

rivm

Rapport 601782012/2008

R.J. Hansler | R. van Herwijnen | R. Posthumus

Indicatieve milieukwaliteitsnormen voor prioritaire stoffen 2004

RIVM Report 601782012/2008

Indicatieve milieukwaliteitsnormen voor prioritaire stoffen 2004

R.J. Hansler, R. van Herwijnen, R. Posthumus

Contact:
R. van Herwijnen
Expert Centre for Substances
rene.van.herwijnen@rivm.nl

Dit onderzoek werd verricht in opdracht en ten laste van het Directoraat Generaal Milieubeheer, Directoraat voor Stoffen, Veiligheid en Straling, in het kader van project (Inter)nationale Normen Stoffen, RIVM-projectnr. 601782

© RIVM 2008

Parts of this publication may be reproduced, provided acknowledgement is given to the 'National Institute for Public Health and the Environment', along with the title and year of publication.

Abstract

Indicative environmental quality standards 2004

This report contains an overview of indicative environmental quality standards that have been derived for priority substances and for substances regulated within the framework of a minimization regime under the Netherlands Emission Guidelines for Air.

Using a simple step-by-step plan, in 2004, the RIVM derived indicative environmental quality standards for 163 substances at the request of policy makers and the competent authorities. These standards are to be used as indicators of the maximum permissible concentration of a substance in water, air or soil. Environmental quality standards are derived more quickly with this newly developed approach than with currently used procedures, mainly because the methods used for literature searches and validation of data are less exhaustive. As a precaution, larger safety factors are applied to prevent any underestimation of a potential risk to humans or the environment.

An important advantage of the approach for policy makers, competent authorities and industry is the anticipated gain in time in terms of identifying potential environmental problems. A negative assessment based on the indicative environmental quality standards may signal a need for further investigation.

Key words: environmental quality standards; maximum permissible concentration; ad hoc MPC

Rapport in het kort

Indicatieve milieukwaliteitsnormen 2004

Dit rapport bevat een overzicht van zogeheten indicatieve milieukwaliteitsnormen die in 2004 zijn afgeleid voor 163 stoffen. Het gaat hierbij om prioritaire stoffen, waarvan de emissie moet worden gereduceerd. Daarnaast gaat het om stoffen die volgens de Nederlandse Emissierichtlijn Lucht (NeR) niet meer mogen worden uitgestoten (minimalisatieverplichting).

Het RIVM werkt sinds 2004 met indicatieve milieukwaliteitsnormen om te bepalen of stoffen met risico's voor mens en milieu schadelijk zijn. De normen geven een indicatie van de maximale concentratie waarin de stoffen mogen voorkomen in water, lucht of bodem. Deze werkwijze is sneller dan de gangbare procedure. Zodoende kunnen vergunningverleners en beleidsmakers, zoals gemeenten, provincies en waterschappen, snel beoordelen of sprake is van een milieuprobleem. Dit onderzoek is op verzoek van VROM verzoek verricht.

De tijdwinst komt voornamelijk doordat literatuuronderzoek en controle van gegevens minder uitvoerig zijn. Om te voorkomen dat autoriteiten een eventueel risico voor de mens of het milieu onderschatten, worden voor indicatieve milieukwaliteitsnormen grotere veiligheidsfactoren gebruikt. Overschrijding van de kwaliteitsnormen kan aanleiding zijn voor aanvullend onderzoek, bijvoorbeeld om een 'gedegen' norm af te leiden.

Trefwoorden: indicatieve milieukwaliteitsnormen; maximaal toelaatbaar risico; ad hoc MTR

Inhoud

| | |
|---|-----------|
| Samenvatting | 9 |
| 1. Inleiding | 11 |
| 1.1 Aanleiding en achtergrond | 11 |
| 1.2 Wat zijn indicatieve milieukwaliteitsnormen? | 11 |
| 1.3 Leeswijzer | 12 |
| 2. Werkwijze | 13 |
| 2.1 Inleiding | 13 |
| 2.2 Toetsing en formele vaststelling | 13 |
| 2.3 Gebruik van reeds bestaande normen | 13 |
| 3. Resultaten | 15 |
| Literatuur | 21 |
| Dankwoord | 21 |
| Bijlage 1 Stappenschema afleiding ad hoc MTR | 23 |
| Bijlage 2 Achtergrondinformatie | 35 |

Samenvatting

In het voorliggende rapport worden alle indicatieve milieukwaliteitsnormen gerapporteerd die in 2004 binnen het project (Inter)nationale Normen Stoffen (INS) zijn afgeleid. Indicatieve milieukwaliteitsnormen zijn normen voor concentraties van gevaarlijke stoffen die gelden zolang er voor een stof geen reguliere milieukwaliteitsnorm is vastgesteld. Het betreft een overzicht van indicatieve milieukwaliteitsnormen, die zijn afgeleid voor prioritare stoffen, en voor stoffen waarvoor een minimalisatieplicht geldt in het kader van de Nederlandse Emissierichtlijn Lucht (NeR).

In Nederland worden milieukwaliteitsnormen afgeleid in het kader van het project (Inter)nationale Normen Stoffen (INS). Sinds 2004 worden, naast de reguliere milieukwaliteitsnormen, binnen INS ook zogenaamde indicatieve milieukwaliteitsnormen afgeleid. Deze indicatieve milieukwaliteitsnormen worden afgeleid volgens een methode die sneller is dan de gangbare, uitgebreide methodiek voor de afleiding van milieukwaliteitsnormen. Er vindt minder uitgebreid literatuuronderzoek plaats, en gegevens worden minder uitgebreid getoetst op validiteit. De procedure is door de toepassing van grotere veiligheidsfactoren in beginsel conservatief. Dat betekent dat de afgeleide waarden een ruime veiligheidsmarge bevatten. Dit verkleint de kans dat een eventueel risico voor mens of milieu wordt onderschat.

Indicatieve milieukwaliteitsnormen kunnen als richtinggevend instrument worden toegepast in verschillende kaders, zoals bijvoorbeeld de beoordeling van de milieukwaliteit en de vergunningverlening.

1. Inleiding

1.1 Aanleiding en achtergrond

In het eerste kwartaal van 2004 is de Tweede Kamer geïnformeerd over een aanvullende lijst van 162 prioritaire stoffen (Tweede Kamer, vergaderjaar 2003-2004, 22 343, nr. 86). Deze 162 prioritaire stoffen vormen een aanvulling op de al langer bestaande oude lijst van 50 prioritaire stoffen. Het merendeel van de stoffen op de aanvullende lijst is afkomstig van stoffenlijsten die betrekking hebben op de bescherming van water en het maritieme milieu, zoals de Europese Kaderrichtlijn Water en OSPAR¹. Nederland zal door het terugdringen van de emissies bijdragen aan het bereiken van de internationale doelstellingen voor deze stoffen. De prioritaire-stoffenlijst is dynamisch van aard en zal op basis van onder andere voortschrijdend inzicht of Europese ontwikkelingen worden geactualiseerd.

In verband met deze beoogde toepassingen van de prioritaire-stoffenlijst heeft het ministerie van VROM het RIVM gevraagd om voor de prioritaire stoffen en voor zogenaamde minimalisatieverplichtige (MVP) stoffen, milieukwaliteitsnormen af te leiden, indien nog geen normen voorhanden zijn. MVP-stoffen zijn stoffen die zo (milieu) gevaarlijk zijn, dat hun emissies (naar lucht) nul zouden moeten zijn. Het streven naar nul emissies heet minimalisatieverplichting. MVP-stoffen zijn opgenomen in de Nederlandse Emissierichtlijn Lucht (NeR). Meer achtergrondinformatie over MVP-stoffen en de prioritaire stoffen is te vinden op de RIVM-website *Risico's van Stoffen* (<http://www.rivm.nl/rvs/>).

Uiteindelijk zijn in 2004 indicatieve milieukwaliteitsnormen afgeleid voor 162 prioritaire stoffen en één MVP-stof. Het betreft hier een MVP-stof die niet op de aanvullende prioritaire-stoffenlijst staat. Dit rapport levert de rapportage van de destijds afgeleide indicatieve milieukwaliteitsnormen (inhaalslag).

1.2 Wat zijn indicatieve milieukwaliteitsnormen?

In Nederland worden milieukwaliteitsnormen afgeleid in het kader van het project INS. INS staat voor (Inter)nationale Normen Stoffen. Dit is het kader dat algemene, milieukwaliteitsnormen vaststelt voor de verschillende milieucompartimenten (bodem, water, lucht). Milieukwaliteitsnormen geven de risicogrenzen aan voor stoffen in deze milieucompartimenten. De normen zijn gebaseerd op de kennis over de effecten van stoffen in het milieu en op de mens.

Sinds 2004 worden, naast de reguliere milieukwaliteitsnormen, binnen INS ook zogenaamde indicatieve milieukwaliteitsnormen afgeleid. Dit gebeurt volgens een gestandaardiseerde methode die sneller is dan de meer uitgebreide methodiek die voor reguliere milieukwaliteitsnormen geldt. Er vindt namelijk minder uitgebreid literatuuronderzoek plaats, en gegevens worden minder uitgebreid getoetst op validiteit. De methodiek voor de afleiding van indicatieve milieukwaliteitsnormen is uitgebreid beschreven in Hansler et al. (2006). Het concept van deze methodiek was in 2004 al beschikbaar.

Omdat voor het afleiden van indicatieve kwaliteitsnormen een vereenvoudigde procedure geldt, zijn in deze normen grotere veiligheidsmarges ingebouwd. De methode is daarmee in beginsel conservatief,

¹ OSPAR: Verdragen van Oslo en Parijs betreffen de bescherming van het mariene milieu in het noord-oost Atlantische gebied (1992).

want hoe minder gegevens er beschikbaar zijn, hoe lager de betrouwbaarheid, en hoe hoger de veiligheidsfactor. Dit verkleint de kans dat een eventueel risico wordt onderschat.

Indicatieve milieukwaliteitsnormen kunnen in verschillende contexten als richtinggevend instrument worden toegepast, wanneer voor een stof geen algemene milieukwaliteitsnorm is vastgesteld. Toepassing is bijvoorbeeld mogelijk in het kader van de beoordeling van de milieukwaliteit en de vergunningverlening. Overschrijding van een indicatieve milieukwaliteitsnorm kan bijvoorbeeld aanleiding zijn voor nader onderzoek naar de risico's van de stof voor mens of milieu.

1.3 Leeswijzer

Hoofdstuk 2 beschrijft globaal de werkwijze die is gevolgd bij de afleiding van indicatieve milieukwaliteitsnormen en bij de toetsing ervan. De stappenschema's die zijn gevolgd bij de afleiding en de toegepaste veiligheidsfactoren staan in Bijlage 1. Hoofdstuk 3 bevat per stof de indicatieve milieukwaliteitsnormen voor lucht, water en bodem. Meer specifieke informatie over de gevolgde werkwijze is opgenomen in Bijlage 2. Deze bijlage bevat de rapportageformulieren waarin, volgens een vast format, per stof is beschreven hoe de indicatieve milieukwaliteitsnormen zijn afgeleid.

2. Werkwijze

2.1 Inleiding

Voor de 162 aanvullende prioritaire stoffen en voor één minimalisatieverplichte stof die niet op de aanvullende prioritaire-stoffenlijst staat, zijn ad hoc MTR-waarden afgeleid, in die gevallen waarin nog geen MTR was vastgesteld. De afleiding van de normen is uitgevoerd volgens de methodiek zoals beschreven in Hansler et al. (2006). (N.B. Concept-methodiek was in 2004 al beschikbaar). Hier volgt een korte toelichting op deze methodiek.

Een andere term voor ‘indicatieve milieukwaliteitsnorm’ is ‘ad hoc maximaal toelaatbaar risiconiveau’ (ad hoc MTR)². Voor ieder milieucompartiment wordt een ad hoc MTR afgeleid. In veel gevallen is in aanvulling op de gestandaardiseerde werkwijze gebruikgemaakt van een deskundigenoordeel (‘expert judgement’) voor de juiste selectie en interpretatie van gegevens.

Zo is voor stoffen waarvoor bepaalde essentiële ecotoxicologische gegevens ontbraken, waar mogelijk gebruikgemaakt van kwantitatieve structuur-activiteitsrelaties (QSAR’s). Het principe van een QSAR berust op het voorspellen van de biologische of toxicologische activiteit van een stof, op basis van zijn molecuulstructuur. Het toepassen van de juiste QSAR vergt specifieke kennis en is daarom geen onderdeel van de standaardmethodiek.

Ook de selectie van de juiste fysisch-chemische gegevens is voor bepaalde stoffen gebaseerd op een combinatie van experimentele gegevens en modellen, waarbij expert judgement gebruikt is. Hoe expert judgement in specifieke gevallen is toegepast, wordt in meer detail beschreven in de rapportageformulieren voor de betreffende stoffen (zie Bijlage 2).

2.2 Toetsing en formele vaststelling

De in dit rapport beschreven normafleidingen zijn inhoudelijk getoetst door middel van collegiale toetsing binnen het RIVM. Het rapport is vervolgens voorgelegd aan de Wetenschappelijke Klankbordgroep INS, waarna de normen op 25 januari 2005 formeel door de Stuurgroep Stoffen zijn vastgesteld. De normen zijn, met uitzondering van de normen voor bodem, te ontsluiten via de website *Risico’s van Stoffen* (<http://www.rivm.nl/rvs/>).

2.3 Gebruik van reeds bestaande normen

Voor een aantal van de in de lijst voorkomende stoffen zijn inmiddels reeds normen bekend of in voorbereiding. Dit rapport bouwt zoveel mogelijk voort op deze bestaande gegevens (actualisatie na 2004 meegenomen).

Zo zijn voor een aantal stoffen reguliere milieukwaliteitsnormen in voorbereiding in het kader van de Europese Kaderrichtlijn Water (KRW) (EU, 2005). Deze reguliere normen zijn reeds in concept beschikbaar, maar nog niet definitief. Voor deze stoffen zijn hier de concept-voorstellen als indicatieve norm overgenomen. Zodra de KRW-normen definitief zijn, vervallen de indicatieve normen.

² Het MTR (maximaal toelaatbaar risiconiveau) is de concentratie van een stof in water, sediment, bodem of lucht waaronder geen negatief effect is te verwachten voor mens of milieu

Daarnaast zijn voor een aantal stoffen reeds bestaande milieukwaliteitsnormen beschikbaar voor een of meer milieuc compartimenten. In dergelijke gevallen zijn, conform de methodiek, geen indicatieve milieukwaliteitsnormen afgeleid.

Ten slotte is voor enkele stoffen in EU-verband een risicobeoordeling uitgevoerd in het kader van Verordening 793/93/EEG (EU, 1993)³. Deze verordening heeft onder meer tot doel de risico's van zogenaamde bestaande stoffen te beoordelen en te beperken. Bij de risicobeoordeling in het kader van deze verordening wordt voor een stof per milieuc compartiment een zogenaamde geen-effect-concentratie (predicted no-effect concentration, kortweg PNEC) afgeleid. Een PNEC geeft de concentratie van een stof weer waaronder geen schadelijke effecten optreden. De PNEC kan als reguliere INS-norm worden overgenomen (zie Janssen et al., 2004). Ook voor dergelijke stoffen zijn geen indicatieve milieukwaliteitsnormen afgeleid.

³ Per juni 2008 is verordening 793/93/EEG vervallen. Op deze datum is de REACH verordening van kracht geworden.

3. Resultaten

In Tabel 1 en Tabel 2 worden ad hoc MTR-waarden gegeven voor, respectievelijk, de 162 aanvullende prioritaire stoffen en voor één minimalisatieverplichte stof.

De volgende aandachtspunten zijn van toepassing:

- In de tabel is aangegeven of voor een stof reeds een MTR is vastgesteld, of een Europees Risk Assessment Report (RAR). De in deze RAR's opgenomen Predicted No Effect Concentrations (PNECs) zullen (eventueel na bewerking) als Nederlandse norm worden overgenomen. Voor deze stoffen is geen indicatieve norm afgeleid.
- Voor stofgroepen is geen ad hoc MTR afgeleid.
- Voor metalen en metaalverbindingen is geen ad hoc MTR afgeleid, omdat er een gedegen norm voor het metaal beschikbaar is.
- De methodiek voor afleiding van indicatieve normen voorziet in het gebruik van QSAR's (onder bepaalde voorwaarden). Er zijn vaak wel QSAR-waarden voor ecotoxiciteit verzameld, maar deze zijn alleen gebruikt voor de normaflleiding voor 2,6-tolueenamine en 2-naftaleenamine.
- Voor een aantal stoffen (15) geven Tabel 1 en 2 een andere ad hoc MTR-waarde dan de oorspronkelijk gerapporteerde waarde voor de stof. Nieuwe waarden staan *cursief* in Tabel 1 en 2 met verwijzing naar voetnoot waar reden van wijziging en oorspronkelijk gerapporteerde waarde wordt vermeld.

