061 MITI non-linear: 0,0042 Biowin 1: 1,3516 Biowin 2: 1,000 Biowin 3: 2,2326 inherently biodegradable, fulfilling criteria	

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	Waarde	ref.
Overall beschikbare dataset	Zeer beperkte data (HSDB). Beoordeling en literatuursch door US-EPA (2005) ivm 'Exemption of a requirement of a tolerance' voor gebruik lignosulfonaten als inerte ingrediënten in pesticide-formuleringen. Voorts: Lignosulfonzuur is in onderzoek als mogelijk vaginaal contracepticum, blokkering van oöcyt-spermatozoïde interactie aangetoond in vitro (apen).	US-EPA 2005 ¹ , Tollner et al. 2002 ²
Carcinogeniteit	Geen data	
Mutageniteit	Geen data	
Kritische studie oraal	Enige studie van langere duur: rat 16 weken NOAEL 2,42 g/kg lg/dag (LOAEL 10 g/kg lg/dag)	US-EPA 2005 ¹
Kritische studie inhalatie	Geen data beschikbaar (stof niet vluchtig)	

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

1. US-EPA (2005) Lignosulfonates; Exemptions from the Requirement of a Tolerance. Federal Register: February 16, 2005 (Volume 70, Number 31) [Proposed Rules] [Page 7912-7921]. At: <http://www.epa.gov/fedrgstr/EPA-PEST/2005/February/Day-16/p2986.htm>. Retrieved on 1 May 2007.

2. Tollner, TL et al. (2002) Lignosulfonic acid blocks in vitro fertilization of macaque oocytes when sperm are treated either before or after capacitation. *Journal of Andrology*, Vol. 23, No. 6, November/December 2002.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Leuciscus idus</i>	48 uur	LC50	1400 - 2000		ecotox
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	48 uur	LC50	7300		ecotox
kreeftachtigen					
algen					
weekdieren					
<i>Crassostrea gigas</i> (zoutwater)	48 uur	EC50	5,4	ontwikkeling	ecotox
<i>Crassostrea gigas</i> (zoutwater)	48 uur	LC50	> 40		ecotox

Dikgedrukte 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)

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	HSDB onvoldoende data, US-EPA (2005) heeft literatuur-review uitgevoerd voor lignosulfonaten	Tollner et al. (2002): lignosulfonzuur blokkeert in vitro fertilisatie van oöcyten en spermatozoïden van Makaken, stof mogelijk te gebruiken als vaginaal anticepticum (locale applicatie)
4	Nee	
5	Nee	
6	Nee	
7	Ja	
8	NOAEL rat 16 weken 2,42 g/kg lg/dag (LOAEL 10 g/kg lg/dag (US-EPA 2005)	Enige studie van langere duur, conclusie US-EPA: lignosulfonaten weinig toxisch voor zoogdieren
9	-	
10	10000 (10 voor interspecies extrapolatie, 10 intraspecies, 10 voor beperkte duur experiment en zeer beperkte database, 10 voor ontbreken repro/ontwikkelingsdata)	
11	Ja	
12	0,24 mg/kg lg/dag (afgerond)	
13	Nee	
14	Nee	
15	-	
16	-	
17	Geen data	
18	ad hoc MTR _{humaan} van 240 µg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	ja	
3	nee ad hoc MTR = 0,54 µg/L	Op basis van een 48-u EC50 van 5,4 mg/L voor <i>Crassostrea gigas</i> . (AF 10000)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,54 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR = 0,54 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,54 µg/L x 0,356 / 1,7 = 0,11 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,11 x 3,33 = 0,38 µg/kg dwt	K _p _{bodem/water} = 0,356 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 0,38 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR = 0,54 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,54 µg/L x 1,03 / 1,15 = 0,48 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 0,48 x 2,71 = 1,3 µg/kg dwt	K _p _{susp/water} = 1,03 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 1,3 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,01 mg/L PEC _{lucht} = 1,29E-05 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 1,88E-03 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 8,97E-03 mg/L PEC _{sediment} = 0,8 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:

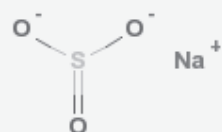
Natrium lignosulfonaat	TDI (µg/kg bw/d) 2,40E+02	TCA (µg/m3) N.A.	Corrected for TCA:	NO	
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (µg/m3)	Soil (µg/kg dwt)	Sediment (µg/kg dwt)
MPC eco	5,4E-01	5,4E-01		3,8E-01	1,3E+00
MPC human	8,3E+03	7,4E+01	1,1E-01	5,1E+01	2,0E+04
Ratio MPC eco/MPC human	6,5E-05	7,3E-03		7,5E-03	6,4E-05
Critical MPC *	5,4E-01	5,4E-01	1,1E-01	3,8E-01	1,3E+00
% importance of total exposure	99,564	0,423	0,013	0,000	
Dominant route of exposure	drw				
% of dominant route	98,793				

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Natriumbisulfiet	
CAS-NUMMER	7631-90-5	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	20 µg/L
	lucht	n.v.t.*
	bodem	8,7 µg/kg dwt
	sediment	43 µg/kg dwt
DATUM	29-05-2007	

* Voor zouten is lucht geen relevante blootstellingsroute.

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Natriumbisulfiet
CAS-nummer	7631-90-5
Stofgroep	Sulfieten
Synoniemen	Monosodium sulfite, Sodium acid sulfite, SODIUM BISULFITE, Sodium metabisulfite, Sodium sulfite, Sodium sulhydrate, Sulfurous acid, monosodium salt
Molecuulformule	NaHSO ₃
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	104,06	www.chemindustry.com
Smeltpunt (°C)	349,84 (geschat)	epiwin
Kookpunt (°C)	816,40 (geschat)	epiwin
Dampdruk (Pa)	3,76E-22 (geschat)	epiwin
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1E+06 (geschat uit log Kow)	epiwin (log Kow van BioLoom ClogP gebruikt)
	1,8471E+05 (geschat uit fragmenten)	epiwin
Log Kow	-2,17 (geschat) -7,51 (geschat)	BioLoom ClogP epiwin
Log Koc	-0,108 (geschat)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coëfficiënt (Pa·m ³ /mol)	2,12E-25 (geschat)	H = dampdruk*molecuulgewicht/oplosbaarheid in water
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	Nvt (anorganische verbinding) (ready biodegradable ingevoerd in EUSES)	

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Bestaande beoordeling (ADI-afleiding ivm gebruik als voedseladditief: SCF (1994) Opinion on sulphurdioxide and other sulphiting agents used as food preservatives, expressed on 25 february 1994).

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Gambusia affinis</i>	96 uur	LC50	240		ecotox
<i>Poecilia latipinna</i>	48 uur	LC50	220		ecotox
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	LC50	119		ecotox
algen					
mollusken					
<i>Lymnaea</i> sp.	96 uur	LC50	59		ecotox
wormen					
<i>Dugesia</i> sp.	96 uur	LC50	179		ecotox

Dikgedrukte 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)

Classificatie: Xn; R22 - R31

Xn: Schadelijk.

R22: Schadelijk bij opname door de mond.

R31: Vormt vergiftige gassen in contact met zuren.

S2: Buiten bereik van kinderen bewaren.

S25: Aanraking met de ogen vermijden.

S46: In geval van inslikken onmiddellijk een arts raadplegen en verpakking of etiket tonen.

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee, wel SCF (1994) ADI 0,7 mg/kg lg (als sulfiet)	
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 700 µg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	ja	
3	nee ad hoc MTR = 20 µg/L	Op basis van een 96-u LC50 van 59 mg/L voor <i>Lymnaea</i> sp. (AF 3000)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 20 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR = 20 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x $K_{pbodem/water} \times 1000/1700$ (RHO_{bodem}) = 20 µg/L x 0,223 / 1,7 = 2,6 µg/kg dwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 2,6 x 3,33 = 8,7 µg/kg dwt	$K_{pbodem/water} = 0,223 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 8,7 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR = 20 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 20 µg/L x 0,919 / 1,15 = 16 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 16 x 2,71 = 43 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 0,919 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 43 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,123 mg/L PEC _{lucht} = 8,76E-14 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 1,28E-03 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 9,72E-03 mg/L PEC _{sediment} = 0,0833 mg/kg wwt	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

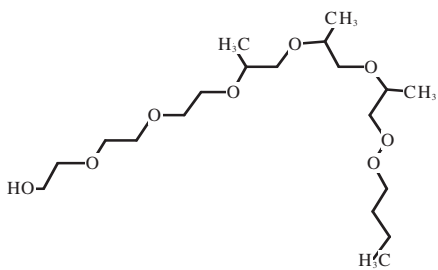
Output Humanex-resultaten:

	TDI (µg/kg bw/d)	TCA (µg/m3)	Corrected for TCA:			NO
Natriumbisulfiet	7,00E+02	N.A.				
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (µg/m3)	Soil (µg/kg dw)	Sediment (µg/kg dw)	
MPC eco	2,0E+01	2,0E+01		8,7E+00	4,3E+01	
MPC human	2,4E+04	1,9E+03	1,7E-08	8,2E+02	5,0E+04	
Ratio MPC eco/MPC human	8,4E-04	1,1E-02		1,1E-02	8,6E-04	
Critical MPC *	2,0E+01	2,0E+01	1,7E-08	8,7E+00	4,3E+01	
% importance of total exposure	98,572	1,428	0,000	0,000		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	97,810					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Polyethyleen-polypropyleen glycol
CAS-NUMMER		9038-95-3
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	oppervlaktewater: 8,2 µg/L grondwater: 0,27 µg/L
	lucht	5,4E-10 µg/m ³
	bodem	1,2 µg/kg dwt
	sediment	58 µg/kg dwt
DATUM		29-05-2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Polyethyleen-polypropyleen glycol
CAS-nummer	9038-95-3
Stofgroep	peroxy acids / surfactants-nonionic
Synoniemen	Oxirane,methyl,polymer and oxibane, butyl ether, Peg/ppg butyl ether, Polyethylene-polypropylene glycol, monobutyl ether,
Molecuulformule	C19H40O8
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	396,53	epiwin
Smeltpunt (°C)	158,87 (geschat)	epiwin
Kookpunt (°C)	429,66 (geschat)	epiwin
Dampdruk (Pa)	1,40E-07 (geschat)	epiwin
Oplosbaarheid in water (mg/L)	447,9 (geschat uit log Kow)	epiwin (BioLoom ClogP gebruikt)
	32124 (geschat uit fragmenten)	epiwin
Log Kow	1,60 (geschat)	BioLoom ClogP
Log Koc	1,85 (geschat)	Sabljić et al. 1995 (QSAR voor niet hydrofobe stoffen)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	1,73E-09 (geschat)	H = dampdruk*molecuulgewicht/oplosbaarheid in water
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	MITI linear: 0,1436 MITI non-linear: 0,0287 Biowin 1: -0,9109 Biowin 2: 0,0000 Biowin 3: 2,7379 persistent	epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	Waarde	ref.
Overall beschikbare dataset	Uitsluitend inhalatiedata (aerosol), geen HSDB beschikbaar	
Carcinogeniteit	Niet beschikbaar	
Mutageniteit	Niet beschikbaar	
Kritische studie oraal	Niet beschikbaar	
Kritische studie inhalatie	Rat, 13 weken aerosol 0,3; 1,1 en 5,2 mg/m ³ 6 uur/dag, 5 dagen/week 13 weken dosis-gerelateerde multifocale pulmonaire fibrose bij alle concentraties (LOAEC 0,3 mg/m ³), systemische effecten: alleen verlaagd lichaamsgewicht bij 5,2 mg/m ³ (NOAEC 1,1 mg/m ³)	Klonne et al. 1988 ¹

1. Klonne DR ; Dodd DE ; Losco PE ; Troup CM ; Tyle TR (1988) Pulmonary Fibrosis Produced in F-344 Rats by Subchronic Inhalation of Aerosols of a 4000 Molecular Weight Ethylene Oxideropylene Oxide Polymer *Fundamental and Applied Toxicology*, Vol. 10, No. 4, p.p. 682-690.

4.2 Ecotoxiciteit

Geen experimentele gegevens beschikbaar. QSAR-resultaten van Ecosar zijn hieronder gegeven. De Ecosar QSAR's zijn niet bruikbaar voor de normafleiding (zie voetnoot onder onderstaande tabel). Read-across is niet mogelijk.

Resultaten Ecosar (log Kow = 1,60, wateroplosbaarheid = 32124 mg/L en smeltpunt = 158,87°C gebruikt)

							Toepasselijkheidsdomein		
Ecosar klasse	soort	duur (uur)	parameter	waarde (mg/L)	N	R ²	log P	MW	Bruikbaar? ¹
Vissen									
peroxy acids	vissen	96 uur	LC50	0,571	3	0,84	< 5,0	< 1000	nee
Kreeftachtigen									
peroxy acids	<i>Daphnia</i>	48 uur	LC50	22,870	3	0,99	< 5,0	< 1000	nee
Algen									

¹QSAR bruikbaar als N ≥ 5, R² ≥ 0,7, stof ligt binnen het domein van de QSAR wat betreft molekulgewicht en log Kow.

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)

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Geen HSDB beschikbaar	
4	Nee	
5	Nee, slechts 13 weken inhalatie	
6	Nee	
7	Ja, 13-weeken inhalatie, 0, 0,3; 1,1, en 5,2 mg/m ³ (aerosol), 6 uur/dag, 5 dagen/week, pulmonaire fibrose LOAEC 0,3 mg/m ³ , systemische NOAEC 1,1 mg/m ³	Systemische NOAEC omgerekend naar lichaamsdosis: 792 µg/kg lg/dag (mbv ademminuutvolume rat van 220 ml/kg lg)
8	Ja oraal: 792 µg/kg lg/dag (afgeleid uit 13 weken inhalatiestudie)	
9	-	
10	10 voor extrapolatie proefdier naar mens, 10 voor gevoelige groepen, 3 voor beperkte duur, 10 voor ontbreken repro/ontwikkelingsdata	
11	Ja	
12	0,26 µg/kg lg/dag	
13	Nee	
14	-	
15	Nee	
16	-	
17	Geen data	
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,26 µg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	TCA wordt niet berekend omdat stof niet vluchtig is.

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht van wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment wordt gebaseerd op humane tox.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 2,87 mg/L PEC _{lucht} = 1,88E-10 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 0,132 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,0958 mg/L PEC _{sediment} = 6,63 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 (µg/kg bw/d)	TCA (µg/m ³)	Corrected for TCA:			NO
Polyethyleen-polypropyleen glycol	2,60E-01	N.A.				
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (µg/m ³)	Soil (µg/kg dw)	Sediment (µg/kg dw)	
MPC eco						
MPC human	8,2E+00	2,7E-01	5,4E-10	1,2E+00	5,8E+01	
Ratio MPC eco/MPC human						
Critical MPC *	8,2E+00	2,7E-01	5,4E-10	1,2E+00	5,8E+01	
% importance of total exposure	92,535	7,464	0,000	0,001		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	90,221					

Bijlage D Rapportageformulier neodecaanzuur

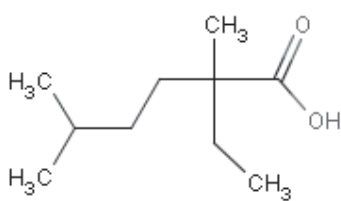
Opdrachtgegevens

Projectnummer	M/601782/07/
Dossiernummer	11129
Opdrachtgever	RIZA
Datum opdracht	29-03-2007
Datum rapportage	29-05-2007
Opdracht	Afleiden van indicatieve milieukwaliteitsnormen voor neodecaanzuur

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Neodecaanzuur	
CAS-NUMMER	26896-20-8	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	4,2 µg/L
	lucht	1,4 µg/m ³
	bodem	3,6E+02 µg/kg dwt
	sediment	3,7E+02 µg/kg dwt
DATUM	29-05-2007	

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Neodecaanzuur
CAS-nummer	26896-20-8
Stofgroep	neutral organics-acid
Synoniemen	Neodecanoic acid; 2,2,3,5-Tetramethylhexanoic acid; 2,4-Dimethyl-2-isopropylpentanoic acid; 2,5-Dimethyl-2-ethylhexanoic acid; 2-ethyl-2,5-dimethyl-hexanoic acid
Molecuulformule	C10H20O2
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	172,265	pubchem.ncbi.nlm.nih.gov
Smeltpunt (°C)	57,13 (geschat)	epiwin
Kookpunt (°C)	262,37 (geschat)	epiwin
Dampdruk (Pa)	0,94 (geschat)	epiwin
Oplosbaarheid in water (mg/L)	88.1 (geschat uit log Kow) 275,39 (geschat uit fragmenten)	epiwin (BioLoom ClogP gebruikt) epiwin
Log Kow	3,78 (geschat) 3,9 (geschat) 3,5 (geschat)	BioLoom ClogP epiwin XlogP via nlm.nih
Log Koc	3,16 (geschat)	Sabljeic et al. 1995 (QSAR voor hydrofobe stoffen) (Keuze voor QSAR is besproken met expert.)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	0,588 (geschat)	H = dampdruk*molecuulgewicht/oplosbaarheid in water
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	MITI linear: 0,6967 MITI non-linear: 0,7844 Biowin 1: 0,5543 Biowin 2: 0,3734 Biowin 3: 2,9710 readily biodegradable	epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Eigenschap	Waarde	ref.
Overall beschikbare dataset	Geen HSDB, wel IUCLID-file	IUCLID 2000 ¹
Carcinogeniteit	Geen data	IUCLID 2000 ¹
Mutageniteit	Ames-test, cytogenetische test in humane lymfocyten	IUCLID 2000 ¹ , Canter et al. 1986 ²
Kritische studie oraal	Subchronisch rat en hond beschikbaar, NOAEL rat 500 ppm in voer (25 mg/kg lg/dag), bij LOAEL 1500 ppm hyperplasie in schildklier, nierveranderingen (ongespecificeerd), NOAEL hond 30 mg/kg lg/dag (LOAEL 94,8 mg/kg lg/dag), studies uit 1966	IUCLID 2000 ¹
Kritische studie inhalatie	Geen data beschikbaar (stof niet vluchtig)	

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

1. IUCLID (2000) Data-file Neodecanoic acid. 18 february 2000

2. Canter et al. (1986) Comparative Mutagenicity of Aliphatic Epoxides in Salmonella. *Mutation Research*, **172**, No. 2, p.p 105-138

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Carassius auratus</i>	96 uur	LC50	0,78	2,6 mg/L (30% a.s. formulering)	IUCLID
<i>Cyprinodon variegatus</i> (mariene soort)	96 uur	LC50	181	a.s.	IUCLID
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	1,47	4,9 mg/L (30% a.s. formulering)	IUCLID
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	60	a.s.	IUCLID
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	47,11	a.s.	IUCLID
<i>Acartia tonsa</i> (mariene soort)	96 uur	LC50	25 ¹	a.s.	IUCLID
algen					

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

¹ Dit eindpunt heeft de voorkeur omdat de studie uitgevoerd is met de actieve stof (a.s.) i.p.v. met de formulering.

