

# **Afleiding van het ecotoxicologisch deel voor 29 ad hoc MTR's voor 2010**

Valesca Harezlak (Deltares)  
Rineke Keijzers (Ecofide)

1203121-001





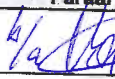
**Titel**  
Afleiding van het ecotoxicologisch deel voor 29 ad hoc MTR's voor 2010

<b>Opdrachtgever</b> Rijkswaterstaat Waterdienst	<b>Project</b> 1203121-001	<b>Kenmerk</b> 1203121-001-ZWS-0011	<b>Pagina's</b> 110
---	-------------------------------	--	------------------------

**Trefwoorden**  
Ad hoc MTR<sub>eco</sub>, normen.

**Samenvatting**

Dit rapport beschrijft de afleiding van het ecotoxicologisch deel van 29 ad hoc MTR's. Dit gebeurt conform de eenvoudige procedure voor de afleiding van de ad hoc MTR's zoals beschreven in de Handreiking voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen (Interimversie 2009); RIVM-rapport 601782025/2009. Het gaat om de volgende stoffen: cythioaat, diafenthiuron, diclobutrazool, difenamide, difenylamine, dimoxystrobine, diniconazool, dioxagbenzofos, dioxathion, disulfoton-sulfon, edifenfos, etaconazool, ethiprol, ethofenprox, fenazaquin, fenobucarb, fenothiocarb, fenpyroximaat, fensulfothion, fention-sulfoxide, flubenzimine, fluchloralin, fluometuron, fluquinconazool, flurenol-butyl, fluoxypyr-meptyl, fluvalinaat, foraat-sulfon, foraat-sulfoxide.

Versie	Datum	Auteur	Paraaf	Review	Paraaf	Goedkeuring	Paraaf
1.1	juli 2011	Valesca Harezlak (Deltares)		Leonard Osté		Toon Segeren	
		Rineke Keijzers (Ecofide)					

**Status**  
definitief



## Inhoud

<b>1 Inleiding</b>	<b>1</b>
<b>2 Methode</b>	<b>3</b>
2.1 Rapportage van gegevens	3
2.2 Het stappenplan	3
<b>3 Resultaten</b>	<b>5</b>
<b>4 Literatuur</b>	<b>7</b>
<b>Bijlage(n)</b>	
<b>A Rapportageformulier Cythiotaat</b>	<b>A-1</b>
<b>B Rapportageformulier Diafenthiuron</b>	<b>B-1</b>
<b>C Rapportageformulier Diclobutrazool</b>	<b>C-1</b>
<b>D Rapportageformulier Difenamide</b>	<b>D-1</b>
<b>E Rapportageformulier Difenylamine</b>	<b>E-1</b>
<b>F Rapportageformulier Dimoxystrobine</b>	<b>F-1</b>
<b>G Rapportageformulier Diniconazool</b>	<b>G-1</b>
<b>H Rapportageformulier Dioxabenzofos</b>	<b>H-1</b>
<b>I Rapportageformulier Dioxathion</b>	<b>I-1</b>
<b>J Rapportageformulieren Disulfoton-sulfon</b>	<b>J-1</b>
<b>K Rapportageformulier Edifenfos</b>	<b>K-1</b>
<b>L Rapportageformulier Etaconazool</b>	<b>L-1</b>
<b>M Rapportageformulier Ethiprol</b>	<b>M-1</b>
<b>N Rapportageformulier Ethofenprox</b>	<b>N-1</b>
<b>O Rapportageformulier Fenazaquin</b>	<b>O-1</b>
<b>P Rapportageformulieren Fenobucarb</b>	<b>P-1</b>
<b>Q Rapportageformulieren Fenothiocarb</b>	<b>Q-1</b>

<b>R Rapportageformulier Fenpyroximaat</b>	<b>R-1</b>
<b>S Rapportageformulier Fensulfothion</b>	<b>S-1</b>
<b>T Rapportageformulier Fention-sulfoxide</b>	<b>T-1</b>
<b>U Rapportageformulier Flubenzimine</b>	<b>U-1</b>
<b>V Rapportageformulier Fluchloralin</b>	<b>V-1</b>
<b>W Rapportageformulier Fluometuron</b>	<b>W-1</b>
<b>X Rapportageformulier Fluquinconazool</b>	<b>X-1</b>
<b>Y Rapportageformulier Flurenol-butyl</b>	<b>Y-1</b>
<b>Z Rapportageformulier Fluroxypyr-meptyl</b>	<b>Z-1</b>
<b>AA Rapportageformulier Fluvalinaat</b>	<b>AA-1</b>
<b>BB Rapportageformulier Foraat-sulfon</b>	<b>BB-1</b>
<b>CC Rapportageformulier Foraat-Sulfoxide</b>	<b>CC-1</b>
<b>DD Rapportageformulier</b>	<b>DD-1</b>

## 1 Inleiding

Sinds 2008 leidt Deltares het ecotoxicologische deel van de ad hoc MTR's af in opdracht van RWS Waterdienst. De ad hoc MTR's worden over het algemeen gebruikt om de lozingen van deze stoffen in oppervlaktewater te kunnen beoordelen, of om monitoringgegevens van met name bestrijdingsmiddelen te kunnen toetsen. De eenvoudige procedure voor de afleiding van de ad hoc MTR's is beschreven in RIVM-rapport 601782025/2009 (Van Herwijnen et al., 2009).

Deltares heeft, samen met adviesbureau Ecofide, het chemisch en ecotoxicologische deel van de ad hoc MTR's uitgevoerd. Normaal gesproken berekent het RIVM het  $MTR_{\text{humaan}}$  en het resultante ad hoc MTR. Wegens andere prioriteitstelling zal RIVM dat voor de stoffen in dit rapport niet meer doen. Ook RWS Waterdienst heeft besloten dat 2010 het laatste jaar was voor afleiding van ad hoc MTRs voor stoffen zonder sterke urgentie.

Omdat de totale afleidingsprocedure niet is afgerond, hebben de in dit rapport vermelde waarden niet de gebruikelijke procedure doorlopen, te weten: beoordeling door een interne RIVM toetsgroep, beoordeling door de Wetenschappelijke Klankbordgroep van INS 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 (Van Herwijnen et al., 2009). 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<sub>humaan</sub>) en op basis van ecotoxicologische eindpunten (ad hoc MTR<sub>eco</sub>). Het ad hoc MTR wordt gelijkgesteld aan de meest kritische.

De te volgen aanpak sluit zoveel mogelijk aan bij (inter)nationale gangbare methodieken. Omdat een minder uitvoerige literatuursearch naar gegevens wordt uitgevoerd en omdat 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<sub>eco</sub> kan worden afgeleid; in die gevallen wordt het ad hoc MTR slechts gebaseerd op het ad hoc MTR<sub>humaan</sub>. Als er gegevens voor het ad hoc MTR ontbreken worden deze in eerste instantie aangevuld via QSAR<sup>1</sup> berekeningen. Over het algemeen geeft dit minder betrouwbare waarden en kunnen de ad hoc MTR's alleen indicatief gebruikt worden.

### 2.1 Rapportage van gegevens

Als een ad hoc MTR wordt afgeleid is het in ieder geval altijd noodzakelijk om te documenteren welke informatie is gebruikt en wat de onderliggende overwegingen zijn geweest voor de keuze van onzekerheidsfactoren. Dit gebeurt in zogenaamde rapportageformulieren. 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 Van Herwijnen et al. (2009). In dit rapport zijn de rapportageformulieren (zie bijlagen) ingekort, omdat er anders een groot aantal lege tabellen werd gepresenteerd. Een volledig rapportageformulier is te vinden in bijlage CC.

### 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 Van Herwijnen et al. (2009), en staat weergegeven in Bijlage DD.

---

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



### 3 Resultaten

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

Tabel 3.1 Voorgestelde ad hoc MTR's.

Stof	CAS nummer	Oppervlaktewater µg/l	Sediment µg/kg dwt
Cythioaat	115-93-5	0,59	
Diafenthiuron	80060-09-9	0,00023	0,014
Diclobutrazool	75736-33-3	0,96	
Difenamide	957-51-7	0,73	
Difenylamine*	122-39-4	2 (RAR: 1,2)	
Dimoxystrobine	149961-52-4	0,02	0,91
Diniconazool	83657-24-3	0,53	
Dioxabenzofos	3811-49-2	0,0012	
Dioxathion	78-34-2	0,00012	
Disulfoton-sulfon	2497-06-5	0,012	
Edifenfos	17109-49-8	0,02	
Etaconazool	60207-93-4	0,25	
Ethiprol	181587-01-9	Geen data	
Ehtofenprox	80844-07-1	0,00054	0,038
Fenazaquin	120928-09-8	0,096	5,88
Fenobucarb	3766-81-2	0,0017	
Fenothiocarb	62850-32-2	2,23	
Fenpyroximaat	134098-61-6	0,011	0,275
Fensultfothion	115-90-2	0,0033	
Fention-sulfoxide	3761-41-9	0,24	
Flubenzimine	37893-02-0	0,28	
Fluchloralin	33245-39-5	0,00051	
Floumeturon	2164-17-2	3,0	
Fluquinconazool	136426-54-5	0,032	
Flurenol-butyl	2314-09-2	1,52	
Fluroxypyr-meptyl*	81406-37-3	0,61	
Fluvalinaat	69409-94-5	0,000024	0,019
Foraat-sulfon	2588-04-7	2515	
Foraat-sulfoxide	2588-05-8	14,8	

\* Deze stoffen dissociëren in enige mate. De Handreiking is in principe niet bedoeld voor dissociërende stoffen. De ad hoc MTRs zijn wel vermeld, maar de onzekerheid is groter dan voor andere stoffen. De toxiciteit van dergelijke stoffen kan pH-afhankelijk zijn, omdat de gedissocieerde vorm meer of minder toxisch is.



## 4 Literatuur

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.

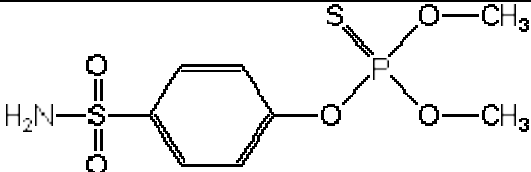
Van Herwijnen, R, P.J.C.M. Janssen, T.H.A. Haverkamp en L.R.M. de Poorter, 2009. Handreiking voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen (Interim-versie 2009). RIVM-rapport 601782025/2009, Bilthoven.



## A Rapportageformulier Cythioaat

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Cythioaat
CAS-NUMMER		115-93-5
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,59 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Cythioaat
IUPAC naam	O,O-dimethyl O-4-sulfamoylphenyl phosphorothioate
Synoniemen	Benzenesulfonamide, p-hydroxy-, O-ester with O,O-dimethyl phosphorothioate; Cyflee; O,O-Dimethyl O-(4-(aminosulfonyl)phenyl) phosphorothioate; O,O-Dimethyl O-(4-sulfamoylphenyl) phosphorothioate; O,O-Dimethyl O-4-sulphamoylphenyl phosphorothioate; O,O-Dimethyl O-p-sulfamoylphenyl phosphorothioate; O,O-Dimethyl phosphorothioate O-ester with p-hydroxybenzenesulfonamide; O-(4-(Aminosulfonyl)phenyl) O,O-dimethyl phosphorothioate; Proban
CAS-nummer	115-93-5
Stofgroep volgens EPIWin	Amides, esters, monothiophosphates
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Cholinesterase remmer
Classificatie	Insecticide
Molecuulformule	C8 H12 N1 O5 P1 S2
Smiles (indien gebruikt)	O=S(=O)(N)c(ccc(OP(OC)(OC)=S)c1)c1
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>297,28</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>87,05</b>	Berekend, gewogen gemiddelde	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>405,67</b>	Stein and Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>2,05E-04</b>	Modified Grain methode	EPI Suite v2.1
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>920</b>	Fragment berekening	EPI Suite v2.1
	972	Berekend	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	<b>1,23</b>	Berekend	Bioloom, 2006
	1,31	Berekend	Physprop, 2010
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>1,67</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	0,67	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>6,27E-05</b>	<b>Berekend</b>	HIM, 2009

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
	3,38E-04	Berekend	EPI Suite v2.1
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>0,35</b>	Veith et al., 1979 (uit HIM, 2009)

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	Duur (dagen)	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen	4	LC <sub>50</sub>	<b>59,09</b>	<sup>1)</sup>	Ecosar v1.00a
kreeftachtigen					
algen					
sediment (indien getriggerd)					
bodem					
lucht (indien getriggerd)					

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

<sup>1)</sup> Op basis van Ecosar met een QSAR voor monothiofosfaat-esters. Deze geeft chronische en acute data voor alg, daphnia en vis, maar alleen de QSAR voor de acute vis voldoet aan de kwaliteitseisen (n=6; R<sup>2</sup>=0,77). Voor amides (geeft Ecosar ook als optie) voldoet geen enkele QSAR aan de kwaliteitseisen.