In Bijlage 2 is een overzicht opgenomen van de gegevens die zijn gebruikt voor de afleiding van de ad hoc MTR-waarden.

Tabel 1. Ad hoc MTR-waarden voor aanvullende prioritaire stoffen. Voor de cursieve waarden: zie tekst en voetnoten.

| nr | CAS-nr | Naam | Ad hoc MTR | | |
|----|------------|--------------------------|---------------------------------------|--|---|
| | | | Lucht ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) | Oppervlakte water($\mu\text{g}/\text{l}$) | Bodem ($\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$) |
| 51 | 100-44-7 | chloormethylbenzeen | 1,65E-02 | a) | a) |
| 52 | 100-63-0 | fenylhydrazine | 4,96E-12 | 1,22E+00 | 7,71E-02 |
| 53 | 101-20-2 | triclocarban | 5,73E-09 | 6,40E-04 | 1,00E-01 |
| 54 | 10124-43-3 | kobaltsulfaat | b) | b) | b) |
| 55 | 10190-55-3 | loodmolybdaat | b) | b) | b) |
| 56 | 106-89-8 | chloormethyloxiraan | a) | a) | a) |
| 57 | 106-93-4 | 1,2-dibroomethaan | a) | a) | a) |
| 58 | 106-99-0 | 1,3-butadien | 3,00E-02 | d) | 4,42E-05 |
| 59 | 107-20-0 | chlooraceetaldehyde | 6,43E-02 | 8,39E-03 | 5,01E-02 |
| 60 | 107-22-2 | ethaandial | 5,02E-02 | 1,76E-01 | 4,81E-02 |
| 61 | 108-70-3 | 1,3,5-trichloorbenzeen | 9,24E+00 | a) | 3,68E+03 |
| 62 | 109-86-4 | 2-methoxyethanol | 1,24E-02 | 1,08E+00 | 7,79E-02 |
| 63 | 110-49-6 | 2-methoxyethylacetaat | 6,16E-04 | 1,34E+00 | 1,04E-01 |
| 64 | 110-80-5 | 2-ethoxyethanol | 5,87E-03 | 4,84E-01 | 2,91E-01 |
| 65 | 111-15-9 | 2-ethoxyethylacetaat | 3,57E-03 | 1,28E+00 | 3,93E-02 |
| 66 | 115-32-2 | dicofol | 5,29E-07 | 2,88E-02 | 3,05E+00 |
| 67 | 118-74-1 | hexachloorbenzeen | 1,16E-04 | a) | a) |
| 68 | 120-82-1 | 1,2,4-trichloorbenzeen | 1,03E+01 | d) | 7,00E+02 |
| 69 | 121-14-2 | 2,4-dinitrotolueen | 2,01E-06 | 1,18E+02 | 3,00E-01 |
| 70 | 122-14-5 | fenitrothion | 5,68E-06 | a) | a) |
| 71 | 123-31-9 | hydrochinon | 3,12E-10 | 4,96E+04 | 3,20E+00 |
| 72 | 123-73-9 | 2-butanal | 4,36E-03 | 7,13E-01 | 1,34E-01 |
| 73 | 127-19-5 | N,N-dimethylacetamide | 2,91E-07 | 3,20E+02 | 8,00E+01 |
| 74 | 1303-28-2 | arseenpentoxide | b) | b) | b) |
| 75 | 1304-56-9 | berylliumoxide | b) | b) | b) |
| 76 | 1306-23-6 | cadmiumsulfide | b) | b) | b) |
| 77 | 1313-99-1 | nikkeloxide | b) | b) | b) |
| 78 | 1314-06-3 | dinikkeltrioxide | b) | b) | b) |
| 79 | 1314-62-1 | vanadiumpentoxide | b) | b) | b) |
| 80 | 1321-64-8 | pentachloornaftaleen | 2,88E-05 | 2,80E-04 | 9,15E+01 |
| 81 | 1321-65-9 | trichloornaftaleen | 1,87E-03 | 4,77E-03 | 5,63E+01 |
| 82 | 1327-53-3 | arseentrioxide | b) | b) | b) |
| 83 | 1333-82-0 | chromoxide | b) | b) | b) |
| 84 | 133-49-3 | pentachloorbenzeen-thiol | 2,68E-04 | 1,17E-03 | 9,59E+01 |
| 85 | 1335-32-6 | loodacetaat | b) | b) | b) |
| 86 | 1335-87-1 | hexachloornaftaleen | 5,05E-05 | 1,63E-04 | 9,83E+01 |
| 87 | 1335-88-2 | tetrachloornaftaleen | 7,46E-05 | 1,41E-03 | 9,13E+01 |
| 88 | 1336-36-3 | PCB's | e) | e) | e) |
| 89 | 13463-39-3 | tetracarbonylnikkel | b) | b) | b) |
| 90 | 140-66-9 | para-tert-octylfenol | 2,11E-05 | a) | a) |
| 91 | 143-50-0 | chloordecon | 2,16E-11 | 8,98E-07 | 1,85E-04 |
| 92 | 14977-61-8 | chromylchloride | b) | b) | b) |
| 93 | 151-56-4 | aziridine | 4,98E-02 | 2,59E-01 | 1,09E-01 |

| nr | CAS-nr | Naam | Ad hoc MTR | | |
|-----|------------|---|---------------------------------------|--|---|
| | | | Lucht ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) | Oppervlakte water($\mu\text{g}/\text{l}$) | Bodem ($\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$) |
| 94 | 1582-09-8 | trifluraline | 2,62E-03 | a) | a) |
| 95 | 1589-47-5 | 2-methoxypropanol | 6,71E-04 | 6,81E-01 | 1,73E-02 |
| 96 | 16812-54-7 | nikkelsulfide | b) | b) | b) |
| 97 | 1825-21-4 | pentachlooranisol | 4,60E-04 | 9,49E-03 | 3,15E+01 |
| 98 | 1836-75-5 | nitrofen | 1,24E-03 | 2,63E+01 | 6,40E+00 |
| 99 | 18540-29-9 | chroom(VI)-verbindingen | b) | b) | b) |
| 100 | 189-55-9 | dibenzo[a,i]pyreen (PAK) | 9,67E-10 | 1,99E-06 | 4,06E-01 |
| 101 | 189-64-0 | dibenzo[a,h]pyreen (PAK) | 2,71E-07 | 4,98E-04 | 1,02E+02 |
| 102 | 1912-24-9 | atrazine | 6,48E-06 | a) | a) |
| 103 | 191-24-2 | benzo[g,h,i]peryleen (PAK) | 1,81E-04 | a) | a) |
| 104 | 191-30-0 | dibenzo[a,l]pyreen (PAK) | 3,00E-07 | 2,54E-04 | 1,15E+02 |
| 105 | 192-65-4 | dibenzo[a,e]pyreen (PAK) | 3,23E-07 | 5,00E-04 | 1,02E+02 |
| 106 | 192-97-2 | benzo[e]pyreen (PAK) | 4,82E-07 | 1,47E-03 | 5,78E+01 |
| 107 | 193-39-5 | indeno[1,2,3-cd]pyreen (PAK) | 1,01E-06 | a) | a) |
| 108 | 194-59-2 | 7H-dibenzo[c,g]-carbazoel (PAK) | 6,32E-07 | 7,15E-03 | 4,16E+01 |
| 109 | 205-82-3 | benzo[j]fluorantheen (PAK) | 3,61E-06 | 1,97E-03 | 5,30E+01 |
| 110 | 205-99-2 | benzo[b]fluorantheen (PAK) | a) | a) | a) |
| 111 | 206-44-0 | fluorantheen (PAK) | 1,21E-03 | a) | a) |
| 112 | 207-08-9 | benzo[k]fluorantheen (PAK) | 2,12E-06 | a) | a) |
| 113 | 2104-64-5 | ethyl-p-nitrofenylthio- benzeenfosfenaat (EPN) | 3,03E-09 | 2,29E-02 | 1,42E+00 |
| 114 | 218-01-9 | chryseen (PAK) | 2,55E-04 | a) | a) |
| 115 | 2227-13-6 | tetrasul | 2,92E-03 | 1,21E-01 | 1,30E+02 |
| 116 | 224-42-0 | dibenz[a,j]acridine (PAK) | 7,05E-07 | 6,60E-03 | 4,30E+01 |
| 117 | 226-36-8 | dibenz[a,h]acridine (PAK) | 2,02E-07 | 5,42E-03 | 4,49E+01 |
| 118 | 22832-87-7 | miconazolnitraat | 3,43E-07 | 4,88E-03 | 4,89E+01 |
| 119 | 2314-97-8 | trifluorjoodmethaan | 6,99E-02 | 2,03E-03 | 3,69E-05 |
| 120 | 23593-75-1 | clotrimazol | 7,74E-07 | 1,87E-02 | 2,82E+00 |
| 121 | 28680-45-7 | heptachloornorborneen | 4,19E-03 | 2,58E-02 | 1,10E+01 |
| 122 | 294-62-2 | cyclododecaan | 9,28E-05 | 3,08E-04 | 8,00E+01 |
| 123 | 301-04-2 | looddiacetaat | b) | b) | b) |
| 124 | 302-01-2 | hydrazine | 2,35E-05 | 1,92E-02 | 2,60E-04 |
| 125 | 309-00-2 | aldrin | 3,63E-05 | a) | a) |
| 126 | 32241-08-0 | heptachloornaftaleen | 2,30E-05 | 1,01E-04 | 1,06E+02 |
| 127 | 32534-81-9 | pentabroombifenyl-ether | d) | a) | a) |
| 128 | 330-54-1 | diuron | 3,10E-07 | a) | a) |
| 129 | 335-57-9 | hexadecafluorheptaan | 6,95E-02 | 1,54E-03 | 9,56E-05 |
| 130 | 3424-82-6 | DDE, 2,4'-isomeer | 1,14E-05 | 7,55E-04 | 5,38E+00 |
| 131 | 355-43-1 | 5,6,6-tridecafluoro-6-iodo- 1,1,1,2,2,3,3,4,4,5-hexaan | 6,89E-02 | 2,07E-03 | 1,80E-04 |
| 132 | 36065-30-2 | 1,3,5-tribroom-2-(2,3-dibroom-2- methylpropoxy)benzeen | 8,01E-06 | 1,68E-03 | 6,43E+01 |
| 133 | 37240-96-3 | loodrhodiumoxide | b) | b) | b) |
| 134 | 41083-11-8 | azocyclotin | 2,64E-09 | a) | 3,00E-02 |
| 135 | 465-73-6 | isodrin | 3,12E-04 | a) | 4,29E+00 |
| 136 | 470-90-6 | chloorfenvinfos | 2,30E-08 | a) | a) |

| nr | CAS-nr | Naam | Ad hoc MTR | | |
|-----|------------|---|---------------------------------------|--|---|
| | | | Lucht ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) | Oppervlakte water($\mu\text{g}/\text{l}$) | Bodem ($\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$) |
| 137 | 4904-61-4 | 1,5,9-cyclododecatrien | 1,53E-02 | 1,47E-02 | 4,56E+00 |
| 138 | 50-28-2 | beta-estradiol | 1,03E-12 | 1,43E-01 | 9,01E+00 |
| 139 | 50-29-3 | DDT, 4,4'-isomeer | 4,32E-06 | a) | a) |
| 140 | 50-32-8 | benzo[a]pyreen (PAK) | 1,89E-07 | a) | a) |
| 141 | 50-63-5 | chloroquinebisfosfaat | 6,11E-07 | 5,72E-02 | 5,25E+00 |
| 142 | 51000-52-3 | neodecaanzuur, ethenyl ester | 2,27E-02 | 2,67E-02 | 2,16E+00 |
| 143 | 512-04-9 | spirost-5-en-3-ol, (3beta,25R)- | 9,03E-07 | 2,37E-03 | 4,82E+02 |
| 144 | 51630-58-1 | fenvaleraat | 8,65E-11 | 4,08E+00 | 2,47E+03 |
| 145 | 53-16-7 | estron | 4,00E-09 | 3,22E-01 | 3,18E+00 |
| 146 | 53-19-0 | DDD, 2,4'-isomeer | 2,63E-05 | 3,94E-03 | 5,05E+00 |
| 147 | 534-52-1 | 2-methyl-4,6-dinitrofenol | 9,94E-04 | a) | a) |
| 148 | 53-70-3 | dibenzo[a,h]-anthraceen (PAK) | 2,25E-07 | 1,02E-03 | 7,36E+01 |
| 149 | 55525-54-7 | 3,3'-(ureyleendimethyleen)bis(3,5,5-trimethylcyclohexyl)diisocynaat | 9,28E-08 | 1,86E-03 | 5,43E+01 |
| 150 | 56-53-1 | diethylstilbestrol (DES) | 1,39E-09 | 4,86E+01 | 5,48E+04 |
| 151 | 56-55-3 | benzo[a]anthraceen (PAK) | 6,29E-05 | a) | a) |
| 152 | 57-63-6 | ethinylestradiol | 8,44E-13 | a) | a) |
| 153 | 593-60-2 | vinylbromide | 1,04E+01 | 8,15E-01 | 2,99E-02 |
| 154 | 59447-55-1 | 2-propeenzuur, (pentabroom-fenyl)methylester | 7,43E-07 | 8,48E-04 | 8,29E+01 |
| 155 | 602-01-7 | 2,3-dinitrotolueen | 7,16E-05 | 3,00E-01 | 4,36E-01 |
| 156 | 603-35-0 | trifenyfosfine | 3,43E-05 | 3,33E-03 | 1,80E+01 |
| 157 | 606-20-2 | 2,6-dinitrotolueen ^{g)} | 1,99E-05 | 4,49E-02 | 2,78E-02 |
| 158 | 608-73-1 | hexachloorcyclo-hexaan ^{h)} | 2,52E-05 | 6,60E-05 | 1,40E-02 |
| 159 | 608-93-5 | pentachloorbenzeen | 7,10E-02 | a) | a) |
| 160 | 618-85-9 | 3,5-dinitrotolueen | 2,23E-04 | 5,98E-01 | 4,55E-01 |
| 161 | 619-15-8 | 2,5-dinitrotolueen ⁱ⁾ | 9,55E-05 | 4,00E-01 | 4,36E-01 |
| 162 | 62-53-3 | aniline | a) | a) | a) |
| 163 | 625-45-6 | methoxyazijnzuur | 5,96E-06 | 6,92E-01 | 7,88E-03 |
| 164 | 64-67-5 | diethylsulfaat ^{j)} | 2,69E-03 | 6,50E-01 | 9,35E-02 |
| 165 | 68-12-2 | N,N-dimethylformamide | 3,52E-04 | 6,84E-01 | 2,74E-02 |
| 166 | 69029-86-3 | telluriumslakken | c) | c) | c) |
| 167 | 70124-77-5 | flucythrinaat ^{k)} | 3,34E-10 | 3,20E-06 | 1,90E-03 |
| 168 | 72-54-8 | DDD, 4,4'-isomeer | 2,38E-06 | a) | a) |
| 169 | 72-55-9 | DDE, 4,4'-isomeer | 1,35E-05 | a) | a) |
| 170 | 732-26-3 | decylfenol | 1,03E-06 | 1,95E-04 | 2,95E+00 |
| 171 | 7440-41-7 | beryllium en -verbindingen | c) | a) | a) |
| 172 | 74-83-9 | broommethaan | a) | a) | a) |
| 173 | 7486-35-3 | tributyltin-verbindingen | b) | b) | b) |
| 174 | 75-12-7 | formamide | 1,06E-03 | 1,50E+03 | 1,29E+01 |
| 175 | 75-15-0 | koolstofdisulfide ^{l)} | 2,63E+01 | 2,10E+00 | 7,30E-01 |
| 176 | 75-21-8 | oxiraan (ethyleenoxide) | 6,49E-02 | a) | a) |
| 177 | 76-01-7 | pentachloorethaan | 5,85E-02 | a) | a) |
| 178 | 76-44-8 | heptachloor | 8,41E-05 | a) | a) |
| 179 | 7646-79-9 | kobaltchloride | b) | b) | b) |