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)

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Geen HSDB, wel IUCLID	
4	Nee	
5	Nee	
6	Nee	
7	Drie generatie rat NOAEL >1500 ppm in voer	
8	NOAEL semichronisch rat 500 ppm in voer (25 mg/kg lg/dag)	Studie van oude datum, mogelijk weinig betrouwbaar
9	-	
10	10 voor extrapolatie dier naar mens, 10 voor gevoelige groepen, 3 voor beperkte duur experiment	
11	-	
12	80 µg/kg lg/dag (afgeronde waarde)	
13	Nee	
14	-	
15	-	
16	-	
17	Genotoxiciteit in vitro negatief	
18	ad hoc MTR _{humaan} van 80 µg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	ja	
3	ja ad hoc MTR _{eco} water = 4,2 µg/L	AFdoorvergiftiging = 2 Op basis van een 96-u LC50 van 25 mg/L voor <i>Acartia tonsa</i> (AF = 3000 * 2 = 6000)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 4,2 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 4,2 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 4,2 µg/L x 43,8 / 1,7 = 108 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 108 x 3,33 = 360 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 43,8 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 3,6E+02 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 4,2 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 4,2 µg/L x 37,2 / 1,15 = 136 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 136 x 2,71 = 368 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 37,2 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 3,7E+02 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,0777 mg/L PEC _{lucht} = 2,31E-04 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 0,1 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 3,9E-03 mg/L PEC _{sediment} = 2,54 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 (µg/kg bw/d)	TCA (µg/m3)	Corrected for TCA:			NO
Neodecaanzuur	8,00E+01	N.A.				
	Surface water (µg/L)	Groundwater (µg/L)	Air (µg/m3)	Soil (µg/kg dwt)	Sediment (µg/kg dwt)	
MPC eco	4,2E+00	4,2E+00		3,6E+02	3,7E+02	
MPC human	4,7E+02	2,4E+01	1,4E+00	2,0E+03	4,8E+04	
Ratio MPC eco/MPC human	8,9E-03	1,8E-01		1,8E-01	7,8E-03	
Critical MPC *	4,2E+00	4,2E+00	1,4E+00	3,6E+02	3,7E+02	
% importance of total exposure	97,380	0,399	2,215	0,006		
Dominant route of exposure	shower					
% of dominant route	50,064					

Bijlage E Rapportageformulier 15

bestrijdingsmiddelen

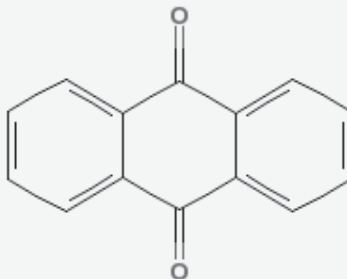
Opdrachtgegevens

Projectnummer	M/601782/07/
Dossiernummer	11300
Opdrachtgever	RIZA
Datum opdracht	20-06-2007
Datum rapportage	14-09-2007
Opdracht	Afleiden van indicatieve milieukwaliteitsnormen voor antrachinon, boscalid, clomazone, dimethirimol, fenamidone, fipronil, flufenacet, flutriafol, metconazool, monalide, oxadixyl, picoxystrobin, piperonyl-butoxide, succimer en tricyclazool

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Antrachinon
CAS-NUMMER		84-65-1
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,075 µg/L
	lucht	0,0462 µg/m ³
	bodem	12,8 µg/kg dwt
	sediment	12,9 µg/kg dwt
DATUM		29 augustus 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Antrachinon
CAS-nummer	84-65-1
Stofgroep	quinonen, type: bird-repellent
Synoniemen	9,10-Anthracenedione, 9,10-Anthraquinone, 9,10-Dioxoanthracene, anthra-9,10-quinone, Anthracene, 9,10-dihydro-9,10-dioxo-, Anthradione, Anthrapel, ANTHRAQUINONE, Anthraquinone [BSI:ISO], Bis-alkylamino anthraquinone, Corbit, Hoelite, Morkit,
Molecuulformule	C ₁₄ H ₈ O ₂
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	208,22	SRC PhysProp Database
Smeltpunt (°C)	286	SRC PhysProp Database
Kookpunt (°C)	377	SRC PhysProp Database
Dampdruk (Pa)	1,16E-7 mm Hg = 1,55E-5 Pa	SRC PhysProp Database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1,35 mg/l	SRC PhysProp Database
Log Kow	3,39	SRC PhysProp Database
Log Koc	3,44-4,24 2,70 3,46	HSDB (toxnet.nlm.nih.gov) QSAR-hydr. stoffen gemiddelde van 3
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	2,35E-8 atm·m ³ /mole(berekend uit opl.heid en dampdruk) = 0,0024 Pa·m³/mol	HSDB (toxnet.nlm.nih.gov)
pKa	7,4	SRC PhysProp Database

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	inherently biodegradable fulfilling criteria ready biodegradable (MITI-I (OECD TG 301C)) BST (biodegrades sometimes); BSA (biodegrades slow with acclimation) en BFA (biodegrades fast with acclimation), allen met activated sludge MITI linear: 0,39 MITI non-linear : 0,2979 Biowin 1: 0,66 Biowin 2: 0.298 Biowin 3: 2,6941	CERI BIODEG database Epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Stof niet beoordeeld door internationale instanties. HSDB-file. IUCLID-file. Orale suchronische en chronische studie NTP in rat en muis.	1,2,3
Carcinogeniteit	Orale NTP-studie rat en muis	2
Mutageniteit	Bacteriële testen, in vivo micronucleustest in beenmerg en in bloed	
Kritische studie oraal	Chronische orale NTP-studie LOAEL 25 mg/kg lg/dag, verhoogde niertumoricidenties bij ≥ 25 mg/kg lg/dag, laagste tumorigene dosis in vrouwtjes 25 mg/kg (6/50 versus 0/50 in controle)	2
Kritische studie inhalatie	Rat 4 maanden inhalatie 5-6 uur/dag, Sovjet-Russische studie uit 1971, Betrouwbaarheid studie onzeker	3

Referenties:

1. HSDB-file Anthraquinone
2. NTP (2005) Technical Report no. 494. <http://ntp.niehs.nih.gov/ntpweb/index.cfm?objectid=070AFB30-E3C1-3AF8-65739A2BF09C05A7> Geraadpleegd op 08-08-2007
3. IUCLID data file voor Anthraquinone.

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Tilapia mossambica</i>	48 uur	LC50	14,86		PAN
kreftachtigen					
<i>Ameriamysis bahia</i>	24-48 uur	LC50	0,45		PAN
algen					
Mollusken					
Wormen					

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja	
4	Nee	
5	Ja	
6	Nee	
7	-	
8	Nee	
9	Ja, 25 mg/kg lg/dag (voor niet carcinogene effecten uit chronische carcinogeniteitsstudie in ratten en muizen (NTP))	
10	10 voor gebruik LOAEL 10 extrapolatie proefdier naar mens 10 voor gevoelige groepen	
11	ja	
12	0,025 mg/kg lg/dag	
13	Ja	
14	Ja	
15	Ja, 0,02 mg/kg lg/dag (chronische carcinogeniteitsstudie in ratten en muizen (NTP))	Genotoxiciteit: resultaat testen deels positief (wijst op mogelijke genotoxiciteit)
16	Ja	Laagste waarde van 0,02 mg/kg lg/dag gekozen, TCA niet nodig vanwege lage vluchtigheid
17		
18	ad hoc orale MTR _{humaan} van 0,02 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	ja Ad hoc MTR = 0,075 µg/l	Op basis van een 24-48 uur LC50 van 0,45 mg/l a.s. voor <i>Ameriamysis bahia</i> (AFwater 3000; Afdv=2)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,075 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,075 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,075 µg/L x 86,7 x 0,59 = 3,836 µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 3,836 x 3,33 = 12,775 µg/kg dwt	K _p _{bodem/water} = 86,7 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 12,8 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,075 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,075 µg/L x 73 x 0,87 = 4,763 µg/kg ww. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 4,763 x 2,71 = 12,908 µg/kg dwt	K _p _{susp/water} = 73 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 12,9 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,227 mg/L PEC _{lucht} = 7E-5 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 12,5 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,224 mg/L PEC _{sediment} = 24,1 mg/kg ww	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

Output Humanex-resultaten:

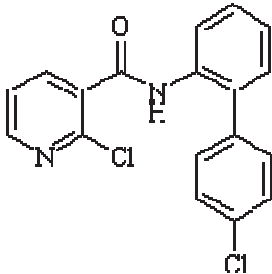
	TDI	TCA	Corrected for TCA:			NO
anthrachinon	(ug/kg bw/d)	(ug/m3)				
	2.00E+01	7.00E+01				
	Surface water	Groundwater	Air	Soil	Sediment	
	(ug/L)	(ug/L)	(ug/m3)	(ug/kg dwt)	(ug/kg dwt)	
MPC eco	7.50E-02	7.50E-02		1.28E+01	1.29E+01	
MPC human	1.50E+02	1.48E+02	4.62E-02	2.70E+04	4.88E+04	
Ratio MPC eco/MPC human	5.01E-04	5.07E-04		4.74E-04	2.64E-04	
Critical MPC *	7.50E-02	7.50E-02	4.62E-02	1.28E+01	1.29E+01	
% importance of total exposure	55.314	38.187	6.184	0.314		
Dominant route of exposure	leaf					
% of dominant route	39.546					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Boscalid/Nicobifen
CAS-NUMMER		188425-85-6
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,55 µg/L
	lucht	9,87E-3 µg/m ³
	bodem	25 µg/kg dwt ¹
	sediment	26 µg/kg dwt
DATUM		29 augustus 2007

¹ er wordt binnenkort een MTR bodem afgeleid

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Boscalid/nicobifen
CAS-nummer	188425-85-6
Stofgroep	carboxamide, fungicide
Synoniemen	3-pyridinecarboxamide,2-chloro-N-(4'-chloro(1,1'-biphenyl)-2-yl) Pyraclostrobin ; carbamic acid, [2-[[[1-(4-chlorophenyl)-1H-pyrazol-3-yl]oxy]methyl]phenyl]methoxy-, methyl ester; pristine fungicide
Molecuulformule	C ₁₈ H ₁₂ Cl ₂ N ₂ O
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	343,21	CTB
Smeltpunt (°C)	143-145; 144	CTB
Kookpunt (°C)	decomposes at 300; 300	CTB
Dampdruk (Pa)	7E-7 Pa	www.cdpr.ca.gov
Oplosbaarheid in water (mg/L)	4,64	www.cdpr.ca.gov
Log Kow	2,96	CTB
Log Koc	2,7 – 3,4 2,56 2,89	Health Canada Regulatory note PMRA-arla (www.hc-sc.gc.ca/prmr-arla) QSAR waarde gemiddelde van 3
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	5,178E-5	CTB
pKa		

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	not biodegradable stable DT50 =402 – 680 days no data MITI linear: -0,1130 MITI non-linear: 0,0023 Biowin 1: 0,2749 Biowin 2: 0,0078 Biowin 3: 1,7591	CTB Health Canada Regulatory note PMRA-arla (www.hc-sc.gc.ca/prmr-arla) biodeg epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Toelatingsbeoordeling als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (exakte samenstelling onderliggend dossier onbekend).	1
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

Referenties:

1. <http://www.herts.ac.uk/aeru/footprint/en/>

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Bluegill sunfish</i>	96 uur	LC50	>4		California Dep.of pesticide regulation publ. report 2003-8
<i>Rainbow trout</i>	96 uur	LC50	2,7		California Dep.of pesticide regulation
<i>Sheepshead minnow</i>	96 uur	LC50	>3,86		California Dep.of pesticide regulation
kreftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	5,33		California Dep.of pesticide regulation
<i>Mysid shrimp</i>	96 uur	LC50	>3,81		California Dep.of pesticide regulation
algen					
Weekdieren					
<i>Oyster</i>	96 uur	EC50	1,66		California Dep.of pesticide regulation

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja, 0.14 mg/kg lg/dag (ADI opgenomen in database herts.ac.uk)	Geen inhalatoire TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0.14 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	nee Ad hoc MTR=0,55µg/l	Op basis van een 96-u EC50 van 1,66 mg/l a.s. voor <i>oester</i> . (Afwater 3000;Afdv=1)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,55 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	Resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,55 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p bodem/water x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,55 µg/L x 23,5 x 0,59 = 7,626 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 7,626 x 3,33 = 25,394 µg/kg dw	K _p bodem/water = 23,5 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 25,4 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,55 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p susp/water x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,55 µg/L x 20,3 x 0,87 = 9,713 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 9,713 x 2,71 = 26,323 µg/kg dw	K _p susp/water = 20,3 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 26,3 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	Resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,76 mg/L PEC _{lucht} = 2,83E-5 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 144 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 10,4 mg/L PEC _{sediment} = 41,9 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

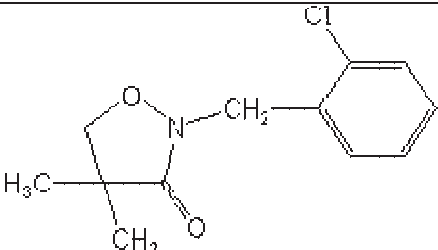
Output Humanex-resultaten:

	TDI	TCA	Corrected for TCA:			NO
Boscalid	(ug/kg bw/d)	(ug/m3)				
	1.40E+02	N.A.				
	Surface water	Groundwater	Air	Soil	Sediment	
	(ug/L)	(ug/L)	(ug/m3)	(ug/kg dwt)	(ug/kg dwt)	
MPC eco	5.50E-01	5.50E-01		2.50E+01	2.60E+01	
MPC human	6.14E+02	3.63E+03	9.87E-03	1.65E+05	4.48E+04	
Ratio MPC eco/MPC human	8.96E-04	1.52E-04		1.52E-04	5.80E-04	
Critical MPC *	5.50E-01	5.50E-01	9.87E-03	2.50E+01	2.60E+01	
% importance of total exposure	4.509	95.216	0.004	0.270		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	74.480					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Clomazone
CAS-NUMMER		81777-89-1
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,56 µg/L
	lucht	2,91E-4 µg/m ³
	bodem	7,1 µg/kg dwt
	sediment	8,1 µg/kg dwt
DATUM		29 augustus 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Clomazone
CAS-nummer	81777-89-1
Stofgroep	unclassified, herbicide
Synoniemen	2-(2-chlorobenzyl)-4,4-dimethyl-1,2-oxazolidin-3-one , 2-(2-Chlorophenyl)methyl-4,4-dimethyl-3-isoxazolidinone , Clomazon , Clomazona , Clomazone , Clomazone (ANSI) , Command , Dimethazone , Klomazon
Molecuulformule	C ₁₂ H ₁₄ ClNO ₂
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	239,7	SRC PhysProp Database
Smeltpunt (°C)	25	SRC PhysProp Database
Kookpunt (°C)	275	SRC PhysProp Database
Dampdruk (Pa)	0,000144 mm Hg = 0,019 Pa	SRC PhysProp Database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1100	SRC PhysProp Database
Log Kow	2,50	SRC PhysProp Database
Log Koc	2,32	QSAR niet hydr. stoffen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	4,13E-8 atm·m ³ /mol = 4,2E-3 Pa m ³ /mol	SRC PhysProp Database
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	not biodegradable no data no data MITI linear: 0,07 MITI non-linear: 0,027 Biowin 1: 0,267 Biowin 2: 0,0158 Biowin 3: 2,2507	CERI Biodeg epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Toelatingsbeoordeling als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (exacte samenstelling dossier onbekend). Beoordeling door Duitse overheid.	1
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

Referenties:

1. http://www.umwelt-online.de/recht/gefstoff/g_stoffe/adi.htm

4.2 Ecotoxiciteit

Species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
Vissen					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96 uur	LC50	40,6		PAN
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	34		PAN
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	19		PAN
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	5,2		PAN
<i>Americamysis bahia</i>	96 uur	LC50	0,556		PAN
algen					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	120 uur	EC50	3,5		PAN
Weekdieren					
<i>Crassostrea virginica</i>	96 uur	EC50	5,3		PAN

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Ja, 0,001 mg/kg lg/dag (afgeleid door Duitse overheid in 2003)	TCA (route to route): 0,0035 mg/m ³ /dag
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,001 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	TCA (route to route): 0,0035 mg/m ³ /dag