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4	Berekening: $59,09 / 100000 = 0,59 \mu\text{g/l}$	LC <sub>50</sub> =59,09 mg/l; AF=10000 * 10 (voor QSAR)
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,59</b> $\mu\text{g/L}$	



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

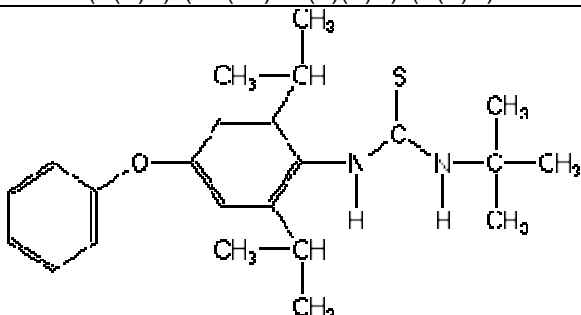
stap	resultaat	opmerking
1	nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		



## B Rapportageformulier Diafenthiuron

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Diafenthiuron
CAS-NUMMER		80060-09-9
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,00023 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	0,014 µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Diafenthiuron
IUPAC naam	1-tert-butyl-3-(2,6-di-isopropyl-4-phenoxyphenyl)thiourea
Synoniemen	1-tert-Butyl-3-(2,6-di-isopropyl-4-phenoxyphenyl)thiourea; 3-(2,6-Diisopropyl-4-phenoxyphenyl)-1-tert-butylthiourea; N-(2,6-Bis(1-methylethyl)-4-phenoxyphenyl)-N'-(1,1-dimethylethyl)thiourea; Pegasus; Polo
CAS-nummer	80060-09-9
Stofgroep volgens EPIWin	Thiourea
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Metaboliët (carbodiimide) is een remmer van mitochondriale respiratie
Classificatie	Insecticide
Molecuulformule	C <sub>23</sub> H <sub>32</sub> N <sub>2</sub> O <sub>1</sub> S <sub>1</sub>
Smiles (indien gebruikt)	<chem>c1ccccc1Oc2cc(C(C)C)c(NC(=S)NC(C)(C)C)c(C(C)C)c2</chem>
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>384,58</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>146</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>467,41</b>	Stein en Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>1,43E-06</b>	Modified Grain methode	EPI Suite v2.1
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>0,06</b>	Experimenteel, 25°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	<b>5,76</b>	Experimenteel	Bioloom, 2006
	6,0	Experimenteel	Physprop, 2010
	5,45	Berekend	Bioloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>4,76</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>3,76</b>	Berekend	HIM, 2009

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>2,43E-03</b>	Berekend	HIM, 2009
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>4,20</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	<b>0,0007</b>		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,5		Footprint
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2	ja	
3	-	
4	Berekening: 0,0007 mg/l / 3000 = 0,23 ng/l	LC <sub>50</sub> vis; AF=3000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,00023</b> µg/L	

#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Ja	
2	Nee	
3	Nee	
4		
5	Ja	
6		
7	<p>ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub> = ad hoc MTR<sub>eco, water</sub> x K<sub>p</sub><sub>susp/water</sub> x 1000/1150 (RHO<sub>susp. matter</sub>) = 2,33 E -4 µg/L x 260 / 1,15 = 0,053 µg/kg<sub>wwt</sub>.</p> <p>Omrekening naar NL-sediment op basis van drooggewicht:</p>	<p>K<sub>p</sub><sub>susp/water</sub> = 260 m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>. (EUSES v2.1)</p> <p>MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NLstandaard</p>

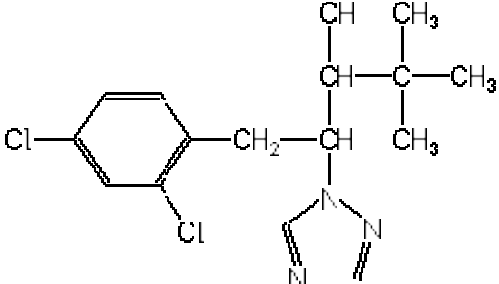
stap	resultaat	opmerking
	$0,92 \times 2,71 = 0,14 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	sediment.
8	Ja, $0,014 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	
9	nee	
10		
11	Het ad hoc $\text{MTR}_{\text{eco, sediment}}$ is <b>0,014</b> $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	



## C Rapportageformulier Diclobutrazool

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Diclobutrazool
CAS-NUMMER		75736-33-3
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,96 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Diclobutrazool
IUPAC naam	(2 <i>RS</i> ,3 <i>RS</i> )-1-(2,4-dichlorophenyl)-4,4-dimethyl-2-(1 <i>H</i> -1,2,4-triazol-1-yl)pentan-3-ol
Synoniemen	( <i>R</i> <sup>*</sup> , <i>R</i> <sup>*</sup> )-(+)-beta-((2,4-Dichlorophenyl)methyl)-alpha-(1,1-dimethylethyl)-1 <i>H</i> -1,2,4-triazole-1-ethanol; 1-(2,4-Dichlorophenyl)-4,4-dimethyl-2-(1,2,4-triazol-1-yl)pentan-3-ol; Diclobutrazol; Diclobutrazol
CAS-nummer	75736-33-3
Stofgroep volgens EPIWin	Triazoles
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Remmer van ergosteol biosynthese
Classificatie	Fungicide
Molecuulformule	C15 H19 CL2 N3 O1
Smiles (indien gebruikt)	Clc1cc(Cl)ccc1CC(C(O)C(C)(C)C)n2ncnc2
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>328,24</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>147-149</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>404,96</b>	Stein en Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>1,02E-06</b>	Modified Grain methode	EPI Suite v2.1
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>9,0</b>	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	<b>3,81</b>	Experimenteel	Bioloom, 2006
	3,80	Experimenteel	Physprop, 2010
	3,50	Berekend	Bioloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,88</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>1,88</b>	Berekend	HIM, 2009

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>3,72E-05</b> 3,85E-08	Berekend Berekend	HIM, 2009 Physprop, 2010
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>2,54</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	<b>9,6</b>		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: 9,6 mg/l / 10000 = <b>0,96</b> µg/l	LC50 vis = 9,6 mg/l; AF = 10000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,96</b> µg/L	

#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

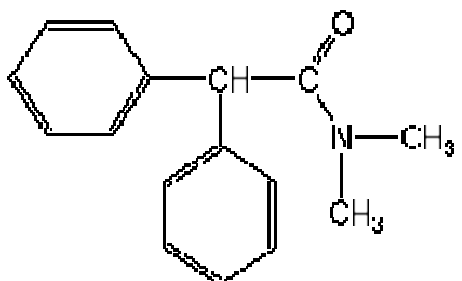
stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		



## D Rapportageformulier Difenamide

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Difenamide
CAS-NUMMER		957-51-7
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,73 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Difenamide
IUPAC naam	<i>N,N</i> -dimethyl-2,2-diphenylacetamide
Synoniemen	<i>N,N</i> -dimethyldiphenylacetamide, <i>N,N</i> -dimethyl-_-phenylbenzeneacetamide, Difenamide, Dimid, Dymid, Enide, Fenam, Rideon, 2,2-Diphenyl- <i>N,N</i> -dimethylacetamide; Difenamid; <i>N,N</i> -Dimethyl- $\alpha$ -phenylbenzeneacetamide;.
CAS-nummer	957-51-7
Stofgroep volgens EPIWin	amides
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Celdelingsremmer
Classificatie	Herbicide
Molecuulformule	C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> NO
Smiles (indien gebruikt)	CN(C)C(=O)C(c1ccccc1)c2ccccc2
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>239,32</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>135</b>	Experimenteel	MacKay et al., 2006
Kookpunt (°C)	<b>365,79</b>	Stein en Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>4,0E06</b> 4,0E06	Experimenteel, 20-25°C Experimenteel, 25°C	MacKay et al., 2006 Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>280</b> 260	Experimenteel, 20-25°C Experimenteel, 27°C	MacKay et al., 2006 Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	<b>1,92</b> 2,17 2,86	Experimenteel Berekend Berekend	Bioloom, 2006 Physprop, 2010 EPI Suite v2.1

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
	2,31	Berekend	Bioloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,32</b>	Onbekend of dit berekend of geschat is.	MacKay et al., 2006
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>1,32</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>3,68E-06</b>	Berekend	HIM, 2009
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>1,43</b>	MacKay et al., 2006

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	paramete r	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Carassius auratus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	32		US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	1 dag	LC <sub>50</sub>	92	a1 <sup>1)</sup>	US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	1 dag	LC <sub>50</sub>	25	a2	US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	80	a3	US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	25	a2	US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	75	a3	US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	65	a1	US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	3,8 dagen (92 uur)	LC <sub>50</sub>	<b>2,2</b>		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	97		US-EPA Aquire
<i>Pimephales promelas</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	48		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Cypridopsis vidua</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	51		US-EPA Aquire
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,058 <sup>2)</sup>		Footprint
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	58		US-EPA Aquire
<i>Gammarus fasciatus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	100		US-EPA Aquire
<i>Palaemonetes kadiakensis</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	32		US-EPA Aquire
<i>Palaemonetes kadiakensis</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	58		US-EPA Aquire
<b>Waterplanten</b>					
<i>Lemna perpusilla</i>	7 dagen	?	1000 <sup>3)</sup>		US-EPA Aquire
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

<sup>1)</sup> De a1, a2, en a3 geven aan dat in aquire drie verschillende referenties zijn gebruikt.

<sup>2)</sup> Data zijn opgenomen in footprint, maar er is mogelijk sprake van een tikfout in de eenheid, omdat aquire

hetzelfde getal maar dan als mg/l specificceert. Aangezien het RIVM aangeeft dat de data uit footprint wel vaker tikfouten bevat, is voor de ad hoc MTR afleiding uitgegaan van Aquire.

<sup>3)</sup> Data staat vermeld zonder opgave van de parameter. Daarom niet meegenomen in beoordeling AF.

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: $2,2 \text{ mg/l} / 3000 = 0,73 \text{ } \mu\text{g/l}$	LC50 vis = 2,2 mg/l; AF = 3000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,73</b> $\mu\text{g/L}$	

#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		

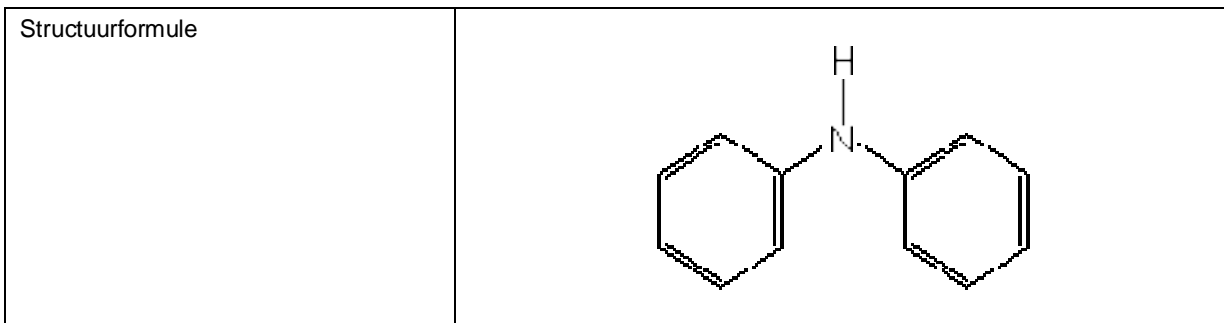


## E Rapportageformulier Difenylamine

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		Difenylamine
<b>CAS-NUMMER</b>		122-39-4
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	2 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		
<b>OPMERKING:</b> Er zijn vanuit de RAR van difenylamine PNEC waarden beschikbaar. De PNEC waarde voor oppervlakte water kan worden overgenomen als MPC <sub>eco.water</sub> . Als basis hiervoor zijn rapporten m.b.t. afleiding van MPC vanuit PNECs van het rivm genomen. In de RAR wordt aangegeven dat er geen data beschikbaar zijn voor afleiding van een PNEC voor sediment en dat deze daarom theoretisch wordt afgeleid volgens dezelfde methode die gebruikt wordt bij de ad hoc MTR afleiding. De Kp blijkt te laag te zijn om blootstelling vanuit het sediment te triggeren.	<b>opp. water</b>	1,2 µg/l

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Difenylamine
IUPAC naam	diphenylamine
Synoniemen	N-phenyl-aniline, Anilinobenzene, N-phenyl-benzenamine, (Phenylamino)-benzene, Anilino-benzene, Difenylamin, Diphenylamine, N,N-Diphenylamine, N-Fenylanilin, N-Phenylaniline, N-Phenylbenzenamine, Phenylaniline, DPA
CAS-nummer	122-39-4
Stofgroep volgens EPIWin	neutral organics
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Remmer van aanmaak van polyeen en isopreen (nodig bij elektronen transport)
Classificatie	fungicide
Molecuulformule	C12 H11 N1
Smiles (indien gebruikt)	<chem>N(c(cccc1)c1)c(cccc2)c2</chem>



## 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>169,23</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>53</b>	Experimenteel	MacKay et al., 2006
Kookpunt (°C)	<b>302</b>	Experimenteel	MacKay et al., 2006
Dampdruk (Pa)	5,68E-01 <b>8,93E-02</b>	Geëxtrapoleerde data Experimenteel, 25°C	MacKay et al., 2006 Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>48-54</b> 53	Experimenteel, 20°C Experimenteel, 20°C	MacKay et al., 2006 Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	<b>3,5</b> 3,62 3,5 3,26	Experimenteel Experimenteel Experimenteel Berekend	Bioloom, 2006 MacKay et al., 2006 Physprop, 2010 Bioloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,54</b>	Experimenteel	MacKay et al., 2006
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>1,54</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	0,035-0,285 <b>1,81</b> 3,59E-04	Berekend Berekend Berekend	MacKay, 2006 HIM, 2009 Physprop, 2010
pKa	<b>0,79-0,89</b> 0,78	Experimenteel Experimenteel	MacKay et., 2006 Physprop, 2010

## 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>1,48</b>	MacKay et al., 2006

## 4. TOXICITEIT

### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	1,46		DAR / efsa
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	2,2		Footprint
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	0,71		Footprint
<i>Oryzias latipes</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	2,2		DAR
<i>Pimephales promelas</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	3,79		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	2,0		US-EPA Aquire
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,31		US-EPA Aquire
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	1,2		DAR / efsa
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,16		IUCLID

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>algen</b>					
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	3 dagen	EC <sub>50</sub>	2,17		US-EPA Aquire
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	3 dagen	NOEC	0,37		US-EPA Aquire
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	3 dagen	EC <sub>50</sub>	0,048		IUCLID
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	3 dagen	NOEC	<b>0,02</b>		IUCLID
<i>Selenastrum capricornatum</i>	3 dagen	EC <sub>50</sub>	0,18		DAR / efsa
<i>Selenastrum capricornatum</i>	3 dagen	NOEC	0,04		DAR / efsa
<b>bacteriën</b>					
<i>Photobacterium phosphoreum</i>	30 minuten	EC <sub>50</sub>	4,76	Zoutwater	IUCLID
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>Uit RAR: PNEC 1,2 µg/L</b>
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: 0,02 mg/l / 10 = 2 µg/l	NOEC alg = 0,02 mg/l; AF=10
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 2 µg/L	

### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP. Uit RAR PNEC 24,6 µg/kg.</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		

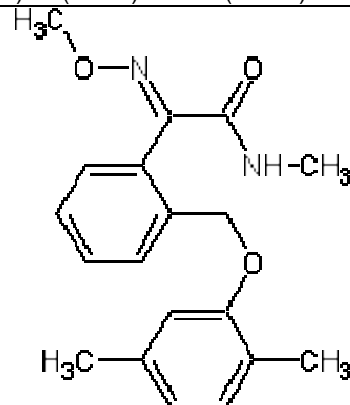




## F Rapportageformulier Dimoxystrobine

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Dimoxystrobine
CAS-NUMMER		149961-52-4
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,02 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	0,91 µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Dimoxystrobine
IUPAC naam	(E)-o-(2,5-dimethylphenoxy)methyl)-2-methoxyimino-N-methylphenylacetamide
Synoniemen	Dimoxystrolin
CAS-nummer	149961-52-4
Stofgroep volgens EPIWin	Strobulines (sitem.herts.ac.uk)
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Elektronentransport blocker
Classificatie	Fungicide
Molecuulformule	C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
Smiles (indien gebruikt)	O=C(NC)\C(=NOC)c1c(cccc1)COc2cc(ccc2C)C
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>326,39</b>		Lookchem.com
Smeltpunt (°C)	<b>138,9</b>	Onbekend of dit een geschatte of experimentele waarde is.	Footprint, 2010
Kookpunt (°C)	-	Ontbindt voordat het kookt	Footprint, 2010
Dampdruk (Pa)	<b>6,00E-06</b>	Onbekend of dit een geschatte of experimentele waarde is, 25°C.	Footprint, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>4,3</b>	Onbekend of dit een geschatte of experimentele waarde is, 20°C.	Footprint, 2010
Log K <sub>ow</sub>	<b>5,51</b>	Berekend	Bioloom, 2006

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log $K_{oc}$ (log [L/kg])	<b>4,65</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log $K_{p, susp-water}$ (log [L/kg])	<b>3,65</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>4,55E-04</b>	Berekend	HIM, 2009
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>3,98</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0512		DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0434		DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	0,01		DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	97 dagen	NOEC	<b>0,001</b>		DAR
<i>Pimephales promelas</i>	36 dagen	NOEC	0,016		DAR
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,0394		DAR
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,0125		DAR
<b>algen</b>					
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	4 dagen	EC <sub>50</sub>	0,017		DAR
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<i>Chironomus riparius</i>	28 dagen	NOEC	0,01 <sup>1)</sup> <sup>2)</sup>		DAR
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

<sup>1)</sup>Betreft een water/sediment systeem en de getoonde waarde is gemeten in het watergedeelte, derhalve wordt deze waarde niet meegenomen in de ad hoc afleiding voor sediment.