| nr | CAS-nr | Naam | Ad hoc MTR | | |
|-----|------------|---|---------------------------------------|--|---|
| | | | Lucht ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) | Oppervlakte water($\mu\text{g}/\text{l}$) | Bodem ($\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$) |
| 180 | 76-87-9 | fentinhydroxide (trifenyltinhydroxide) | 1,31E-07 | a) | a) |
| 181 | 7738-94-5 | chromiumzuur | b) | b) | b) |
| 182 | 77-47-4 | hexachloorcyclopentadien ^{m)} | 1,22E-04 | 2,20E-04 | 2,00E-01 |
| 183 | 7758-01-2 | kaliumbromaat | f) | | |
| 184 | 77-78-1 | dimethylsulfaat | 1,83E-03 | d) | 2,69E-02 |
| 185 | 7778-39-4 | arseenzuur en -zouten | b) | b) | b) |
| 186 | 7778-44-1 | calciumarsenaat | b) | b) | b) |
| 187 | 7778-50-9 | kaliumdichromaat | b) | b) | b) |
| 188 | 7784-40-9 | loodarsenaat | b) | b) | b) |
| 189 | 7790-79-6 | cadmiumfluoride | b) | b) | b) |
| 190 | 789-02-6 | DDT, 2,4'-isomeer ⁿ⁾ | 2,80E-08 | 6,00E-06 | 6,70E-03 |
| 191 | 79-16-3 | N-methylacetamide | 1,45E-02 | 6,82E+02 | 2,33E+02 |
| 192 | 793-24-8 | 4-(dimethylbutylamino)difenylamine | 1,32E-05 | a) | a) |
| 193 | 79-34-5 | 1,1,2,2-tetrachloro-ethaan ^{o)} | 7,42E+01 | a) | a) |
| 194 | 79-46-9 | 2-nitropropan | 4,40E-02 | 2,26E-01 | 5,33E-02 |
| 195 | 8001-35-2 | toxafeen ^{p)} | 4,01E-06 | 7,20E-06 | 1,12E-03 |
| 196 | 823-40-5 | 2,6-tolueendiamine ^{q)} | 6,64E-07 | 5,60E-01 | 7,21E-03 |
| 197 | 85-01-8 | fenanthreen (PAK) | 9,57E-03 | a) | a) |
| 198 | 85-22-3 | pentabroomethyl-benzeen | 7,63E-06 | 1,95E-04 | 1,08E+02 |
| 199 | 85535-84-8 | C10-13-chlooralkanen | c) | a) | c) |
| 200 | 87-68-3 | hexachloorbutadien | 3,90E-03 | a) | a) |
| 201 | 87-86-5 | pentachloorfenol ^{r)} | 3,01E-05 | a) | a) |
| 202 | 900-95-8 | trifenylinacetaat ^{s)} | 3,72E-09 | a) | 2,80E-03 |
| 203 | 91-08-7 | 2,6-tolueendiisocyanaat | 4,77E-03 | 6,29E-02 | 1,09E+01 |
| 204 | 91-59-8 | 2-naftaleenamine ^{t)} | 5,95E-06 | 1,00E-01 | 1,65E-01 |
| 205 | 91-94-1 | 3,3'-dichloorbenzidine | a) | a) | a) |
| 206 | 95-53-4 | 2-methylbenzeenamine ^{u)} | 3,90E-04 | 3,00E-01 | 1,60E-02 |
| 207 | 96-45-7 | ethyleenthioureum (ETU) | 6,89E-09 | 2,75E+00 | 7,68E-01 |
| 208 | 98-07-7 | trichloormethyl-benzeen | 1,49E-04 | 2,19E-04 | 2,17E-02 |
| 209 | 98-95-3 | nitrobenzeen ^{v)} | 2,82E-02 | 1,80E+00 | 4,20E+00 |
| 210 | | PCDF's | c) | c) | c) |
| 211 | | PCDD's | c) | c) | c) |
| 212 | | PCB's | e) | e) | e) |

- a) Voor deze stof is een officieel MTR beschikbaar.
- b) Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.
- c) Er is geen ad hoc MTR afgeleid, omdat het een stofgroep betreft.
- d) Voor deze stof is een Europees Risk Assessment Report beschikbaar. De in deze rapporten opgenomen Predicted No Effect Concentrations (PNEC's) zullen als Nederlandse norm worden overgenomen.
- e) Voor PCB's zijn recent normen afgeleid door de Waterdienst (Rijkswaterstaat).
- f) Voor deze stof is i.v.m. het ontbreken van een Kp geen ad hoc MTR afgeleid.
- g) Voor de ad-hocnormen voor lucht, water en bodem van 2,6-dinitrotolueen is de afleiding van 2004 niet meer te achterhalen. De ad-hocnormen uit 2004 waren: lucht: 3,79E-05; water: 8,55E-02; bodem: 5,29E-02.
- h) Voor hexachloorcyclohexaan is in 2004 voor water en bodem niet de laagste waarde van de HUMANEX output gerapporteerd. De ad-hocnormen uit 2004 waren: water: 6,68E-04; bodem: 3,51E+00.

- i) Voor 2,5-dinitrotolueen is in 2004 voor water niet de laagste waarde van de HUMANEX output gerapporteerd. De ad hoc norm uit 2004 was: water: 5,99E-01.
- j) Voor de ad-hocnormen voor lucht, water en bodem van diethylsulfaat was de afleiding van 2004 niet meer te achterhalen. De ad-hocnormen uit 2004 waren: lucht: 5,11E-03; water: 1,23E+00; bodem: 1,78E-01.
- k) Voor flucythrinaat is in 2004 voor water niet de laagste waarde van de HUMANEX output gerapporteerd. De ad hoc norm uit 2004 was: water: 2,75E-03.
- l) Voor koolstofdissulfide is in 2004 voor water niet de laagste waarde van de HUMANEX output gerapporteerd. De ad hoc norm uit 2004 was: water: 2,77E+01.
- m) Voor hexachloorpentadieen is in 2004 voor water en bodem niet de laagste waarde van de HUMANEX output gerapporteerd. De ad-hocnormen uit 2004 waren: water: 3,61E-01; bodem: 1,10E+02.
- n) Voor DDT, 2,4'-isomeer is in 2004 voor bodem niet de laagste waarde van de HUMANEX output gerapporteerd. De ad hoc norm uit 2004 was: bodem: 5,16E+00.
- o) In 2004 is voor 1,1,2-tetrachloorethaan de norm voor lucht waarschijnlijk fout overgenomen. De in 2004 gerapporteerde norm was: lucht: 9,42E+01.
- p) Voor toxafeen is in 2004 voor water niet de laagste waarde van de HUMANEX output gerapporteerd. De ad hoc norm uit 2004 was: water: 2,67E-05.
- q) Voor 2,6-toleendiamine is in 2004 voor water niet de laagste waarde van de HUMANEX output gerapporteerd. De ad hoc norm uit 2004 was: water: 6,90E-01.
- r) In 2004 is voor pentachloorfenol de norm voor lucht waarschijnlijk fout overgenomen. De in 2004 gerapporteerde norm was: lucht: 3,07E+05.
- s) Voor de ad-hocnormen voor bodem van trifenyltinacetaat is de afleiding van 2004 niet meer te achterhalen. De ad hoc norm uit 2004 was: bodem: 3,00E-01.
- t) Voor de ad-hocnormen voor water en bodem van 2-naftaleenamine is de afleiding van 2004 niet meer te achterhalen. De ad-hocnormen uit 2004 waren: water: 9,90E-01; bodem: 3,02E-01.
- u) Voor de ad-hocnormen voor water en bodem van 2-methylbenzeenamine is de afleiding van 2004 niet meer te achterhalen. De ad-hocnormen uit 2004 waren: water: 1,27E+00; bodem: 4,50E-01.
- v) Voor de ad-hocnormen voor lucht, water en bodem van nitrobenzene is de afleiding van 2004 niet meer te achterhalen. De ad-hocnormen uit 2004 waren: lucht: 2,04E-03; water: 2,27E+01; bodem: 3,00E-01.

Tabel 2. Ad hoc MTR-waarden voor minimalisatieverplichte stoffen die niet op de aanvullende prioritaire-stoffenlijst staan

| Naam | Ad hoc MTR | | |
|--------------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|---|
| | Lucht ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) | Water ($\mu\text{g}/\text{L}$) | Bodem ($\mu\text{g}/\text{kg dwt.}$) |
| polybroomdibenzodioxines | b) | b) | b) |
| polybroomdibenzofuranen | b) | b) | b) |
| polyhalogeen-dibenzodioxines | b) | b) | b) |
| polyhalogeen-dibenzofuranen | b) | b) | b) |
| acrylonitrile | a) | a) | a) |
| benzeen | a) | a) | a) |
| 1,2-dichloorethaan | a) | a) | a) |
| 1,2-epoxypropaan ^{c)} | 6,98E-01 | 5,94E-01 | 1,64E+00 |
| vinylchloride | a) | a) | a) |

a) Voor deze stof is een officieel MTR beschikbaar

b) Er is geen ad hoc MTR afgeleid omdat het een stofgroep betreft

c) Voor de ad-hocnormen voor lucht, water en bodem van 1,2-epoxypropaan is de afleiding van 2004 niet meer te achterhalen. De ad-hocnormen uit 2004 waren: lucht: 7,05E-01; water: 5,32E-01; bodem: 1,47E+00.

Literatuur

- EU (1993) Verordening (EEG) nr. 793/93 van de Raad van 23 maart 1993 inzake de beoordeling en beperking van de risico's van bestaande stoffen
- EU (2005) Proposal for a Directive of the European Parliament and of the Council on environmental quality standards in the field of water policy and amending Directive 2000/60/EC
- Hansler RJ, Traas TP, Mennes WC (2006) Handreiking voor de afleiding van indicatieve milieukwaliteitsnormen. RIVM-rapport 601503024.
- Janssen MPM, Traas TP, Rila J-P, van Vlaardingen PLA (2004) Guidance for deriving Dutch Environmental Risk Limits from EU-Risk Assessment Reports of existing substances. RIVM-rapport 601501020.

Dankwoord

Dit rapport is besproken in de wetenschappelijke klankbordgroep INS. De auteurs bedanken de leden van de WK-INS voor hun bijdrage.

Bijlage 1 Stappenschema afleiding ad hoc MTR

De afleiding van ad hoc MTR's vindt plaats aan de hand van een stappenschema, volgens de methodiek die uitgebreid is beschreven in Hansler et al. (2006). (N.B. Het concept van deze methodiek was in 2004 al beschikbaar.). Ter informatie is het stappenschema in deze bijlage opgenomen. Het schema bestaat uit achtereenvolgens de afleiding van het ad hoc MTR_{humaan}, de afleiding van het ad hoc MTR_{eco} voor de verschillende milieucompartimenten, en de integratie van het ad hoc MTR_{humaan} en het ad hoc MTR_{eco}.

Afleiding ad hoc MTR_{humaan}

| Nr | Vraag / Statement | Antw. | Conclusie | Ga naar |
|--------------|---|-------|---|---------|
| START | alle stoffen | | | |
| 1 | Is door het RIVM in de laatste 10 jaar een MTR of daarmee vergelijkbare grootheid afgeleid? | ja | Baseer ad hoc MTR op deze bestaande MTR of vergelijkbare grootheid. | 18 |
| | | nee | | 2 |
| 2 | Is door een andere instantie in de laatste 10 jaar een MTR of daarmee vergelijkbare grootheid afgeleid? | ja | Baseer ad hoc MTR op deze bestaande MTR of vergelijkbare grootheid. | 18 |
| | | nee | | 3 |
| 3 | Bevat de HSDB-database experimentele toxiciteitsdata van deze stof? | ja | | 4 |
| | | nee | ad hoc MTR = 1,5 µg/p/d ⁴ | 18 |
| 4 | Zijn er slechts acute toxiciteits-, irritatie-, corrosiviteits- en/of sensibilisatiegegevens? | ja | ad hoc MTR = 1,5 µg/p/d | 18 |
| | | nee | AF ⁵ 1 = 10; AF2 = 10 | 5 |
| | stoffen met experimentele toxiciteitsgegevens | | | |
| 5 | Is een 'life-time'-toxiciteitsstudie aanwezig? | ja | AF3 = 1 | 6 |
| | | nee | AF3 = 10 | 6 |
| 6 | Zijn zowel fertiliteits- als pre-/postnatale ontwikkelingseffecten onderzocht? | ja | | 7 |
| | | nee | AF4 = 10 | 8 |
| 7 | Zijn biochemische en histopathologische parameters onderzocht? | ja | AF4 = 1 | 8 |
| | | nee | AF4 = 10 | 8 |

⁴ µg/p/d = microgram per persoon per dag

⁵ AF = veiligheidsfactor

| Nr | Vraag / Statement | Antw. | Conclusie | Ga naar |
|----|---|-------|--|---------|
| 8 | Is afleiding van een overall NOAEL uit dierstudies mogelijk? | ja | AF5 = 1 | 10 |
| | | nee | | 9 |
| 9 | Is afleiding van een overall LOAEL uit dierstudies mogelijk? | ja | AF5 = 10 | 10 |
| | | nee | MTIL ⁶ = 1,5 µg/p/d | 13 |
| 10 | Bepaal overall AF | | Overall AF = AF1 × AF2 × AF3 × AF4 × AF5 | 11 |
| 11 | Is overall AF ≤ 1000? | ja | | 12 |
| | | nee | MTIL = 1,5 µg/p/d | 13 |
| 12 | Bepaal MTIL | | MTIL = (NOAEL of LOAEL uit dierstudies) / overall AF | 13 |
| | evaluatie carcinogeniteit | | | |
| 13 | Is de carcinogeniteit onderzocht? | ja | | 14 |
| | | nee | | 17 |
| 14 | Is carcinogeniteit gevonden? | ja | | 15 |
| | | nee | ad hoc MTR = MTIL | 18 |
| 15 | Is 1/10 ⁴ /levenslang risico te bepalen? | ja | bepaal 1/10 ⁴ /levenslang risico | 16 |
| | | nee | ad hoc MTR = MTIL | 18 |
| 16 | Is 1/10 ⁴ /levenslangrisico ≤ MTIL? | ja | ad hoc MTR = 1/10 ⁴ /levenslang risico | 18 |
| | | nee | ad hoc MTR = MTIL | 18 |
| | evaluatie mutageniteit | | | |
| 17 | Is in de chemische structuur van de stof een Structural Alert voor mutageniteit aanwezig? | ja | ad hoc MTR = 1,5 µg/p/d | 18 |
| | | nee | ad hoc MTR = MTIL | 18 |
| 18 | Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTR_{human} en ad hoc MTR_{eco}</i> | | | § 3.4 |

⁶ MTIL = maximum threshold intake level

Afleiding ad hoc MTR_{eco}

| Nr | Vraag / Statement | Antw. | Conclusie | Ga naar |
|--|--|----------|--|---------------|
| ad hoc MTR_{eco} (grond)water | | | | |
| 1 | Is er een officieel MTR _{eco} beschikbaar voor water? | ja | Er wordt geen ad hoc MTR voor water afgeleid | STOP |
| | | nee | | 2 |
| 2 | Zijn er experimentele ecotox-data voor water voor deze stof? | ja | | 3 |
| | | nee | Baseer ad hoc MTR _{water} op humane tox | |
| 3 | Bepaal kans op doorvergiftiging: voldoet de stof aan de criteria in Tabel B2? | ja | Bereken AF _{water} en AF _{doorvergiftiging} | 4 |
| | | nee | Bereken ad hoc MTR _{water} (Tabel B4) | 5 |
| 4 | Deze berekening houdt rekening met additionele effecten als gevolg van bioaccumulatie en doorvergiftiging (DV) | | Bereken ad hoc MTR _{water} met $AF = AF_{water} (Tabel B4) \times AF_{doorvergiftiging} (Tabel B3)$ | 5 |
| 5 | Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTR_{humanaan} en ad hoc MTR_{eco}</i> | | | |
| ad hoc MTR_{eco} lucht | | | | |
| 1 | Is er een officieel MTR _{eco} beschikbaar voor lucht? | ja | Er wordt geen ad hoc MTR voor lucht afgeleid | STOP |
| | | nee | | 2 |
| 2 | Zijn er experimentele ecotox-data voor lucht voor deze stof? | ja | | 3 |
| | | nee | Baseer ad hoc MTR _{lucht} op humane tox | |
| 3 | Bereken ad hoc MTR _{lucht} | 1. 2. | Zoek AF _{lucht} op in Tabel B1 ad hoc MTR _{lucht} = LOAEL/AF _{lucht} | Tabel B1 4 |
| 4 | Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTR_{humanaan} en ad hoc MTR_{eco}</i> | | | |

| Nr | Vraag / Statement | Antw. | Conclusie | Ga naar |
|---------------------------------------|--|-------|--|-------------|
| ad hoc MTR_{eco} bodem | | | | |
| 1 | Is door een officiële instantie in de laatste 10 jaar een MTR of vergelijkbaar afgeleid voor bodem? | ja | Er wordt geen ad hoc MTR voor bodem afgeleid | STOP |
| | | nee | | 2 |
| 2 | Zijn er experimentele ecotox-data voor bodem van deze stof? | ja | | 3 |
| | | nee | | 6 |
| 3 | Bepaal kans op doorvergiftiging: voldoet de stof aan de criteria in Tabel B2? | ja | Bereken AF _{bodem} en AF _{doorvergiftiging} | 4 |
| | | nee | Bereken ad hoc MTR _{bodemEXP} ⁷ (Tabel B5) | 5 |
| 4 | Deze berekening houdt rekening met additionele effecten als gevolg van bioaccumulatie en doorvergiftiging (DV) | | Bereken ad hoc MTR _{bodemEXP} met AF = AF _{bodem} (Tabel B5) * AF _{doorvergiftiging} (Tabel B3) | 5 |
| 5 | Bereken ook ad hoc MTR _{bodemEP} ⁸ | | | 6 |
| 6 | Zijn er experimentele ecotox-data voor water van deze stof? (zie Bijlage 2) | ja | Bereken ad hoc MTR _{water} (zie stappenschema ad hoc MTR _{water}) | 7 |
| | | nee | Baseer ad hoc MTR _{bodem} op humane tox | |
| 7 | Bereken ad hoc MTR _{bodemEP} uit ad hoc MTR _{water} | | ad hoc MTR _{bodemEP} = ad hoc MTR _{water} * K _p (bodem/water) * F _{bodemNL} ⁹ | 8 |
| 8 | Is ad hoc MTR _{bodemEXP} beschikbaar? | ja | | 9 |
| | | nee | ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{bodemEP} | 10 |
| 9 | Is ad hoc MTR _{bodemEP} < ad hoc MTR _{bodemEXP} ? | ja | ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{bodemEP} | 10 |
| | | nee | ad hoc MTR _{bodem} = ad hoc MTR _{bodemEXP} | 10 |
| 10 | Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTR_{huumaan} en ad hoc MTR_{eco}</i> | | | |