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	nee Ad hoc MTR = 0,56 µg/l	Op basis van een 96-u LC50 van 0,556 mg/l a.s. voor <i>Americamysis bahia</i> . (AFwater=1000;AFdv=1)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,56 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,56 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,56 µg/L x 6,47 x 0,59 = 2,137 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 2,137 x 3,33 = 7,118 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 6,47 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 7,1 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,56 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,56 µg/L x 6,12 x 0,87 = 2,981 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 2,981 x 2,71 = 8,08 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 6,12 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 8,1 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 17 mg/L PEC _{lucht} = 2,17E-4 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 38 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 9,99 mg/L PEC _{sediment} = 9,92 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

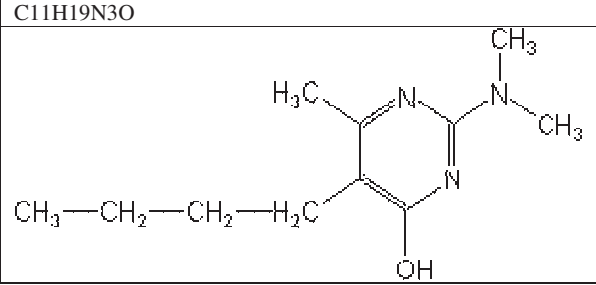
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
clomazone	1.00E+00	3.50E+00				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)	
MPC eco	5.60E-01	5.60E-01		7.10E+00	8.10E+00	
MPC human	2.28E+01	1.34E+01	2.91E-04	1.67E+02	4.09E+01	
Ratio MPC eco/MPC human	2.45E-02	4.17E-02		4.25E-02	1.98E-01	
Critical MPC *	5.60E-01	5.60E-01	2.91E-04	7.10E+00	8.10E+00	
% importance of total exposure	78.841	20.876	0.245	0.038		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	65.476					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Dimethirimol
CAS-NUMMER		5221-53-4
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	8,7 µg/L
	lucht	8,72E-3 µg/m ³
	bodem	92 µg/kg dwt
	sediment	108 µg/kg dwt
DATUM		29 augustus 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Dimethirimol
CAS-nummer	5221-53-4
Stofgroep	pyrimidine, fungicide
Synoniemen	4(1H)-Pyrimidinone, 5-butyl-2-(dimethylamino)-6-methyl-, 4(1H)-Pyrimidinone, 5-butyl-2-(dimethylamino)-6-methyl-, 4-Pyrimidinol, 5-butyl-2-(dimethylamino)-6-methyl-, 4-Pyrimidinol, 5-butyl-2-(dimethylamino)-6-methyl-, 5-Butyl-2-(dimethylamino)-6-methyl-4(1H)pyrimidinone, 5-Butyl-2-(dimethylamino)-6-methyl-4-pyrimidinol, 5-n-Butyl-2-dimethylamino-4-hydroxy-6-methylpyrimidine, Dimethirimol, Milcurb
Molecuulformule	C ₁₁ H ₁₉ N ₃ O
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	209,29	SRC PhysProp Database
Smeltpunt (°C)	102	SRC PhysProp Database
Kookpunt (°C)	-	
Dampdruk (Pa)	1,1E-5 mm Hg = 1,5E-3 Pa	SRC PhysProp Database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1200	SRC PhysProp Database
Log Kow	1,90	SRC PhysProp Database
Log Koc	2,24	ARS pesticide prop database (11 waarden + QSARniet-hydrof. stoffen), is gemiddelde van 12)
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	2,52E-9 atm·m ³ /mol = 2,55E-4 Pa·m ³ /mol	SRC PhysProp Database
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	inherently biodeg. fulfilling criteria no data no data MITI linear: 0,15 MITI non-linear: 0,059 Biowin 1: 0,77 Biowin 2: 0,84 Biowin 3: 2,6869	CERI biodeg epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Toelatingsbeoordeling als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (exacte samenstelling onderliggend dossier onbekend). Beoordeling door Australische overheid.	1
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

Referentie:

1. <http://www.tga.gov.au/docs/pdf/adi.pdf>

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Anguilla japonica</i>	48 uur	LC50	87		PAN
kreeftachtigen					
algen					

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja, 0,2 mg/kg lg/dag (tga.gov Australië, 1972)	Geen inhalatoire TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,2 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	nee Ad hoc MTR = 8,7 µg/l	Op basis van een 96-u LC50 van 87 mg/l a.s. voor <i>Anguilla japonica</i> (AFwater=10000; AFdv=1)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 8,7 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 8,7 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 8,7 µg/L x 5,41 x 0,59 = 27,7695 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 27,7695 x 3,33 = 92,472 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 5,41 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 92 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 8,7 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 8,7 µg/L x 5,25 x 0,87 = 39,737 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 39,737 x 2,71 = 107,687 µg/kg dwt	K _p _{susp/water} = 5,25 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 108 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,462 mg/L PEC _{lucht} = 1E-5 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 9,29 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 2,92 mg/L PEC _{sediment} = 2,24 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

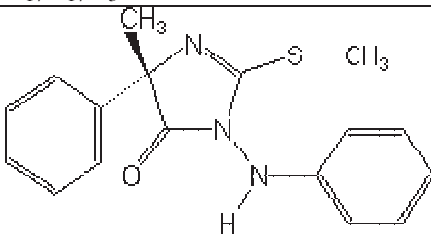
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
dimethirimol	2.00E+02	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco	8.70E+00	8.70E+00		9.20E+01	1.08E+02	
MPC human	4.03E+02	2.55E+03	8.72E-03	2.65E+04	5.99E+03	
Ratio MPC eco/MPC human	2.16E-02	3.42E-03		3.47E-03	1.80E-02	
Critical MPC *	8.70E+00	8.70E+00	8.72E-03	9.20E+01	1.08E+02	
% importance of total exposure	0.260	99.604	0.105	0.030		
Dominant route of exposure	leaf					
% of dominant route	59.793					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fenamidone
CAS-NUMMER		161326-34-7
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	1,25 µg/L
	lucht	3,59E-3 µg/m ³
	bodem	30 µg/kg dwt
	sediment	32 µg/kg dwt
DATUM		29 augustus 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fenamidone
CAS-nummer	161326-34-7
Stofgroep	imidazolen; fungicide
Synoniemen	(S)-1-anilino-4-methyl-2-methylthio-4-phenylimidazolin-5-one , 4H-Imidazol-4-one, 3,5-dihydro-5-methyl-2-(methylthio)-5-phenyl-3-(phenylamino)-, (5S)- , 4H-Imidazol-4-one, 3,5-dihydro-5-methyl-2-(methylthio)-5-phenyl-3-(phenylamino)-, (S)- , FenamidonaÊ , Fenamidone , S-5-Methyl-2-methylthio-5-phenyl-3-phenylamino-3,5-dihydro-4H-imidazol-4-one
Molecuulformule	C ₁₇ H ₁₇ N ₃ OS
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	311	EU document: ec.europa.eu/food/plant/protection/evaluation/newactive/list1-21_en.pdf French proposal for the environmental classification of Fenamidone, ministere de l'aménagement du territoire et de l'environnement
Smeltpunt (°C)	136,8	EU document
Kookpunt (°C)	decomposes	EU document
Dampdruk (Pa)	3,4E-7 Pa	EU document
Oplosbaarheid in water (mg/L)	7,8	EU document
Log Kow	2,8	EU document
Log Koc	2,6	gemiddelde van exp. waarden uit EU doc en QSAR waarde voor niet-hydr. stoffen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	0,5E-5 Pa·m ³ /mol	EU document
pKa	niet-ioniseerbaar	EU document

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	inherently biodegradable, fullfilling criteria DT50 hydrolyse: 42-411 dagen DT50 fotolyse: 25,7 uur no data no data MITI linear: -0,4366 MITI non-linear: 0,0000 Biowin 1: 0,6715 Biowin 2: 0,6134 Biowin 3: 2,3429	EU document eu-document CER1 Biodeg Epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	EU-beoordeling als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (exacte samenstelling onderliggend dossier onbekend).	1
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

Referentie:

1. SANCO (2003) http://ec.europa.eu/food/plant/protection/evaluation/newactive/list1-21_en.pdf

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,74		EU document
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,74		EU document
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	28 dagen	NOEC	0,31		EU document
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	0,19		EU document
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,0125		EU document
algen					
<i>Selenastrum subspicatus</i>	72 uur	EC50	3,84		EU document
Insecten					
<i>Chironomus riparius</i>	24 dagen	NOEC	0,05		EU document

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

Niet geclassificeerd in Annex I van Richtlijn 67/548/EEC (stof beoordeeld door desbetreffende werkgroep).

Enrionmental C&L proposal: N; R50-53; S60-61 (eu-document)

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja, 0,03 mg/kg lg/dag (SANCO, 2003)	Geen inhalatoire TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,03 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	ja	
3	nee Ad hoc MTR = 1,25 µg/l	Op basis van een 21-d NOEC van 0,0125 mg/l a.s. voor <i>Daphnia magna</i> (AFwater=10; AFdv=1)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 1,25 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 1,25 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 1,25 µg/L x 12,1 x 0,59 = 8,9237 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 8,9237 x 3,33 = 29,716 µg/kg dwt	K _p _{bodem/water} = 12,1 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 30 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 1,25 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 1,25 µg/L x 10,9 x 0,87 = 11,8537 µg/kg ww.	K _p _{susp/water} = 10,9 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3.
	Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 11,8537 x 2,71 = 32,1236 µg/kg dw	MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 32 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,344 mg/L PEC _{lucht} = 1,76E-5 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 11 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 1,54 mg/L PEC _{sediment} = 3,82 mg/kg ww	
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

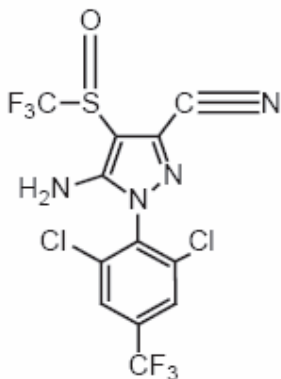
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
fenamidone	3.00E+01	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)	
MPC eco	1.25E+00	1.25E+00		3.00E+01	3.20E+01	
MPC human	7.02E+01	3.14E+02	3.59E-03	7.36E+03	2.39E+03	
Ratio MPC eco/MPC human	1.78E-02	3.98E-03		4.08E-03	1.34E-02	
Critical MPC *	1.25E+00	1.25E+00	3.59E-03	3.00E+01	3.20E+01	
% importance of total exposure	1.761	98.151	0.032	0.056		
Dominant route of exposure	leaf					
% of dominant route	63.546					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fipronil
CAS-NUMMER		120068-37-3
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	7E-5 µg/L
	lucht	4,03E-4 µg/m ³
	bodem	4E-3 µg/kg dwt
	sediment	4E-3 µg/kg dwt
DATUM		29 augustus 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fipronil
CAS-nummer	120068-37-3
Stofgroep	pyrazole; insecticide
Synoniemen	5-Amino-1-(2,6-dichloro-4-(trifluoromethyl)phenyl)-4-(1.R,S)-(trifluoromethyl)sulfinyl)-1H-pyrazole-3-carbonitrile , Fiprinil , Fipronil , Fipronil 1.5% granular soil insecticide
Molecuulformule	C ₁₂ H ₄ Cl ₂ F ₆ N ₄ OS
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	437,2	www.pw.ucr.edu/tetfiles/fipronil.pdf (Conelly, environmental fate of fipronil)
Smeltpunt (°C)	200-201; 200,5	Conelly
Kookpunt (°C)		
Dampdruk (Pa)	3,7E-7	
Oplosbaarheid in water (mg/L)	2,2 (pH=5)-2,4 (pH=9) ; 2,3	Conelly
Log Kow	4,00	Conelly
Log Koc	2,9 3,1 3,0	Conelly QSAR hydr. stoffen gemiddelde
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	3,7E-5	Conelly
pKa	-	Conelly

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	readily biodegradable DT50 water = 14 dagen no data no data MITI linear: -0,5414 MITI non-linear: 0,0000 Biowin 1: -0,793 Biowin 2: 0,0000 Biowin 3: 0,5767	Conelly CERI Biodeg epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	EU-beoordeling als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (exacte samenstelling onderliggend dossier onbekend).	1
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

Referentie:

1. http://www.efsa.europa.eu/EFSA/efsa_locale-1178620753812_1178620764421.htm

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96 uur	LC50	0,13		PAN
<i>Ictalurus punctatus</i>	96 uur	LC50	0,56		PAN
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,045		PAN
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,099		PAN
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	0,082		PAN
<i>Americamysis bahia</i>	96 uur	LC50	0,00014		PAN
algen					
<i>Anabaena flosaquae</i>	5 dagen	EC50	0,17		PAN
<i>Navicula pelliculosa</i>	5 dagen	EC50	0,12		PAN
<i>Selenastrum capricornutum</i>	5 dagen	EC50	0,103		PAN
<i>Skeletonema costatum</i>	5 dagen	EC50	0,14		PAN
Waterplanten					
<i>Lemna gibba</i>	5 dagen	EC50	0,1		PAN
Weekdieren					
<i>Crassostrea virginica</i>	96 uur	EC50	0,77		PAN

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

Classificatie onder Annex I van Richtlijn 67/548/EEC: T; R23/24/25; R48/25- N; R50-53 (30° ATP)..

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	Resultaat	Opmerking
1	Nee	
2	Ja, 0,0002 mg/kg lg/dag (EFSA 2006)	Geen inhalatoire TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,0002 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	ja Ad hoc MTR=0,00007µg/l	Op basis van een 96-u LC50 van 0,00014 mg/l a.s. voor <i>Americamysis bahia</i> (AFwater=1000;AFdv=2)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,00007 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,00007 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,00007 µg/L x 30,2 x 0,59 = 0,001247 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,001247 x 3,33 = 0,00415 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 30,2 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 0,004 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,00007 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,00007 µg/L x 25,9 x 0,87 = 0,001577 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 0,001577 x 2,71 = 0,00427 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 25,9 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 0,004 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,048 mg/L PEC _{lucht} = 2,15E-5 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 1,27 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,0718 mg/L PEC _{sediment} = 1,08 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

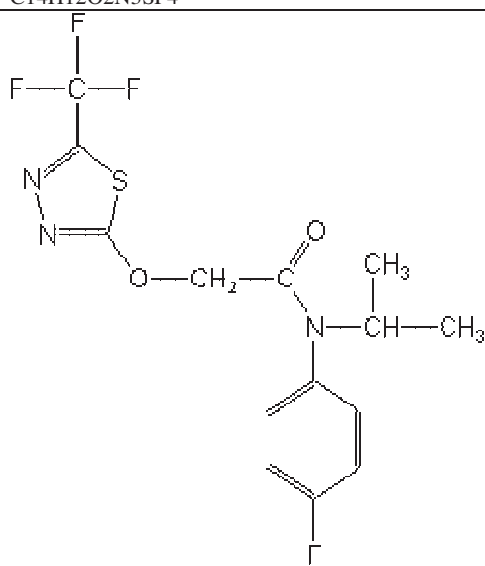
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
Fipronil	2.00E-01	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)	
MPC eco	7.00E-05	7.00E-05		4.00E-03	4.00E-03	
MPC human	8.99E-01	1.34E+00	4.03E-04	7.79E+01	6.20E+01	
Ratio MPC eco/MPC human	7.79E-05	5.21E-05		5.13E-05	6.45E-05	
Critical MPC *	7.00E-05	7.00E-05	4.03E-04	4.00E-03	4.00E-03	
% importance of total exposure	35.390	62.545	1.970	0.095		
Dominant route of exposure	fish					
% of dominant route	35.390					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Flufenacet	
CAS-NUMMER	142459-58-3	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,01 µg/L
	lucht	7,14E-5 µg/m³
	bodem	0,3 µg/kg dwt
	sediment	0,32 µg/kg dwt
DATUM	29 augustus 2007	

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Flufenacet
CAS-nummer	142459-58-3
Stofgroep	anilides, thiodiazolen; herbicide
Synoniemen	N-(4-fluorophenyl)-N-(1-methylethyl)-2-[[5-(trifluoromethyl)-1,2,3-thiadiazol-2-yl]oxy]acetamide; flufenacet; Axiom DF Herbicide; FOE 4053 Technical Herbicide; FOE 5043 DF Herbicide; fluthiamide, thiafluamide)
Molecuulformule	C ₁₄ H ₁₂ O ₂ N ₃ SF ₄
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	362	EPA pesticide fact sheet
Smeltpunt (°C)	75,5-77; 76	EPA pesticide fact sheet
Kookpunt (°C)	not applicable	www.hc-sc.gc.ca/pmra-arla/regulatory/decision/document/Health_Canada/RDD2003-07
Dampdruk (Pa)	2E-6 Pa (25°C)	www.hc-sc.gc.ca/pmra-arla/regulatory/decision/document/Health_Canada/RDD2003-07
Oplosbaarheid in water (mg/L)	56	EPA pesticide fact sheet
Log Kow	3,20	EPA pesticide fact sheet
Log Koc	2,7	QSAR niet hydr. stoffen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	9E-4	www.hc-sc.gc.ca/pmra-arla/regulatory/decision/document/Health_Canada/RDD2003-07

		RDD2003-07
pKa	niet-dissocieerbaar in water	EPA pesticide fact sheet

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	not biodegradable MITI linear: 0,0550 MITI non-linear: 0,0000 Biowin 1: -0,4138 Biowin 2: 0,0000 Biowin 3: 1,3640	epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	EU-beoordeling als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (exacte samenstelling onderliggend dossier onbekend).	1
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