<sup>2)</sup> Ook al behoort hij niet tot de basisset, de NOEC is wel meegeteld bij het afleiden van de AF<sub>water</sub> (basisset + 3 NOEC)

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: $0,001 \text{ mg/l} / 50 = 0,02 \text{ } \mu\text{g/l}$	Noec vis = $0,001 \text{ mg/l}$ ; AF=50
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,02</b> $\mu\text{g/L}$	

### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

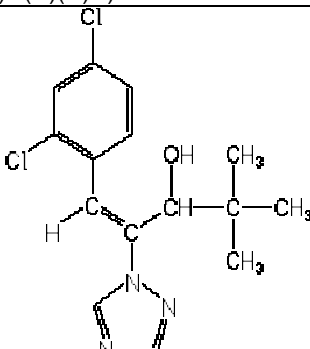
stap	resultaat	opmerking
1	Ja	
2	Nee	
3	Nee	
4		
5	Ja	
6		
7	<p>ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub> = ad hocMTR<sub>eco, water</sub> x K<sub>p</sub><sub>susp/water</sub> x 1000/1150 (RHO<sub>susp. matter</sub>) = <math>0,02 \text{ } \mu\text{g/L} \times 193 / 1,15 = 3,36 \text{ } \mu\text{g/kg}_{\text{wwt}}</math>.</p> <p>Omrekening naar NL-sediment op basis van drooggewicht:  <math>3,36 \times 2,71 = 9,10 \text{ } \mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}</math></p>	<p>K<sub>susp/water</sub> = <math>193 \text{ m}^3/\text{m}^3</math> (EUSUS v2.1)</p> <p>MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NLstandaard sediment.</p>
8	Ja, 0,91	
9	Nee	
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is <b>0,91</b> $\mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}$	



## G Rapportageformulier Diniconazool

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Diniconazool
CAS-NUMMER		83657-24-3
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,53 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Diniconazool
IUPAC naam	(E)-1-(2,4-Dichlorophenyl)-4,4-dimethyl-2-(1,2,4-triazol-1-yl)-1-penten-3-ol
Synoniemen	Diniconazole, Mixor
CAS-nummer	83657-24-3
Stofgroep volgens EPIWin	Vinyl/allyl Alcoholen, Triazolen, Vinyl/allyl aminen
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Sterol-remmer
Classificatie	Fungicide
Molecuulformule	C <sub>15</sub> H <sub>17</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O
Smiles (indien gebruikt)	Clc1cc(Cl)ccc1C=C(C(O)C(C)(C)C)n2ncnc2
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>326,23</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>148-149</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
	148-149	Onbekend	Physprop
Kookpunt (°C)	<b>412,36</b>	Stein en Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>4,91E-03</b>	Experimenteel, 25°C	Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>4,0</b>	Experimenteel, 25°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	<b>4,3</b>	Experimenteel	Bioloam, 2006
	4,3	Experimenteel	EPI Suite v2.1
	3,73	Berekend	Bioloam, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>3,11</b>	QSAR methode	HIM, 2009

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log $K_{p, \text{susp-water}}$ (log [L/kg])	<b>2,11</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>0,40</b>	Berekend	HIM, 2009
pKa	-		

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>2,96</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	<b>1,58</b>		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	<b>7,4</b>		Footprint
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: 1,58 mg/l / 3000 = 0,53 µg/l	LC <sub>50</sub> vis = 1,58 mg/l; AF = 3000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,53 µg/L</b>	

#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		

## H Rapportageformulier Dioxabenzofos

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Dioxabenzofos
CAS-NUMMER		3811-49-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,0012 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Dioxabenzofos
IUPAC naam	(RS)-2-methoxy-4H-1,3,2λ5-benzodioxaphosphinine 2-sulfide of (RS)-2-methoxy-4H-1,3,2λ5-benzodioxaphosphorine 2-sulfide
Synoniemen	2-Methoxy-4H-1,2,3-benzodioxaphosphorine-2-sulfide, 2-Methoxy-4H-1,3,2-lambda-5-benzodioxaphosphinine 2-sulfide, 2-Methoxy-4H-benzo-1,3,2-dioxaphosphorin 2-sulphide, Cyclic O,O-(methylene-o-phenylene) phosphorothioate O-methyl, Cyclic O,O-(methylene-o-phenylene) O-Phosphorothioic acid, Salithion.
CAS-nummer	3811-49-2
Stofgroep volgens EPIWin	Esters, Monothiophosphates
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Cholinesterase remmer
Classificatie	Insecticide
Molecuulformule	C8 H9 O3 P1 S1
Smiles (indien gebruikt)	c1ccc2COP(=S)(OC)Oc2c1
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>216,19</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>8,48</b>	Berekende gemiddelde waarde	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>297,56</b>	Stein en Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>0,296</b>	Modified Grain methode	EPI Suite v2.1
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>58</b>	Experimenteel, 30°C	Physprop, 2010
	189,1	Berekend, 25°C	EPI Suite v2.1
Log K <sub>ow</sub>	<b>2,67</b>	Experimenteel	Bioloom, 2006
	2,67	Experimenteel	Physprop, 2010
	2,673	Berekend	Bioloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,34</b>	QSAR methode	HIM, 2009

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log $K_{p, \text{susp-water}}$ (log [L/kg])	<b>1,34</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>1,10</b>	Berekend	HIM, 2009
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>1,57</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009.

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Anguilla japonica</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	8,80		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<b>insecten</b>					
<i>Cloeon dipterum</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	<b>0,0035</b>	<sup>1)</sup>	US-EPA Aquire
<b>weekdieren</b>					
<i>Cipangopaludina malleata</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	7,20		US-EPA Aquire
<i>Indoplanorbis exustus</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	2,00		US-EPA Aquire
<i>Physella acuta</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	4,30		US-EPA Aquire
<i>Semisulcospira libertina</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	3,30		US-EPA Aquire
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

1) Dioxabenzofos is een insecticide. Toxiciteits data van de haft *Cloeon* zijn daarom geschikt om als vervanger van kreeftachtigen uit de basisset te dienen.

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: 0,0035 mg/l / 3000 = 1,17 ng/l	EC50 insect=3,5 µg/l; AF=3000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,0012</b> µg/L	



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

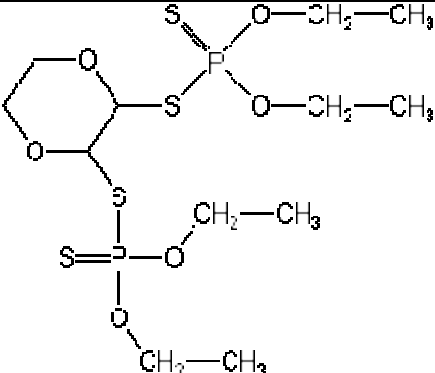
<b>stap</b>	<b>resultaat</b>	<b>opmerking</b>
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		



## I Rapportageformulier Dioxathion

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Dioxathion
CAS-NUMMER		78-34-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,00012 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Dioxathion
IUPAC naam	S,S'-(1,4-dioxane-2,3-diyl) O,O,O',O'-tetraethyl bis(phosphorodithioate)
Synoniemen	1,4-Dioxaan-2,3-diyl-bis(O,O-diethyl-dithiofosfaat), 1,4-Dioxan-2,3-diyl O,O,O',O'-tetraethyl di(phosphorodithioate), 1,4-Dioxan-2,3-diyl S,S-di(O,O-diethyl phosphorodithioate), 1,4-Dioxan-2,3-diyl bis(O,O-diethyl phosphorothiothionate), 2,3-p-Dioxanedithiol S,S-bis(O,O-diethyl phosphorodithioate), Dioxane phosphate, S,S'-(1,4-Dioxane-2,3-diyl) O,O,O',O'-tetraethyl bis(phosphorodithioate), S,S'-(1,4-Dioxane-2,3-diyl) O,O,O',O'-tetraethyl di(phosphorodithioate)
CAS-nummer	78-34-2
Stofgroep volgens EPIWin	Esters, Dithiophosphates
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Cholinesterase remmer
Classificatie	Insecticide
Molecuulformule	C12 H26 O6 P2 S4
Smiles (indien gebruikt)	CCOP(=S)(OCC)SC1OCCOC1SP(=S)(OCC)OCC
Structuurformule (alanwood.net)	

## 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>456,53</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>-20</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>480</b>	Stein en Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>1,17E-05</b> 1,17E-05	Modified Grain methode Berekend	EPI Suite v2.1 Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>37,833</b>	Schatting uit fragmenten	EPI Suite v2.1
Log K <sub>ow</sub>	3,45 <b>4,007</b>	Berekend Berekend	Ecosar v1.00a Biobloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,97</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>1,97</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>1,41E-04</b>	Berekend	HIM, 2009
pKa	-		

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

## 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>2,71</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

## 4. TOXICITEIT

### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Anguilla rostrata</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,006	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Carassius auratus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	32		US-EPA Aquire
<i>Fundulus heteroclitus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,006	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Fundulus heteroclitus</i>	10 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0054	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Fundulus majalis</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,015	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Lepomis cyanellus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,130		US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,012		US-EPA Aquire
<i>Menidia menidia</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,006	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Micropterus salmoides</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,022		US-EPA Aquire
<i>Mugil cephalus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,039	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus clarki</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,110		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,047		US-EPA Aquire
<i>Pimephales promelas</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,300		US-EPA Aquire
<i>Poecilia reticulata</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,210		US-EPA Aquire
<i>Sphoeroides maculatus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,075	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Thalassoma bifasciatum</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,035	Zoutwater	US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Crangon septemspinosa</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,038	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	<b>0,00035</b>		US-EPA Aquire
<i>Gammarus fasciatus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0086		US-EPA Aquire
<i>Gammarus lacustris</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,270		US-EPA Aquire
<i>Pagurus longicarpus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,082	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Palaemonetes vulgaris</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,285	Zoutwater	US-EPA Aquire

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>weekdieren</b>					
<i>Cipangopaludina malleata</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	24		US-EPA Aquire
<i>Indoplanorbis exustus</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	18		US-EPA Aquire
<i>Physella acuta</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	13		US-EPA Aquire
<i>Semisulcospira libertina</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	8		US-EPA Aquire
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: $0,00035 \text{ mg/l} / 3000 = 0,12 \text{ ng/l}$	EC50 Daphnia=0,35 µg/l; AF=3000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,00012 µg/L</b>	

#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		



## J Rapportageformulier Disulfoton-sulfon

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Disulfoton-sulfon
CAS-NUMMER		2497-06-5
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,012 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Disulfoton-sulfon
IUPAC naam	Phosphorodithioic acid,O,O-diethyl S-[2-(ethylsulfonyl)ethyl] ester
Synoniemen	Disyston sulfone, Ethanethiol, 2-(ethylsulfonyl)-, S-ester with O,O-diethyl phosphorodithioate, O,O-Diethyl S-(2-ethylsulfonylethyl) phosphorodithioate, O,O-Diethyl S-(2-ethylsulfonylethyl) thiothionophosphate, O,O-Diethyl S-(2-ethylsulfonylethyl)thionophosphate, O,O-Diethyl-S-(2-ethylsulfonylethyl)phosphorodithioate
CAS-nummer	2497-06-5
Stofgroep volgens EPIWin	Esters, Dithiophosphates
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Cholinesterase remmer
Classificatie	Insecticide
Molecuulformule	C8 H19 O4 P1 S3
Smiles (indien gebruikt)	CCOP(=S)(OCC)SCCS(=O)(=O)CC
Structuurformule (EPI Suite v2.1)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>306,39</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>59,23</b>	Gemiddeld, berekende waarde	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>381,58</b>	Stein en Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>1,49E-3</b>	Modified Grain methode	EPI Suite v2.1
	1,49E-3	Berekend	Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>883</b>	Experimenteel, 25°C	Physprop, 2010