⁷ Ad hoc MTR_{bodemEXP} = ad hoc MTR_{bodem} gebaseerd op experimentele ecotox-data voor bodem

⁸ Ad hoc MTR_{bodemEP} = ad hoc MTR_{bodem} gebaseerd op evenwichtspartitie

⁹ F_{bodemNL} = 3,33; deze factor dient voor de omrekening naar drooggewicht Nederlandse standaard bodem.

| Nr | Vraag / Statement | Antw. | Conclusie | Ga naar |
|--|--|-------|--|-------------|
| ad hoc MTR_{eco} sediment | | | | |
| 1 | Is door een officiële instantie in de laatste 10 jaar een MTR of vergelijkbaar afgeleid voor sediment? | ja | Er wordt geen ad hoc MTR voor sediment afgeleid | STOP |
| | | nee | | 2 |
| 2 | Zijn er experimentele ecotox-data voor sediment van deze stof? | ja | | 3 |
| | | nee | | 6 |
| 3 | Bepaal kans op doorvergiftiging: voldoet de stof aan de criteria in Tabel B2? | Ja | Bereken AF _{sediment} en AF _{doorvergiftiging} | 4 |
| | | nee | Bereken ad hoc MTR _{sedimentEXP} ¹⁰ (Tabel B6) | 5 |
| 4 | Deze berekening houdt rekening met additionele effecten als gevolg van bioaccumulatie en doorvergiftiging (DV) | | Bereken ad hoc MTR _{sedimentEXP} met AF = AF _{sediment} (Tabel B6) * AF _{doorvergiftiging} (Tabel B3) | 5 |
| 5 | Bereken ook ad hoc MTR _{sedimentEP} ¹¹ | | | 6 |
| 6 | Zijn er experimentele ecotox-data voor water van deze stof? | ja | Bereken ad hoc MTR _{water} (zie stappenschema ad hoc MTR _{water}) | 7 |
| | | nee | Baseer ad hoc MTR _{sediment} op humane tox | § 3.4 |
| 7 | Bereken ad hoc MTR _{sedimentEP} uit ad hoc MTR _{water} | | ad hoc MTR _{sedimentEP} = ad hoc MTR _{water} * K _p (sediment/water) * F _{sedimentNL} ¹² | 8 |
| 8 | Is ad hoc MTR _{sedimentEXP} beschikbaar? | ja | | 9 |
| | | nee | ad hoc MTR _{sediment} = ad hoc MTR _{sedimentEP} | 10 |
| 9 | Is ad hoc MTR _{sedimentEP} < ad hoc MTR _{sedimentEXP} ? | ja | ad hoc MTR _{sediment} = ad hoc MTR _{sedimentEP} | 10 |
| | | nee | ad hoc MTR _{sediment} = ad hoc MTR _{sedimentEXP} | 10 |
| 10 | Gebruik resultaat als input voor <i>Integratie ad hoc MTR_{humanaan} en ad hoc MTR_{eco}</i> | | | § 3.4 |

¹⁰ Ad hoc MTR_{sedimentEXP} = ad hoc MTR_{sediment} gebaseerd op experimentele ecotox-data voor sediment

¹¹ Ad hoc MTR_{sedimentEP} = ad hoc MTR_{sediment} gebaseerd op evenwichtspartitie

¹² F_{sedimentNL} = 2,71; deze factor dient voor de omrekening naar drooggewicht Nederlands standaard sediment.

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

| Nr | Vraag / Statement | Antw. | Conclusie | Ga naar |
|----|---|-------|--|-------------|
| 1 | Bereken de verspreiding van de stof over de milieucompartimenten met EUSES 2.0.3 | | Gebruik de input voor EUSES 2.0.3 en de default settings | 2 |
| 2 | Input in HUMANEX: <ul style="list-style-type: none">• stof-eigenschappen• EUSES 2.0.3-verdeling (fate)• ad hoc MTR_{humaan} (µg/p/d) (§ 3.2)• ad hoc MTR_{eco} (µg/l, µg/m³) (§ 3.3)¹³ | | Bereken HUMANEX-output: MTR _{humaan} en MTR _{eco} per compartiment | 3 |
| 3 | Bepaal per compartiment de meest kritische (= laagste) ad hoc MTR-waarde | | | STOP |

¹³ Wanneer volgens het stappenschema (§ 3.3) voor een bepaald compartiment geen ad hoc MTR_{eco} kan worden afgeleid, wordt het uiteindelijke ‘overall’ ad hoc MTR slechts gebaseerd op het ad hoc MTR_{humaan}.

Tabel B1. Afleiding ad hoc MTR_{lucht} gebaseerd op toxiciteitsgegevens ^{a,b)}

| Beschikbare data | Aanvullende criteria | ad hoc MTR gebaseerd op | Veiligheidsfactor |
|--|---|---------------------------|-------------------|
| Basisgroepen | Plant of (korst)mos, ongewervelden, gewervelden | | |
| NOEC voor 1 van de 3 basisgroepen ^a | NOEC(min) (= de laagste NOEC) van soort in basisgroepen | $NOEC_{\min}$ | 1000 |
| NOEC's voor 2 van de 3 basisgroepen ^a | NOEC(min) van verschillende soorten in de basisgroepen | $NOEC_{\min}$ | 300 |
| NOEC's voor 3 van de 3 basisgroepen ^a | NOEC(min) van verschillende soorten in de basisgroepen | $NOEC_{\min}$ | 100 |
| L(E)C50s voor basisset^b | L(E)C50s van minimaal 1 soort behorende tot de basisgroepen | $L(E)C50_{\min}$ | 1000 |
| Basisset + 1 x chronische tox (NOEC) | $L(E)C50_{\min}/1000 < NOEC_{\min}/100$ | $L(E)C50_{\min}$ | 1000 |
| | $L(E)C50_{\min}/1000 \geq NOEC_{\min}/100$ | $NOEC_{\min}$ | 100 |
| Basisset + 2 NOEC's | $NOEC_{\min} < LC50_{\min}$ en NOEC's voor 2 soorten met verschillend leef- en voedselpatroon | $NOEC_{\min}$ | 50 |
| | Indien condities niet vervuld zijn, ga naar basisset + 1x NOEC | | |
| Basisset + 3 NOEC's | $NOEC_{\min} < LC50_{\min}$ en NOEC's voor 3 soorten met verschillend leef- en voedselpatroon | $NOEC_{\min}$ | 10 |
| | Indien condities niet vervuld zijn, ga naar basisset + 2x NOEC | | |

a) Het ad hoc MTR_{lucht} is gebaseerd op de bepalende toxiciteitswaarde volgens het schema (kolom 3) gedeeld door de AF (kolom 4).

De AF-waarden die moeten worden toegepast wanneer er alleen NOEC's beschikbaar zijn en geen LC50's, zijn ontleend aan Tabel B4. Wanneer minder gegevens beschikbaar zijn dan de basisset, worden de juiste factoren toegepast op de beschikbare LC50- en NOEC-waarden; vervolgens wordt het laagste resultaat gebruikt voor afleiding van het ad hoc MTR .

b) De TGD geeft geen basisset voor blootstelling via lucht. De basis zoals hier gebruikt is gebaseerd op de INS-guidance (zie Traas, 2001) en bestaat uit primaire producenten (planten of (korst)mossen), ongewervelden en gewervelden. De TGD schrijft geen standaard factoren voor; er is hier gekozen voor analogie met afleiding van ad hoc MTR_{bodem} (Tabel B5). In het kader van de ad hoc MTR -methode wordt, wanneer de basisset niet compleet is, en/of er alleen acute gegevens zijn, het ad hoc MTR_{lucht} altijd vergeleken met die op basis van equilibrium-partitie vanuit water, en wordt de meest kritische waarde hiervan genomen.

Tabel B2. Conditie om een stof als potentieel bioaccumulatief te classificeren ^{a)}

| Karakteristieken | Conditie |
|------------------|--|
| Fysisch-chemisch | <ul style="list-style-type: none"> • $\text{Log } K_{ow} > 3$ en molecuulgewicht < 700 • Indicatie op basis van expert judgement |
| (Organo)metalen | <ul style="list-style-type: none"> • Indicatie op basis van literatuur/ experiment |

a) Een stof kan in potentie accumuleren in de voedselketen. Vogels en zoogdieren kunnen blootgesteld worden aan toxische stoffen via het voedsel. Dit proces wordt aangeduid als doorvergiftiging. Meer detail over de condities wordt gegeven in de EU-TGD.

Tabel B3. Veiligheidsfactoren ter voorkoming van doorvergiftiging

| $\text{Log } K_{ow}$ range | AF |
|----------------------------|----|
| 3-4 | 2 |
| 4-5 | 5 |
| 5-8 | 10 |
| 8-9 | 3 |
| > 9 | 1 |

Tabel B4. Afleiding ad hoc MTR_{water} gebaseerd op toxiciteitsgegevens ^{a)}

| Beschikbare data | Aanvullende criteria | ad hoc MTR gebaseerd op | Veiligheids-factor |
|---------------------------------------|---|-------------------------|--------------------|
| Basisgroepen | Alg, Daphnia, vis | | |
| L(E)C50 voor 1 van de 3 basisgroepen | LC50(min) van soorten in basisgroepen | L(E)C50 _{min} | 10000 |
| NOEC voor 1 van de 3 basisgroepen | NOEC(min) van soorten in basisgroepen | NOEC _{min} | 1000 |
| L(E)C50s voor 2 van de 3 basisgroepen | LC50(min) van 2 testen voor verschillende soorten in de basisgroepen | L(E)C50 _{min} | 3000 |
| NOEC's voor 2 van de 3 basisgroepen | NOEC(min) van 2 testen voor verschillende soorten in de basisgroepen | NOEC _{min} | 300 |
| NOEC's voor basisset | Alg, Daphnia, vis | NOEC _{min} | 100 |
| L(E)C50s voor basisset | Alg, Daphnia, vis | L(E)C50 _{min} | 1000 |
| Basisset + 1 x chronische tox (NOEC) | NOEC voor dezelfde taxonomische groep als de laagste L(E)C50 ? | | |
| | Ja | NOEC _{min} | 100 |
| | Nee: $L(E)C50_{min}/1000 < NOEC_{aqua}/100$ | L(E)C50 _{min} | 1000 |
| | Nee: $L(E)C50_{min}/1000 \geq NOEC_{min}/100$ | NOEC _{min} | 100 |
| Basisset + 2 NOEC's | NOEC(min) voor dezelfde taxonomische groep als de laagste L(E)C50? | | |
| | Ja: Daphnia of vis | NOEC _{min} | 50 |
| | Nee: $NOEC_{min} \leq LC50_{min}$ | NOEC _{min} | 100 |
| | Nee: $LC50_{min} < NOEC_{min}$ | LC50 _{min} | 100 |
| Basisset + 3 NOEC's | NOEC's voor alg, Daphnia, vis? | | |
| | Ja | NOEC _{min} | 10 |
| | Nee: $NOEC_{min}$ voor dezelfde taxonomische groep als de laagste L(E)C50 en $NOEC_{min} \leq LC50_{min}$ | NOEC _{min} | 10 |
| | Nee: $NOEC_{min}$ niet van dezelfde taxonomische groep als de laagste L(E)C50 en $NOEC_{min} \leq LC50_{min}$ | NOEC _{min} | 50 |

| Beschikbare data | Aanvullende criteria | <i>ad hoc MTR</i> gebaseerd op | Veiligheids-factor |
|------------------|---|-----------------------------------|--------------------|
| | Nee: NOEC _{min} niet van dezelfde taxonomische groep als de laagste L(E)C50 <i>en</i> LC50 _{min} < NOEC _{min} | LC50 _{min} | 100 |

a) Het ad hoc MTR_{water} is gebaseerd op de bepalende toxiciteitswaarde volgens het schema (kolom 3) gedeeld door de AF (kolom 4). Wanneer minder gegevens beschikbaar zijn dan de basisset, worden de juiste factoren toegepast op de beschikbare LC50- en NOEC-waarden; vervolgens wordt het laagste resultaat gebruikt voor afleiding van het ad hoc MTR.

Tabel B5. Afleiding ad hoc MTR_{bodem} gebaseerd op toxiciteitsgegevens ^{a,b)}

| Beschikbare data | Aanvullende criteria | ad hoc MTR gebaseerd op | Veiligheids-factor |
|--|---|---------------------------|--------------------|
| Basisgroepen | Planten, microorganismen (decomposers), ongewervelden (consumers) | | |
| NOEC voor 1 van de 3 basisgroepen ^a | NOEC(min) van soort in basisgroepen | $NOEC_{\min}$ | 1000 |
| NOEC's voor 2 van de 3 basisgroepen ^a | NOEC(min) van verschillende soorten in de basisgroepen. | $NOEC_{\min}$ | 300 |
| NOEC's voor 3 van de 3 basisgroepen ^a | NOEC(min) van verschillende soorten in de basisgroepen. | $NOEC_{\min}$ | 100 |
| L(E)C50s voor basisset^b | L(E)C50s uit minimaal 1 van de drie basisgroepen | $L(E)C50_{\min}$ | 1000 |
| Basisset + 1 x chronische tox (NOEC) | $L(E)C50_{\min}/1000 < NOEC_{\min}/100$ | $L(E)C50_{\min}$ | 1000 |
| | $L(E)C50_{\min}/1000 \geq NOEC_{\min}/100$ | $NOEC_{\min}$ | 100 |
| Basisset + 2 NOEC's | $NOEC_{\min} < LC50_{\min}$ NOEC's voor soorten uit 2 trofische niveau's | $NOEC_{\min}$ | 50 |
| | Indien condities niet vervuld zijn, ga naar basis set + 1x NOEC | | |
| Basisset + 3 NOEC's | $NOEC_{\min} < LC50_{\min}$ NOEC's voor soorten uit 3 trofische niveau's | $NOEC_{\min}$ | 10 |
| | Indien condities niet vervuld zijn, ga naar basisset + 2x NOEC | | |

a) Het ad hoc MTR_{bodem} is gebaseerd op de bepalende toxiciteitswaarde volgens het schema (kolom 3) gedeeld door de AF (kolom 4). De AF-waarden die moeten worden toegepast wanneer er alleen NOEC's beschikbaar zijn en geen LC50's, zijn ontleend aan Tabel B4. Wanneer minder gegevens beschikbaar zijn dan de basisset, worden de juiste factoren toegepast op de beschikbare LC50- en NOEC-waarden; vervolgens wordt het laagste resultaat gebruikt voor afleiding van het ad hoc MTR .

b) De TGD-basisset bestaat in principe uit primaire producenten (planten), decomposers (microorganismen) en consumers (vele soorten ongewervelde bodemfauna). De TGD laat voor bodem toe, dat de factor 1000 wordt gebruikt wanneer de basisset niet compleet is. Wanneer er echter maar één LC50 beschikbaar is, wordt het ad hoc MTR_{bodem} vergeleken met het ad hoc MTR_{bodem} op basis van equilibrium-partitie. In het kader van de ad hoc MTR -methode wordt, wanneer de basisset niet compleet is, en/of er alleen acute gegevens zijn, het ad hoc MTR_{bodem} altijd vergeleken met die op basis van equilibrium partitie. Dit is analoog aan de TGD-werkwijze voor sediment. De meest kritische waarde wordt genomen als ad hoc MTR_{bodem} (zie stappenschema).