Referentie:

1. SANCO (2003) http://ec.europa.eu/food/plant/protection/evaluation/newactive/list1_flufenacet_en.pdf

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	5,84		PAN
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	2,13		CTB
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	97 dagen	NOEC	0,2		CTB
kreeftachtigen					
<i>Americamysis bahia</i>	96 uur	LC50	2,72		PAN
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	30,9		CTB
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	3,26		CTB
algen					
<i>Anabaena flosaqua</i>	5 dagen	EC50	34		PAN
<i>Navicula pelliculosa</i>	5 dagen	EC50	4,8		PAN
<i>Selenastrum capricornutum</i>	5 dagen	EC50	0,0036		PAN
<i>Selenastrum capricornutum</i>	72 uur	EC50	0,002		CTB
<i>Skeletonema costatum</i>	5 dagen	EC50	0,0085		PAN
Weekdieren					
<i>Crassostrea virginica</i>	96 uur	EC50	12,6		PAN

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

Classificatie: Xn; R22-48/22 - R43 - N; R50-53

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja, 0,005 mg/kg lg/dag (SANCO 2003)	Geen inhalatoire TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,005 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	ja Ad hoc MTR=0,01µg/l	Op basis van een 72-u EC50 bsn 0,002 mg/l voor <i>Selenastrum capricornutum</i> (AFwater=100;AFdv=2)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,01 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox..	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,01 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,01 µg/L x 15,2 x 0,59 = 0,08968 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,08968 x 3,33 = 0,2986 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 15,2 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 0,30 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,01 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,01 µg/L x 13,4 x 0,87 = 0,11658 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 0,11658 x 2,71 = 0,3159 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 13,4 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 0,32 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water} (opgelost) = 1,76 mg/L PEC _{lucht} = 1,35E-5 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 94 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 10,5 mg/L PEC _{sediment} = 25,8 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
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
flufenacet	5.00E+00	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)	
MPC eco	1.00E-02	1.00E-02		3.00E-01	3.20E-01	
MPC human	9.31E+00	5.56E+01	7.14E-05	1.63E+03	4.19E+02	
Ratio MPC eco/MPC human	1.07E-03	1.80E-04		1.84E-04	7.64E-04	
Critical MPC *	1.00E-02	1.00E-02	7.14E-05	3.00E-01	3.20E-01	
% importance of total exposure	3.065	96.816	0.043	0.075		
Dominant route of exposure	leaf					
% of dominant route	58.045					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Flutriafol
CAS-NUMMER		76674-21-0
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	9,1 µg/L
	lucht	8,03E-6 µg/m ³
	bodem	89 µg/kg dwt
	sediment	104 µg/kg dwt
DATUM		13 september 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Flutriafol
CAS-nummer	76674-21-0
Stofgroep	(con)azolen; benzyl alcoholen; fungicide
Synoniemen	α-(2-fluorophenyl)-α-(4-fluorophenyl)-1H-1,2,4-triazole-1-ethanol; (RS)-1-(2-Fluorophenyl)-1-(4-fluorophenyl)-2-(1,2,4-triazol-1-yl)ethanol, (RS)-2',4-Difluoro-α-((1H-1,2,4-triazol-1-yl)methyl)benzhydriyl alcohol, , 1H-1,2,4-Triazole-1-ethanol, α-(2-fluorophenyl)-α-(4-fluorophenyl)-, α-(2-Fluorophenyl)-α-(4-fluorophenyl)-1H-1,2,4-triazole-1-ethanol, Flutriaflo PP, Flutriafol, Flutriafol (ANSI), Impact, PP 450
Molecuulformule	C ₁₆ H ₁₃ F ₂ N ₃ O
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	301,30	epiwin
Smeltpunt (°C)	164,45	epiwin
Kookpunt (°C)	396,93	epiwin
Dampdruk (Pa)	2,03E-8 mm Hg = 2,7E-6 Pa	epiwin
Oplosbaarheid in water (mg/L)	130 mg/l	epiwin
Log Kow	2,29	epiwin
Log Koc	2,2	QSAR niet hydr. stoffen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	1,86E-11 atm·m ³ /mol = 1,88E-6 Pa·m ³ /mol	epiwin
pKa	-	epiwin

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	not biodegradable no data no data MITI linear: 0,0497 MITI non-linear: 0,000 Biowin 1: -1,1998 Biowin 2: 0,000 Biowin 3: 1,5073	CERI Biodeg epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Duitse beoordeling als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (exacte samenstelling onderliggend dossier onbekend).	1
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

Referentie:

1. BfR (2007)

http://www.bfr.bund.de/cm/218/grenzwerte_fuer_die_gesundheitliche_bewertung_von_pflanzenschutzmittelruecks taenden.pdf

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	139	QSAR neutral organics, N=60, R ² =0,94	TGD dl.III, p.18
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	96	QSAR neutral organics, N=49, R ² =0,95	TGD dl.III, p.18
algen					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	72-96 uur	EC50	91	QSAR neutral organics, N=10, R ² =0,93	TGD dl.III, p.18

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja, 0,01 mg/kg lg/dag (BfR 2007)	Geen inhalatoire TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,01 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3	Nee Ad hoc MTR= 9,1 µg/l	Op basis van een geschatte 48-u LC50 van 91 mg/l voor <i>Daphnia magna</i> (AFwater 10.000; Afdv=1)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 9,1 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 9,1 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 9,1 µg/L x 4,96 x 0,59 = 26,630 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 26,630 x 3,33 = 88,678 µg/kg dwt	K _p _{bodem/water} = 4,96 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 89 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 9,1 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 9,1 µg/L x 4,86 x 0,87 = 38,476 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 38,476 x 2,71 = 104,271 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 4,86 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 104 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,77 mg/L PEC _{lucht} = 7,97E-7 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 30,7 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 10,5 mg/L PEC _{sediment} = 7,98 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

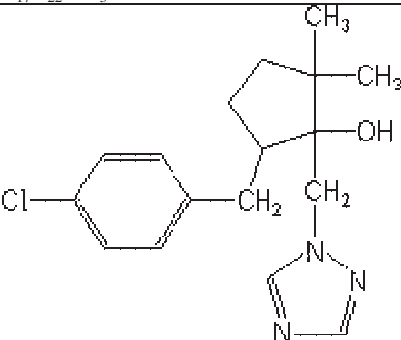
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
flutriafol	1.00E+01	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)	
MPC eco	9.10E+00	9.10E+00		8.90E+01	1.04E+02	
MPC human	1.78E+01	1.06E+02	8.03E-06	1.01E+03	2.47E+02	
Ratio MPC eco/MPC human	5.10E-01	8.60E-02		8.78E-02	4.21E-01	
Critical MPC *	9.10E+00	9.10E+00	8.03E-06	8.90E+01	1.04E+02	
% importance of total exposure	0.495	99.481	0.002	0.023		
Dominant route of exposure	leaf					
% of dominant route	66.285					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Metconazool
CAS-NUMMER		125116-23-6
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,0095 µg/L
	lucht	2,64E-4 µg/m ³
	bodem	0,6 µg/kg dwt
	sediment	0,6 µg/kg dwt
DATUM		13 september 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Metconazool
CAS-nummer	125116-23-6
Stofgroep	triazolen; fungicide
Synoniemen	5-[(4-chlorophenyl)methyl]-2,2-dimethyl-1-(1H-1,2,4-triazol-1-ylmethyl)cyclopentanol;
Molecuulformule	C ₁₇ H ₂₂ ClN ₃ O
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	319,837	EPA fact sheet www.epa.gov/opprd001/factsheets/metconazole.pdf
Smelpunt (°C)	111,5	epiwin
Kookpunt (°C)	285	epiwin
Dampdruk (Pa)	9,23E-8 atm = 1,23E-5 Pa	EPA fact sheet
Oplosbaarheid in water (mg/L)	15	EPA fact sheet
Log Kow	3,93	EPA fact sheet
Log Koc	3,02	QSAR niet hydrof. stoffen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	2,59E-9 atm·m ³ /mol = 2,6E-4 Pa·m ³ /mol	epiwin
pKa	11,38 en 1,06	EPA fact sheet

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	not biodegradable no data no data MITI linear: -0,0022 MITI non-linear: 0,0088 Biowin 1: 0,0997 Biowin 2: 0,0016 Biowin 3: 1,7867	CERI Biodeg epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	EU-beoordeling als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (exacte samenstelling onderliggend dossier onbekend).	1
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

Referentie:

1. EFSA (2006) http://www.efsa.europa.eu/EFSA/PRAPER/Conclusion/praper_concl_sr64_metconazole_en1.pdf

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Fish</i>	96 uur	LC50	2,07		Ecosar v0.99g
<i>Fish</i>	30 dagen	NOEC	0,19	MATC/2	Ecosar v0.99g
kreeftachtigen					
<i>Daphnid</i>	48 uur	LC50	2,58		Ecosar v0.99g
algen					
<i>Green algae</i>	96 uur	EC50	1,83		Ecosar v0.99g
<i>Green algae</i>	96 uur	NOEC	0,33	MATC/2	Ecosar v0.99g

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

Geclassificeerd in Annex I van Richtlijn 67/548/EEC: R22 – R63 – R51/53

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja, 0,01 mg/kg lg/dag (EFSA 2006)	Geen inhalatoire TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,01 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3	ja Ad hoc MTR=0,0095 µg/l	Op basis van een geschatte 30-d NOEC van 0,19 mg/l a.s. voor <i>Fish</i> (AFwater=10.000; AFdv=2)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,0095 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,0095 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x $K_{p\text{bodem/water}} \times 1000/1700$ (RHO_{bodem}) = 0,0095 µg/L x 31,6 x 0,59 = 0,177118 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,177118 x 3,33 = 0,5898 µg/kg dw	$K_{p\text{bodem/water}} = 31,6 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 0,6 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,0095 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,0095 µg/L x 27,1 x 0,87 = 0,22398 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 0,22398 x 2,71 = 0,60698 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 27,1 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 0,6 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,75 mg/L PEC _{lucht} = 3,11E-5 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 193 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 10,4 mg/L PEC _{sediment} = 58,8 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

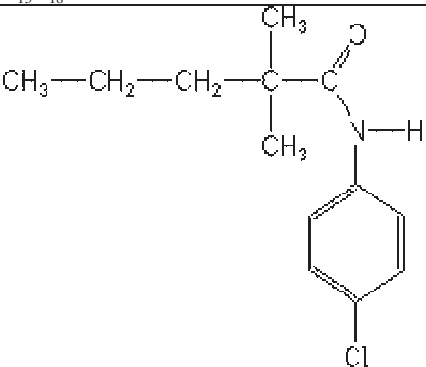
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
metconazool	1.00E+01	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)	
MPC eco	9.50E-03	9.50E-03		6.00E-01	6.00E-01	
MPC human	1.48E+01	8.82E+01	2.64E-04	5.36E+03	1.53E+03	
Ratio MPC eco/MPC human	6.40E-04	1.08E-04		1.12E-04	3.92E-04	
Critical MPC *	9.50E-03	9.50E-03	2.64E-04	6.00E-01	6.00E-01	
% importance of total exposure	10.191	89.623	0.056	0.130		
Dominant route of exposure	leaf					
% of dominant route	41.801					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Monalide
CAS-NUMMER		7287-36-7
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,0262 µg/L (water) 0,14 µg/L (grondwater)
	lucht	3,37E-6 µg/m ³
	bodem	0,8 µg/kg dwt
	sediment	0,8 µg/kg dwt
	DATUM	13 september 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Monalide
CAS-nummer	7287-36-7
Stofgroep	anilides; herbicide
Synoniemen	4'-chloro-2,2-dimethylvaleraniide; 4'-chloro- α,α -dimethylvaleraniide; N-(4-chlorophenyl)-2,2-dimethylpentanamide; Monalide; Potablan; 4'-Chloro-2,2-dimethylvaleraniide, 4'-Chloro-alpha,alpha-dimethylvaleraniide, N-(4-CHLOROPHENYL)-2,2-DIMETHYLPENTAMIDE, N-(4-Chlorophenyl)-2,2-dimethylpentanamide, N-(4-Chlorophenyl)-2,2-dimethylvaleramide (9CI), N-(4-Chlorophenyl)-2,2-dimethylvaleroamide, Pentanamide, N-(4-chlorophenyl)-2,2-dimethyl-, Potablan, Schering-35830, SN 35830, Valeraniide, 4'-chloro-2,2-dimethyl-
Molecuulformule	C ₁₃ H ₁₈ ClNO
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	239,75	SRC PhysProp Database
Smeltpunt (°C)	87-88; 87,5	SRC PhysProp Database
Kookpunt (°C)	371,06	epiwin
Dampdruk (Pa)	2,92E-6 mm Hg = 3,89E-4 Pa	SRC PhysProp Database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	22,8	SRC PhysProp Database
Log Kow	3,83	SRC PhysProp Database
Log Koc	2,97	QSAR niet-hydr.stoffen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	1,89E-8 atm·m ³ /mol = 1,9E-3 Pa·m ³ /mol	SRC PhysProp Database
pKa	-	SRC PhysProp Database

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	not biodegradable no data no data MITI linear: 0,3322 MITI non-linear: 0,1265 Biowin 1: 0,4772 Biowin 2: 0,1911 Biowin 3: 2,1964	CERI Biodeg epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Zeer oud herbicide (een 'obsolete pesticide' volgens WHO). Geen beoordeling beschikbaar.	1
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Fish</i>	96 uur	LC50	1,93		Ecosar v0.99g
kreeftachtigen					
<i>Daphnid</i>	48 uur	LC50	2,39		Ecosar v0.99g
algen					
<i>Green Algae</i>	96 uur	EC50	1,68		Ecosar v0.99g
<i>Green Algae</i>	96 uur	NOEC	0,28	MATC/2	Ecosar v0.99g

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Nee, ad hoc MTR = 1,5 µg/p/dag	Geen inhalatoire TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,02 µg /kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3	ja Ad hoc MTR=0,014 µg/l	Op basis van een geschatte 96-u NOEC van 0,28 mg/l a.s. voor <i>Green Algae</i> (AFwater=10.000;AFdv=2)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,014 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox..	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,014 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,014 µg/L x 28,2 x 0,59 = 0,2329 µg/kg dwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,2329 x 3,33 = 0,77566 µg/kg dwt	K _p _{bodem/water} = 28,2 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 0,8 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,014 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,014 µg/L x 24,2 x 0,87 = 0,2947 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 0,2947 x 2,71 = 0,7988 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 24,2 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 0,8 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,69 mg/L PEC _{lucht} = 2,17E-4 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 165 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 9,95 mg/L PEC _{sediment} = 49,7 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

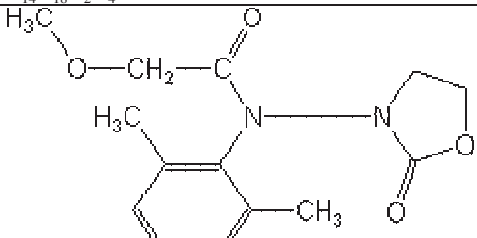
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
monalide	2.00E-02	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)	
MPC eco	1.40E-01	1.40E-01		8.00E-01	8.00E-01	
MPC human	2.62E-02	1.54E-01	3.37E-06	8.39E+00	2.36E+00	
Ratio MPC eco/MPC human	5.34E+00	9.07E-01		9.54E-02	3.38E-01	
Critical MPC *	2.62E-02	1.40E-01	3.37E-06	8.00E-01	8.00E-01	
% importance of total exposure	7.400	91.968	0.532	0.101		
Dominant route of exposure	leaf					
% of dominant route	35.969					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Oxadixyl
CAS-NUMMER		77732-09-3
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	109 µg/L
	lucht	6,07E-6 µg/m ³
	bodem	210 µg/kg dwt
	sediment	400 µg/kg dwt
DATUM		29 augustus 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Oxadixyl
CAS-nummer	77732-09-3
Stofgroep	aniliden, oxazolen; fungicide
Synoniemen	2-methoxy-N-(2-oxo-1,3-oxazolidin-3-yl)acet-2',6'-xylidide ; N-(2,6-dimethylphenyl)-2-methoxy-N-(2-oxo-3-oxazolidinyl)acetamide; 2-Methoxy-N-(2-oxo-1,3-oxazolidin-3-yl)acet-2',6'-xylidide, 2-Methoxy-N-(2-oxo-1,3-oxazolidine-3-yl)-acet-2,6-xylidine [French], 77732-09-3, Acetamide, N-(2,6-dimethylphenyl)-2-methoxy-N-(2-oxo-3-oxazolidinyl)-, M 10797, N-(2,6-Dimethylphenyl)-2-methoxy-N-(2-oxo-3-oxazolidinyl)acetamide, OXADIXYL, Oxadixyl [BSI:ISO], Recoil, Ripost, SAN 371, SAN 371F, Sandofan, Wakil
Molecuulformule	C ₁₄ H ₁₈ N ₂ O ₄
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	278,31	SRC PhysProp Database
Smeltpunt (°C)	104	SRC PhysProp Database
Kookpunt (°C)	437,03	epiwin
Dampdruk (Pa)	2,48E-8 mm Hg = 3,3e-6 Pa	SRC PhysProp Database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	3400 mg/l	SRC PhysProp Database
Log Kow	0,8	SRC PhysProp Database
Log Koc	1,43	QSAR niet hydr. stoffen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	2,67E-12 atm·m ³ /mol = 2,7E-7 Pa·m³/mol	SRC PhysProp Database
pKa	-	SRC PhysProp Database