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
	482,58	Fragmenten schatting	EPI Suite v2.1
Log K <sub>ow</sub>	1,83	Berekend	Ecosar v1.00a
	<b>1,87</b>	Experimenteel	Bioloam, 2006
	1,87	Experimenteel	Physprop, 2010
	2,221	Berekend	Bioloam, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>1,97</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>0,97</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>5,17E-04</b>	Berekend	HIM, 2009
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	0,89	Veith et al, 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	EC <sub>50</sub>	4 dagen	1,06		e-toxbase
<i>Lepomis macrochirus</i>	EC <sub>50</sub>	4 dagen	0,112		e-toxbase
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	EC <sub>50</sub>	1 dag	0,22		US-EPA Aquire
<i>Daphnia magna</i>	EC <sub>50</sub>	2 dagen	<b>0,0352</b>		e-toxbase
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	Resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: 0,0352 mg/l / 3000 = 0,012 µg/l	EC <sub>50</sub> <i>Daphnia</i> =0,0352 mg/l; AF=3000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,012 µg/L</b>	



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

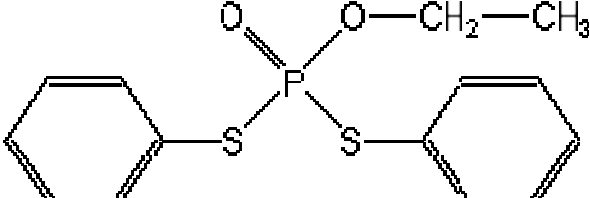
stap	resultaat	opmerking
1	Nee	STOP
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		



## K Rapportageformulier Edifenfos

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Edifenfos
CAS-NUMMER		17109-49-8
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,02 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Edifenfos
IUPAC naam	O-ethyl S,S-diphenyl phosphorodithioate
Synoniemen	EDDP, EDDP, Edifenfos, Ediphenfos, O-Ethyl S,S-diphenyl dithiophosphate, O-Ethyl-S,S-diphenyl phosphorodithioate, Hinosan
CAS-nummer	17109-49-8
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Cholinesterase remmer
Classificatie	Fungicide
Molecuulformule	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub> P <sub>1</sub> S <sub>2</sub>
Smiles (indien gebruikt)	c1ccccc1SP(=O)(OCC)Sc2ccccc2
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>310,37</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>-25</b>	Experimenteel	MacKay et al., 2006
	<25	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	154	Stein en Brown method	EPI Suite v2.1
	154	Experimenteel (1.00E-02 mm Hg)	Physprop, 2010
	<b>154</b>	Experimenteel (1.00E-02 mm Hg)	MacKay et al., 2006
Dampdruk (Pa)	3,6E-05	Experimenteel, 25°C	Physprop, 2010
	<b>1,3E-02</b>	Experimenteel, 20°C	MacKay et al., 2006
Oplosbaarheid in water (mg/L)	56	Experimenteel, 20°C	MacKay et al., 2006
Log K <sub>ow</sub>	3,61	Berekend	Ecosar v1.00a
	<b>3,48</b>	Experimenteel	Biobloom, 2006
	3,48	Experimenteel	MacKay et al., 2006
	3,63	Berekend	Biobloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,68</b>	Berekend	MacKay et al., 2006
	2,72	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>1,68</b>	Berekend	HIM, 2009

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	7,21E-02	Berekend	MacKay et al., 2006 EPI Suite v2.1 HIM, 2009
	<b>7,71E-005</b>	Experimenteel	
	7,21E-02	Berekend	
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>1.81</b>	MacKay et al., 2006 (Berekend)
	2,26	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Anguilla japonica</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	4,00		US-EPA Aquire
<i>Cyprinus carpio</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	1,20		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,43		Footprint
<i>Poecilia sp.</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	1,62		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia pulex</i>	0,25 dag	LC <sub>50</sub>	<b>0,060</b>		US-EPA Aquire
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,000032	<sup>1)</sup>	Footprint
<b>amfibieën</b>					
<i>Bufo bufo ssp. japonicus</i>	1 dag	LC <sub>50</sub>	1,80		US-EPA Aquire
<b>insecten</b>					
<i>Cloeon dipterum</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	0,53		US-EPA Aquire
<b>weekdieren</b>					
<i>Cipangopaludina malleata</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	15,0		US-EPA Aquire
<i>Indoplanorbis exustus</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	5,30		US-EPA Aquire
<i>Physella acuta</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	5,50		US-EPA Aquire
<i>Semisulcospira libertina</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	4,80		US-EPA Aquire
<b>sediment (indien getriggerd)</b>					
<b>bodem</b>					
<b>lucht (indien getriggerd)</b>					

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

<sup>1)</sup> Oorspronkelijke bron kon niet achterhaald worden. Waarde ligt opvallend veel lager dan de range van alle andere toxiciteitsdata. Ad hoc MTR is daarom berekend op basis van *Daphnia pulex*.

**5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)****Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: $0,06 \text{ mg/l} / 3000 = 0,02 \text{ } \mu\text{g/l}$	EC <sub>50</sub> <i>Daphnia</i> 0,06 mg/l; AF=3000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,02</b> $\mu\text{g/L}$	

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

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		



## L Rapportageformulier Etaconazool

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Etaconazool
CAS-NUMMER		60207-93-4
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,25 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Etaconazool
IUPAC naam	1-[(2RS,4RS;2RS,4SR)-2-(2,4-dichlorophenyl)-4-ethyl-1,3-dioxolan-2-ylmethyl]-1H-1,2,4-triazole
Synoniemen	1-((2-(2,4-Dichlorophenyl)-4-ethyl-1,3-dioxolan-2-yl)methyl)-1H-1,2,4-triazole, Benit, Etaconazole, Sonax, Vangard
CAS-nummer	60207-93-4
Stofgroep volgens EPIWin	Triazoles
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Remmer van ergosteol synthese
Classificatie	Fungicide
Molecuulformule	C15 H17 CL2 N3 O2
Smiles (indien gebruikt)	CCC1CCOC(Cn2cncn2)(O1)c3ccc(Cl)cc3Cl
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>342,23</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>75-93</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>415,99</b>	Stein en Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>1,52E-04</b> 3,12E-05	Modified Grain methode Berekend, 25°C	EPI Suite v2.1 Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>80</b> 17,98	Experimenteel, 20°C Fragementberekening	Physprop EPI Suite v2.1
Log K <sub>ow</sub>	4,13 <b>3,1</b> 3,1	Onbekend Experimenteel Experimenteel	Ecosar v1.00a Bioloom, 2006 Physprop, 2010

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
	2,78	Berekend	Bioloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,55</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>1,55</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>6,50E-04</b> <b>1,38E-04</b>	Berekend Berekend	HIM, 2009 EPI Suite v2.1
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>1,94</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	<b>2,5</b>		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: 2,5 mg/l / 10000 = 0,25 µg/l	LC <sub>50</sub> vis = 2,5 mg/l; AF=10000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,25 µg/L</b>	

#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		



## M Rapportageformulier Ethiprol

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Ethiprol
CAS-NUMMER		181587-01-9
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	XXXX µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Ethiprol
IUPAC naam	5-amino-1-(2,6-dichloro-α,α,α-trifluoro-p-tolyl)-4-ethylsulfinylpyrazole-3-carbonitrile
Synoniemen	Ethiprol
CAS-nummer	181587-01-9
Stofgroep volgens EPIWin	Phenylpyrazole (fsc.go.jp site)
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Remt aanmaak van gamma aminobutyric zuur
Classificatie	Insecticide
Molecuulformule	C13 H9 Cl2 F3 N4 O1 S1
Smiles (indien gebruikt)	CCS(=O)c1c(nn(c1N)-c1c(Cl)cc(cc1Cl)C(F)(F)F)C#N
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	397,2		www.compendium.bayer cropscience.com
Smeltpunt (°C)			
Kookpunt (°C)			
Dampdruk (Pa)			
Oplosbaarheid in water (mg/L)			
Log K <sub>ow</sub>	2,756	Berekend	Bioloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,33	QSAR methode	HIM, 2009

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log $K_{p, \text{susp-water}}$ (log [L/kg])	1,33	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)			
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	1,64	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen					
kreeftachtigen					
algen					
sediment (indien getriggerd)					
bodem					
lucht (indien getriggerd)					

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

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Geen data	
2		
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is XXXX µg/L	

#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		

## N Rapportageformulier Ethofenprox

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Ethofenprox
CAS-NUMMER		80844-07-1
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,00054 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	0,038 µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Ethofenprox
IUPAC naam	2-(4-ethoxyphenyl)-2-methylpropyl 3-phenoxybenzyl ether
Synoniemen	1-((2-(4-Ethoxyphenyl)-2-methylpropoxy)methyl)-3-phenoxy benzene, 3-Phenoxybenzyl 2-(4-ethoxyphenyl)-2-methylpropyl ether, Ethofenprox, Ethophenprox, Etofenprox, Trebon, alpha-((p-Ethoxy-beta,beta-dimethylphenethyl)oxy)-m-phenoxytoluene
CAS-nummer	80844-07-1
Stofgroep volgens EPIWin	neutral organics
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Grijpt in op het zenuwstelsel
Classificatie	Insecticide
Molecuulformule	C <sub>25</sub> H <sub>28</sub> O <sub>3</sub>
Smiles (indien gebruikt)	<chem>c1cc(OCC)ccc1C(C)(C)COCc2cc(Oc3ccccc3)ccc2</chem>
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>376,50</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>37</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>200</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>2,79E-05</b> 9,05E-07	Modified Grain methode Berekend	EPI Suite v2.1 Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>1,0E-03</b>	Experimenteel, 25°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	7,47 <b>7,05</b> 7,24 7,05	Onbekend Experimenteel Berekend Experimenteel	Ecosar v1.00a Bioloom, 2006 Bioloom, 2006 Physprop

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>5,81</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>4,81</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>10,5</b>	Berekend	HIM, 2009
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>4,66</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Anguilla japonica</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	14,0		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0027		Footprint/efsa
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	0,0021		efsa
<i>Oreochromis mossambicus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	1,74		US-EPA Aquire
<i>Tilapia mossambica</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	1,74		e-toxbase
<i>Tilapia nilotica</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	8,20		US-EPA Aquire
<i>Tilapia zillii</i>	1 dag	LC <sub>50</sub>	5,00		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Caridina africana</i>	0,83 dag	LC <sub>50</sub>	0,18		US-EPA Aquire
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0012		Footprint/efsa
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	<b>0,000054</b>		Footprint/efsa
<b>algen</b>					
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	4 dagen	NOEC	0,15		Footprint/efsa
<b>insecten</b>					
<i>Chironomus yoshimatsui</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	0,011		US-EPA Aquire
<i>Culex pipiens</i>	1 dag	LC <sub>50</sub>	0,015		US-EPA Aquire
<b>wormen</b>					
<i>Agamermis unka</i>	1 dag	LC <sub>50</sub>	1,21		US-EPA Aquire
<b>sediment (indien getriggerd)</b>					
<i>Chironomus riparius</i>	10 dagen	NOEC	0,0038 mg/kg		Footprint
<b>bodem</b>					
<b>lucht (indien getriggerd)</b>					

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

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

Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: $0,054 \mu\text{g/l} / 100 = 0,00054 \mu\text{g/l}$	NOEC Daphnia = $0,054 \mu\text{g/l}$ ; AF=100
5	Het ad hoc $\text{MTR}_{\text{eco, water}}$ is <b>0,00054</b> $\mu\text{g/L}$	

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

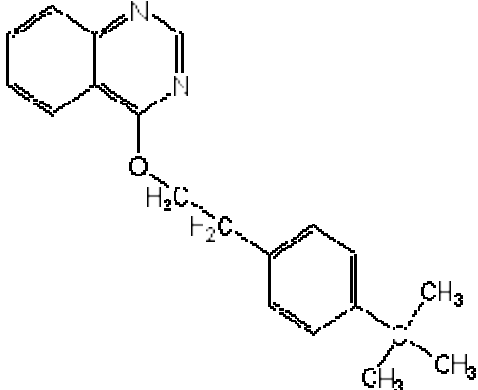
stap	resultaat	opmerking
1	Ja	
2	Nee	
3	Ja	
4	$3,8 \mu\text{g/kg} / 100 = \mathbf{0,038} \mu\text{g/kg}$	
5	Ja	
6		
7	<p>ad hoc <math>\text{MTR}_{\text{eco, sediment}} = \text{ad hoc MTR}_{\text{eco, water}} \times K_{\text{p}_{\text{susp/water}}} \times 1000/1150</math> (<math>\text{RHO}_{\text{susp. matter}} = 0,00054 \mu\text{g/L} \times 1,21\text{E}+03 / 1,15 = 0,57 \mu\text{g/kg}_{\text{wwt}}</math>.</p> <p>Omrekening naar NL-sediment op basis van drooggewicht:  <math>0,57 \times 2,71 = 1,54 \mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}</math></p>	<p><math>K_{\text{susp/water}} = 1,21\text{E}+03 \text{ m}^3/\text{m}^3</math> (EUSES, v2.1)</p> <p>MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NLstandaard sediment.</p>
8	Ja, $0,154 \mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}$	
9	Ja	
10	Nee	
11	Het ad hoc $\text{MTR}_{\text{eco, sediment}}$ is <b>0,038</b> $\mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}$	



## O Rapportageformulier Fenazaquin

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fenazaquin
CAS-NUMMER		120928-09-8
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,096 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	5,88 µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fenazaquin
IUPAC naam	4- <i>tert</i> -butylphenethyl quinazolin-4-yl ether
Synoniemen	4-((4-(1,1-Dimethylethyl)phenyl)ethoxy)quinazoline, 4- <i>tert</i> -Butylphenethylquinazolin-4-yl ether
CAS-nummer	120928-09-8
Stofgroep volgens EPIWin	neutral organics
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Electronentransport blocker
Classificatie	Insecticide
Molecuulformule	C <sub>20</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>1</sub>
Smiles (indien gebruikt)	<chem>n1cnc2ccccc2c1OCCc3ccc(C(C)(C)C)cc3</chem>
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>306,41</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>78,5</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>422,50</b>	Stein and Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>3,40E-06</b> 3,40E-006	Experimenteel, 25°C Experimenteel, 25°C	Physprop, 2010 EPI Suite v2.1
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>0,22</b>	Experimenteel, 20°	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	5,76 <b>5,7</b> 5,95 5,51	Onbekend Experimenteel Berekend Experimenteel	Ecosar v1.00a Bioloom, 2006 Bioloom, 2006 Physprop, 2010

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>4,72</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>3,72</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	4,73E-03 <b>4,73E-003</b>	Berekend Experimenteel	HIM, 2009 EPI Suite v2.1
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>4,15</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0341		DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0038		DAR / Footprint
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	63 dagen	NOEC	<b>0,00096</b>	Early life stage	DAR / Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,0041		DAR / Footprint
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,0038	SC formulation, waarde omgerekend naar actieve ingrediënt	DAR
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,0014		DAR / Footprint
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,00020 <sup>3)</sup>	SC formulation, waarde omgerekend naar actieve ingrediënt	DAR
<i>Crangon crangon</i>	4 dagen	EC <sub>50</sub>	0,015	Zoutwater	DAR
<b>algen</b>					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	3 dagen	NOEC	0,208 <sup>1)</sup>	2)	DAR
<b>weekdieren</b>					
<i>Crassostrea virginica</i>	4 dagen	EC <sub>50</sub>	0,0054	Zoutwater	DAR
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<i>Chironomus riparius</i>	28 dagen	NOEC	0,0025	Geen sediment proef	DAR
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

<sup>1)</sup> Geen effect in hoogste testconcentratie, maar dit is tevens de oplosbaarheid in puur water (0,102-0,220 mg/l), dus waarde opgenomen in het overzicht



<sup>2)</sup> Acute EC50 alg niet opgenomen, want had geen effect in de hoogste testconcentratie, maar ligt hoger dan 3daagse NOEC van de alg. Met dat gegeven zou dezelfde ad hoc MTR worden afgeleid. Dus uitgegaan van complete basisset + 3 NOEC voor vaststellen  $AF_{water}$ .