Tabel B6. Afleiding ad hoc MTR_{sediment} gebaseerd op toxiciteitsgegevens ^{a,b)}

| Beschikbare data | Aanvullende criteria | ad hoc MTR gebaseerd op | Veiligheids-factor |
|--|---|-------------------------|--------------------|
| Basisgroepen | Sediment-bewonende organismen | | |
| NOEC voor 1 van de 3 basisgroepen ^a | NOEC(min) van soort in basisgroepen | $NOEC_{\min}$ | 1000 |
| NOEC's voor 2 van de 3 basisgroepen ^a | NOEC(min) van verschillende soorten in de basisgroepen. | $NOEC_{\min}$ | 300 |
| NOEC's voor 3 van de 3 basisgroepen ^a | NOEC(min) van verschillende soorten in de basisgroepen. | $NOEC_{\min}$ | 100 |
| L(E)C50's voor basisset^b | L(E)C50's van minimaal 1 soort behorende tot de basisgroepen | $L(E)C50_{\min}$ | 1000 |
| Basisset + 1 x chronische tox (NOEC) | $L(E)C50_{\min}/1000 < NOEC_{\min}/100$ | $L(E)C50_{\min}$ | 1000 |
| | $L(E)C50_{\min}/1000 \geq NOEC_{\min}/100$ | $NOEC_{\min}$ | 100 |
| Basisset + 2 NOEC's | $NOEC_{\min} < LC50_{\min}$ en NOEC's voor 2 soorten met verschillend leef- en voedselpatroon | $NOEC_{\min}$ | 50 |
| | Indien condities niet vervuld zijn, ga naar basis set + 1x NOEC | | |
| Basisset + 3 NOEC's | $NOEC_{\min} < LC50_{\min}$ en NOEC's voor 3 soorten met verschillend leef- en voedselpatroon | $NOEC_{\min}$ | 10 |
| | Indien condities niet vervuld zijn, ga naar basisset + 2x NOEC | | |

- a) Het ad hoc MTR_{sediment} is gebaseerd op de bepalende toxiciteitswaarde volgens het schema (kolom 3) gedeeld door de AF (kolom 4). De AF-waarden die moeten worden toegepast wanneer er alleen NOEC's beschikbaar zijn en geen LC50's, zijn ontleend aan Tabel B4. Wanneer minder gegevens beschikbaar zijn dan de basisset, worden de juiste factoren toegepast op de beschikbare LC50- en NOEC-waarden; vervolgens wordt het laagste resultaat gebruikt voor afleiding van het ad hoc MTR.
- b) De TGD geeft geen basisset voor blootstelling via sediment, maar specificeert wel dat de aanvullende chronische gegevens alleen leiden tot verlaging van de AF als het gaat om soorten 'met verschillend leef- en voedselpatroon'. Volgens de TGD wordt, wanneer er alleen acute gegevens voorhanden zijn, het ad hoc MTR_{sediment} altijd vergeleken met die op basis van equilibrium-partitie vanuit water. De meest kritische waarde hiervan wordt genomen als ad hoc MTR_{sediment} .

Bijlage 2 Achtergrondinformatie

Rapportage formulieren

Het onderstaande geeft per stof een overzicht van de gegevens die zijn verzameld en de stappen die gevolgd zijn voor afleiding van het ad hoc MTR_{humanaan} en het ad hoc MTR_{eco}. Voor een toelichting op het stappenplan wordt verwezen naar Hansler et al. (2006).

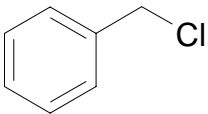
(N.B. Het concept van deze methodiek was in 2004 al beschikbaar.)

Rapportage formulier

51. chloormethylbenzeen (100-44-7)

Voor deze stof zijn MTRwater en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 601503004 (25)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | Benzeen, (chloormethyl)- |
| CAS-nummer | 100-44-7 |
| Synoniemen | benzylchloride; alpha-chloortolueen; omega-chloortolueen; chloormethylbenzeen; chloorfenylmethaan; tolylchloride |
| Molecuulformule | C7 H7 Cl |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | waarde | Ref. |
|--|-----------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 126,59 | 1 |
| Smeltpunt (°C) | -39,2 | 1 |
| Kookpunt (°C) | 179,4 | 1 |
| Dampdruk (Pa) | 173,27 (25 ° C) | 1 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 525 (exp.) (25 ° C) | 1 |
| Log Kow | 2,3 (exp.) | 1 |
| LogKoc | 1,96 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 42,04 (exp.) (25 ° C) | 5 |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | - | |
| (Aerobe bio)degradatie | - | |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| | | | |
|------------------------|--|--|---|
| experimentele gegevens | 1/10 ⁶ : 5,8 E-6 mg/kg bw/d | | 9 |
| carcinogeniteit | | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 4,4 | | 3 |
| <i>Poecilia reticulata</i> | 14 d | LC50 | 0,39 | | 11 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Penaeus setiferus</i> | 48 | LC50 | 3,5 | zoutwater | 3 |
| <i>Daphnia magna</i> | 24 | EC50 | 1,3 | | 11 |
| Algen | | | | | |
| <i>Scenedesmus quadricauda</i> | 8 d | NOEC | 50 | | 11 |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Microcystis aeruginosa (bact.)</i> | 8 d | NOEC | 30 | | 11 |
| <i>Entosiphom sulcatum (prot.)</i> | 72 | NOEC | 25 | | 11 |
| <i>Pseudomonas putida (bact.)</i> | 16 | NOEC | 4,8 | | 11 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumanaan

s1: nee

s2: ja

IRIS: $OSF = 1,7E-1 \text{ mg.kg bw/d. } 1/100/0.17 = 5,8E-2 \text{ mg/kg bw/d} \rightarrow 1/1E+6 = 5,8E-6 \text{ mg/kg bw/d} = 0,0058 \text{ } \mu\text{g/kg bw/d}$

ad hoc MTRwater/grondwater

s1: ja; MTR = 310 $\mu\text{g/l}$

ad hoc MTRbodemsediment

s1: ja; MTR = 33 mg/kg

ad hoc MTRLucht

s1: nee

s2: nee

s4: ja

s6: EP methode: $Kp \text{ lucht/water} = (H/R*T)*1000 = 17 \text{ m}^3/\text{m}^3$

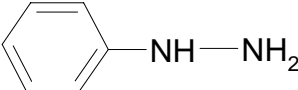
ad hoc MTRLucht = $0,31 * 17 = 5,27 \text{ g/m}^3$

Output Humanex-resultaten

| chloormethylbenzeen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------------------|-----------------------|-----------------------|--------------------------|--------------------------|
| | ($\mu\text{g/kg bw/d}$) | ($\mu\text{g/m}^3$) | NO | | |
| | 5.80E-03 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | ($\mu\text{g/l}$) | ($\mu\text{g/l}$) | ($\mu\text{g/m}^3$) | ($\mu\text{g/kg dwt}$) | ($\mu\text{g/kg dwt}$) |
| MPC eco | 3.10E+02 | 3.10E+02 | 1.07E+02 | 3.30E+04 | 3.30E+04 |
| MPC human | 4.76E-02 | 7.15E-03 | 1.65E-02 | 4.07E-02 | 3.62E-01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 6.52E+03 | 4.34E+04 | 6.52E+03 | 8.10E+05 | 9.12E+04 |
| Critical MPC | 4.76E-02 | 7.15E-03 | 1.65E-02 | 4.07E-02 | 3.62E-01 |
| % importance of total exposure | 18.257 | 0.268 | 81.473 | 0.002 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 81.254 | | | | |

Rapportage formulier 52. fenyldiazine (100-63-0)

1. IDENTITEIT

| | | |
|-------------------|--|-------------------|
| Stofnaam | fenyldiazine | Referentie |
| CAS-nummer | 100-63-0 | - |
| Stofgroep | hydrazine | 5 |
| Synoniemen | hydrazinebenzeen monofenyldiazine | 7 |
| Molecuul formule | C6 H8 N2 | 5 |
| Structuur formule |  | 5 |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|-------------------------------|----------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 108,14 | 1 |
| Smeltpunt (°C) | 19,6 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 243,5 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 127000 bij 25 °C (exp.) | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 3,47 bij 25 °C (exp) | 2 |
| Log Kow | 1,25 (exp) | 6 |
| LogKoc | 1,67 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 5,89 E-07 bij 25 °C (exp.) | 2 |

3. TOXICITEIT

3.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |

3.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-----------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Brachydanio rerio</i> | 96 | LC50 | 0,16 | | 11 |
| <i>Oryzias latipes</i> | 48 | LC50 | 15,7 | | 3 |
| fish | | NOEC | 0,01 | | 10 |
| <i>Brachydanio rerio</i> , larvae | | NOEC | 0,00049 | survival | 10 |
| <i>Brachydanio rerio</i> , larvae | | NOEC | 0,0039 | hatching | 10 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 24 | EC50 | 2 | | 11 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 2,63 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| <i>Scenedesmus sp.</i> | | EC50 | 3,2 | | 11 |
| QSAR <i>Green algae</i> | 144 | EC50 | 0,55 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Vibrio fisheri</i> | 0,5 | EC50 | 66,7 | | 7 |

4. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1: nee
s2: nee
s3: ja
s4: nee; AF1 = 10; AF2 = 10
s5: ja; AF3 = 1
s6: nee; AF4 = 10
s8: nee
s9: nee; MTIL = 1,5 µg/p/d
s14: ja
s15: nee; ad hoc MTR = MTIL = 1,5 µg/p/d = 0,02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater/grondwater

s1: nee
s2: ja
s3: nee
s4: LC50 aanwezig voor 3 groepen basisset + NOEC voor 1 groep (vis)→
NOECmin voor vis is 0,00049 mg/l ; LC50min = 0,16 mg/l voor vis→
ad hoc MTRwater = NOECmin/100 = 5E-06 mg/l

ad hoc MTR bodem/sediment

s1: nee
s2: nee
s6: ja
s7: ad hoc MTR bodem = ad hoc MTR water* Kp
Sabljjic formule 2: $\log K_{oc} = 1,02 + 0,52 \log K_{ow} = 1,67 \rightarrow K_{oc} = 46,77 \rightarrow$
 $K_p = 0,0588 * 46,77 = 2,75 \text{ l/kg}$
ad hoc MTR bodem = $5E-06 * 2,75 = 1,4E-05 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTR lucht

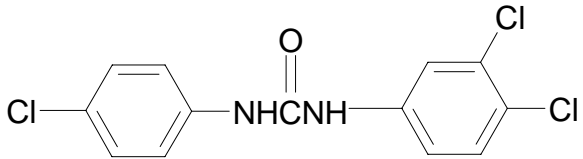
s1: nee
s2: nee
s4: ja
s6: EP methode: $K_p \text{ lucht/water} = (H/R * T) * 1000 = 2,38 E-7 \text{ m}^3/\text{m}^3$
ad hoc MTRlucht = $5 E-06 * 2,38 E-7 = 1,2E-12 \text{ g/m}^3$

Output Humanex-resultaten

| fenyldrazine | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|--------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.005 | 0.005 | 4.96E-12 | 0.014 | 0.014 |
| MPC human | 1.22E+00 | 2.50E-02 | 1.21E-09 | 7.71E-02 | 5.74E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 4.09E-03 | 2.00E-01 | 4.09E-03 | 1.82E-01 | 2.44E-03 |
| Critical MPC | 1.22E+00 | 2.50E-02 | 4.96E-12 | 7.71E-02 | 5.74E+00 |
| % importance of total exposure | 92.040 | 7.959 | 0.000 | 0.001 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 87.262 | | | | |

Rapportage formulier 53. triclocarban (101-20-2)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | triclocarban |
| CAS-nummer | 101-20-2 |
| Stofgroep | urea |
| Synoniemen | urea, N-(4-chlorophenyl-N'-(3,4-dichlorophenyl)-; carbanilide, 3,4,4'-trichloro-; 3,4,4'-trichlorodiphenylurea; genoface; procutene; solubacter; cutison; cusiter |
| Molecuulformule | |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|----------------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 315,59 | 5 |
| Smeltpunt (°C) | 182,04 | 5 |
| Kookpunt (°C) | 434,57 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 4,81 E-07 bij 25 °C | 5 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,65 (op basis logKow) bij 25 °C | 5 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,0002 bij 25 °C | 18 |
| Log Kow | 4,90 (geschat) | 5 |
| LogKoc | 3,45 (fenylurea) | 17 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 1187 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | niet afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|------------------------------|------------|-----------|---------------|-------------------------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vis | 96 | LC50 | 0,409 | QSAR voor neutrale stof | 4 |
| QSAR vis | | NOEC | 0,090 | neutrale stof | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Mercenaria mercenaria</i> | 48 | LC50 | 0,032 | | 7 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,576 | neutrale stof | 4 |

| | | | | | |
|--------------------------|----|------|--------|---------------|---|
| QSAR <i>garnaal</i> | 96 | LC50 | 0,016 | neutrale stof | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 0,425 | neutrale stof | 4 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 0,227 | neutrale stof | 4 |
| QSAR Green algae | 4 | EC50 | 0,0002 | urea | 4 |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

4. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhuuman

s1: nee

s2: nee

s3: nee; ad hoc MTR = 1,5 µg/p/d = 0,02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water/grondwater

s1: nee

s2: ja

s3: ja, AFdoorvergiftiging = 5

s4: 1 LC50 aanwezig voor mollusca (geen daphnia): 0,032 mg/l; AF = 10000 →
ad hoc MTR = 0,032/10000*5 = 6,4E-07

ad hoc MTR bodem/sediment

s1: nee

s2: nee

s6: ja

s7. Sabljic formule 4: $\log K_{oc} = 1,09 + 0,47 \log K_{ow} = 3,39 \rightarrow K_{oc} = 2472 \rightarrow$

$K_p = 0,0588 * 2472 = 145 \text{ l/kg}$

ad hoc MTR bodem EP = $6,4E-07 * 145 = 0,0001 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTR lucht

s1: nee

s2: nee

s4: ja

s6: ad hoc MTR luchtEP = ad hoc MTR water* Kp

EUSES: $K_p = 9,86 \text{ E-}08 \text{ m}^3/\text{m}^3 \rightarrow \text{ad hoc MTR luchtEP} = 6,4E-07 * 9,86 \text{ E-}08 = 6,3 \text{ E-}14 \text{ g/m}^3$

Output Humanex-resultaten

| triclocarban | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2,00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 6,40E-04 | 6,40E-04 | 5,73E-09 | 1,00E-01 | 1,00E-01 |
| MPC human | 3,63E-02 | 2,02E-02 | 3,25E-07 | 2,89E+00 | 8,82E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1,77E-02 | 3,17E-02 | 1,77E-02 | 3,46E-02 | 1,13E-02 |
| Critical MPC | 6,40E-04 | 6,40E-04 | 5,73E-09 | 1,00E-01 | 1,00E-01 |
| % importance of total exposure | 83,108 | 16,825 | 0,015 | 0,052 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 83,108 | | | | |

Rapportageformulier

54. kobaltsulfaat (10124-43-3)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

55. loodmolybdaat (10190-68-8)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

56. chloormethyloxiraan (106-89-8)

Voor alle drie compartimenten zijn inmiddels gedegen normen afgeleid zie RIVM-rapport 601782003 (26).

Rapportageformulier

57. 1,2-dibroomethaan (106-93-4)


Voor alle drie compartimenten zijn inmiddels gedegen normen afgeleid zie RIVM-rapport 601782003 (26).

Rapportageformulier

58. 1,3-butadien (106-99-0)

Voor deze stof is een EU-RAR beschikbaar.

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 1,3-butadien |
| CAS-nummer | 106-99-0 |
| Stofgroep | diene |
| Synoniemen | 1,3-butadiene, bivinyl, divinyl, erythrene, vinyl ethylene, biethylene, pyrrolylene |
| Molecuulformule | C ₄ H ₆ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 54.09 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -109 | 2 |
| Kookpunt (°C) | -4 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 281240 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 735 | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 20700 | 18 |
| Log Kow | 1.99 | 2 |
| LogKoc | 2.05 | 17 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 0.02 µg/kg bw/d TCA: 0.03 µg/m ³ | 9 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. ja; RfC = $2E-3 \text{ mg/m}^3$

$1/10E+4 = 3 \text{ } \mu\text{g/m}^3$; $1/10E+6 = 0.03 \text{ } \mu\text{g/m}^3$

MTRwater = 0.033 mg/l

MTRbodem = 0.046 mg/kg

MTRsediment = 0.062 mg/kg

De MTRs voor water, bodem en sediment zijn PNECs uit de EU-RAR.