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	not biodegradable no data no data MITI linear: 0,08 MITI non-linear: 0,023 Biowin 1: 0,377 Biowin 2: 0,038 Biowin 3: 2,4258	CERI Biodeg epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Duitse beoordeling als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (exacte samenstelling onderliggend dossier onbekend).	1
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

Referentie:

1. BfR (1996)

http://www.bfr.bund.de/cm/218/grenzwerte_fuer_die_gesundheitliche_bewertung_von_pflanzenschutzmittelruecks_tenden.pdf

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	320		PAN
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	530		PAN
algen					

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja, 0,05 mg/kg lg/dag (BfR 1996)	Geen inhalatoire TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,05 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	ja	
3	Nee Ad hoc MTR=107 µg/l	Op basis van een 96-u LC50 van 320 mg/l a.s. voor <i>Oncorhynchus mykiss</i> (AFwater=3000; AFdv=1)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 107 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 107 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 107 µg/L x 1,01 x 0,59 = 63,7613 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 63,7613 x 3,33 = 210,41229 µg/kg dwt	K _p _{bodem/water} = 1,01 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 210 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 107 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 107 µg/L x 1,57 x 0,87 = 146,1513 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 156,1513 x 2,71 = 396,07 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 1,57 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 400 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,77 mg/L PEC _{lucht} = 9,87E-8 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 6,24 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 10,5 mg/L PEC _{sediment} = 2,26 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

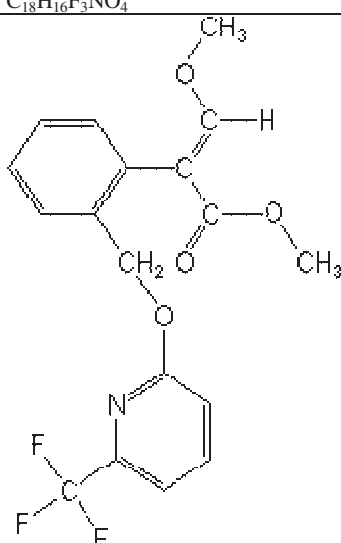
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
oxadixyl	5.00E+01	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)	
MPC eco	1.10E+02	1.10E+02		2.10E+02	4.00E+02	
MPC human	1.09E+02	6.45E+02	6.07E-06	1.26E+03	4.26E+02	
Ratio MPC eco/MPC human	1.01E+00	1.70E-01		1.67E-01	9.39E-01	
Critical MPC *	1.09E+02	1.10E+02	6.07E-06	2.10E+02	4.00E+02	
% importance of total exposure	0.048	99.946	0.000	0.006		
Dominant route of exposure	leaf					
% of dominant route	60.728					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Picoxystrobin
CAS-NUMMER		117428-22-5
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,025 µg/L
	lucht	6,24E-3 µg/m ³
	bodem	1 µg/kg dwt
	sediment	1 µg/kg dwt
DATUM		13 september 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Picoxystrobin
CAS-nummer	117428-22-5
Stofgroep	strobilurines; fungicide
Synoniemen	methyl (E)-3-methoxy-2-{2-[6-(trifluoromethyl)-2-pyridyloxymethyl]phenyl}acrylate ; methyl (αE)-α-(methoxymethylene)-2-[[[6-(trifluoromethyl)-2-pyridinyl]oxy]methyl]benzeneacetate;
Molecuulformule	C ₁₈ H ₁₆ F ₃ NO ₄
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	367,3	EC document
Smeltpunt (°C)	75	EC document
Kookpunt (°C)	-	EC document
Dampdruk (Pa)	5,5E-6	EC document
Oplosbaarheid in water (mg/L)	3,1	EC document
Log Kow	3,6	EC document
Log Koc	2,9 – 3,1 2,8 2,9	EC document QSAR niet-hydr. stoffen gemiddelde van 3
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	6E-4 Pa m ³ /mol	EC document
pKa	-	

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	persistent DT50 fotolyse water: 17-25 dagen DT50 biodegradatie water 5; 7-35 dagen MITI linear: 0,1873 MITI non-linear: 0,000 Biowin 1: -0,1436 Biowin 2: 0,0013 Biowin 3: 1,7337	EC document epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Duitse beoordeling als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (exacte samenstelling onderliggend dossier onbekend).	1
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

Referentie:

1. BfR (2003)

http://www.bfr.bund.de/cm/218/grenzwerte_fuer_die_gesundheitliche_bewertung_von_pflanzenschutzmittelruecks
taenden.pdf

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,064		EC document
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	0,065		EC document
<i>Cyprinus carpio</i>	96 uur	LC50	0,16		EC document
<i>Gasterosteus aculeatus</i>	96 uur	LC50	0,1		EC document
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,096		EC document
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	28 dagen	NOEC	0,01		EC document
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	L(E)C50	0,02		EC document
<i>Daphnia pulex</i>	48 uur	L(E)C50	>0,05		EC document
<i>Diaptomus</i>	48 uur	L(E)C50	0,005		EC document
<i>Macrocyclus</i>	48 uur	L(E)C50	0,087		EC document
<i>Asellus</i>	48 uur	L(E)C50	0,152		EC document
<i>Crangonyx</i>	48 uur	L(E)C50	0,063		EC document
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,008		EC document
algen					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	72 uur	EC50	0,048		EC document
Insecten					
<i>Notonecta</i>	48 uur	L(E)50	>1		EC document
<i>Naucoridae</i>	48 uur	L(E)C50	>1		EC document
<i>Cloeon</i>	48 uur	L(E)C50	0,194		EC document
<i>Coenagrion</i>	48 uur	L(E)C50	>1		EC document
<i>Agrypnia</i>	48 uur	L(E)C50	0,158		EC document
<i>Chaoborus</i>	48 uur	L(E)C50	0,332		EC document
<i>Chironomus</i>	48 uur	L(E)C50	0,326		EC document
<i>Chironomus riparius</i>	25 dagen	NOEC	0,0625		EC document
Wormen					
<i>Dugesia</i>	48 uur	L(E)C50	0,2		EC document
<i>Polycelis</i>	48 uur	L(E)C50	0,2		EC document
<i>Tubificidae</i>	48 uur	L(E)C50	0,299		EC document
Rotiferen					
<i>Brachionus</i>	24 uur	L(E)C50	>4		EC document
Weekdieren					
<i>Limnea</i>	48 uur	L(E)C50	>1		EC document

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja, 0,043 mg/kg lg/dag (BfR 2003)	Geen inhalatoire TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,043 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	ja	
3	Ja Ad hoc MTR = 0,025 µg/l	Op basis van een 48-u L(E)C50 van 0,005 mg/l a.s. voor <i>Daphnia magna</i> (AFwater=100; AFdv=2) AFwater=100 omdat de laagste NOEC niet lager is dan de laagste EC50
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,025 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox..	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,025 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,025 µg/L x 24 x 0,59 = 0,354 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,354 x 3,33 = 1,1788 µg/kg dwt	K _p _{bodem/water} = 24 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 1 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,025 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,025 µg/L x 20,8 x 0,87 = 0,4524 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 7,2384 x 2,71 = 1,226 µg/kg dwt	K _p _{susp/water} = 20,8 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 1 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,71 mg/L PEC _{lucht} = 1,48E-4 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 144 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 10,2 mg/L PEC _{sediment} = 42 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

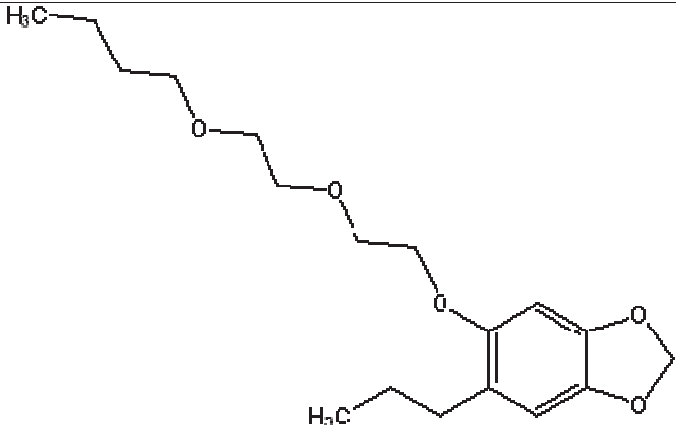
Output Humanex-resultaten:

	TDI	TCA	Corrected for TCA:			NO
picoxystrobin	(ug/kg bw/d) 4.30E+01	(ug/m3) N.A.				
	Surface water	Groundwater	Air	Soil	Sediment	
	(ug/L)	(ug/L)	(ug/m3)	(ug/kg dwt)	(ug/kg dwt)	
MPC eco	2.50E-02	2.50E-02		1.00E+00	1.00E+00	
MPC human	7.21E+01	4.30E+02	6.24E-03	1.99E+04	5.44E+03	
Ratio MPC eco/MPC human	3.47E-04	5.81E-05		5.02E-05	1.84E-04	
Critical MPC *	2.50E-02	2.50E-02	6.24E-03	1.00E+00	1.00E+00	
% importance of total exposure	6.040	93.745	0.106	0.109		
Dominant route of exposure	leaf					
% of dominant route	53.672					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Piperonyl-butoxide	
CAS-NUMMER	51-03-6	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	8,3E-5 µg/L
	lucht	0,122 µg/m ³
	bodem	0,39 µg/kg dwt
	sediment	0,39 µg/kg dwt
DATUM	29 augustus 2007	

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Piperonyl-butoxide
CAS-nummer	51-03-6
Stofgroep	unclassified; synergist bij insecticiden
Synoniemen	(Butylcarbityl)(6-propylpiperonyl) ether 80% and related compounds 20% , 00486 (CA DPR Chem Code) , 067501 (US EPA PC Code) , 1,3-Benzodioxole, 5-((2-(2-butoxyethoxy)ethoxy)methyl)-6-propyl-, 486 (CA DPR Chem Code) , 5-((2-(2-Butoxyethoxy)ethoxy)methyl)-6-propyl-1,3-benzodioxole , 51-03-6 (CAS Number) , 51036 , 51036 (CAS Number) , 6-Propylpiperonyl butyl diethyleneglycol ether , alpha-(2-(2-Butoxyethoxy)ethoxy)-4,5-(methylenedioxy)-2-propyltoluene , Butacide , Butyl carbitol 6-propylpiperonyl ether , But—xido de piperonilo , ENT-14250 , PBO , Piperonyl butoxide , piperonyl , Piperonyl butoxide , piperonyl butoxyde , piperonylbutoksid , Piperonylbutoxid (Synergist) , Piperonylbutoxide , Piperonylbutoxyd , Pybuthrin
Molecuulformule	C ₁₉ H ₃₀ O ₅
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	388,43	SRC PhysProp Database
Smeltpunt (°C)	<0 ; 0	MSDS
Kookpunt (°C)	180 at 1 mm Hg; > 150; 180	www.fao.org ; MSDS
Dampdruk (Pa)	1,33E-5 Pa	www.fao.org
Oplosbaarheid in water (mg/L)	14,3	www.fao.org
Log Kow	4,75	www.fao.org
Log Koc	4,9	QSAR hydr. stoffen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	8,89E-11 atm·m ³ /mol = 9E-6 Pa·m ³ /mol	SRC PhysProp Database
pKa	-	SRC PhysProp Database

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	inherently biodegradable no data no data MITI linear: 0,421 MITI non-linear: 0,228 Biowin 1: -0,0287 Biowin 2: 0,0057 Biowin 3: 2,5325	www.fao.org gelablede metabolieten gevonden CERI Biodeg Epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	JMPR-Beoordeling als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (exacte samenstelling onderliggend dossier onbekend). Beoordeling veterinaire gebruik door EMEA (1999)	1, 2
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

Referentie:

1. JMPR (1995) <http://www.inchem.org/documents/jmpr/jmpeval/jmpr2002.htm>
2. <http://www.emea.europa.eu/pdfs/vet/mrls/053798en.pdf>

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96 uur	LC50	0,19		PAN
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,415		PAN
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,487		PAN
kreftachtigen					
<i>Asellus brevicaudus</i>	96 uur	LC50	12		PAN
<i>Palaemon paucidens</i>	24 uur	LC50	3,5		PAN
<i>Penaeus duorarum</i>	96 uur	LC50	0,00125		PAN
<i>Penaeus japonicus</i>	24 uur	LC50	1,6		PAN
algen					
Amfibieën					
<i>Pseudacris triseriata</i>	96 uur	LC50	0,272		PAN
<i>Pseudacris triseriata triseriata</i>	96 uur	LC50	1		PAN
Wormen					
<i>Lumbriculus variegatus</i>	96 uur	LC50	3,54		PAN

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja, 0,2 mg/kg lg/dag (JMPR 1995, EMEA 1999)	Geen inhalatoire TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,2 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	ja	
3	ja Ad hoc MTR=0,000083µg/l	Op basis van een 96-u LC50 van 0,00125 mg/l a.s. voor <i>Penaeus duorarum</i> (AFwater=3000;Afdv=5)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,000083 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox..	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,000083 µg/L.	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,000083 µg/L x 2380 x 0,59 = 0,1165 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,1165 x 3,33 = 0,388 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 2380 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 0,39 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,000083 µg/L.	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,000083 µg/L x 1990 x 0,87 = 0,1437 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 0,1437 x 2,71 = 0,3894 µg/kg dwt	K _p _{susp/water} = 1990 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 0,39 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,223 mg/L PEC _{lucht} = 1,16E-4 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 1150 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,821 mg/L PEC _{sediment} = 763 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

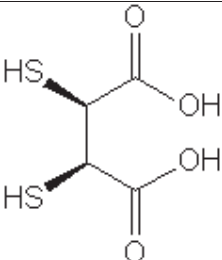
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
piperonyl-butoxide	2.00E+02	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco	8.30E-05	8.30E-05		3.90E-01	3.90E-01	
MPC human	2.34E+02	8.61E+02	1.22E-01	3.95E+06	2.45E+06	
Ratio MPC eco/MPC human	3.55E-07	9.64E-08		9.87E-08	1.59E-07	
Critical MPC *	8.30E-05	8.30E-05	1.22E-01	3.90E-01	3.90E-01	
% importance of total exposure	39.959	53.381	0.292	6.368		
Dominant route of exposure	fish					
% of dominant route	39.959					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Succimer
CAS-NUMMER		304-55-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	79 µg/L (water) 96 µg/L (grondwater)
	lucht	1,18E-6 µg/m ³
	bodem	56 µg/kg dwt
	sediment	181 µg/kg dwt
	DATUM	13 september 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Succimer
CAS-nummer	304-55-2
Stofgroep	thiols (mercaptans)-acid (epiwin); lood-chelator (medicijn)
Synoniemen	Butanedioic acid, 2,3-dimercapto-, (R*,S*)-, DMSA; 2,3-dimercaptosuccinaat; meso-2,3-Dimercaptosuccinic acid; (R*,S*)-2,3-Dimercaptobutanedioic acid, .alpha.,.beta.-Dimercaptosuccinic acid, 2, 3-Dimercaptosuccinic acid, 2,3-Dimercaptobutanedioic acid, 2,3-Dimercaptosuccinic acid, Butanedioic acid, 2, 3-dimercapto-, Butanedioic acid, 2,3-dimercapto-, Butanedioic acid, 2,3-dimercapto-, (2R,3S)-rel-, Butanedioic acid, 2,3-dimercapto-, (R*,S*)-, Butanedioic acid, 2,3-dimercapto-, arsenic(3+) salt, Dimercaptosuccinic acid, DIMERCAPTOSUCCINIC ACID, SUCCIMER, Dimercaptosuccinic acid, DMS, DMSA, meso-2,3-Dimercaptosuccinic acid, meso-Dimercaptosuccinic acid, NCI60_001347, NSC 259951, NSC16866, NSC16867, NSC259951, Ro 1-7977, Succimer, Succimer (USAN), Succimer [USAN:BAN:INN], Succimero [INN-Spanish], Succimerum [INN-Latin], Succinic acid, 2,3-dimercapto-, Succinic acid, 2,3-dimercapto-, arsenic(III) salt, Succinic acid, 2,3-dimercapto-, meso-, Suximer
Molecuulformule	C ₄ H ₆ O ₄ S ₂
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	182,21	epiwin
Smeltpunt (°C)	127,49	epiwin
Kookpunt (°C)	356,88	epiwin
Dampdruk (Pa)	1,56E-6 mm Hg = 2,08E-4 Pa	epiwin
Oplosbaarheid in water (mg/L)	9,523E+5 mg/l	epiwin
Log Kow	-1,01	epiwin
Log Koc	0,5	QSAR niet hydr. stoffen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	3,8E-13 atm.m ³ /mol = 3,85E-8 Pa·m ³ /mol	epiwin
pKa	-	epiwin

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	inherently biodeg. fulfilling crit. no data no data MITI linear: 0,431 MITI non-linear: 0,3396 Biowin 1: 0,806 Biowin 2: 0,846	CERI Biodeg epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Stof wordt therapeutisch gebruikt als chelator tegen loodvergiftiging. Therapeutische doseringen 8-40 mg/kg lg/dag gedurende 5 dagen; klinische studies bij mens, teratogeniteit rat en muis, neurotox rat	1,2,3
Carcinogeniteit	Niet beschikbaar	
Mutageniteit	Niet beschikbaar	
Kritische studie oraal	Klinische studies bij mens: geen schadelijke effecten bij doseringen tot 30 mg/kg lg/dag (subacuut) . Orale teratogeniteitsstudie in rat: NOAEL voor foetotoxiciteit < 100 mg/kg lg/dag, neurotox rat LOAEL voor testbatterijen in 3-wekenstudie 25-50 mg/kg lg/dag	1, 2, 3
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar	