<sup>3)</sup> Deze waarde is het laagst maar betreft een formulering. In de DAR gebruiken ze de chronische vis-NOEC als laagste waarde. Deze aanpak hier dus overgenomen.

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

### Ad hoc $MTR_{eco, water}$

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: $0,96 \mu\text{g/l} / 10 = 0,096 \mu\text{g/l}$	NOEC vis = $0,96 \mu\text{g/l}$ ; $AF=10$
5	Het ad hoc $MTR_{eco, water}$ is <b>0,096</b> $\mu\text{g/L}$	

### Ad hoc $MTR_{eco, sediment}$

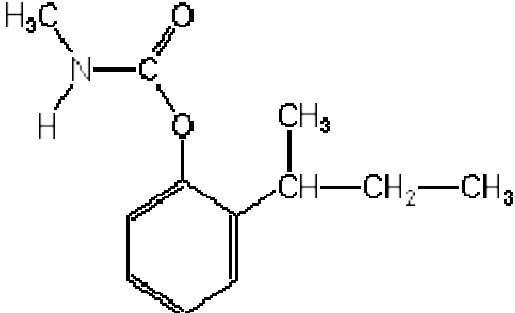
stap	resultaat	opmerking
1	Ja	
2	Nee	
3	Nee	
4		
5	Ja	
6		
7	$\text{ad hoc } MTR_{eco, sediment} = \text{ad hoc } MTR_{eco, water} \times K_{p_{susp/water}} \times 1000/1150 \text{ (RHO}_{susp. matter})} = 0.096 \mu\text{g/L} \times 260 / 1,15 = 21,70 \mu\text{g/kg}_{wwt}$ <p>Omrekening naar NL-sediment op basis van drooggewicht:  <math>21,70 \times 2,71 = 58,81 \mu\text{g/kg}_{dwt}</math></p>	$K_{susp/water} = 260 \text{ m}^3/\text{m}^3$ , EUSES 2.1  MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NLstandaard sediment.
8	Ja, delen door 10: $5,88 \mu\text{g/kg}_{dwt}$	
9	Nee	
10		
11	Het ad hoc $MTR_{eco, sediment}$ is <b>5,88</b> $\mu\text{g/kg}_{dwt}$	



## P Rapportageformulier Fenobucarb

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fenobucarb
CAS-NUMMER		3766-81-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,0017 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fenobucarb
IUPAC naam	( <i>RS</i> )-2- <i>sec</i> -butylphenyl methylcarbamate
Synoniemen	2-(1-Methylpropyl)phenyl methylcarbamate, 2- <i>sec</i> -Butylphenyl N-methylcarbamate, 2- <i>sec</i> -Butylphenyl methylcarbamate, Barizon, Bassa, Baycarb, Carvil, Hopcin, Methylcarbamic acid o- <i>sec</i> -butylphenyl ester, Osbac, 2-(1-methylpropyl)-, methylcarbamate phenol, o- <i>sec</i> -Butylphenyl methylcarbamate
CAS-nummer	3766-81-2
Stofgroep volgens EPIWin	Carbamate Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Cholinesterase remmer
Classificatie	Insecticide
Molecuulformule	C12 H17 N1 O2
Smiles (indien gebruikt)	O=C(Oc(c(ccc1)C(CC)C)c1)NC
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>207,27</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>31,5</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>112,5</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>1,91E-02</b>	Experimenteel, 25°	Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>420</b>	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	2,86	Onbekend	Ecosar v1.00a
	<b>2,78</b>	Experimenteel	Bioloom, 2006
	2,82	Berekend	Bioloom, 2006
	2,78	Experimenteel	Physprop, 2010

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,4</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>1,4</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	9,41E-03 <b>5,99E-03</b>	Berekend Experimenteel	HIM, 2009 EPI Suite v2.1
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>1,66</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Acheilognathus moriokae</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	16,0		US-EPA Aquire
<i>Anguilla japonica</i>	1 dag	LC <sub>50</sub>	19,0		US-EPA Aquire
<i>Channa striata</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	11,4		US-EPA Aquire
<i>Cyprinus carpio</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	1,70		US-EPA Aquire
<i>Gambusia affinis</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	2,60		US-EPA Aquire
<i>Poecilia reticulata</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	0,80		US-EPA Aquire
<i>Tilapia nilotica</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	0,12		US-EPA Aquire
<i>Tilapia nilotica</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	1,47		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	0,10		US-EPA Aquire
<i>Paratya compressa ssp. improvisa</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	<b>0,0051</b>		US-EPA Aquire
<b>insecten</b>					
<i>Culicoides schultzei</i>	0,5 dag	LC <sub>50</sub>	1,70		US-EPA Aquire
<i>Cloeon dipterum</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	0,17		US-EPA Aquire
<b>amfibieën</b>					
<i>Rana limnocharis</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	8,65		US-EPA Aquire
<b>weekdieren</b>					
<i>Cipangopaludina malleata</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	34		US-EPA Aquire
<i>Indoplanorbis exustus</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	40		US-EPA Aquire
<i>Physella acuta</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	30		US-EPA Aquire
<i>Semisulcospira libertina</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	18		US-EPA Aquire
<i>Tapes philippinarum</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	13		US-EPA Aquire
<b>sediment (indien getriggerd)</b>					
<b>bodem</b>					
<b>lucht (indien getriggerd)</b>					

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

**5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)****Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: $5,1 \mu\text{g/l} / 3000 = 0,0017 \mu\text{g/l}$	EC <sub>50</sub> kreeftachtige = 5,1 $\mu\text{g/l}$ ; AF=3000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,0017 <math>\mu\text{g/L}</math></b>	

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

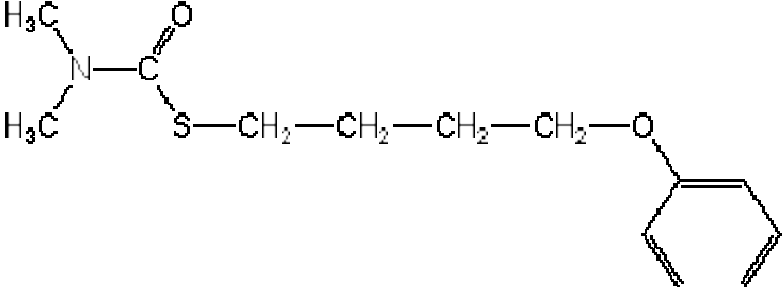
stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		



## Q Rapportageformulier Fenothiocarb

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fenothiocarb
CAS-NUMMER		62850-32-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	2,23 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fenothiocarb
IUPAC naam	S-4-phenoxybutyl dimethyl(thiocarbamate)
Synoniemen	Dimethylcarbamothioic acid S-(4-phenoxybutyl)ester, Panocon, Phenothiocarb, S-4-Phenoxybutyl dimethylthiocarbamate
CAS-nummer	62850-32-2
Stofgroep volgens EPIWin	Mono-thiocarbamates
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	remt vroege groei van mijten
Classificatie	Miticide
Molecuulformule	C13 H19 N1 O2 S1
Smiles (indien gebruikt)	c1cccc1OCCCCSC(=O)N(C)C
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Moleculgewicht (g/mol)	<b>253,36</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>40,5</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>155</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>1,67E-04</b>	Experimenteel, 23°C	Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	30	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	3,28	Onbekend	Ecosar v1.00a
	<b>3,28</b>	Experimenteel	Bioloom, 2006
	2,99	Berekend	Bioloom, 2006
	3,28	Experimenteel	Physprop, 2010
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,63</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>1,63</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	1,41E-03	Berekend	HIM, 2009
	<b>1,41E-03</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>2,09</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinidae</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	7,9		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia carinata</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	<b>6,7</b>		Footprint
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: 6,7 mg/l / 3000 = 2,23 µg/l	EC <sub>50</sub> Daphnia = 6,7 mg/l; AF = 3000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>2,23 µg/L</b>	

#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		



## R Rapportageformulier Fenpyroximaat

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fenpyroximaat
CAS-NUMMER		134098-61-6
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,011 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	0,275 µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fenpyroximaat
IUPAC naam	<i>tert</i> -butyl ( <i>E</i> )- $\alpha$ -(1,3-dimethyl-5-phenoxy-pyrazol-4-ylmethyleneaminoxy)- <i>p</i> -toluate
Synoniemen	Acari, Danitron, FujiMite, Kiron, Naja, Ortus, Portal
CAS-nummer	134098-61-6
Stofgroep volgens EPIWin	Aliphatische amines, esters, pyrazoles
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Electronentransport blocker
Classificatie	Miticide
Molecuulformule	C <sub>24</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>
Smiles (indien gebruikt)	O=C(OC(C)(C)C)c1ccc(CON=Cc2c(Oc3ccccc3)n(C)nc2C)cc1
Structuurformule (alanwood)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>421,50</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>102</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	-	Ontbindt voordat het kookt	ppdb site
Dampdruk (Pa)	<b>7,50E-06</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>1,46E-02</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Log K <sub>ow</sub>	5,57	Onbekend	Ecosar v1.00a
	<b>5,01</b>	Experimenteel	Bioloom, 2006
	4,93	Berekend	Bioloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>4,16</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>3,16</b>	Berekend	HIM, 2009

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>2,17E-01</b>	Berekend	HIM, 2009
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>3,56</b>	Veith et al, 1976 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinus carpio</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0055		DAR
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,002		DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0011		DAR/efsa
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	0,00019		DAR/efsa
<i>Pimephales promelas</i>	34 dagen	NOEC	<b>0,00011</b>		DAR/efsa
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,0033		DAR/efsa
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,00068		DAR/efsa
<b>algen</b>					
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	3 dagen	EC <sub>50</sub>	0,0034		DAR/efsa
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	3 dagen	NOEC	0,001		DAR/efsa
<b>sediment (indien getriggerd)</b>					
<i>Chironomus riparius</i>	28 dagen	NOEC	0,010	Geen sediment proef	DAR/efsa
<b>bodem</b>					
<b>lucht (indien getriggerd)</b>					

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

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: 0,00011 mg/l / 10 = 0,011 µg/l	NOEC vis = 0,11 µg/l; AF = 10
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,011</b> µg/L	

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

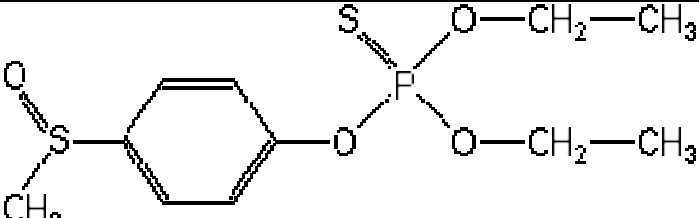
stap	resultaat	opmerking
1	Ja	
2	Nee	
3	Nee	
4		
5	Ja	
6		
7	<p>ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub> = ad hocMTR<sub>eco, water</sub> x Kp<sub>susp/water</sub>  x 1000/1150 (RHO<sub>susp. matter</sub>) = 0,011 µg/L x 106 / 1,15 =  1,01 µg/kg<sub>wwt</sub>.</p> <p>Omrekening naar NL-sediment op basis van  drooggewicht:  1,01 x 2,71 = 2,75 µg/kg<sub>dwt</sub></p>	<p>K<sub>susp/water</sub> = 106 m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>, EUSES 2.1</p> <p>MTR moet ook gecorrigeerd worden voor  de karakteristieken van NLstandaard  sediment.</p>
8	Ja, 0,275	
9	Nee	
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is <b>0,275 µg/kg<sub>dwt</sub></b>	



## S Rapportageformulier Fensulfothion

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fensulfothion
CAS-NUMMER		115-90-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,0033 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fensulfothion
IUPAC naam	O,O-diethyl O-4-methylsulfinylphenyl phosphorothioate
Synoniemen	BAY 25141, Daconit, Dasanit, Diethyl p-methylsulfinylphenyl thiophosphate, O,O-Diethyl O-(4-(methylsulfinyl)phenyl) phosphorothioate, O,O-Diethyl O-(p-(methylsulfinyl)phenyl) phosphorothioate, O,O-Diethyl O-4-methylsulphanylphenyl phosphorothioate, O,O-Diethyl O-p-(methylsulfinyl)phenyl thiophosphate, p-(methylsulfinyl)-, O-ester with O,O-diethyl phenol, phosphorothioate, p,O-Diethyl O-p-(methylsulfinyl)phenyl thiophosphate
CAS-nummer	115-90-2
Stofgroep volgens EPIWin	Esters, mono-thiofosfaten
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Cholinesterase remmer
Classificatie	Insecticide, nematicide
Molecuulformule	C11 H17 O4 P1 S2
Smiles (indien gebruikt)	CCOP(=S)(OCC)Oc1ccc(cc1)S(C)=O
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>308,35</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>&lt;25</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>140</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>6,66E-03</b>	Experimenteel, 25°C	Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	2000	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	2,35	Onbekend	Ecosar v1.00a
	<b>2,23</b>	Experimenteel	Bioloom, 2006
	2,23	Experimenteel	Physprop, 2010
	2,24	Berekend	Bioloom, 2006

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log $K_{oc}$ (log [L/kg])	<b>2,14</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log $K_{p, susp-water}$ (log [L/kg])	<b>1,14</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	1,03E-03 <b>1,02E-03</b>	Berekend Experimenteel	HIM, 2009 Physprop, 2010
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>1,20</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Fundulus similis</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	0,055	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,056		US-EPA Aquire
<i>Mystus cavasius</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	16,5		US-EPA Aquire
<i>Pimephales promelas</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	43,1		US-EPA Aquire
<i>Pimephales promelas</i>	31-34 dagen	NOEC	2,72	Effect op groei	US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Penaeus aztecus</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,010	Zoutwater. Change in ability to maintain balance	US-EPA Aquire
<i>Gammarus fasciatus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	<b>0,010</b>		US-EPA Aquire
<b>insecten</b>					
<i>Chironomus riparius</i>	1 dag	EC <sub>50</sub>	0,00065	<sup>1)</sup>	US-EPA Aquire
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

<sup>1)</sup> Acute EC50-waarde is de laagste. Ad hoc MTR hier toch niet op gebaseerd, omdat testduur afwijkend is en (met name) omdat de referentie er op lijkt te duiden dat van een QSAR gebruik is gemaakt. Zonder verificatie in de oorspronkelijke literatuur kan deze data niet gebruikt worden.