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTR luchtEP = ad hoc MTR water* Kp

EUSES: $Kp = 8.73 \text{ m}^3/\text{m}^3 \rightarrow \text{ad hoc MTRluchtEP} = 0.033 * 8.73 = 0.3 \text{ g/m}^3$

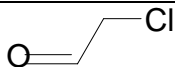
Output Humanex-resultaten

| 1,3-butadiene | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------------------|-----------------------|-----------------------|--------------------------|--------------------------|
| | ($\mu\text{g/kg bw/d}$) | ($\mu\text{g/m}^3$) | YES | | |
| | 2.00E-02 | 3.00E-02 | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | ($\mu\text{g/l}$) | ($\mu\text{g/l}$) | ($\mu\text{g/m}^3$) | ($\mu\text{g/kg dwt}$) | ($\mu\text{g/kg dwt}$) |
| MPC eco | 3.30E+01 | 3.30E+01 | 1.12E+03 | 4.60E+01 | 4.60E+01 |
| MPC human | 8.84E-04 | 4.30E-06 | 3.00E-02 | 4.42E-05 | 1.86E-02 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.73E+04 | 7.68E+06 | 3.73E+04 | 1.04E+06 | 2.47E+03 |
| Critical MPC | 8.84E-04 | 4.30E-06 | 3.00E-02 | 4.42E-05 | 1.86E-02 |
| % importance of total exposure | 0.248 | 0.000 | 99.752 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 99.749 | | | | |

Rapportageformulier

59. chlooraceetaldehyde (107-20-0)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | chlooraceetaldehyde |
| CAS-nummer | 107-20-0 |
| Stofgroep | aldehyde |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₂ H ₃ ClO |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|----------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 78,5 | 5 |
| Smeltpunt (°C) | -16,3 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 85,5 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 8570 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 111000 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 6,06 | 18 |
| Log Kow | 0,09 (geschat) | 5 |
| LogKoc | 1,07 | 17 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 3,162 (berekend) | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Danio rerio</i> | 96 | LC50 | 3,28 | | 3 |
| <i>Brachydanio rerio</i> , 8 cellig stadium tot uitkomen ei | | NOEC | 0,24 | | 7 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 24 | EC50 | 15 | | 3 |
| <i>Daphnia magna</i> | 21 d | NOEC | 5 | | 3 |
| <i>Nitroca spinipes</i> | 96 | LC50 | 1,2 | zoutwater | 3 |
| Algen | | | | | |
| <i>Scenedesmus subspicata</i> | 48 | EC50 | 0,55 | biomassa | 3 |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Tetrahymena pyriformis</i> (protoz.) | 36 | EC50 | 3 | groei | 3 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1: nee
- s2: nee
- s3: ja
- s4: nee; AF1 = 10; AF2 = 10
- s5: nee; AF3 = 10
- s6: nee; AF4 = 10
- s8: nee
- s9: nee; MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d
- s14: ja
- s15: nee, ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water/grondwater

- s1: nee
- s2: ja
- s3: nee
- s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen basisset + NOEC voor 2 groepen basisset (daphnia en vis); NOECmin = 0.24 mg/l; LC50min = 0.55 mg/l
NOECmin (vis) niet voor zelfde groep als LC50min (alg) en NOECmin = <LC50min→
ad hoc MTRwater = NOECmin/AF100 = 0.24/100 = 0.0024 mg/l

ad hoc MTR bodem/sediment

- s1: nee
- s2: nee
- s6: ja
- s7: ad hoc MTR bodemEP = ad hoc MTR water*Kp bodem
Sabljic formule 2: $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 \log K_{ow} = 1.07 \rightarrow K_{oc} = 11.7 \rightarrow K_p = 0.69 \text{ l/kg}$
ad hoc MTRbodem EP = 0.0024 * 0.69 = 0.0017 mg/kg

ad hoc MTR lucht

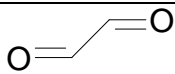
- s1: nee
- s2: nee
- s4: ja
- s6: ad hoc MTR luchtEP = ad hoc MTR water* Kp lucht
EUSES: $K_p = 2.56E-3 \text{ m}^3/\text{m}^3 \rightarrow \text{ad hoc MTR luchtEP} = 0.0024 * 2.56E-3 = 6.14 \text{ E-}06 \text{ g/m}^3$

Output Humanex-resultaten

| chloroacetaldehyde | TDI | TCA | | Corrected for TCA: | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|--------------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | NO | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/L) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 2.4 | 2.4 | 1.84E+01 | 1.7 | 1.7 |
| MPC human | 8.39E-03 | 4.72E-02 | 6.43E-02 | 5.01E-02 | 1.45E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.86E+02 | 5.09E+01 | 2.86E+02 | 3.39E+01 | 1.17E+00 |
| Critical MPC | 8.39E-03 | 4.72E-02 | 6.43E-02 | 5.01E-02 | 1.45E+00 |
| % importance of total exposure | 0.009 | 7.681 | 92.309 | 0.001 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 91.791 | | | | |

Rapportageformulier 60. ethaandial (107-22-2)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | ethaandial |
| CAS-nummer | 107-22-2 |
| Stofgroep | aldehyde |
| Synoniemen | glyoxaal biformyl |
| Molecuulformule | C2H2O2 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|--------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 58,04 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 15 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 50,4 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 34000 (exp.) bij 25 °C | 1 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1000000 (exp.) bij 20 °C | 2 |
| Log Kow | -1,66 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 0,16 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 1,97 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 3,162 (berekend) | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-----------------------|------------|
| experimentele gegevens | NOAEL: 125 mg/kg bw/d | 19 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 215 | | 3 |
| QSAR vissen | 32 d | NOEC | 121 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | EC50 | 290 | | 11 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 516 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| <i>Selenastrum capricornutum</i> | 96 | EC50 | 66 | | 3 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 603 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhuuman

- s1: nee
- s2: nee
- s3: ja (ook in DOSE en SIDS)
- s4: nee; AF1 = 10; AF2 = 10
- s5: ja; AF3 = 1
- s6: ja
- s7: ja; AF4 = 1
- s8: ja; NOAEL = 125 mg/kg bw/d; AF5 = 1
- s10: Overall AF = 10x10x1x10x1 = 100
- s11: ja
- s12: MTIL = NOAEL/100 = 1.3 mg/kg bw/d
- s13: nee; ad hoc MTR = MTIL = 1.3 mg/kg bw/d
- s14: nee
- s17: ja; ad hoc MTR = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water/grondwater

- s1: nee
- s2: ja
- s3: nee
- s4: L(E)50 aanwezig voor basisset; laagste EC50 = 66 mg/l voor algen; AF = 1000;
ad hoc MTR water = 66/1000 = 0.066 mg/l

ad hoc MTR bodem/sediment

- s1: nee
- s2: nee
- s6: ja
- s7: ad hoc MTR bodemEP = ad hoc MTR water * Kp
Sabljjic: formule 2 (niet hydrofoob): $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 \log K_{ow} = 0.16 \rightarrow$
 $K_{oc} = 1.43 \rightarrow K_p = 0.084 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTR bodemEP} = 0.066 * 0.084 = 0.006 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTR lucht

- s1: nee
- s2: nee
- s4: ja
- s6: ad hoc MTR luchtEP = ad hoc MTR water * Kp
EUSES: $K_p = 8E-4 \text{ m}^3/\text{m}^3 \rightarrow \text{ad hoc MTR luchtEP} = 0.066 * 0.0008 = 5.3 E-05 \text{ g/m}^3$

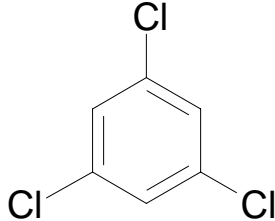
Output Humanex-resultaten

| ethaandial | TDI | TCA | | Corrected for TCA: | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|--------------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | NO | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | Soil | Sediment |
| | Surface water | Groundwater | Air | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | | |
| MPC eco | 6.60E+01 | 6.60E+01 | 1.88E+01 | 6.00E+00 | 6.00E+00 |
| MPC human | 1.76E-01 | 1.03E-01 | 5.02E-02 | 4.81E-02 | 3.38E-01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.75E+02 | 6.43E+02 | 3.75E+02 | 1.25E+02 | 1.78E+01 |
| Critical MPC | 1.76E-01 | 1.03E-01 | 5.02E-02 | 4.81E-02 | 3.38E-01 |
| % importance of total exposure | 26.336 | 0.788 | 72.875 | 0.001 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 71.658 | | | | |

Rapportageformulier

61. 1,3,5-trichloorbenzeen (108-70-3)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 1,3,5-trichloorbenzeen |
| CAS-nummer | 108-70-3 |
| Stofgroep | chloorbenzenen |
| Synoniemen | TCB |
| Molecuulformule | C6 H3 Cl3 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-----------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 181,45 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 63,5 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 208 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 31,99 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 6,01 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 4,19 (exp) | 2 |
| LogKoc | 3,49 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 191,5 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------|------------|
| BCF | 14000 in vis | 7 |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 8 µg/kg bw/d TCA: 50 µg/m ³ | 14 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTR humaan

TDI = 8 µg/kg bw/d

TCA = 50 µg/m³

MTR water/grondwater

MTR = 0.067 mg/l

Referentie: RIVM rapport: 679101011

MTR bodem/sediment

MTR = 7 mg/kg

Referentie: RIVM rapport: 679101011

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTRluchtEP = MTRwater *Kp

Kp = (191.5/2477.6)*1000 = 77.3 m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 0.067*77.3 = 5.18 g/m³

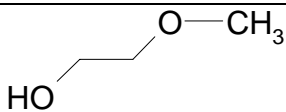
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|----------------------|----------------------|---------------------------|-------------|-----------------|
| 1,3,5-trichloorbenzeen | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 6.70E+01 | 6.70E+01 | 4.61E+01 | 7.00E+03 | 7.00E+03 |
| MPC human | 1.34E+01 | 2.04E+01 | 9.24E+00 | 3.68E+03 | 4.27E+03 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 4.98E+00 | 3.28E+00 | 4.98E+00 | 1.90E+00 | 1.64E+00 |
| Critical MPC | 1.34E+01 | 2.04E+01 | 9.24E+00 | 3.68E+03 | 4.27E+03 |
| % importance of total exposure | 19.201 | 46.776 | 33.906 | 0.117 | |
| Dominant route of exposure | shower | | | | |
| % of dominant route | 33.794 | | | | |

Rapportageformulier

62. 2-methoxyethanol (109-86-4)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | 2-methoxyethanol |
| CAS-nummer | 109-86-4 |
| Stofgroep | neutraal |
| Synoniemen | ethylene glycol monomethyl ether |
| Molecuulformule | C3 H8 O2 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|--------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 76,10 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -85,1 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 124,1 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 1266 (exp.) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1000000 (exp.) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 0,1 | 2 |
| LogKoc | 1,07 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 0,334 (exp.) bij 25 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | 14,8 (exp.) bij 25 °C | 2 |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 0,15 (berekend) | 1 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-----------------------------|------------|
| experimentele gegevens | RfC: 0.02 mg/m ³ | 9 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Poecilia reticulata</i> | 96 | LC50 | 14977 | | 11 |
| <i>Lepomis macrochirus</i> | 96 | LC50 | 9650 | | 11 |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 22655 | | 4 |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 1360 | zoutwater | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 1868 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| QSAR <i>Daphnia magne</i> | 48 | LC50 | 20048 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 10686 | | 4 |
| QSAR Green algae | 96 | NOEC | 216 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------------------|------|------|------|--|----|
| QSAR aardworm | 14 d | LC50 | 3338 | | 4 |
| <i>Chilomonas paramaecium</i> (prot) | 48 h | NOEC | 2,2 | | 11 |
| <i>Entosiphom sulcatum</i> (prot) | 72 | NOEC | 1715 | | 11 |
| <i>Microcystis aeruginosa</i> (bact) | 192 | NOEC | 100 | | 11 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1: nee

s2: ja; IRIS: RfC = 0.02 mg/m³

ad hoc MTR water/grondwater

s1: nee

s2: ja

s3: nee

s4. LC50 aanwezig voor 1 groep basisset → AF = 10000

ad hoc MTRwater = 9650/10000 = 0.97 mg/l

ad hoc MTR bodem/sediment

s1: nee

s2: nee

s6: ja

s7: ad hoc MTR bodemEP = ad hoc MTR water * Kp

Sabljić: formule 2: $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 \log K_{ow} = 1.072 \rightarrow$

$K_{oc} = 11.8 \rightarrow K_p = 0.69 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTR bodemEP} = 0.97 * 0.69 = 0.67 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTR lucht

1: nee

s2: nee

s4: ja

s6: ad hoc MTR luchtEP = ad hoc MTR water * Kp

$K_p = (0.334/2477.6) * 1000 = 0.13 \text{ m}^3/\text{m}^3 \rightarrow$

ad hoc MTR luchtEP = 0.97 * 0.13 = 0.13 g/m³

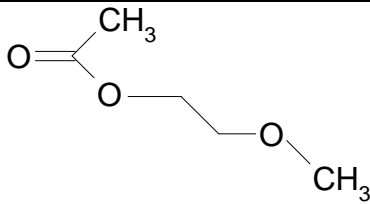
Output Humanex-resultaten

| | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: NO | | |
|---------------------------------------|-------------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| 2-methoxyethanol | 2.00E-02 | 2.00E+01 | | | |
| MPC eco | 9.70E+02 | 9.70E+02 | 1.11E+01 | 6.70E+02 | 6.70E+02 |
| MPC human | 1.08E+00 | 1.68E-01 | 1.24E-02 | 7.79E-02 | 2.08E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 8.97E+02 | 5.78E+03 | 8.97E+02 | 8.60E+03 | 3.23E+02 |
| Critical MPC | 1.08E+00 | 1.68E-01 | 1.24E-02 | 7.79E-02 | 2.08E+00 |
| % importance of total exposure | 79.225 | 1.312 | 19.463 | 0.001 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 77.203 | | | | |

Rapportageformulier

63. 2-methoxyethylacetaat (110-49-6)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 2-methoxyethylacetaat |
| CAS-nummer | 110-49-6 |
| Stofgroep | ester |
| Synoniemen | ethylene glycol monomethyl acetaat 2-methoxyethyl acetaat; methyl cellosolve acetaat |
| Molecuulformule | C5 H10 O3 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 118,13 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -70 (exp) | 2 |
| Kookpunt (°C) | 143 (exp) | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 267 (exp) bij 20 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1000000 (exp) bij 20 °C | 2 |
| Log Kow | 0,10 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 1,10 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,032 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 3,162 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Carassius auratus</i> | 24 | LC50 | 190 | | 7 |
| <i>Lepomis macrochirus</i> | 96 | LC50 | 40 | | 7 |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee AF1 = 10; AF2 = 10
- s5. nee; AF3 = 10
- s6. ja
- s7. ja; AF4 = 1
- s8. nee
- s9. nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d
- s14: nee
- s17: nee; ad hoc MTR = MTIL-0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater/grondwater

- s1. nee
- s2. ja
- s3. nee
- s4. LC50 aanwezig voor 1 groep → AF = 10000
ad hoc MTRwater = 40/10000 = 0.004 mg/l

ad hoc MTRbodem/sediment

- s1. nee
- s2. nee
- s6. ja
- s7. ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater*Kp
Sabljic: formule 2 $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 \log K_{ow} = 1.07$
 $K_{oc} = 11.8 \rightarrow K_p = 0.69 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodemEP} = 0.004 * 0.69 = 0.003 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. ja
- s6. ad hoc MTRlucht = ad hoc MTRwater*Kp
EUSES: $K_p = 1.33 \text{ E-05 m}^3/\text{m}^3$; ad hoc MTRluchtEP = $1.33 \text{ E-05} * 0.004 = 5.3 \text{ E-08 g/m}^3$

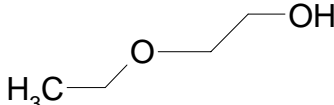
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | | Corrected for | |
|---------------------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|-----------------|
| 2-methoxyethylacetaat | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | TCA: | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | NO | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 4.00E+00 | 4.00E+00 | 1.84E-03 | 3.00E+00 | 3.00E+00 |
| MPC human | 1.34E+00 | 9.35E-02 | 6.16E-04 | 1.04E-01 | 3.47E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.99E+00 | 4.28E+01 | 2.99E+00 | 2.89E+01 | 8.66E-01 |
| Critical MPC | 1.34E+00 | 9.35E-02 | 6.16E-04 | 1.04E-01 | 3.00E+00 |
| % importance of total exposure | 97.382 | 0.810 | 1.807 | 0.001 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 95.639 | | | | |

Rapportageformulier

64. 2-ethoxyethanol (110-80-5)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | 2-ethoxyethanol |
| CAS-nummer | 110-80-5 |
| Stofgroep | neutraal |
| Synoniemen | ethyleen glycol monoethyl ether |
| Molecuulformule | C4H10O2 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 90,12 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -70 (exp) | 2 |
| Kookpunt (°C) | 135 (exp) | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 708 (exp) | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1000000(exp) | 2 |
| Log Kow | -0,32 (exp) | 2 |
| LogKoc | 0,35 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,048 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | 14,8 (exp) | 2 |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