Referenties

1. HSDB-file Succimer. Latest Update on 02/13/2002.
2. DE Stangle, DR Smith, SA Beaudin, MS Strawderman, DA Levitsky BJ Strupp (2007) Succimer Chelation Improves Learning, Attention, and Arousal Regulation in Lead-Exposed Rats but Produces Lasting Cognitive Impairment in the Absence of Lead Exposure. Environmental Health Perspectives **115** (no. 2), 201-209.
3. FM Jorgenson (1993) Succimer: the first approved oral lead chelator, American Family Physician. http://findarticles.com/p/articles/mi_m3225/is_n8_v48/ai_14674732, retrieved on 07 August 2007

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	53.000	QSAR neutral organics, N=60, R ² =0,94, stof valt buiten log Kow-range van 1-6	TGD dl.III, p.18
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	960	QSAR neutral organics, N=49, R ² =0,95, stof valt buiten log Kow-range van 1-6	TGD dl.III, p.18
algen					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	72-96 uur	EC50	109.000	QSAR neutral organics, N=10, R ² =0,93, stof valt buiten log Kow-range van 1-6	TGD dl.III, p.18

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja	
4	Nee	
5	Nee	
6	Ja	
7	Ja, beperkt in teratogeniteitsstudie rat & muis	
8	Nee	
9	Ja, 25 mg/kg lg/dag uit 3-weken neurotox-studie rat	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
10	10 afwezigheid chronische studie 10 voor gebruik LOAEL 1 extrapolatie proefdier naar mens (gezien beschikbaarheid klinische studies die geen effecten lieten zien) 10 voor gevoelige groepen	
11	Ja	
12	0,025 mg/kg lg/dag	
13	Nee	
14	-	
15	Nee	
16	-	
17	Nee	
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,025 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3	Nee Ad hoc MTR= 96 µg/l	Op basis van een geschatte 72-96-u LC50 van 960 mg/l a.s. voor <i>Daphnia magna</i> AFwater=10.000;AFdv=1)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 96 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 96 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 96 µg/L x 0,295 x 0,59 = 16,7088 µg/kg ww. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 16.7088 x 3,33 = 55,640 µg/kg dwt	K _p _{bodem/water} = 0,295 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 56 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 96 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 96 µg/L x 0,979 x 0,87 = 81,766 µg/kg ww. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 81,766 x 2,71 = 221,586 µg/kg dwt	K _p _{susp/water} = 0,979 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 220 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,989 mg/L PEC _{lucht} = 1,48E-8 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 1,6 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 9,23 mg/L PEC _{sediment} = 0,738 mg/kg ww	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

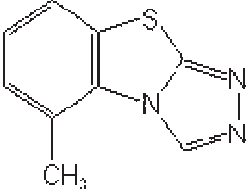
Output Humanex-resultaten:

	TDI	TCA	Corrected for TCA:			NO
succimer	(ug/kg bw/d) 2.50E+01	(ug/m3) N.A.				
	Surface water	Groundwater	Air	Soil	Sediment	
	(ug/L)	(ug/L)	(ug/m3)	(ug/kg dwt)	(ug/kg dwt)	
MPC eco	9.60E+01	9.60E+01		5.60E+01	2.20E+02	
MPC human	7.91E+01	7.38E+02	1.18E-06	4.19E+02	1.81E+02	
Ratio MPC eco/MPC human	1.21E+00	1.30E-01		1.34E-01	1.22E+00	
Critical MPC *	7.91E+01	9.60E+01	1.18E-06	5.60E+01	1.81E+02	
% importance of total exposure	0.070	99.926	0.000	0.004		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	84.854					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Tricyclazool
CAS-NUMMER		41814-78-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,47 µg/L
	lucht	9,09E-6 µg/m ³
	bodem	2,4 µg/kg dwt
	sediment	3,2 µg/kg dwt
DATUM		29 augustus 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Tricyclazool
CAS-nummer	41814-78-2
Stofgroep	neutral organics (epiwin) unclassified
Synoniemen	5-methyl-1,2,4-triazolo[3,4-b][1,3]benzothiazole; 5-Methyl-1,2,4-triazolo[3,4-b]benzo-1,3-thiazole; Methyl-1,2,4-triazolo(3,4-b)benzothiazole
Molecuulformule	C ₉ H ₇ N ₃ S
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	189,24	SRC PhysProp Database
Smeltpunt (°C)	187	SRC PhysProp Database
Kookpunt (°C)	275	SRC PhysProp Database
Dampdruk (Pa)	2E-7 atm = 2,67E-5 Pa	SRC PhysProp Database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1600	SRC PhysProp Database
Log Kow	1,7	SRC PhysProp Database
Log Koc	1,9	QSAR niet-hydr. stoffen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	3,11E-11 atm·m ³ /mol = 3,15E-6 Pa·m ³ /mol	SRC PhysProp Database
pKa	-	SRC PhysProp Database

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	inherently biodeg. fulfilling crit. no data no data MITI linear: 0,2235 MITI non-linear: 0,1044 Biowin 1: 0,7121 Biowin 2: 0,7107	CERI Biodeg epiwin

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Toelatingsbeoordeling als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (exacte samenstelling onderliggend dossier onbekend).	1
Carcinogeniteit		
Mutageniteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

Referenties:

1. <http://www.herts.ac.uk/aeru/footprint/en/>

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Anguilla japonica</i>	48 uur	LC50	3,5		PAN
<i>Cyprinus carpio</i>	96 uur	LC50	14		PAN
<i>Gambusia affinis</i>	48 uur	LC50	1,4		PAN
kreeftachtigen					
<i>Scapholeberis kingi</i>	3 uur	LC50	94		PAN
algen					
Amfibiën					
<i>Rana limnocharis</i>	48 uur	LC50	19,425		PAN

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

nvt

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

classification: Xn; R22

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja, 0.03 mg/kg lg/dag (herts.ac.uk)	Geen inhalatoire TCA nodig vanwege lage vluchtigheid
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0.03 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee Ad hoc MTR=0,47 µg/l	Op basis van een 48-u LC50 van 1,4 mg/l a.s. voor <i>Gambusia affinis</i> (AFwater=3000; AFdv=1)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,47 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4	ad hoc MTR _{eco} lucht wordt gebaseerd op humane tox.	

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,47 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,47 µg/L x 2,58 x 0,59 = 0,715 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,715 x 3,33 = 2,382 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 2,58 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 2,4 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,47 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,47 µg/L x 2,89 x 0,87 = 1,1817 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 1,1817 x 2,71 = 3,2024 µg/kg dwt	K _p _{susp/water} = 2,89 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 3,2 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,612 mg/L PEC _{lucht} = 1,43E-7 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 7,14 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 4,7 mg/L PEC _{sediment} = 1,52 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
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
tricyclazool	3.00E+01	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco	4.70E-01	4.70E-01		2.40E+00	3.20E+00	
MPC human	3.89E+01	2.99E+02	9.09E-06	1.49E+03	2.96E+02	
Ratio MPC eco/MPC human	1.21E-02	1.57E-03		1.61E-03	1.08E-02	
Critical MPC *	4.70E-01	4.70E-01	9.09E-06	2.40E+00	3.20E+00	
% importance of total exposure	0.113	99.874	0.001	0.011		
Dominant route of exposure	leaf					
% of dominant route	68.825					

Bijlage F Rapportageformulier 5

bestrijdingsmiddelen

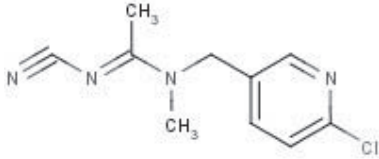
Opdrachtgegevens

Projectnummer	M/601782/07/
Dossiernummer	11356
Opdrachtgever	RWS-WD
Datum opdracht	22-08-2007
Datum rapportage	20-11-2007
Opdracht	Afleiden van indicatieve milieukwaliteitsnormen voor acetamiprid, methoxyfenozone, thiamethoxam, chloorpyrifos- methyl en flonicamid

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Acetamiprid
CAS-NUMMER		135410-20-7
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,1 µg/L
	lucht	4,1E-7 µg/m ³
	bodem	0,95 µg/kg dwt
	sediment	1,1 µg/kg dwt
DATUM		26 september 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Acetamiprid
CAS-nummer	135410-20-7
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	neutral organics, insecticide, neonicotinoid
Synoniemen	Acetamiprid, Acetaprid; (E)-N-(6-Chloro-3-pyridyl)methyl-N'-cyano-N-methylacetamidine Acetamiprid; HSDB 7274; NI 25; Ethanimidamide, N-((6-chloro-3-pyridinyl)methyl)-N'-cyano-N-methyl-, (E)-
Molecuulformule	C ₁₀ H ₁₁ ClN ₄
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	222,68		epiwin
Smeltpunt (°C)	107		epiwin
Kookpunt (°C)	340		epiwin
Dampdruk (Pa)	3E-7 Pa at 50 °C (>99%). Expected <1E-6 Pa at 25 °C		EU 2004
Oplosbaarheid in water (mg/L)	4200 mg/L	experimentele waarde bij 25 °C	epiwin
Log Kow	2,55 1,97	geschatte waarden	epiwin CLogP
Log Koc	2,12-2,43 2,02 2,19	QSAR niet hydr. stoffen gemiddelde van 3 waarden	HSDB Handreiking afleiding ind. normen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	5,739E-8 atm·m ³ /mol = 5,8E-3 Pa·m ³ /mol	dampdruk gedeeld door oplosbaarheid	epiwin
pKa	-	geen waarde beschikbaar	epiwin

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	not biodegradable MITI linear: -0,0079 MITI non-linear: 0,0133 Biowin 1: 0,3045 Biowin 2: 0,0217 Biowin 3: 2,2863	epiwin (CERI en BODEG databases: geen data)

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	EU-beoordeling uit 2004 als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI	1
Carcinogeniteit	Zie brondocument EU	
Mutageniteit	Idem	
Kritische studie oraal	Idem	
Kritische studie inhalatie	idem	

Referenties:

1. EU (2004) <http://ec.europa.eu/food/plant/protection/evaluation/newactive/acetamiprid.pdf> (Geraadpleegd op 17-10-2007)

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	EC50	>100		NI-EC Toel. Dossier ¹ / Footprint database ²
<i>Pimephales promelas</i>	35 dagen	NOEC	19,2		NI-EC Toel. Dossier/ Footprint database
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	49,8		NI-EC Toel. Dossier/ Footprint database
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	5		NI-EC Toel. Dossier/ Footprint database
algen					
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	72 uur	EC50	98,3		NI-EC Toel. Dossier/ Footprint database
Insecten					
<i>Chironomus riparius</i>	28 dagen	NOEC	0.005		NI-EC Toel. dossier

¹ EU (2004) <http://ec.europa.eu/food/plant/protection/evaluation/newactive/acetamiprid.pdf> (geraadpleegd op 5-11-2007)

² <http://www.herts.ac.uk/aeru/footprint/> (geraadpleegd op 5-11-2007)

Dikgedrukte 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)

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	EU (2004) ADI=0,07 mg/kg lg/dag	
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,07 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege lage dampdruk

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee Ad hoc MTR = 0,1 µg/l	Op basis van een 28 dagen NOEC van 0,005 mg/l a.s. voor <i>Chironomus riparius</i> . (AFwater=50; AFdv=1)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,1 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,1 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,1 µg/L x 4,85 / 1,7 = 0,2852941 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,2852941 x 3,33 = 0,9500294 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 4,85 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 0,95 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,1 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,1 µg/L x 4,77 / 1,15 = 0,41478 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 0,41478 x 2,71 = 1,12406 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 4,77 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 1,12 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,77 mg/L PEC _{lucht} = 2,31E-9 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 30 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 10,5 mg/L PEC _{sediment} = 7,81 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3.
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

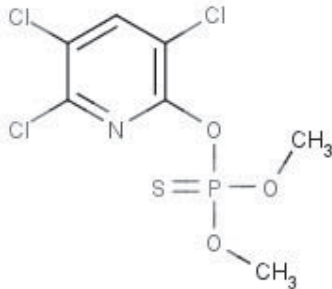
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
acetamiprid	7.00E+01	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco	1.00E-01	1.00E-01		9.50E-01	1.10E+00	
MPC human	3.12E+02	1.85E+03	4.07E-07	1.73E+04	4.23E+03	
Ratio MPC eco/MPC human	3.20E-04	5.40E-05		5.48E-05	2.60E-04	
Critical MPC *	1.00E-01	1.00E-01	4.07E-07	9.50E-01	1.10E+00	
% importance of total exposure	0.661	99.283	0.000	0.057		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	76.053					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Chloorpyrifos-methyl	
CAS-NUMMER	5598-13-0	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	2,0E-4 µg/L
	lucht	3,83E-2 µg/m ³
	bodem	3,6E-2 µg/kg dwt
	sediment	3,6E-2 µg/kg dwt
DATUM	13 november 2007	

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Chloorpyrifos-methyl
CAS-nummer	5598-13-0
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	esters, phosphate esters; pesticides
Synoniemen	Chlorpyrifos O,O-dimethyl analog; Chloropyriphos-methyl; Dowco 214 Dursban methyl; EINECS 227-011-5; ENT 27520; EPA Pesticide; Chemical Code 059102; HSDB 6981; M 3196; Methyl chlorpyrifos; Methyl chlorpyriphos; Methyl dursban; Methylchlorpyrifos; NSC 60380; Noltran; O,O-Dimethyl O-(3,5,6-trichloro-2-pyridinyl) phosphorothioate OMS-1155; Reldan; Reldan 50 EC; Trichlormethylfos; Tumar; Zertell Chlorpyrifos-methyl; Phosphorothioic acid, O,O-dimethyl O-(3,5,6-trichloro-2-pyridinyl) ester; Phosphorothioic acid, O,O-dimethyl O-(3,5,6-trichloro-2-pyridyl) ester; Chlorpyrifos methyl O,O-Dimethyl O-(3,5,6-trichloro-2-pyridyl) phosphorothioate
Molecuulformule	C7 H7 Cl3 N O3 P1 S1
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	322,53		epiwin
Smeltpunt (°C)	84	geschat	epiwin
Kookpunt (°C)	354	geschat	epiwin
Dampdruk (Pa)	0,003 Pa (25 °C)		EU 2005
Oplosbaarheid in water (mg/L)	4,76 (20 °C)	experimenteel	epiwin
Log Kow	4,31 4,17	experimenteel voorkeurswaarde	epiwin MLogP
Log Koc	3,5 – 3,89 3,05 3,48	HSDB QSAR fosfaten gemiddelde van 3	toxnet.nlm.nih.gov handreiking afleiding ind. normen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	0,37 0,20	experimenteel berekend uit dampdruk en opl.heid	epiwin
pKa	-	geen gegevens	epiwin

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	not biodegradable MITI linear: -0,0986 MITI non-linear: 0,0013 Biowin 1: 0,2061 Biowin 2: 1,0000 Biowin 3:1,8062	epiwin CERI en BODEG databases: geen data)

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	EU-beoordeling uit 2005 als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI.	1
Carcinogeniteit	Zie brondocument EU	
Mutageniteit	Idem	
Kritische studie oraal	Idem	
Kritische studie inhalatie	idem	

Referenties:

1. EU (2005) http://ec.europa.eu/food/plant/protection/evaluation/existactive/list_chlorpyrifos-methyl.pdf (Geraadpleegd op 18-09-2007)

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Acheilognathus morio</i>	48 uur	LC50	2,1		PAN ¹
<i>Anguilla japonica</i>	48 uur	LC50	5		PAN
<i>Leiostomus xanthurus</i>	48 uur	LC50	0,15		PAN
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,88		PAN
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,0126		PAN
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,301		PAN
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	0,41		Footprint database ² / EC toel. dossier ³
<i>Oncorhynchus macrochirus</i>	96 uur	LC50	0,12		PAN
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	0,005		Footprint database/ EC-toel. dossier
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	0,678		PAN
<i>Poecilia sp.</i>	48 uur	LC50	0,85		PAN
<i>Rasbora heteromorpha</i>	96 uur	LC50	2,61		PAN
<i>Rasbora heteromorpha</i>	96 uur	LC50	15,67		PAN
<i>Salvelinus fontinalis</i>	96 uur	LC50	0,2		PAN
<i>Salvelinus fontinalis</i>	96 uur	LC50	0,1		PAN
kreeftachtigen					
<i>Penaeus aztecus</i>	48 uur	LC50	0,00068		PAN
<i>Penaeus duorarum</i>	48 uur	LC50	0,00003		PAN
<i>Procambarus sp.</i>	36 uur	LC50	0,0035		PAN
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	0,00111		PAN/ Footprint database
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,00001		Footprint database/ EC-toel. Dossier
<i>Artemia salina</i>	24 uur	LC50	7,64		PAN
<i>Artemia salina</i>	24 uur	LC50	1,84		PAN
<i>Artemia salina</i>	24 uur	LC50	0,05		PAN
<i>Daphnia carinata</i>	48 uur	LC50	0,0018		PAN