**5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)****Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: $10 \mu\text{g/l} / 3000 = 0,0033 \mu\text{g/l}$	LC <sub>50</sub> kreeftachtige = $10 \mu\text{g/l}$ ; AF=3000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,0033</b> $\mu\text{g/L}$	

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

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		

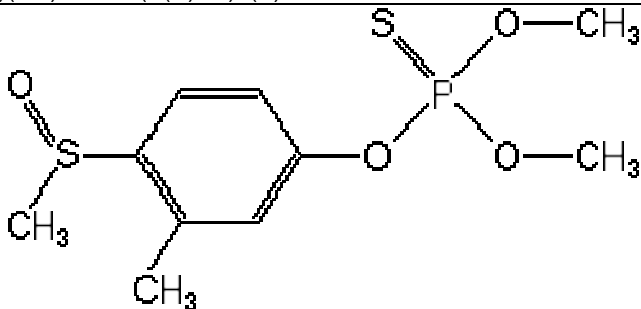




## T Rapportageformulier Fenthion-sulfoxide

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fenthion-sulfoxide
CAS-NUMMER		3761-41-9
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,24 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fenthion-sulfoxide
IUPAC naam	O,O-dimethyl O-4-methylsulfinyl-m-tolyl phosphorothioate
Synoniemen	Fensulfoxide, Mesulfenfos, Mesulfenos, O,O-Dimethyl O-((4-methylthio)-m-tolyl)phosphorothioate sulfoxide, O,O-Dimethyl O-(4-(methylsulfinyl)-m-tolyl) phosphorothioate, nemanon
CAS-nummer	3761-41-9
Stofgroep volgens EPIWin	Esters, mono-thiofosfaten
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Cholinesterase remmer
Classificatie	Insecticide, nematicide
Molecuulformule	C10 H15 O4 P1 S2
Smiles (indien gebruikt)	COP(=S)(OC)Oc1ccc(S(C)=O)c(C)c1
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	294,32		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	69,9	Berekend, gewogen gemiddels	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	389,92	Stein en Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	7,35E-04	Modified Grain methode	EPI Suite v2.1
Oplosbaarheid in water (mg/L)	3,72	Experimenteel, 25°C	EPI Suite v2.1
Log K <sub>ow</sub>	1,92	Onbekend	Ecosar v1.00a
	2,07	Berekend	Bioloam, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,06	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	1,06	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	5,82E-02	Berkend	HIM, 2009
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>1,06</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen	4 dagen	LC <sub>50</sub>	<b>24,36</b>	<sup>1)</sup>	Ecosar
kreeftachtigen					
algen					
sediment (indien getriggerd)					
bodem					
lucht (indien getriggerd)					

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

<sup>1)</sup> Op basis van Ecosar met een QSAR voor monothiofosfaat-esters. Deze geeft chronische en acute data voor alg, daphnia en vis, maar alleen de QSAR voor de acute vis voldoet aan de kwaliteitseisen (n=6; R<sup>2</sup>=0,77).

Verder geeft Ecosar aan dat weergegeven LC<sub>50</sub>-waarde wellicht boven oplosbaarheid ligt.

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja	
4	Berekening: $24,36 / 100000 = 0,24 \mu\text{g/l}$	LC <sub>50</sub> =24,36 mg/l; AF = 10000 * 10 (voor QSAR)
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,24</b> $\mu\text{g/L}$	

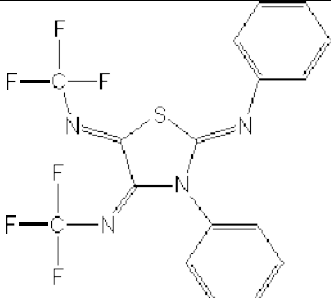
#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		

## U Rapportageformulier Flubenzimine

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Flubenzimine
CAS-NUMMER		37893-02-0
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,28 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Flubenzimine
IUPAC naam	(2Z,4E,5Z)-N <sup>2</sup> ,3-diphenyl-N <sup>4</sup> ,N <sup>5</sup> -bis(trifluoromethyl)-1,3-thiazolidine-2,4,5-triimine
Synoniemen	(2Z,4E,5Z)-N2,3-Diphenyl-N4,N5-bis(trifluoromethyl)-1,3-thiazolidine-2,4,5-triylidenetriamine, Crototex, N-(3-Phenyl-4,5-bis((trifluoromethyl)imino)-2-thiazolidinylidene)benzenamine
CAS-nummer	37893-02-0
Stofgroep volgens EPIWin	Neutral organics
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Vermindert mycelinius groei door intracellulaire vernieling
Classificatie	Miticide
Molecuulformule	C17 H10 F6 N4 S1
Smiles (indien gebruikt)	S1C(=NC(F)(F)F)C(=NC(F)(F)F)N(c2ccccc2)C1=Nc3ccccc3
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>416,35</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>118</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>409,63</b>	Stein and Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>1,33E-03</b>	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>30</b>	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	6,66	Onbekend	Ecosar v1.00a
	<b>4,03</b>	Berekend	Biolum, 2006
	6,66	Berekend	Physprop, 2010
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>3,37</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>2,37</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>1,85E-02</b>	Berekend	HIM, 2009

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>2,73</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
vissen	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,025	<sup>1)</sup>	Ecosar
	30 dagen	NOEC	<b>0,0028</b>	ChV=0,004 dus NOEC=0,004/ $\sqrt{2}$ <sup>1)</sup>	Ecosar
kreeftachtigen	2 dagen	LC <sub>50</sub>	0,028	<sup>1)</sup>	Ecosar
		NOEC	0,0049	ChV=0,007 dus NOEC=0,007/ $\sqrt{2}$ <sup>1)</sup>	Ecosar
algen	4 dagen	EC <sub>50</sub>	0,102	<sup>1)</sup>	Ecosar
		NOEC	0,060	ChV=0,085 dus NOEC=0,085/ $\sqrt{2}$ <sup>1)</sup>	Ecosar
sediment (indien getriggerd)					
bodem					
lucht (indien getriggerd)					

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

<sup>1)</sup> Op basis van Ecosar met een QSAR voor neutral organics. Deze QSAR heeft een  $n >> 5$  en  $R^2 = 0,74$

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja	
4	Berekening: $2,8 \mu\text{g/l} / 10 = 0,28 \mu\text{g/l}$	NOEC vis = 0,0028 mg/l; AF = 10
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,28</b> $\mu\text{g/L}$	

#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		

## V Rapportageformulier Fluchloralin

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fluchloralin
CAS-NUMMER		33245-39-5
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,00051 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fluchloralin
IUPAC naam	N-(2-chloroethyl)-2,6-dinitro-N-propyl-4-(trifluoromethyl)aniline, N-(2-chloroethyl)- $\alpha,\alpha,\alpha$ -trifluoro-2,6-dinitro-N-propyl-p-toluidine
Synoniemen	Basalin, Benzenamine, N-(2-chloroethyl)-2,6-dinitro-N-propyl-4-(trifluoromethyl), HSDB 3919, N-(2-Chloroethyl)-2,6-dinitro-N-propyl-4-(trifluoromethyl)aniline, N-(2-Chloroethyl)-2,6-dinitro-N-propyl-4-(trifluoromethyl)benzenamide, N-(2-Chloroethyl)-2,6-dinitro-N-propyl-4-(trifluoromethyl)benzenamine, N-(2-Chloroethyl)- $\alpha,\alpha,\alpha$ -trifluoro-2,6-dinitro-N-propyl-p-toluidine, N-Propyl-N-(2-chloroethyl)-2,6-dinitro-4-trifluoromethylaniline N-Propyl-N-(2-chloroethyl)- $\alpha,\alpha,\alpha$ -trifluoro-2,6-dinitro-p-toluidine, p-Toluidine, N-(2-chloroethyl)-2,6-dinitro-N-propyl- $\alpha,\alpha,\alpha$ -trifluoro-p-Toluidine, N-(2-chloroethyl)- $\alpha,\alpha,\alpha$ -trifluoro-2,6-dinitro-N-propyl
CAS-nummer	33245-39-5
Stofgroep volgens EPIWin	Dinitrobenzenes
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Remming van celdeling door de remming van microtubule vorming
Classificatie	Herbicide
Molecuulformule	C12 H13 Cl F3 N3 O4
Smiles (indien gebruikt)	CCCN(CCCl)c1c(cc(cc1N(=O)=O)C(F)(F)F)N(=O)=O
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>355,70</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>42</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>401,61</b>	Stein and Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>4,00E-03</b>	Experimenteel, 20°C	MacKay et al., 2006
	4,00E-03	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>0,9</b>	Experimenteel, 20°C	MackKay et al., 2006
	0,9	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	5,07	Onbekend	Ecosar v1.00a
	<b>4,63</b>	Experimenteel	Bioloom, 2006
	4,63	Experimenteel	MackKay et al., 2006
	4,86	Berekend	Bioloom, 2006
	5,07	Berekend	Physprop, 2010
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>3,56</b>	Experimenteel	MackKay et al., 2006
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>2,56</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	1,58	Berekend	HIM, 2009
	1,34	Berekend	MackKay et al., 2006
	<b>1,52</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	2.4	MackKay et al., 2006 (berekend)
	<b>3,24</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Ictalurus punctatus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,120		US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,016		US-EPA Aquire
<i>Noemacheilus denisonii</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	<b>0,00051</b>	<sup>1)</sup>	US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0096		US-EPA Aquire
<i>Pimephales promelas</i>	365 dagen	NOEC	0,0056		e-toxbase
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,56		US-EPA Aquire
<i>Gammarus pseudolimnaeus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,056		US-EPA Aquire
<b>algen</b>					
<b>insecten</b>					
<i>Chironomus plumosus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0056		US-EPA Aquire
<b>weekdieren</b>					
<i>Bellamyia bengalensis</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	0,178		US-EPA Aquire
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

<sup>1)</sup> Veiligheidsfactor is 1000 op de  $NOEC_{min}$  bij 1 NOEC van de basisset. Echter, hier is de  $LC_{50}$  vis < NOEC. In dit geval dus gekozen om de veiligheidsfactor van 1000 op de  $LC_{50}$ -waarde toe te passen.

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: $0,51 \mu\text{g/l} / 1000 =$	$LC_{50}$ vis = $0,51 \mu\text{g/l}$ ; AF = 1000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,00051</b> $\mu\text{g/L}$	

#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		

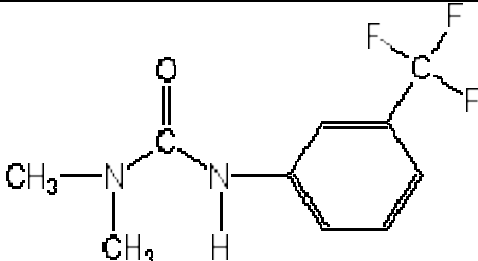




## W Rapportageformulier Fluometuron

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fluometuron
CAS-NUMMER		2164-17-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	3,0 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fluometuron
IUPAC naam	1,1-dimethyl-3-(α,α,α-trifluoro- <i>m</i> -tolyl)urea
Synoniemen	1,1-Dimethyl-3-(3-trifluoromethylphenyl)urea, 1,1-Dimethyl-3-(alpha,alpha,alpha-trifluoro- <i>m</i> -tolyl)urea, 3-(3-Trifluoromethylphenyl)-1,1-dimethylurea, 3-( <i>m</i> -Trifluoromethylphenyl)-1,1-dimethylurea, Cotogard, Cotoran, Cottonex, HSDB 1721, Lanex, N,N-Dimethyl-N'-(3-(trifluoromethyl)phenyl)urea, N-(3-Trifluoromethylphenyl)-1,1-dimethylurea, N-(3-Trifluoromethylphenyl)-N'-N'-dimethylurea, N-( <i>m</i> -Trifluoromethylphenyl)-N',N'-dimethylurea, N-(meta-Trifluoromethylphenyl)-N,N'-dimethylurea, Pakhtaran, 1,1-dimethyl-3-(alpha,alpha,alpha-trifluoro- <i>m</i> -tolyl)- urea, N,N-dimethyl-N'-(3-(trifluoromethyl)phenyl)-urea
CAS-nummer	2164-17-2
Stofgroep volgens EPIWin	Substituted Ureas, Amiden
Bekend gebruik (beperkt)	
Toxiciteitsmechanisme	Hill reactie remmer (cel resperatie)
Classificatie	
Molecuulformule	C10 H11 F3 N2 O1
Smiles (indien gebruikt)	O=C(N(C)C)Nc(ccc1C(F)(F)F)c1
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>232,21</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>164</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>317,72</b>	Stein en Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>1,25E-05</b> 1,25E-05	Experimenteel, 20-25°C Experimenteel, 20°C	MacKay et al., 2006 Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>106</b>	Experimenteel, shake flash	MacKay et al., 2006