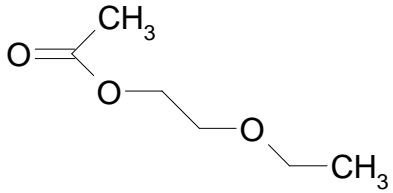
Output Humanex-resultaten

| | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| 2-ethoxyethanol | 2.00E-02 | 2.00E+02 | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 7.70E+03 | 7.70E+03 | 9.34E+01 | 1.76E+03 | 1.76E+03 |
| MPC human | 4.84E-01 | 5.64E-01 | 5.87E-03 | 2.91E-01 | 9.58E-01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.59E+04 | 1.37E+04 | 1.59E+04 | 6.05E+03 | 1.84E+03 |
| Critical MPC | 4.84E-01 | 5.64E-01 | 5.87E-03 | 2.91E-01 | 9.58E-01 |
| % importance of total exposure | 0.537 | 85.230 | 14.230 | 0.003 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 80.505 | | | | |

Rapportageformulier

65. 2-ethoxyethylacetaat (111-15-9)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 2-ethoxyethylacetaat |
| CAS-nummer | 111-15-9 |
| Stofgroep | ester |
| Synoniemen | ethyleen glycol monoethyl ether acetaat 2-ethoxyethyl acetaat; cellosolve acetaat oxitolacetaat |
| Molecuulformule | C6 H12 O3 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 132,16 | 2 |
| Smelpunt (°C) | -61,7 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 156,4 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 311,9 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 247000 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 0,59 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 0,77 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,32 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 0,6 | 7 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | NOEC teratogeniteit: 270 mg/m ³ | 10 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. nee; AF3 = 10

s6. ja

s7. ja; AF4 = 1

s8. nee

s9. nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

s14. nee

s17. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

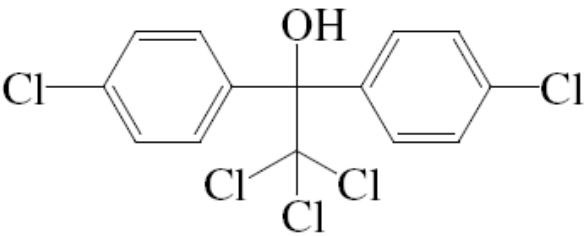
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------|------------------------------|---------------------------|-------------|-----------------|
| 2-ethoxyethylacetaat | (µg/kg bw/d) 2.00E-02 | (µg/m ³) N.A. | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.00E+02 | 3.00E+02 | 8.36E-01 | 1.10E+02 | 1.10E+02 |
| MPC human | 1.28E+00 | 5.36E-02 | 3.57E-03 | 3.93E-02 | 2.82E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.34E+02 | 5.59E+03 | 2.34E+02 | 2.80E+03 | 3.90E+01 |
| Critical MPC | 1.28E+00 | 5.36E-02 | 3.57E-03 | 3.93E-02 | 2.82E+00 |
| % importance of total exposure | 93.904 | 0.428 | 5.667 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 91.621 | | | | |

Rapportageformulier

66. dicofol (115-32-2)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | dicofol |
| CAS-nummer | 115-32-2 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | kelthane, kelthan |
| Molecuulformule | C ₁₄ H ₉ Cl ₅ O |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 370.49 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 77.5 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 193 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.0001 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.8 | 2 |
| Log Kow | 5.02 | 2 |
| LogKoc | 3.45 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.046 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Oncorhynchus clarki</i> | 26 | LC50 | 0.053 | | 10 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 96 | LC50 | 0.390 | | 10 |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee (KRW)
- s3. ja
- s4. nee; AF1 = 1-; AF2 = 10
- s5. ja; AF3 = 1
- s6. ja
- s7. ja; AF4 = 1
- s8. nee
- s9. nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. ja
- s15. ja
- s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

- s1. nee
- s2. ja
- s3. ja; AFdoorvergiftiging = 10
- s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000
ad hoc MTRwater = 0.053/3000*10 = 1.8E-06 mg/l

ad hoc MTRbodem

- s1. nee
- s2. nee
- s6. ja
- s7. ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater*Kp
Sabljjic formule4: $\log K_{oc} = 1.09 + 0.47 \log K_{ow} = 3.45$
 $K_{oc} = 2814 \rightarrow K_p = 166 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodemEP} = 1.8E-06 * 166 = 0.0003 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. ja
- s6. ad hoc MTRluchtEP = MTRwater*Kp
EUSES: $K_p = 1.95 \text{ E-05 m}^3/\text{m}^3 \rightarrow \text{ad hoc MTRluchtEP} = 3.5 \text{ E-11 g/m}^3$

Output Humanex-resultaten

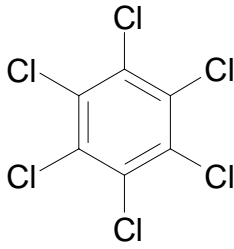
| dicofol | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.0018 | 0.0018 | 5.29E-07 | 0.3 | 0.3 |
| MPC human | 2.88E-02 | 1.87E-02 | 8.47E-06 | 3.05E+00 | 8.12E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 6.24E-02 | 9.62E-02 | 6.24E-02 | 9.83E-02 | 3.70E-02 |
| Critical MPC | 2.88E-02 | 1.87E-02 | 5.29E-07 | 3.05E+00 | 8.12E+00 |
| % importance of total exposure | 83.586 | 14.880 | 1.473 | 0.062 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 83.586 | | | | |

Rapportageformulier

67. hexachlorobenzeen (118-74-1)

Voor deze stof zijn gedegen MTRwater en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 679101012/1994 (28).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | hexachloorbenzeen |
| CAS-nummer | 118-74-1 |
| Stofgroep | chloorbenzenen |
| Synoniemen | HCB; perchloorbenzeen; pentachlorophenyl-chloride; amatin; anticarie; no-bunt; sarocide |
| Molecuulformule | C6 Cl6 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 284,78 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 231,8 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 325 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,0024 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,0062 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 5,73 (exp) | 2 |
| LogKoc | 4,74 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 172,2 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---|------------|
| experimentele gegevens | oral 1:10E+4=0,16 µg/kg bw/d | 14 |
| | inhal 1:10E+4=0,75 µg/m ³ | |
| | RfD: 8E-4 mg/kg bw/d | 9 |
| carcinogeniteit | oral 1/10E+6: 6,3 E-7 mg/kg bw/d inhal. 1/10E+6: 0,002 µg/m ³ | 9 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTRhumaan

oral : $1/10E+4 = 0.16 \mu\text{g}/\text{kg bw}/\text{d}$

inhalation: $1/10E+4 = 0.75 \mu\text{g}/\text{m}^3$

MTRwater = $0.009 \mu\text{g}/\text{l}$

MTRbodem/sediment = $0.005 \text{ mg}/\text{kg}$

ad hoc MTR lucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = $\text{MTRwater} \cdot K_p$

$K_p = (172.2/2477.6) \cdot 1000 = 69.5 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = $9E-06 \cdot 69.5 = 0.0006 \text{ g}/\text{m}^3$

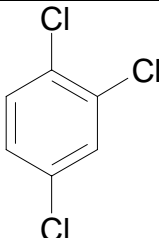
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---|--|------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|
| hexachloorbenzeen | ($\mu\text{g}/\text{kg bw}/\text{d}$) 1.60E-03 | ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) 7.50E-03 | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | ($\mu\text{g}/\text{l}$) | ($\mu\text{g}/\text{l}$) | ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) | ($\mu\text{g}/\text{kg dwt}$) | ($\mu\text{g}/\text{kg dwt}$) |
| MPC eco | 0.009 | 0.009 | 3.73E-03 | 5.00E+00 | 5.00E+00 |
| MPC human | 2.80E-04 | 1.73E-03 | 1.16E-04 | 5.52E+00 | 1.81E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.21E+01 | 5.20E+00 | 3.21E+01 | 9.06E-01 | 2.77E+00 |
| Critical MPC | 2.80E-04 | 1.73E-03 | 1.16E-04 | 5.00E+00 | 1.81E+00 |
| % importance of total exposure | 40.730 | 50.234 | 5.154 | 3.883 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 40.730 | | | | |

Rapportageformulier

68. 1,2,4-trichlorobenzeen (120-82-1)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 1,2,4-trichloorbenzeen |
| CAS-nummer | 120-82-1 |
| Stofgroep | chloorbenzenen |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C6 H3 Cl3 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|----------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 181,45 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 17 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 213,5 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 61,3 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 49 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 4,02 (exp) | 2 |
| LogKoc | 3,36 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 143,85 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|----------|------------|
| BCF | 490-5200 | 7 |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 8 µg/kg bw/d TCA: 50 µg/m ³ RfD: 0,01 mg/kg bw/d | 14 9 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTRhumaan

TDI = 8 µg/kg bw/d

TCA = 50 µg/m³

MTRwater/grondwater = 0.067 mg/l

Referentie: RIVM rapport: 679101011

MTRbodem/sediment = 7 mg/kg

Referentie: RIVM rapport: 679101011

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = MTRwater *Kp

$Kp = (143.8/2477.6)*1000 = 58 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = 0.067*58 = 3.9 g/m³

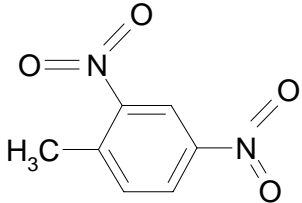
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|----------------------|----------------------|---------------------------|-------------|-----------------|
| 1,2,4-trichloorbenzeen | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 8.00E+00 | 5.00E+01 | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 6.70E+01 | 6.70E+01 | 4.09E+01 | 7.00E+02 | 7.00E+02 |
| MPC human | 1.69E+01 | 2.44E+01 | 1.03E+01 | 3.19E+03 | 3.75E+03 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.96E+00 | 2.75E+00 | 3.97E+00 | 2.19E-01 | 1.87E-01 |
| Critical MPC | 1.69E+01 | 2.44E+01 | 1.03E+01 | 7.00E+02 | 7.00E+02 |
| % importance of total exposure | 17.336 | 44.703 | 37.863 | 0.098 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 36.957 | | | | |

Rapportageformulier

69. 2,4-dinitrotolueen (121-14-2)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | 2,4-dinitrotolueen |
| CAS-nummer | 121-14-2 |
| Stofgroep | dinitrobenzenen |
| Synoniemen | 1-methyl-2,4-dinitrobenzenen |
| Molecuulformule | C7 H6 N2 O4 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|----------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 182,14 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 71 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 300 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,02 (exp) bij 22 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 270 (exp) bij 22 °C | 2 |
| Log Kow | 1,98 (exp) | 2 |
| LogKoc | 1,7 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,0055 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 6,7 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-----------------------|------------|
| experimentele gegevens | RfD: 0,002 mg/kg bw/d | 9 |
| carcinogeniteit | IARC 2B | 10 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 31 | | 10 |
| <i>Danio rerio</i> | 96 | LC50 | 10 | | 3 |
| <i>Gasterosteus aculeatus</i> | 96 | LC50 | 1,3 | | 3 |
| <i>Gasterosteus aculeatus</i> | 35 d | NOEC | 0,77 | | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | EC50 | 22,5 | | 3 |
| <i>Daphnia magna</i> | 21 d | NOEC | 0,02 | | 3 |

| | | | | | |
|--|------|------|-------|--|---|
| <i>Daphnia magna</i> | 21 d | NOEC | 0,04 | | 3 |
| Algen | | | | | |
| <i>Anacystis aeruginosa</i> | 96 | EC50 | 0,07 | | 3 |
| <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> | 96 | EC50 | 0,011 | | 3 |
| <i>Chlorella pyrenoidosa</i> | 96 | EC50 | 3,5 | | 3 |
| <i>Oscillatoria agardhii</i> | 96 | EC50 | 0,36 | | 3 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. ATSDR: MRLchronisch = 0.002 mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater/grondwater

s1. nee

s2. ja

s3. nee

s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen + NOEC voor 2 groepen

NOECmin voor kreeft en LC50 min voor alg→

LC50 min <NOECmin→ ad hoc MTRwater = LC50min/100 = 0.011/100 = 0.0001 mg/l

ad hoc MTRbodemsediment

s1. nee

s2. nee

s6. ja

s7. ad hoc MTRbodemsEP = ad hoc MTRwater*Kp

Sabljić formule 1: $\log K_{oc} = 0.10 + 0.81 \log K_{ow} = 1.7$ →

$K_{oc} = 50.6$ → $K_p = 2.97$ l/kg→ad hoc MTRbodemsEP = 0.0001*2.97 = 0.0003 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = MTRwater *Kp

$K_p = (0.0055/2477.6)*1000 = 0.0022$ m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 0.0001*0.0022 = 2.2E-07 g/m³

Output Humanex-resultaten

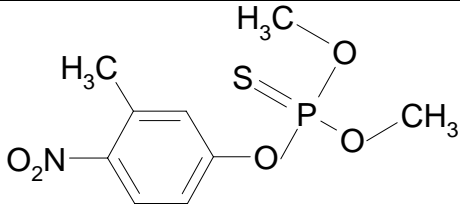
| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| 2,4-dinitrotolueen | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E+00 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.1 | 0.1 | 2.01E-06 | 3.00E-01 | 3.00E-01 |
| MPC human | 1.18E+02 | 5.59E+00 | 2.37E-03 | 4.06E+01 | 1.11E+03 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 8.48E-04 | 1.79E-02 | 8.48E-04 | 7.39E-03 | 2.70E-04 |
| Critical MPC | 1.18E+02 | 5.59E+00 | 2.01E-06 | 3.00E-01 | 3.00E-01 |
| % importance of total exposure | 97.198 | 2.360 | 0.437 | 0.005 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 84.265 | | | | |

Rapportageformulier

70. fenitrothion (122-14-5)

Voor deze stof zijn gedegen MTRwater en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 601501002 (29)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | fenitrothion |
| CAS-nummer | 122-14-5 |
| Stofgroep | fosfaat ester |
| Synoniemen | O,O-dimethyl O-(3-methyl-4-nitrofenyl)ester fosforzwavelzuur |
| Molecuulformule | C ₉ H ₁₂ N O ₅ P S |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 277,23 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 3,4 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 164 bij 134 Pa | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,0072 (exp) bij 20 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 38 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 3,30 (exp) | 2 |
| LogKoc | 2,64 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,094 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 69 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbeeldbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | LC50 inhal, rat: 378 mg/m ³ | 7 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Cyprinus carpio</i> | 48 | LC50 | 4,1 | | 7 |
| <i>Lepomis macrochirus</i> | 96 | LC50 | 0,6 | | 3 |
| <i>Fundulus heteroclitus</i> | 48 | LC50 | 0,59 | | 7 |
| crustacean | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | EC50 | 0,0086 | | 7 |

| | | | | | |
|--------------------------------|-------|------|----------|--|---|
| <i>Callinectes sapidus</i> | 96 | LC50 | 0,0074 | | 3 |
| <i>Gammarus pseudolimnaeus</i> | 96 | LC50 | 0,001 | | 3 |
| <i>Homarus americanus</i> | 7,3 d | LC50 | 0,0001 | | 3 |
| <i>Daphnia magna</i> | 21 d | NOEC | 0,000009 | | 3 |
| Algen | | | | | |
| <i>Anabaena sp.</i> | 96 | EC50 | 1,1 | | 3 |
| <i>Anabaena sp.</i> | 96 | NOEC | 0,1 | | 3 |
| <i>Ankistrodesmus falcatus</i> | 96 | EC50 | 2,5 | | 3 |
| <i>Ankistrodesmus falcatus</i> | 96 | NOEC | 0,1 | | 3 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTR_{humaan}

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. ja

s7. ja; AF4 = 1

s8. nee

s9. nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

s14. nee

s17. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

MTR_{water} = 9E-6 mg/l

MTR_{sediment} = 0.0007 mg/kg

ad hoc MTR_{lucht}

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTR_{luchtEP} = MTR_{water} * K_p

$$K_p = (0.094/2477.6) * 1000 = 0.038 \text{ m}^3/\text{m}^3$$

$$\text{ad hoc MTR}_{\text{luchtEP}} = 9\text{E-}6 * 0.038 = 3.4\text{E-}07 \text{ g}/\text{m}^3$$

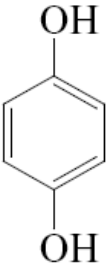
Output Humanex-resultaten

| fenitrothion | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.009 | 0.009 | 5.68E-06 | 0.7 | 0.7 |
| MPC human | 4.98E-01 | 7.88E-02 | 3.14E-04 | 2.03E+00 | 1.70E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.81E-02 | 1.14E-01 | 1.81E-02 | 3.45E-01 | 4.11E-02 |
| Critical MPC | 4.98E-01 | 7.88E-02 | 5.68E-06 | 2.03E+00 | 1.70E+01 |
| % importance of total exposure | 92.658 | 3.612 | 3.707 | 0.023 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 49.799 | | | | |

Rapportageformulier

71. hydrochinon (123-31-9)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | hydrochinon |
| CAS-nummer | 123-31-9 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | 1,4-benzenediol, <i>p</i> -dihydroxybenzene, <i>p</i> -hydroxyphenol, quinol, hydroquinol, hydroquinone, 1,4-dihydroxybenzene |
| Molecuulformule | C ₆ H ₄ (OH) ₂ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|---------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 110,11 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 172 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 287 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,0032 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 7,2E+04 | 2 |
| Log Kow | 0,59 | 2 |
| LogKoc | 1,27 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 4,8E-06 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-------------------|------------|
| BCF | 40 RA (ratio) vis | 3 |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|----------------------|------------|
| experimentele gegevens | NOAEL: 75 mg/kg bw/d | 10 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Oncorhynchus mykiss</i> | 96 | E(L)C50 | 0,044 | e-toxbase | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 24 | EC50 | 0,120* | | 3 |

| | | | | | |
|----------------------|----|------|------|------------|---|
| <i>Daphnia magna</i> | 24 | EC50 | 0,09 | e-toxibase | 3 |
|----------------------|----|------|------|------------|---|

*Deze waarde is de in 2004 gebruikte waarde, de overige lagere waarden zijn later gevonden.