Invertebrate	48 uur	EC50	0,00062		EC-toel. Dossier
Algen					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	72 uur	EC50	0,57		Footprint database
<i>Algae</i>	96 uur	EC50	0,54		EC-toel. dossier
<i>Algae</i>	-	NOEC	0,15		EC-toel. dossier
Weekdier					
Insecten					
<i>Aedes aegypti</i>	24 uur	LC50	0,0007		PAN
<i>Aedes aegypti</i>	24 uur	LC50	0,0024		PAN
<i>Aedes albopictus</i>	24 uur	LC50	0,0043		PAN
<i>Anopheles albimanus</i>	24 uur	LC50	0,02		PAN
<i>Baetis parvus</i>	1 uur	LC50	0,0009		PAN
<i>Chironomus tepperi</i>	24 uur	LC50	0,0025		PAN
<i>Culex pipiens</i>	24 uur	LC50	0,0095		PAN
<i>Culex quinquefasciatus</i>	24 uur	LC50	0,0028		PAN
<i>Hydropsyche californica</i>	1 uur	LC50	0,3		PAN
<i>Hydropsyche californica</i>	1 uur	LC50	0,21		PAN
<i>Prosimulium magnum</i>	0,17 uur	LC50	0,0331		PAN
<i>Prosimulium magnum</i>	0,17 uur	LC50	0,0385		PAN
<i>Simulium argus</i>	1 uur	LC50	0,0065		PAN
<i>Simulium virgatum</i>	1 uur	LC50	0,035		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,0055		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,009		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,008		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,0087		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,0054		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,0201		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,0204		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,0163		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,0202		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,0127		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,02		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,0365		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,0103		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,0228		PAN
<i>Simulium vittatum</i>	0,17 uur	LC50	0,0394		PAN
Amfibieën					
<i>Bufo vulgaris formosus</i>	24 uur	LC50	1,8		PAN
<i>Bufo vulgaris formosus</i>	24 uur	LC50	2,3		PAN
Weekdieren					
<i>Crassostrea virginica</i>	96 uur	EC50	0,32		PAN

¹PAN: http://www.pesticideinfo.org/Search_Chemicals.jsp (geraadpleegd 5-11-2007)

²Footprint database www.herts.ac.uk/aeru/footprint (geraadpleegd 5-11-2007)

³EC toel. dossier : http://ec.europa.eu/food/plant/protection/evaluation/existactive/list_chlorpyrifos-methyl.pdf

Dikgedrukte 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)

R43 - N; R50-53

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	EU 2005, ADI= 0,01 mg/kg lg/dag	
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,01 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege geringe vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Ja Ad hoc MTR = 0,2 ng/l	Op basis van een 21 dagen NOEC van 0,00001 mg/l a.s. voor <i>Daphnia magna</i> . (AFwater=10; AFdv=5)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 2E-4 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 2E-4 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x $K_{pbodem/water} \times 1000/1700$ (RHO_{bodem}) = 2E-4 µg/L x 90,8 / 1,7 = 1,068E-2 µg/kg wwv. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 1,068E-4 x 3,33 = 3,557E-2 µg/kg dw	$K_{pbodem/water} = 90,8 \text{ m}^3/\text{m}^3$ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 3,6E-2 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 2E-4 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 2E-4 µg/L x 76,4 / 1,15 = 1,3287E-2 µg/kg dwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 1,3287E-4 x 2,71 = 3,6007E-2 µg/kg dwt	K _p _{susp/water} = 76,4 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 3,6E-2 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 0,853 mg/L PEC _{lucht} = 2,2E-3 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 3,60 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 6,74 mg/L PEC _{sediment} = 95,7 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3.
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

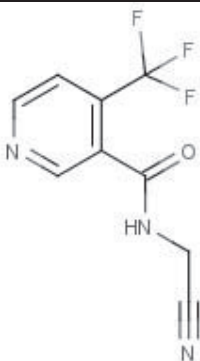
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
chloorpyrifos-methyl	1.00E+01	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco	2.00E-04	2.00E-04		3.60E-02	3.60E-02	
MPC human	1.49E+01	1.17E+02	3.83E-02	2.05E+04	5.11E+03	
Ratio MPC eco/MPC human	1.35E-05	1.70E-06		1.75E-06	7.04E-06	
Critical MPC *	2.00E-04	2.00E-04	3.83E-02	3.60E-02	3.60E-02	
% importance of total exposure	16.322	81.759	1.399	0.520		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	33.758					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Flonicamid	
CAS-NUMMER	158062-67-0	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	120 µg/L (water) 310 µg/L (grondwater)
	lucht	1,13E-6 µg/m ³
	bodem	400 µg/kg dwt
	sediment	360 µg/kg dwt
DATUM	13 november 2007	

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Flonicamid
CAS-nummer	158062-67-0
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	neutral organics, insecticide, pyridine
Synoniemen	Aria; Carbine; F 1785; Flonicamid; IKI 220
Molecuulformule	C ₉ H ₆ F ₃ N ₃ O
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	229,16		Toel. Dossier
Smeltpunt (°C)	145,6	mbv Smiles notatie	epiwin
Kookpunt (°C)	372,9	mbv. Smiles notatie	epiwin
Dampdruk (Pa)	9.43E-4 mPa (20 °C)= 9,43E-7 Pa		Pesticide manual
Oplosbaarheid in water (mg/L)	6222		
Log Kow	0,3 0,5 -0,75	Bij 29,8°C estimated estimated via Smiles	Toel. dossier epiwin ClogP
Log Koc	1,18	QSAR niet hydr. verbindingen	handreiking afleiding indicatieve normen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	1,086E-10 atm·m ³ /mol = 1,1E-5 Pa·m³/mol	VP/Wsol	epiwin
pKa	-	geen gegevens	epiwin

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	not biodegradable MITI linear: 0,3214 MITI non-linear: 0,0 Biowin 1: 0,4806 Biowin 2: 0,4458 Biowin 3: 1,8290	epiwin (CERI en BIODEG databases: no data)

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 US-EPA uit 2005 als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI (RfD).	1
Carcinogeniteit	Zie brondocument US-EPA	
Mutageniteit	Idem	
Kritische studie oraal	Idem	
Kritische studie inhalatie	idem	

Referenties:

1. US-EPA (2005) <http://a257.g.akamaitech.net/7/257/2422/01jan20051800/edocket.access.gpo.gov/2005/pdf/05-17128.pdf> (geraadpleegd op 18-09-2007)

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	>100		Toel. Dossier ¹ / Footprint database ²
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	>100		Toel. dossier
<i>Pimephales promelas</i>	33 dagen	NOEC	10		Toel. Dossier
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	>100		Toel. Dossier/ Footprint database
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	3,1		Toel. Dossier
algen					
<i>Ps. subcapitata</i>	72 uur	EC50	>100		Toel. dossier
<i>Algae</i>	-	EC50	119		Footprint database
Insecten					
<i>Chironomus riparius</i>	48 uur	LC50	>200		Toel. dossier
<i>Chironomus riparius</i>	28 dagen	NOEC	25		Toel. dossier

¹ Toelatingsdossier: <http://www.ctb.agro.nl> (geraadpleegd op 16-8-2007)

² <http://www.herts.ac.uk/aeru/footprint/en/reports/321.htm> (geraadpleegd op 5-11-2007)

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

geen gegevens van aanvrager

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	US-EPA (2005), RfD=0,04 mg/kg lg	
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,04 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege geringe vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee Ad hoc MTR = 310 µg/l	Op basis van een 21 dagen NOEC van 3,1 mg/l a.s. voor <i>Daphnia magna</i> . (AFwater=10; AFdv=1)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 310 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 310 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 310 µg/L x 0,654 / 1,7 = 119,25882 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 59,81176 x 3,33 = 397,13188 µg/kg dwt	K _p _{bodem/water} = 0,654 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 400 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 310 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 310 µg/L x 1,28 / 1,15 = 345,04348 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 345,04348 x 2,71 = 935,06783 µg/kg dwt	K _p _{susp/water} = 1,28 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 940 µg/kg dwt gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,77 mg/L PEC _{lucht} = 1,71E-8 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 4,06 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 10,5 mg/L PEC _{sediment} = 1,8 mg/kg wwt	EUSES 2.0.3
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

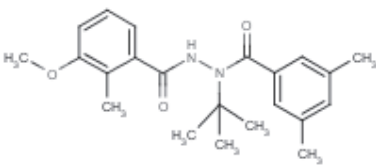
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
flonicamid	4.00E+01	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco	3.10E+02	3.10E+02		4.00E+02	9.40E+02	
MPC human	1.17E+02	6.93E+02	1.13E-06	8.78E+02	3.64E+02	
Ratio MPC eco/MPC human	2.65E+00	4.47E-01		4.56E-01	2.58E+00	
Critical MPC *	1.17E+02	3.10E+02	1.13E-06	4.00E+02	3.64E+02	
% importance of total exposure	0.065	99.930	0.000	0.005		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	49.803					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Methoxyfenozide
CAS-NUMMER		161050-58-4
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	0,18 µg/L
	lucht	7,75E-2 µg/m ³
	bodem	13,4 µg/kg dwt
	sediment	13,7 µg/kg dwt
DATUM		26 september 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Methoxyfenozide
CAS-nummer	161050-58-4
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	hydrazines; insecticide; diacylhydrazines
Synoniemen	RH-2485; Benzoic acid, 3-methoxy-2-methyl-, 2-(3,5-dimethylbenzoyl)-2-(1,1-dimethylethyl)hydrazide; N'-(tert-butyl)-N'-(3,5-dimethylbenzoyl)-3-methoxy-2-methylbenzohydrazide; N-tert-butyl-N'-(3-methoxy-o-toluoyl)-3,5-xylohydrazide
Molecuulformule	C ₂₂ H ₂₈ N ₂ O ₃
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	368,48		epiwin
Smeltpunt (°C)	204,5	experimenteel	SRC phys prop database
Kookpunt (°C)	539,1		
Dampdruk (Pa)	<1,48E-3 mPa (20 °C) <1,48E-6 Pa		Pesticide Manual
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1	experimenteel	SRC phys prop database
Log Kow	3,70 3,70	experimenteel	epiwin MLogP
Log Koc	3,1	QSAR hydr. stoffen	handreiking afleiding ind. normen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	< 5,45E-4	dampdruk/opl.heid	zelf berekend
pKa	-	geen gegevens	epiwin

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	inherently biodegradable, fulfilling criteria MITI linear: -0,3189 MITI non-linear: 0,0 Biowin 1: 0,6841 Biowin 2: 0,5082 Biowin 3: 1,8901	epiwin (CERI en BIODEG databases: no data)

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 JMPR 2003 als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI.	1
Carcinogeniteit	Zie brondocument JMPR	
Mutageniteit	Idem	
Kritische studie oraal	Idem	
Kritische studie inhalatie	idem	

Referenties:

1. JMPR (2003) <http://www.inchem.org/documents/jmpr/jmpmono/v2003pr07.htm#to2> (Geraadpleegd op 18-09-2007)

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	3,3		Footprint database ¹
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	4,2		PAN ² /EC-toel. Dossier ³
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96 uur	LC50	2,8		PAN ⁴ /EC-toel. dossier
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 uur	LC50	4,3		PAN/EC-toel. dossier
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	3,8		EC-toel. Dossier
<i>Pimephales promelas</i>	33 dagen	NOEC	2,4		NI-EC Toel. Dossier
<i>Cyprinodon variegatus</i>	32 dagen	NOEC	2,6		NI-EC Toel. Dossier
<i>Pimephales promelas</i>	262 dagen	NOEC	0,53		NI-EC Toel. Dossier
kreftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	3,7		PAN/Foot print database/ EC-toel. Dossier
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,39		NI-EC Toel. Dossier
<i>Americamysis bahia</i>	96 uur	LC50	1,3		PAN
algen					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	5 dagen	EC50	3,4		PAN/Foot print database/

					EC-toel. Dossier
Weekdier					
<i>Crassostrea virginica</i>	96 uur	EC50	1,2		PAN
Insecten					
<i>Chironomus riparius</i>	28 dagen	NOEC	0,018		Nl-EC Toel. dossier

¹ <http://www.herts.ac.uk/aeru/footprint/en/reports/321.htm> (geraadpleegd op 5-11-2007)

² PAN: http://www.pesticideinfo.org/Search_Chemicals.jsp (geraadpleegd op 5-11-2007)

³ NLToelatingsdossier: <http://www.ctb.agro.nl> (geraadpleegd op 16-8-2007)

⁴ EC toelatingsdossier: EC toel. dossier:

http://ec.europa.eu/food/plant/protection/evaluation/newactive/methoxyfenozide_review_report.pdf (geraadpleegd op 5-11-2007)

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

geen info van aanvrager

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	JMPR (2003), ADI=0,1 mg/kg lg	
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,1 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA ndig vanwege geringe vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Ja Ad hoc MTR = 0,18 µg/l	Op basis van een 28 dagen NOEC van 0,018 mg/l a.s. voor <i>Chironomus riparius</i> . (AFwater=50; AFdv=2)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 0,18 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,18 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 0,18 µg/L x 38 / 1,7 = 4,023529 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 4,023529 x 3,33 = 13,3983 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 38 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 13,4 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 0,18 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 0,18 µg/L x 32,4 / 1,15 = 5,071304 µg/kg ww.	K _p _{susp/water} = 32,4 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3.
	Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 5,071304 x 2,71 = 13,743 µg/kg dw	MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 13,7 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water} (opgelost) = 0,255 mg/L PEC _{lucht} = 4,92E-5 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 12,1 mg/kg ww PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 0,543 mg/L PEC _{sediment} = 10,1 mg/kg ww	EUSES 2.0.3.
2	Humanex-output: zie tabel hieronder	
3	Meest kritische ad hoc MTR's staan boven aan rapportage formulier vermeld.	

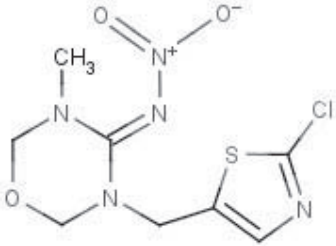
Output Humanex-resultaten:

	TDI (ug/kg bw/d)	TCA (ug/m3)	Corrected for TCA:			NO
methoxyfenozide	1.00E+02	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dw)	Sediment (ug/kg dw)	
MPC eco	1.80E-01	1.80E-01		1.34E+01	1.37E+01	
MPC human	4.02E+02	8.56E+02	7.75E-02	6.25E+04	4.88E+04	
Ratio MPC eco/MPC human	4.48E-04	2.10E-04		2.14E-04	2.81E-04	
Critical MPC *	1.80E-01	1.80E-01	7.75E-02	1.34E+01	1.37E+01	
% importance of total exposure	17.591	80.611	1.650	0.148		
Dominant route of exposure	leaf					
% of dominant route	46.199					

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM	Thiamethoxam	
CAS-NUMMER	153719-23-4	
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	1 µg/L
	lucht	1,05E-6 µg/m ³
	bodem	0,91 µg/kg dwt
	sediment	0,26 µg/kg dwt
DATUM	13 november 2007	

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Thiamethoxam
CAS-nummer	153719-23-4
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	neutral organics, insecticide, neonicotinoid
Synoniemen	Thiamethoxam; 3-((2-Chloro-5-thiazolyl)methyl)tetrahydro-5-methyl-N-nitro-4H-1,3,5-oxadiazin-4-imine; Actara; Adage; CCRIS 9026 CGA 293343; Cruiser; Diaclofen; Thiamethoxam; 4H-1,3,5-Oxadiazin-4-imine, 3-((2-chloro-5-thiazolyl)methyl)tetrahydro-5-methyl-N-nitro-
Molecuulformule	C ₈ H ₁₀ Cl N ₅ O ₃ S
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	291,7		Toel. dossier
Smeltpunt (°C)	145,6	geschatte waarde	epiwin
Kookpunt (°C)	373	geschatte waarde	epiwin
Dampdruk (Pa)	6,6E-6 mPa (25 °C) = 6,6E-9 Pa		Pesticide Manual
Oplosbaarheid in water (mg/L)	6222	geschatte waarde	epiwin
Log Kow	-0,13 0,50 0,72	25°C geschatte waarde geschatte waarde	Toel. dossier epiwin CLogP
Log Koc	0,95	QSAR niet-hydr. stoffen	handreiking afleiding ind. normen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	1,086E-10 atm·m ³ /mol = 1,1E-5 Pa·m³/mol	berekend uit dampdruk en opl.heid	epiwin
pKa	-	geen gegevens	epiwin

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	not biodegradable MITI linear: 0,3214 MITI non-linear: 0,0 Biowin 1: 0,4806 Biowin 2: 0,4458 Biowin 3:1,829	epiwin (CERI en BIODEG database: geen data)

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Beoordeling EU (2006) als bestrijdingsmiddel beschikbaar met daarin afgeleide ADI	1
Carcinogeniteit	Zie brondocument EU	
Mutageniteit	Idem	
Kritische studie oraal	Idem	
Kritische studie inhalatie	idem	

Referenties:

1. EU (2006) http://ec.europa.eu/food/plant/protection/evaluation/newactive/thiamethoxam_en.pdf (Geraadpleegd op 17-10-2007)

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LD50	>125		NI-EC Toel. dossier ^{1,2}
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	100		Footprint database ³
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	88 dagen	NOEC	20		NI-EC Toel. Dossier
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	100		Footprint database
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	100		NI-EC Toel. Dossier
Ostracoda					
<i>Chaoborus sp.</i>	48 uur	EC50	0,18		NI-EC Toel. dossier
algen					
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	-	EC50	100		Footprint database
<i>Selenastrum capricornutum</i>	72 uur	NOEC	81,8		Toel. dossier
<i>Selenastrum capricornutum</i>	72 uur	EC50	>81,8		Toel. dossier
Insecten					
<i>Cloeon sp.</i>	48 uur	EC50	0,014		NI-EC Toel. dossier
<i>Chironomus riparius</i>	30 dagen	NOEC	0,01		EC-Toel. Dossier
Weekdieren					
<i>Crassostrea virginica</i>	96 uur	EC50	>119		NI-EC Toel. dossier

Rotiferen					
<i>Brachionus calyciflorus</i>	24 uur	EC50	>100		NI-EC Toel. dossier

¹ NLToelatingsdossier: <http://www.ctb.agro.nl> (geraadpleegd op 16-8-2007)