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
	110	methode Experimenteel, 22°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	2,35	Onbekend	Ecosar v1.00a
	<b>2,42</b>	Experimenteel	Bioloom, 2006
	2,39	Berekend	Bioloom, 2006
	2,40	Experimenteel	MacKay et al., 2006
	2,42	Experimenteel	Physprop, 2010
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,0</b>	Experimenteel	MacKay et al., 2006
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>1,0</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	1,47E-04	Berekend	HIM, 2009
	1,73E-04	Berekend	MacKay et al., 2006
	<b>2,64E-04</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	0,95	MacKay et al., 2006 (berekend)
	<b>1,36</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Ameiurus melas</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	55,0		US-EPA Aquire
<i>Carassius carassius</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	120		US-EPA Aquire
<i>Cyprinodon variegatus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	38,0	Zoutwater	DAR
<i>Ictalurus punctatus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,64		US-EPA Aquire
<i>Ictalurus sp.</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	44,0		US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	13,5		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	2,96		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	4,3		Footprint
<i>Perca sp.</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	70,0		US-EPA Aquire
<i>Poecilia reticulata</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	46,0		US-EPA Aquire
<i>Pimephales promelas</i>	33 dagen	NOEC	3,1		DAR
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	9,90		US-EPA Aquire
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	6,60		DAR
<i>Americamysis bahia</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	3,80	Zoutwater	US-EPA Aquire
<b>algen</b>					
<i>Anabaena flosaquae</i>	5 dagen	EC <sub>50</sub>	0,13		US-EPA Aquire
<i>Anabaena flosaquae</i>	5 dagen	NOEC	0,07		e-toxbase
<i>Anabaena variabilis</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,53	Effect op Chlorofyl a	US-EPA Aquire
<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	4 dagen	EC <sub>50</sub>	0,53		US-EPA Aquire
<i>Chlorococcum sp.</i>	1 dagen	EC <sub>50</sub>	2,32		US-EPA Aquire

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<i>Lyngbya sp.</i>	1 dagen	EC <sub>50</sub>	0,28		US-EPA Aquire
<i>Navicula pelliculosa</i>	3 dagen	EC <sub>50</sub>	0,26		DAR
<i>Navicula pelliculosa</i>	3 dagen	NOEC	0,094		DAR
<i>Nitzschia sp.</i>	5 dagen	EC <sub>50</sub>	0,31	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Nitzschia sp.</i>	5 dagen	NOEC	0,107	Zoutwater	e-toxbase
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	5 dagen	EC <sub>50</sub>	<b>0,030</b>	<sup>1)</sup>	US-EPA Aquire
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	3 dagen	EC <sub>50</sub>	0,32		DAR
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	3 dagen	NOEC	0,066		DAR
<i>Skeletonema costatum</i>	5 dagen	NOEC	0,41	Zoutwater	e-toxbase
<b>waterplanten</b>					
<i>Lemna sp</i>	14 dagen	EC <sub>50</sub>	0,99		DAR
<i>Lemna sp</i>	14 dagen	NOEC	0,19		DAR
<i>Lemna gibba</i>	14 dagen	EC <sub>50</sub>	0,22		US-EPA Aquire
<i>Lemna gibba</i>	14 dagen	NOEC	0,115		e-toxbase
<i>Lemna perpusilla</i>	7 dagen	EC <sub>50</sub>	0,48		US-EPA Aquire
<i>Spirodela polyrhiza</i>	7 dagen	EC <sub>50</sub>	0,60		US-EPA Aquire
<b>insecten</b>					
<i>Chironomus plumosus</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,22		US-EPA Aquire
<b>weekdieren</b>					
<i>Crassostrea virginica</i>	4 dagen	NOEC	9,1	Zoutwater	DAR
<i>Crassostrea virginica</i>	4 dagen	EC <sub>50</sub>	6,53	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Lymnaea sp.</i>	4 dagen	LC <sub>0</sub>	20,0		US-EPA Aquire
<b>sediment (indien getriggerd)</b>					
<b>bodem</b>					
<b>lucht (indien getriggerd)</b>					

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

<sup>1)</sup> Veiligheidsfactor is 10 op de NOEC<sub>min</sub> bij een complete basisset en 3 NOEC's. Echter, hier is de EC<sub>50</sub> < NOEC. In dit geval dus gekozen om de veiligheidsfactor van 10 op de EC<sub>50</sub>-waarde toe te passen.

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: 0,030 mg/l / 10 = 0,0030 mg/l	EC <sub>50</sub> alg = 0,030 mg/l; AF=10
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>3,0</b> µg/L	

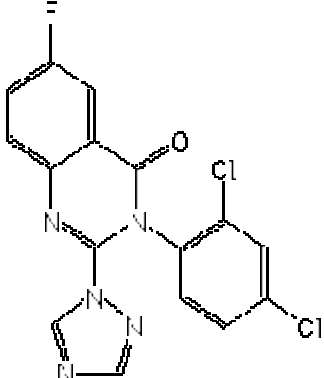
## Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		

## X Rapportageformulier Fluquinconazool

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fluquinconazool
CAS-NUMMER		136426-54-5
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,032 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fluquinconazool
IUPAC naam	3-(2,4-dichlorophenyl)-6-fluoro-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)quinazolin-4(3H)-one
Synoniemen	Fluquinconazole
CAS-nummer	136426-54-5
Stofgroep volgens EPIWin	Amiden, Halo benzamides, triazoles
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Demethylatie remmer
Classificatie	Fungicide
Molecuulformule	C16 H8 Cl2 F1 N5 O1
Smiles (indien gebruikt)	Fc1ccc2N=C(n3ncnc3)N(c4ccc(Cl)cc4Cl)C(=O)c2c1
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>376,18</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>192</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>511,8</b>	Stein en Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>6,40E-09</b>	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	3,73	Onbekend	Ecosar v1.00a
	<b>3,24</b>	Experimenteel	Bioloom, 2006
	3,24	Experimenteel	Physprop, 2010
	3,11	Berekend	Bioloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,61</b>	QSAR methode	HIM, 2009

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log $K_{p, \text{susp-water}}$ (log [L/kg])	1,61	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	2,09E-06 2,41E-06	Experimenteel Berekend	Physprop, 2010 HIM, 2009
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	2,05	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinus carpio</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	1,90		DAR
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	1,34		DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	1,90		DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	LC <sub>50</sub>	0,63		DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	0,30		DAR
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,65		DAR
<b>algen</b>					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	4 dagen	EC <sub>50</sub>	0,014		DAR
<i>Selenastrum capricornutum</i>	4 dagen	NOEC	0,0032		DAR
<b>waterplanten</b>					
<i>Lemna minor</i>	14 dagen	EC <sub>50</sub>	1,4		DAR
<i>Lemna minor</i>	14 dagen	NOEC	0,63		DAR
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: 3,2 µg/l / 100 = 0,032 µg/l	NOEC alg = 3,2 µg/l; AF=100
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,032 µg/L	

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

<b>stap</b>	<b>resultaat</b>	<b>opmerking</b>
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		

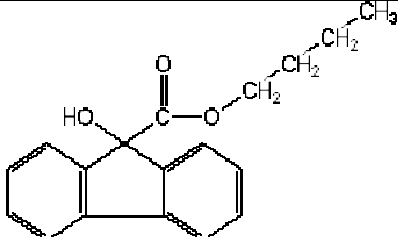




## Y Rapportageformulier Flurenol-butyl

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Flurenol-butyl
CAS-NUMMER		2314-09-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	1,52 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Flurenol-butyl
IUPAC naam	butyl 9-hydroxyfluorene-9-carboxylate
Synoniemen	Butyl 9-hydroxy-9H-fluorene-9-carboxylate, Butyl 9-hydroxyfluorene-9-carboxylate, Butyl flurenol, Fluorene-9-carboxylic acid, 9-hydroxy-, butyl ester, Flurecol, Flurecol-butyl, Flurenol, Flurenol ester, Flurenol-butyl, Flurenol-butyl ester
CAS-nummer	2314-09-2
Stofgroep volgens EPIWin	Esters, benzylalcohol
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	auxin-transport remmer (cel groei hormoon)
Classificatie	Herbicide
Molecuulformule	C18 H18 O3
Smiles (indien gebruikt)	c1ccc2c3ccccc3C(O)(C(=O)OCCCC)c2c1
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>382,34</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>71</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>408,53</b>	Stein and Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>5,10E-06</b>	Modified Grain methode	EPI Suite v2.1
Oplosbaarheid in water (mg/L)	36,5	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	3,69 <b>3,7</b> 3,7 4,10	Onbekend Experimenteel Experimenteel Berekend	Ecosar v1.00a Bioloom, 2006 Physprop, 2010 Bioloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,83</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>1,83</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>3,95E-05</b>	Berekend	HIM, 2009
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>2,45</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	4,17	<sup>1)</sup>	Ecosar
<b>kreeftachtigen</b>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	6,90	<sup>1)</sup>	Ecosar
	21 dagen	NOEC	1,99	ChV=2,82 dus NOEC=2,82/√2 <sup>1)</sup>	Ecosar
<b>algen</b>	4 dagen	EC <sub>50</sub>	2,45	<sup>1)</sup>	Ecosar
		NOEC	<b>0,76</b>	ChV=1,07 dus NOEC=1,07/√2 <sup>1)</sup>	Ecosar
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

<sup>1)</sup> Op basis van Ecosar met een QSAR voor esters. Deze chronische QSAR voor algen heeft een n=6 en een R<sup>2</sup> van 0,72. De chronische QSAR voor vissen is niet opgenomen aangezien deze niet voldoet aan de kwaliteitseisen.

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja	
4	Berekening: 0,76 mg/l / 500 = 1,52 µg/l	NOEC alg = 0,76 mg/l; AF = 50 * 10 (voor QSAR)
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>1,52 µg/L</b>	

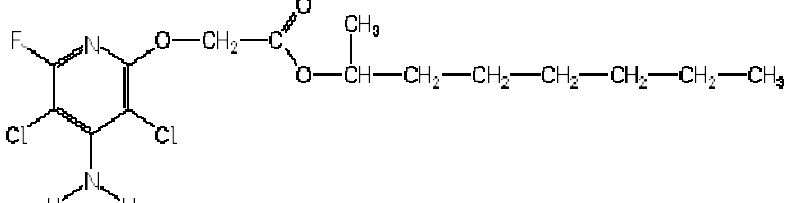
#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		

## Z Rapportageformulier Fluroxypyr-meptyl

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fluroxypyr-meptyl
CAS-NUMMER		81406-37-3
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,61 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fluroxypyr-meptyl
IUPAC naam	(RS)-1-methylheptyl 4-amino-3,5-dichloro-6-fluoro-2-pyridyloxyacetate
Synoniemen	Fluroxypyr 1-methylheptyl ester, Fluroxypyr meptyl, Fluroxypyr-(1-methylheptyl), Fluroxypyr-meptyl, Starane, Starane 2, Starane 250
CAS-nummer	81406-37-3
Stofgroep volgens EPIWin	Anilines, esters, halopyridines
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	auxine imitator: lijdt tot vroegtijdige veroudering en necrose
Classificatie	Herbicide
Molecuulformule	C <sub>15</sub> H <sub>21</sub> Cl <sub>2</sub> F <sub>1</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
Smiles (indien gebruikt)	<chem>n1c(F)c(Cl)c(N)c(Cl)c1OCC(=O)OC(C)CCCCC</chem>
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>367,25</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>59</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>416,49</b>	Stein and Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>1,35E-06</b>	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>0,09</b>	Experimenteel, 20°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	4,82	Onbekend	Ecosar v1.00a
	<b>4,53</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>3,49</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>2,49</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	5,49E-03	Berekend	HIM, 2009,
	<b>5,49E-03</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
pKa	<b>2,94</b>	Experimenteel	HSDB, 2010

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>3,15</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oncorhynchus gorboscha</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	8,0		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus keta</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	10,0		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus kisutch</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	10,0		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	12,0		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	0,2		Footprint/DAR
<i>Oncorhynchus nerka</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	10,0		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus tshawytscha</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	9,0		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	<b>0,061</b>		Footprint/DAR
<b>algen</b>					
<i>Anabaena flosaquae</i>	5 dagen	EC <sub>50</sub>	0,40		US-EPA Aquire/ DAR
<i>Anabaena flosaquae</i>	4 dagen	NOEC	0,46		DAR
<i>Anabaena flosaquae</i>	4 dagen	EC <sub>50</sub>	1,44		DAR
<i>Anabaena flosaquae</i>	5 dagen	NOEC	0,073		DAR
<i>Skeletonema costatum</i>	5 dagen	EC <sub>50</sub>	0,29	Zoutwater	US-EPA Aquire
<i>Skeletonema costatum</i>	5 dagen	NOEC	0,085	Zoutwater	DAR
<b>weekdieren</b>					
<i>Crassostrea virginica</i>	4 dagen	EC <sub>50</sub>	0,068	Zoutwater	US-EPA Aquire
<b>waterplanten</b>					
<i>Lemna gibba</i>	14 dagen	NOEC	1,22		DAR
<b>sediment (indien getriggerd)</b>					
<i>Chironomus riparius</i>	28 dagen	NOEC	0,13		DAR
<b>bodem</b>					
<b>lucht (indien getriggerd)</b>					

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

**5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)****Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: $61 \mu\text{g/l} / 100 = 0,61 \mu\text{g/l}$	NOEC Daphnia = $61 \mu\text{g/l}$ ; AF=100
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,61</b> $\mu\text{g/L}$	

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

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		



## AA Rapportageformulier Fluvalinaat

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Fluvalinaat
CAS-NUMMER		69409-94-5
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,000024 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	0,019 µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Fluvalinaat
IUPAC naam	(RS)-α-cyano-3-phenoxybenzyl N-(2-chloro-α,α,α-trifluoro-p-tolyl)-DL-valinate
Synoniemen	(RS)-alpha-Cyano-3-phenoxybenzyl (R)-2-(2-chloro-4-(trifluoromethyl)anilino-3-methyl-butanoate), (RS)-alpha-Cyano-3-phenoxybenzyl N-(2-chloro-alpha,alpha,alpha-trifluoro-p-tolyl)-D-valinate, Apistan, Kartan, Klartan, Mavrik, Minadox, N-(2-Chloro-4-(trifluoromethyl)phenyl)-DL-valine cyano(3-phenoxyphenyl)methyl ester, N-(2-Chloro-alpha,alpha,alpha-trifluoro-p-tolyl)-DL-valine alpha-cyano-phenoxybenzyl ester, SPUR
CAS-nummer	69409-94-5
Stofgroep volgens EPIWin	Ester, benzyl nitrillen, nitril esters
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Interfereert met natrium kanaal
Classificatie	Insecticide
Molecuulformule	C26 H22 Cl1 F3 N2 O3
Smiles (indien gebruikt)	<chem>c1cc(C(F)(F)F)cc(Cl)c1NC(C(C)C)C(=O)OC(C#N)c2cccc(Oc3ccccc3)c2</chem>
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>502,92</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>&lt;25</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>164</b>	Experimenteel	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>1,33E-05</b>	Experimenteel, 25°C	Physprop, 2010

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>5,0E-03</b>	Experimenteel, 25°C	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	6,81	Berekend	Ecosar v1.00a
	<b>7,9</b>	Berekend	Bioloom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>5,88</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>4,88</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>1,34</b>	Berekend	HIM, 2009
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>4,44</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit (gezocht op 16 september 2010)

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	4 dagen	EC <sub>50</sub>	0,0108	Zoutwater	e-toxbase
<i>Anguilla japonica</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0013		US-EPA Aquire
<i>Cyprinus carpio</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0048		US-EPA Aquire
<i>Gambusia affinis</i>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0022		US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	14 dagen	LC <sub>50</sub>	0,00066		US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0009		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,0029		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,00040		US-EPA Aquire
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	<b>0,000024</b>		e-toxbase
<i>Americamysis bahia</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,000018	Zoutwater <sup>1)</sup>	US-EPA Aquire
<i>Procambarus clarkii</i>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	0,00023		US-EPA Aquire
<i>Scapholeberis kingi</i>	0,125 dag	LC <sub>50</sub>	0,30		US-EPA Aquire
<b>algen</b>					
<b>insecten</b>					
<i>Culex pipiens ssp. pallens</i>	1 dag	LC <sub>50</sub>	0,058		US-EPA Aquire
<b>weekdieren</b>					
<i>Crassostrea virginica</i>	2 dagen	EC <sub>50</sub>	0,012	Zoutwater	US-EPA Aquire
<b>sediment (indien getriggerd)</b>					
<b>bodem</b>					
<b>lucht (indien getriggerd)</b>					

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

<sup>1)</sup> LC<sub>50</sub> *Americamysis bahia* niet meegenomen in het afleiden van de ad hoc MTR, aangezien het hier om een mariene aasgarnaal gaat en de gevonden waarde minimaal een factor 10 lager ligt dan LC<sub>50</sub>-waarden voor zoetwater kreeftachtigen.