² EC toelatingsdossier: EC toel. dossier: http://ec.europa.eu/food/plant/protection/evaluation/newactive/thiamethoxam_en.pdf (geraadpleegd op 5-11-2007)

³ <http://www.herts.ac.uk/aeru/footprint/en/> (geraadpleegd op 5-11-2007)

Dikgedrukte 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)

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	EU (2006), ADI=0,026 mg/kg lg/dag	
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18	ad hoc MTR _{humaan} van 0,026 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege geringe vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee Ad hoc MTR = 1 µg/l	Op basis van een 30 dagen NOEC van 0,01 mg/l a.s. voor <i>Chironomus riparius</i> (AFwater=10; AFdv=1)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 1 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 1 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 1 µg/L x 0,467 / 1,7 = 0,2747 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 0,2747 x 3,33 = 0,9147 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 0,467 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 0,91 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 1 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 1 µg/L x 1,12 / 1,15 = 0,9739 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 0,9739 x 2,71 = 2,6393 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 1,12 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 2,6 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,77 mg/L PEC _{lucht} = 1,93E-8 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 2,9 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 10,5 mg/L PEC _{sediment} = 1,55 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
thiamethoxam	2.60E+01	N.A.				
	Surface water (ug/L)	Groundwater (ug/L)	Air (ug/m3)	Soil (ug/kg dwt)	Sediment (ug/kg dwt)	
MPC eco	1.00E+00	1.00E+00		9.10E-01	2.60E+00	
MPC human	9.66E+01	5.73E+02	1.05E-06	5.18E+02	3.63E+02	
Ratio MPC eco/MPC human	1.04E-02	1.75E-03		1.76E-03	7.16E-03	
Critical MPC *	1.00E+00	1.00E+00	1.05E-06	9.10E-01	2.60E+00	
% importance of total exposure	0.082	99.913	0.000	0.005		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	63.346					

Bijlage G Rapportageformulier

tetramethyl ammoniumchloride

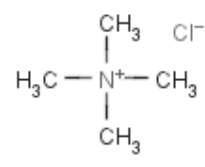
Opdrachtgegevens

Projectnummer	M/601782/07/
Dossiernummer	11357
Opdrachtgever	RWS-WD
Datum opdracht	03-09-2007
Datum rapportage	20-11-2007
Opdracht	Afleiden van indicatieve milieukwaliteitsnormen voor tetramethyl ammoniumchloride

Rapportageformulier

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Tetramethyl ammoniumchloride
CAS-NUMMER		75-57-0
VOORGESTELDE ad hoc MTR	(grond)water	15,7 µg/L (water) 46,2 µg/L (grondwater)
	lucht	1,07E-8 µg/m ³
	bodem	18,2 µg/kg dwt
	sediment	32,6 µg/kg dwt
DATUM		13 november 2007

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Tetramethyl ammoniumchloride
CAS-nummer	75-57-0
Stofgroep volgens EPIWin 3.12	neutral organics
Synoniemen	Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, chloride; N,N,N-Trimethylmethanaminium chloride; Tetramethylammonium chloride; AI3-19012; EINECS 200-880-8; N,N,N-Trimethylmethanaminium chloride Tetramethylammonium chloride; Tetramine chloride USAF AN-8; Ammonium, tetramethyl-, chloride; Methanaminium, N,N,N-trimethyl-, chloride; Tetramethylammonium chloride
Molecuulformule	C ₄ H ₁₂ N.Cl
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	109,60		epiwin
Smeltpunt (°C)	420		SRC Physporp database
Kookpunt (°C)	324,50	lager dan smeltpunt!	epiwin
Dampdruk (Pa)	1,21E-8 mm Hg = 1,61E-6 Pa		epiwin
Oplosbaarheid in water (mg/L)	10091	geschatte waarde	epiwin
Log Kow	-4.18 -4,68	geschatte waarde	epiwin CLogP
Log Koc	-1,41	QSAR voor niet hydrofobe stoffen	handreiking afleiding ind. normen
Henry-coefficient (Pa·m ³ /mol)	1,745E-15 atm·m ³ ·mol = 1,768E-10 Pa·m³·mol	berekend uit dampdruk en oplosbaarheid	epiwin
pKa	-	geen gegevens	epiwin

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

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
(Aerobe bio)degradatie	inherently biodegradable fulfilling criteria MITI linear: 0,3785 MITI non-linear: 0,4242 Biowin 1: 0,6954 Biowin 2: 0,8104 Biowin 3: 2,9570	epiwin CERI and BIODEG databases: no data

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

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset	Geen bestaande beoordeling beschikbaar voor de stof zelf. Tetramethylammoniumhydroxide is een sterk verwante verbinding. Voor deze stof is OECD-SIDS beschikbaar.	1
Carcinogeniteit	Niet onderzocht	
Mutageniteit	In vitro	
Kritische studie oraal	NOAEL 28 dagen oraal (gavage) rat, 5 mg/kg lg/dag	
Kritische studie inhalatie	Niet beschikbaar	

Referenties:

1. OECD (2006) Tetramethylammonium hydroxide - SIDS Initial Assessment Report For SIAM 22 Paris, France, 18-21 April 2006. https://www.oecd.org/document/63/0,3343,en_2649_201185_1897983_1_1_1_1,00.html (Geraaad[pleegd op 17-10-2007])

4.2 Ecotoxiciteit

species	duur (uur)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	462		Aquire/ ecotox
kreeftachtigen					
algen					

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

5. CLASSIFICATIE & LABELLING

5.1 C & L volgens de Material Safety Data Sheet

geen informatie ontvangen van aanvrager

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

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

6. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

Ad hoc MTR_{humaan}

Stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Nee	
4	Nee, voor verwante stof tetramethylammoniumhydroxide is er OECD-SIDS (2006)	NB. Analogie met andere quats. Voor deze brede groep van stoffen wordt irritatie als kritische effect beschouwd (ook via orale route).
5	Nee (tetramethylammoniumhydroxide)	
6	Nee (tetramethylammoniumhydroxide)	
7	Ja (tetramethylammoniumhydroxide)	
8	Ja, 5 mg/kg lg/dag (28 dagen rat)	
9	-	
10	10 interspecies, 10 intraspecies, 10 beperkte studieduur en beperkte dataset	
11	Ja	
12	0,005 mg/kg lg/dag	
13	Nee	
14	-	
15	-	
16	-	
17	In vitro genotoxiciteit negatief (tetramethylammoniumhydroxide)	
18	Ad hoc MTR _{humaan} van 0,005 mg/kg lg/dag gebruikt voor integratie humaan en eco.	Geen TCA nodig vanwege geringe vluchtigheid

Ad hoc MTR_{eco} (grond)water

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	Nee Ad hoc MTR = 46,2 µg/l	Op basis van een 4 dagen LC50 van 462 mg/l voor <i>Pimephales promelas</i> . (AFwater=10000; AFdv=1)
4		
5	ad hoc MTR _{eco} water van 46,2 µg/L gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} lucht

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

Ad hoc MTR_{eco} bodem

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 46,2 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} bodem = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{bodem/water} x 1000/1700 (RHO _{bodem}) = 46,2 µg/L x 0,201 / 1,7 = 5,4625 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-bodem en op basis van drooggewicht: 5,4625 x 3,33 = 18,19 µg/kg dw	K _p _{bodem/water} = 0,201 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaardbodem.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} bodem van 18,2 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

Ad hoc MTR_{eco} sediment

stap	Resultaat	opmerking
1	nee	
2	nee	
3		
4		
5		
6	ad hoc MTR _{eco} water = 46,2 µg/L	
7	ad hoc MTR _{eco} sediment = ad hoc MTR _{eco} water x K _p _{susp/water} x 1000/1150 (RHO _{susp. matter}) = 46,2 µg/L x 0,901 / 1,15 = 36,197 µg/kg wwt. Omrekening naar NL-sediment en op basis van drooggewicht: 36,197 x 2,71 = 98,09 µg/kg dw	K _p _{susp/water} = 0,901 m ³ /m ³ volgens EUSES 2.0.3. MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van een NLstandaard sediment.
8		
9		
10	ad hoc MTR _{eco} sediment van 98,1 µg/kg dw gebruikt voor integratie humaan en eco.	

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

stap	resultaat	opmerking
1	PEC _{opp. water (opgelost)} = 1,02 mg/L PEC _{lucht} = 6,98E-10 mg/m ³ PEC _{landbouwgrond} = 1,14 mg/kg wwt PEC _{landbouwgrond, poriewater} = 9,61 mg/L PEC _{sediment} = 0,692 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
tetramethyl ammoniumchloride	(ug/kg bw/d)	(ug/m3)				
	5.00E+00	N.A.				
	Surface water	Groundwater	Air	Soil	Sediment	
	(ug/L)	(ug/L)	(ug/m3)	(ug/kg dwt)	(ug/kg dwt)	
MPC eco	4.62E+01	4.62E+01		1.82E+01	9.81E+01	
MPC human	1.57E+01	1.48E+02	1.07E-08	5.74E+01	3.26E+01	
Ratio MPC eco/MPC human	2.95E+00	3.13E-01		3.17E-01	3.01E+00	
Critical MPC *	1.57E+01	4.62E+01	1.07E-08	1.82E+01	3.26E+01	
% importance of total exposure	0.070	99.928	0.000	0.003		
Dominant route of exposure	drw					
% of dominant route	84.848					

**Bijlage H Het stappenschema
(RIVMrapport 601503024,
Hansler, Traas en Mennes, 2006)**

Voor nadere details en uitleg van de voetnoten verwijzen we naar het originele rapport, www.rivm.nl

Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
START	alle stoffen			
1	Is door het RIVM in de laatste 10 jaar een MTR of daarmee vergelijkbare grootheid afgeleid? (zie http://www.rivm.nl/)	ja	Baseer ad hoc MTR op deze bestaande MTR of vergelijkbare grootheid.	18
		nee		2
2	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
3	Bevat de HSDB-database (zie Bijlage 2) experimentele toxiciteitsdata van deze stof?	ja		4
		nee	ad hoc MTR = 1,5 µg/p/d ₁	18
4	Zijn er slechts acute toxiciteits-, irritatie-, corrosiviteits- en/of sensibilisatiegegevens?	ja	ad hoc MTR = 1,5 µg/p/d	18
		nee	AF ₂₁ = 10; AF ₂ = 10	5
	stoffen met experimentele toxiciteitsgegevens			
5	Is een 'life-time'-toxiciteitsstudie aanwezig?	ja	AF ₃ = 1	6
		nee	AF ₃ = 10	6

6	Zijn zowel fertiliteits- als pre-/postnatale ontwikkelingseffecten onderzocht?	ja		7
		nee	AF4 = 10	8
Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
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	MTIL ₃ = 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
	evaluatie carcinogeniteit			
13	Is de carcinogeniteit onderzocht?	ja		14
		nee		17
14	Is carcinogeniteit gevonden?	ja		15
		nee	ad hoc MTR = MTIL	18
15	Is 1/10 ⁴ /levenslang risico te bepalen?	ja	bepaal 1/10 ⁴ /levenslang risico	16

		nee	ad hoc MTR = MTIL	18
Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
16	Is $1/10^4/\text{levenslangrisico} \leq \text{MTIL}$?	ja	ad hoc MTR = $1/10^4/\text{levenslangrisico}$	18
16	Is $1/10^4/\text{levenslangrisico} \leq \text{MTIL}$?	ja	ad hoc MTR = $1/10^4/\text{levenslangrisico}$	18
		nee	ad hoc MTR = MTIL	18
	evaluatie mutageniteit			
17	Is in de chemische structuur van de stof een Structural Alert voor mutageniteit aanwezig?	ja	ad hoc MTR = 1,5 µg/p/d	18
		nee	ad hoc MTR = MTIL	18
18	Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{eco}</i>			§ 3.4
ad hoc MTR_{eco}(grond)water				
Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
1	Is er een officieel MTR _{eco} beschikbaar voor water? (zie Bijlage 2 en http://www.stoffen-risico.nl)	ja	Er wordt geen ad hoc MTR voor water afgeleid ₁	STOP
		nee		2
2	Zijn er experimentele ecotox-data voor water voor deze stof? (zie Bijlage 2)	ja		3
		nee	Baseer ad hoc MTR _{water} op humane tox (§ 3.2)	§ 3.4
3	Bepaal kans op doorvergiftiging: voldoet de stof aan de criteria in Tabel 7?	ja	Bereken AF _{water} en AF _{doorvergiftiging}	4

		nee	Bereken ad hoc MTR_{water} (Tabel 9)	5
Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
4	Deze berekening houdt rekening met additionele effecten als gevolg van bioaccumulatie en doorvergiftiging (DV)	Bereken ad hoc MTR_{water} met $AF = AF_{water}(\text{Tabel 9}) \times AF_{doorvergiftiging}(\text{Tabel 8})$		5
5	Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTR_{huuman} en ad hoc MTR_{eco}</i>			§ 3.4
ad hoc MTR_{eco} lucht				
1	Is er een officieel MTR_{eco} beschikbaar voor lucht? (zie Bijlage 2 en http://www.stoffen-risico.nl)	ja	Er wordt geen ad hoc MTR voor lucht afgeleid ¹	STOP
		nee		2
2	Zijn er experimentele ecotox-data voor lucht voor deze stof? (zie Bijlage 2)	ja		3
		nee	Baseer ad hoc MTR_{lucht} op humane tox (§ 3.2)	§ 3.4
3	Bereken ad hoc MTR_{lucht}	1. 2.	Zoek AF_{lucht} op in Tabel 6 ad hoc $MTR_{lucht} = LOAEL/AF_{lucht}$	Tabel 6 4
4	Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTR_{huuman} en ad hoc MTR_{eco}</i>			§ 3.4
ad hoc MTR_{eco} bodem				
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 http://www.stoffen-risico.nl)	ja	Er wordt geen ad hoc MTR voor bodem afgeleid ¹	STOP
		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 AF_{bodem} en $AF_{\text{doorvergiftiging}}$	4
		nee	Bereken ad hoc MTR_{bodemEXP} (Tabel 10) ²	5
4	Deze berekening houdt rekening met additionele effecten als gevolg van bioaccumulatie en doorvergiftiging (DV)	Bereken ad hoc MTR_{bodemEXP} met $AF = AF_{\text{bodem}}(\text{Tabel 10}) * AF_{\text{doorvergiftiging}}(\text{Tabel 8})$		5
5	Bereken ook ad hoc MTR_{bodemEP1}			6
6	Zijn er experimentele ecotox-data voor water van deze stof? (zie Bijlage 2)	ja	Bereken ad hoc MTR_{water} (zie stappenschema ad hoc MTR_{water})	7
		nee	Baseer ad hoc MTR_{bodemOP} humane tox (§ 3.2)	§3.4
7	Bereken ad hoc $MTR_{\text{bodemEPuit}}$ ad hoc MTR_{water}	ad hoc $MTR_{\text{bodemEP}} = \text{ad hoc } MTR_{\text{water}} * K_p(\text{bodem/water}) * F_{\text{bodemNL2}}$		8
8	Is ad hoc MTR_{bodemEXP} beschikbaar?	ja		9

		nee	ad hoc MTR_{bodem} = ad hoc $MTR_{bodemEP}$	10
9	Is ad hoc $MTR_{bodemEP}$ < ad hoc $MTR_{bodemEXP}$?	ja	ad hoc MTR_{bodem} = ad hoc $MTR_{bodemEP}$	10
		nee	ad hoc MTR_{bodem} = ad hoc $MTR_{bodemEXP}$	10
Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
10	Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTR_{huuman} en ad hoc MTR_{reco}</i>			§ 3.4
ad hoc MTR_{reco} sediment				
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 http://www.stoffen-risico.nl)	ja	Er wordt geen ad hoc MTR voor sediment afgeleid ¹	STOP
		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 $AF_{sediment}$ en $AF_{doorvergiftiging}$	4
		nee	Bereken ad hoc $MTR_{sedimentEXP}$ ² (Tabel 11)	5
4	Deze berekening houdt rekening met additionele effecten als gevolg van bioaccumulatie en doorvergiftiging (DV)	Bereken ad hoc $MTR_{sedimentEXP}$ met $AF = AF_{sediment}$ (Tabel 11) * $AF_{doorvergiftiging}$ (Tabel 8)		5

5	Bereken ook ad hoc $MTR_{\text{sedimentEP}}^3$			6
6	Zijn er experimentele ecotox-data voor water van deze stof? (zie Bijlage 2)	ja	Bereken ad hoc MTR_{water} (zie stappenschema ad hoc MTR_{water})	7
		nee	Baseer ad hoc $MTR_{\text{sedimentOP}}$ humane tox (§ 3.2)	§ 3.4
Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie	Ga naar
7	Bereken ad hoc $MTR_{\text{sedimentEP}}$ uit ad hoc MTR_{water}		ad hoc $MTR_{\text{sedimentEP}} = \text{ad hoc } MTR_{\text{water}} * K_p(\text{sediment/water}) * F_{\text{sedimentNL } 1}$	8
8	Is ad hoc $MTR_{\text{sedimentEXP}}$ beschikbaar?	ja		9
		nee	ad hoc $MTR_{\text{sediment}} = \text{ad hoc } MTR_{\text{sedimentEP}}$	10
9	Is ad hoc $MTR_{\text{sedimentEP}} < \text{ad hoc } MTR_{\text{sedimentEXP}}$?	ja	ad hoc $MTR_{\text{sediment}} = \text{ad hoc } MTR_{\text{sedimentEP}}$	10
		nee	ad hoc $MTR_{\text{sediment}} = \text{ad hoc } MTR_{\text{sedimentEXP}}$	10
10	Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTR_{humaan} en ad hoc MTR_{reco}</i>			§ 3.4

Integratie met humaan:

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

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