**5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)****Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>**

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3	-	
4	Berekening: $0,024 \mu\text{g/l} / 1000 = 0,000024 \mu\text{g/l}$	NOEC kreeftachtige = $0,024 \mu\text{g/l}$ ; AF=1000
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>0,000024</b> $\mu\text{g/L}$	

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

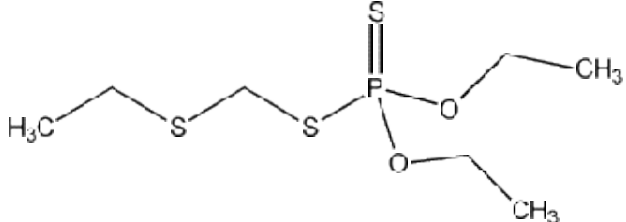
stap	resultaat	opmerking
1	Ja	
2	Nee	
3	Nee	
4		
5	Ja	
6		
7	<p>ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub> = ad hocMTR<sub>eco, water</sub> x K<sub>p</sub><sub>susp/water</sub>  x 1000/1150 (RHO<sub>susp. matter</sub>) = <math>0,000024 \mu\text{g/L} \times</math>  <math>3,36\text{E}+03 / 1,15 = 0,07 \mu\text{g/kg}_{\text{wwt}}</math>.</p> <p>Omrekening naar NL-sediment op basis van  drooggewicht:  <math>0,067 \times 2,71 = 0,19 \mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}</math></p>	<p>K<sub>susp/water</sub> = <math>3,36\text{E}+03 \text{ m}^3/\text{m}^3</math>.</p> <p>MTR moet ook gecorrigeerd worden voor  de karakteristieken van NLstandaard  sediment.</p>
8	Ja, $0,019 \mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}$	
9	Nee	
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is <b>0,019</b> $\mu\text{g/kg}_{\text{dwt}}$	



## BB Rapportageformulier Foraat-sulfon

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Foraat-sulfon
CAS-NUMMER		2588-04-7
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	2515 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Foraat-sulfon
IUPAC naam	Diethoxy-(ethylsulfonylmethylsulfanyl)-sulfanylidene-λ <sup>5</sup> -fosphane
Synoniemen	(ethylsulfonyl)-, S-ester with O,O-diethyl methanethiol, phosphorodithioate, O,O-Diethyl S-ethylsulfonylmethyl thiothionophosphate, O,O-Diethyl S-ethylsulfonylmethyl thionophosphate, O,O-Diethyl-S-ethylsulfonyl methylphosphorodithioate, Phorate sulfone, Thimet sulfone
CAS-nummer	2588-04-7
Stofgroep volgens EPIWin	Esters, Dithiophosphates
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Cholinesterase remmer
Classificatie	Insecticide
Molecuulformule	C7 H17 O4 P1 S3
Smiles (indien gebruikt)	S=P(SCS(=O)(=O)CC)(OCC)OCC
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>292,37</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>48,71</b>	Berekend, gewogen gemiddelde	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>369,98</b>	Stein en Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>3,56E-03</b> 3,56-03	Modified Grain methode Berekend	EPI Suite v2.1 Physprop, 2010
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>861</b>	Experimenteel	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	1,34 <b>1,98</b> 1,97 1,99 1,87	Onbekend Experimenteel Experimenteel Experimenteel Berekend	Ecosar v1.00a Bioloom, 2006 Physprop, 2010 EPI Suite v2.1 Bioloom, 2006
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>2,02</b>	QSAR methode	HIM, 2009

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log $K_{p, \text{susp-water}}$ (log [L/kg])	<b>1,02</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>1,21E-03</b>	Berekend	HIM, 2009
	1,27E-03	Berekend	EPI Suite v2.1
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>0,98</b>	Veith et al., 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	811,8	<sup>1)</sup>	Ecosar
		NOEC	55,29	ChV=78,19 dus NOEC=78,19/√2 <sup>1)</sup>	Ecosar
<b>kreeftachtigen</b>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	432,6	<sup>1)</sup>	Ecosar
		NOEC	<b>25,15</b>	ChV=35,57 dus NOEC=35,57/√2 <sup>1)</sup>	Ecosar
<b>algen</b>	4 dagen	EC <sub>50</sub>	142,4	<sup>1)</sup>	Ecosar
		NOEC	32,31	ChV=45,69 dus NOEC=45,69/√2 <sup>1)</sup>	Ecosar
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

<sup>1)</sup> Op basis van Ecosar met een QSAR voor neutral organics. Deze QSAR heeft een  $n \gg 5$  en een  $R^2$  van 0,86. Ecosar geeft ook als optie de klasse dithiofosfaatesters, maar de berekende waarden van alle soortsgroepen voldoen voor deze groep niet aan de kwaliteitseisen.

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja	
4	Berekening: 25,15 mg/l / 10 = 2515 µg/l	NOEC <i>Daphnia</i> = 25,15 mg/l; AF=10
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>2515 µg/L</b>	

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

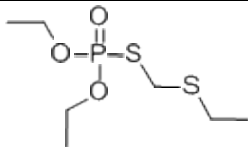
<b>stap</b>	<b>resultaat</b>	<b>opmerking</b>
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		



## CC Rapportageformulier Foraat-Sulfoxide

SAMENVATTING		
STOFNAAM		Foraat-sulfoxide
CAS-NUMMER		2588-05-8
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	14,8 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	XXXX µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Foraat-sulfoxide
IUPAC naam	O,O-diethyl S-eththionylmethyl thiothionophosphate
Synoniemen	Diethyl S-eththionylmethyl thiophosphate, O,O-Diethyl S-eththionylmethyl phosphorothioate, Phorate oxon sulfoxide, Phorate sulfoxide, Phoratoxon sulfoxide
CAS-nummer	2588-05-8
Stofgroep volgens EPIWin	Esters, Fosfaatesters
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Cholinesterase remmer
Classificatie	Insecticide
Molecuulformule	C7 H17 O4 P1 S2
Smiles (indien gebruikt)	CCOP(=O)(OCC)SCS(=O)CC
Structuurformule (alanwood.net)	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	<b>260,31</b>		Ecosar v1.00a
Smeltpunt (°C)	<b>87,31</b>	Berekend gewogen gemiddelde	EPI Suite v2.1
Kookpunt (°C)	<b>365,26</b>	Stein and Brown methode	EPI Suite v2.1
Dampdruk (Pa)	<b>1,92E-03</b>	Modified Grain methode	EPI Suite v2.1
Oplosbaarheid in water (mg/L)	<b>1,00E+06</b>	Fragmenten berekeningt	EPI Suite v2.1
	651	Berekend	Physprop, 2010
Log K <sub>ow</sub>	1,76	Onbekend	Ecosar v1.00a
	<b>1,78</b>	Experimenteel	Physprop, 2010
	1,78	Experimenteel	EPI Suite v2.1
	0,20	Berekend	Bioloom, 2009
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>1,93</b>	QSAR methode	HIM, 2009
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	<b>0,93</b>	Berekend	HIM, 2009
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	<b>5,00E-07</b>	Berekend	HIM, 2009
	2,18E-08	Berekend	EPI Suite v2.1
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>0,81</b>	Veith et al, 1979 in HIM, 2009

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>	4 dagen	LC <sub>50</sub>	48,53	<sup>1)</sup>	Ecosar
<b>kreeftachtigen</b>	2 dagen	LC <sub>50</sub>	102,89	<sup>1)</sup>	Ecosar
	21 dagen	NOEC	48,83	ChV=69,05 dus NOEC=69,05/ $\sqrt{2}$ <sup>1)</sup>	Ecosar
<b>algen</b>	4 dagen	EC <sub>50</sub>	45,00	<sup>1)</sup>	Ecosar
		NOEC	<b>7,42</b>	ChV=10,49 dus NOEC=10,49/ $\sqrt{2}$ <sup>1)</sup>	Ecosar
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

<sup>1)</sup> Op basis van Ecosar met een QSAR voor esters. Deze chronische QSAR voor algen heeft een n=6 en een R<sup>2</sup> van 0,72. De chronische QSAR voor vissen is niet opgenomen aangezien deze niet voldoet aan de kwaliteitseisen.

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

#### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja	
4	Berekening: 7,42 mg/l / 500 = 14,8 µg/l	NOEC alg = 7,42 mg/l; AF = 50 * 10 (voor QSAR)
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is <b>14,8 µg/L</b>	

#### Ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub>

stap	resultaat	opmerking
1	Nee	<b>STOP</b>
2		
3		
4		
5		
6		
7		



## DD Volledig rapportageformulier

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		
<b>CAS-NUMMER</b>		
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	XXXX µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	
IUPAC naam	
Synoniemen	
CAS-nummer	
Stofgroep volgens EPIWin	
Bekend gebruik (beperkt)	
Toxiciteitsmechanisme	
Classificatie	
Molecuulformule	
Smiles (indien gebruikt)	
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)			
Smeltpunt (°C)			
Kookpunt (°C)			
Dampdruk (Pa)			
Oplosbaarheid in water (mg/L)			
Log K <sub>ow</sub>			
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])			
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])			
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)			
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)		

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

## 4. TOXICITEIT

### 4.1 Humane toxiciteit

Toxicologisch eindpunt	Beschrijving	ref.
Overall beschikbare dataset		
Carcinogeniteit		
Genotoxiciteit		
Kritische studie oraal		
Kritische studie inhalatie		

### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<b>kreeftachtigen</b>					
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

### Ad hoc GH<sub>L</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18		
19	De GH <sub>L-oraal</sub> van XXX mg/kg lg/dag en de GH <sub>L-inhal</sub> van XXX µg/m <sup>3</sup> worden gebruikt voor de afleiding van de humane MTRs	

### Ad hoc MTR<sub>eco, water</sub>

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is XXXX µg/L	

**Ad hoc MTR<sub>humaan, voedsel, water</sub>**

Stap	resultaat	opmerking
1		
2	$0,1 \times \text{XXX} \times 70 / 0,115 =$	gebruik het resultaat in stap 3
3	$\text{XXX} / \text{BCF}_{\text{vis}} \times \text{BMF} =$	
4	Het ad hoc MTR <sub>humaan, voedsel, water</sub> is XXXX µg/L	

**Ad hoc MTR<sub>dw, water</sub>**

Stap	resultaat	opmerking
1	$0,1 \times \text{XXX} \times 70 / 2 =$	
2	Het ad hoc MTR <sub>dw, water</sub> is XXXX µg/L	

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

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7	ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> = ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> x K <sub>p</sub> <sub>susp/water</sub> x 1000/1150 (RHO <sub>susp. matter</sub> ) = XXX µg/L x XXX / 1,15 = XXX µg/kg <sub>wwt</sub> .  Omrekening naar NL-sediment op basis van drooggewicht: XXX x 2,71 = XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	K <sub>susp/water</sub> = XXX m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> .  MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NLstandaard sediment.
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6	Ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> = ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> x K <sub>p</sub> <sub>bodem/water</sub> x 1000/1700 (RHO <sub>bodem</sub> ) = XXX µg/L x XXX / 1,7 = XXX µg/kg <sub>wwt</sub> .  Omrekening naar NL-bodem op basis van drooggewicht: XXX x 3,33 = XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	K <sub>bodem/water</sub> = XXX m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> .  MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaard bodem.
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

**Ad hoc MTR<sub>humaan, voedsel, bodem</sub>**

Stap	resultaat	opmerking
1	Ad hoc MTR <sub>humaan, bodem</sub> is: XXX µg/kg voor NL-bodem op basis van drooggewicht.	De kritische route is:
2	Het ad hoc MTR <sub>humaan, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, lucht</sub> is XXX µg/m <sup>3</sup>	

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

Stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3	Het ad hoc MTR <sub>humaan, lucht</sub> is XXX µg/m <sup>3</sup>	

## Bepaling uiteindelijke ad hoc MTR

	ad hoc MTR				
	opp. water (µg/L)	grondwater (µg/L)	sediment (µg/kg <sub>dwt</sub> )	bodem (µg/kg <sub>dwt</sub> )	lucht (µg/m <sup>3</sup> )
eco					
humaan	voedsel, water	dw, water	↓	voedsel, bodem	GHL <sub>inhal</sub>
			↓		
	laagste ↓	laagste ↓	↓	laagste ↓	laagste ↓
ad hoc MTR					

gg. = geen gegevens  
nt. = niet getriggerd