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10
- s5. ja; AF3 = 1
- s6. ja
- s7. ja; AF4 = 1
- s8. ja; AF5 = 1
- s10. overall AF = 10x10x1x1x1 = 100
- s11. ja
- s12. MTIL = 75/100 = 0.75 mg/kg bw/d
- s13. nee
- s14. ja
- s15. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.75 mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

- s1. nee
- s2. ja
- s3. nee
- s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000
ad hoc MTRwater = 0.12/3000 = 4E-05 mg/l

MTRbodem&sediment = 0.05 mg/kg

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. ja
- s6. ad hoc MTRluchtEP = MTRwater *Kp
EUSES:Kp = 2.07 E-09 m³/m³ → ad hoc MTRluchtEP = 8.2 E-14 g/m³

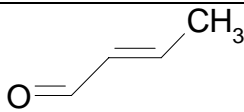
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| hydrochinon | 7.50E+02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.04 | 0.04 | 3.12E-10 | 3.20E+00 | 3.20E+00 |
| MPC human | 4.96E+04 | 6.31E+02 | 3.87E-04 | 9.25E+02 | 1.47E+05 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 8.06E-07 | 6.34E-05 | 8.06E-07 | 3.46E-03 | 2.18E-05 |
| Critical MPC | 4.96E+04 | 6.31E+02 | 3.12E-10 | 3.20E+00 | 3.20E+00 |
| % importance of total exposure | 96.632 | 3.366 | 0.002 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 94.538 | | | | |

Rapportageformulier

72. 2-butanal (123-73-9)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 2-butanal |
| CAS-nummer | 123-73-9 |
| Stofgroep | Aldehyde |
| Synoniemen | crotonaldehyde ethylene propionate |
| Molecuulformule | C ₄ H ₆ O |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|-------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 70,09 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -76 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 102,2 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 3999 (exp.) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 150000 (exp.) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 0,63 (geschat) | 1 |
| LogKoc | 1,35 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 1,97 (exp.) bij 25 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 0,73 (berekend) | 1 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Menidia beryllina</i> | 96 | LC50 | 1,3 | | 7 |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 16,2 | | 4 |
| QSAR vissen | 32 d | NOEC | 4,2 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 26,5 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 603 | | 4 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 4,2 | | 4 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhuuman

- s1: nee
- s2: nee
- s3: ja
- s4: nee; AF2 = 10; AF2 = 10
- s5: ja; AF3 = 1
- s6: nee; AF4 = 10
- s8: nee
- s9: nee; MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d
- s14: ja
- s15: ja
- s16: nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water/grondwater

- s1: nee
- s2: ja
- s3: nee
- s4: LC50 aanwezig voor 1 groep basiset → AF = 10000;
ad hoc MTR water = 1.3/10000 = 0.0001 mg/l

ad hoc MTR bodem/sediment

- s1: nee
- s2: nee
- s6: ja
- s7: ad hoc MTR bodemEP = ad hoc MTR water * Kp
Sabljjic: niet hydrofoob, $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 \log K_{ow} = 1.35 \rightarrow K_{oc} = 22.3 \rightarrow K_p = 1.31 \text{ l/kg}$
ad hoc MTR bodemEp = 0.0001 * 1.31 = 0.0001 mg/kg

ad hoc MTR lucht

- s1: nee
- s2: nee
- s4: ja
- s6: ad hoc MTR luchtEP = ad hoc MTR water * Kp
 $K_p = (1.97/2477.6) * 1000 = 0.8 \text{ m}^3/\text{m}^3 \rightarrow$
ad hoc MTR luchtEP = 0.0001 * 0.8 = 0.0001 g/m³

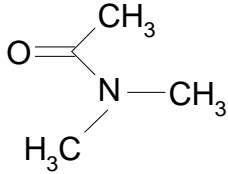
Output Humanex-resultaten

| 2-butanal | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.1 | 0.1 | 4.36E-03 | 0.1 | 0.1 |
| MPC human | 7.13E-01 | 7.97E-02 | 3.11E-02 | 1.34E-01 | 2.27E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.40E-01 | 1.25E+00 | 1.40E-01 | 7.49E-01 | 4.41E-02 |
| Critical MPC | 7.13E-01 | 7.97E-02 | 4.36E-03 | 1.34E-01 | 2.27E+00 |
| % importance of total exposure | 54.186 | 0.626 | 45.186 | 0.002 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 50.915 | | | | |

Rapportageformulier

73. N,N'-dimethylacetamide (127-19-5)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | N,N'-dimethylacetamide |
| CAS-nummer | 127-19-5 |
| Stofgroep | neutraal |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₄ H ₉ N O |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|-------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 87,12 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -20 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 165 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 267 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1000000 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | -0,77 (exp) | 2 |
| LogKoc | 0,62 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 1,50E-08 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | 10,8 (exp) bij 25 °C | 2 |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 3,162 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|----------------------|------------|
| experimentele gegevens | NOAEL=100 mg/kg bw/d | 10 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Lepomis macrochirus</i> | 24 | LC50 | 5 | | 11 |
| <i>Oryzias latipes</i> | 48 | LC50 | 1000 | | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Mysidopsis bahia</i> | 96 | NOEC | 320 | | 11 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 12234 | | 4 |
| QSAR Green algae | 96 | NOEC | 247 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1: nee; s2: nee

s3: ja

s4: nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5: nee; AF3 = 10

s6: ja

s7: ja; AF4 = 1

s8: ja; NOAEL = 100 mg/kg bw/d; AF5 = 1

s10: Overall AF = 10x10x10x1x1 = 1000

s11: ja

s12: MTIL = NOAEL/overall AF = 100:1000 = 0.1 mg/kg bw/d

s13: nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.1 mg/kg bw/d

s14: nee

s17: nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.1 mg/kg bw/d

ad hoc MTR water/grondwater

s1: nee

s2: ja

s3: nee

s4: NOEC aanwezig voor 1 groep basisset → AF = 1000 →

ad hoc MTRwater = 320 : 1000 = 0.32 mg/l

ad hoc MTR bodem/sediment

s1: nee

s2: nee

s6: ja

s7: ad hoc MTR bodemEP = ad hoc MTR water * Kp

Sabljić: formule 2 → $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 * \log K_{ow} = 0.62$ → $K_{oc} = 4.16$

$K_p = 0.24 \text{ l/kg}$ → ad hoc MTRbodemEP = 0.32 * 0.24 = 0.08 mg/kg

ad hoc MTR lucht

1: nee

2: nee

4: ja

6: ad hoc MTR luchtEP = ad hoc MTR water * Kp

$K_p = (1.5 \text{ E-}08 / 2477.6) * 1000 = 6 \text{ E-}09 \text{ m}^3/\text{m}^3$ →

ad hoc MTR luchtEP = 0.32 * 6 E-09 = 1.9 E-09 g/m³

Output Humanex-resultaten

| N,N-dimethylacetamide | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 1.00E+02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.20E+02 | 3.20E+02 | 2.91E-07 | 8.00E+01 | 8.00E+01 |
| MPC human | 3.26E+03 | 9.43E+02 | 2.96E-06 | 9.09E+02 | 7.94E+03 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 9.82E-02 | 3.39E-01 | 9.82E-02 | 8.80E-02 | 1.01E-02 |
| Critical MPC | 3.20E+02 | 3.20E+02 | 2.91E-07 | 8.00E+01 | 8.00E+01 |
| % importance of total exposure | 93.965 | 6.033 | 0.000 | 0.002 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 93.144 | | | | |

Rapportageformulier

74. diarseenpentoxide (1303-28-2)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

75. berylliumoxide (1304-56-9)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

76. cadmiumsulfide (1306-23-6)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

77. nikkeloxide (1313-99-1)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

78. dinikkeltrioxide (1314-06-3)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

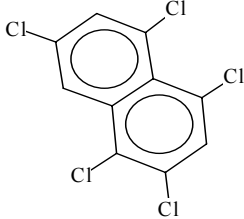
Rapportageformulier

79. vanadiumpentoxide (1314-62-1)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier 80. pentachloornaftaleen (1321-64-8)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Pentachloornaftaleen | - |
| Structuurformule |  | |
| CAS-nummer | 1321-64-8 | - |
| Synoniemen | | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | waarde | Ref. |
|--|-----------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 300,40 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 1,986E-03 (25 ° C, geschat) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 118,6 (geschat) | 5 |
| Kookpunt (°C) | 350,9 (geschat) | 5 |
| Log Kow | 6,76 | 5 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,0425 (25 ° C, geschat) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 14,1 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|-----------------------------|------|
| BCF | 6,94E+04/1,33E+05 (geschat) | 10/5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet goed afbreekbaar | 2 |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 336 | LC50 | 0,029 | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,002 | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,011 | geschat | 4 |
| | 384 | EC50 | 0,005 | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | NOEC | 0,014 | geschat | 4 |
| andere organismen | | | | | |

Bovenstaande tabel minder betrouwbaar door hoge logKow en lage wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhuuman

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10
- s5. nee; AF3 = 10
- s6. nee; AF4 = 10
- s8. nee
- s9. nee; MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. nee
- s17. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

- s1. nee
- s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

- s1. nee
- s2. nee
- s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

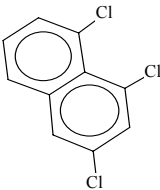
Output Humanex-resultaten

| pentachloornaftaleen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.70E-04 | 3.70E-04 | 3.80E-05 | 8.00E+00 | 8.00E+00 |
| MPC human | 2.80E-04 | 4.21E-03 | 2.88E-05 | 9.15E+01 | 1.24E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.32E+00 | 8.80E-02 | 1.32E+00 | 8.75E-02 | 6.44E-01 |
| Critical MPC | 2.80E-04 | 3.70E-04 | 2.88E-05 | 8.00E+00 | 8.00E+00 |
| % importance of total exposure | 10.139 | 52.127 | 12.540 | 25.195 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 49.618 | | | | |

De gerapporteerde ad-hocnormen komen van de humane Humanex output.

Rapportageformulier 81. trichloornaftaleen (1321-65-9)

1. IDENTITEIT

| | | | |
|------------------|--|------|---|
| Stofnaam | Naftaleen, trichloor- | Ref. | - |
| Structuurformule |  | | |
| CAS-nummer | 1321-65-9 | | - |
| Synoniemen | | | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|---------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 231,51 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 4,19E-02 (25 °C, geschat) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 83,5 (geschat) | 5 |
| Kookpunt (°C) | 310 (geschat) | 5 |
| Log Kow | 5,46 (geschat) | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,065 | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 150 | 18 |
| Relatieve dichtheid | 1,58 | 10 |
| PKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|---|------|
| BCF | 1,33 ^E +04 (geschat) | 5 |
| | 2,7 ^E +04 (experimenteel in guppies) | 10 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet snel afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| | | |
|------------------------|--|--|
| Acute toxiciteit | | |
| Irritatie | | |
| Corrosiviteit | | |
| Sensibilisatie | | |
| Experimentele gegevens | | |
| Carcinogeniteit | | |
| Mutageniteit | | |

MAC-waarde volgens Chemiekaarten 2004: 5 mg/m³

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | Opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | 96 | LC50 | 0,096 | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,022 | geschat | 4 |
| Invertebraten | 48 | LC50 | 0,131 | geschat | 4 |

| | | | | | |
|--------------------------|-----|------|--------|---------|---|
| | 384 | EC50 | 0,030 | geschat | 4 |
| Algen | 96 | NOEC | 0,1074 | geschat | 4 |
| Andere organismen | | | | | |

Resultaten in bovenstaande tabel zijn minder betrouwbaar door hoge logKow (voor acute tox vissen en daphnia) en lage wateroplosbaarheid (alle resultaten)

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee → AF1 = 10; AF2 = 10
- s5. nee → AF3 = 10
- s6. nee → AF4 = 10
- s8. nee
- s9. nee → MTIL = 1 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. nee
- s17. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

- s1. nee
- s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

- s1. nee
- s2. nee
- s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| trichloornaftaleen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.20E-03 | 3.20E-03 | 1.26E-03 | 6.3 | 6.3 |
| MPC human | 4.77E-03 | 2.92E-02 | 1.87E-03 | 5.63E+01 | 1.84E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 6.71E-01 | 1.10E-01 | 6.71E-01 | 1.12E-01 | 3.42E-01 |
| Critical MPC | 3.20E-03 | 3.20E-03 | 1.26E-03 | 5.63E+01 | 1.84E+01 |
| % importance of total exposure | 32.720 | 60.582 | 4.697 | 2.000 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 32.720 | | | | |

De gerapporteerde ad-hocnormen komen van de humane Humanex output.

Rapportageformulier

82. diarseentrioxide (1327-53-3)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

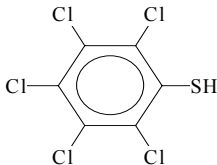
83. chromoxide (1333-82-0)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

84. pentachloorbenzeen-thiol (133-49-3)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Benzeenthiool, pentachloor- | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 133-49-3 | - |
| Synoniemen | | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|--------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 282,4 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 2,49E-02 | 5 |
| Smeltpunt (°C) | 92,83 | 5 |
| Kookpunt (°C) | 315,71 | 5 |
| Log Kow | 5,95 | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,20 (gebaseerd op fragmenten) | 5 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 35,3 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | - |
| pKa | - | - |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|---|-----------------|
| BCF | 7612 (geschat) | ClogPstar |
| (Aerobe bio)degradatie | 0% in 30 dagen (exp) niet snel afbreekbaar (geschat) | 11 ClogPstar |

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--|----------|
| Experimentele gegevens | LD50 oraal rat: 11900 mg/kg bw LD50 oraal muis: 2913 mg/kg bw | 11 11 |
| Carcinogeniteit | geen informatie | - |
| Mutageniteit | negatief | 11 |

MAC-waarde volgens Chemiekaarten 2004: 5 mg/m³

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | Opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | 96 | LC50 | 0,153 | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,006 | geschat | 4 |
| Invertebraten | 48 | LC50 | 0,368 | geschat | 4 |
| | 504 | NOEC | 0,017 | geschat | 4 |
| Algen | 96 | EC50 | 0,045 | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,044 | geschat | 4 |

| Andere organismen | | | | | |
|---|-----|-------------------------|-------|-------------------------------|---|
| <i>Raphanus sativus</i> (radijs) | 120 | EC50 _{kieming} | 215,2 | In waterige oplossing bepaald | 3 |
| <i>Sorghum bicolor drummondii</i> (grassoort) | 144 | EC50 _{kieming} | 135,3 | In waterige oplossing bepaald | 3 |

Resultaten voor de aquatische organismen in bovenstaande tabel zijn minder betrouwbaar door hoge logKow (voor acute tox vissen en daphnia) en lage wateroplosbaarheid (alle resultaten)

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. nee → AF1 = 10; AF2 = 10

s5. nee → AF3 = 10

s6. nee → AF4 = 10

s8. nee

s9. nee → MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d

s14. nee

s17. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| pentachloorbenzeenthiool | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.06 | 0.06 | 1.37E-02 | 3.00E+02 | 3.00E+02 |
| MPC human | 1.17E-03 | 2.00E-02 | 2.68E-04 | 9.59E+01 | 1.14E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 5.13E+01 | 3.00E+00 | 5.13E+01 | 3.13E+00 | 2.64E+01 |
| Critical MPC | 1.17E-03 | 2.00E-02 | 2.68E-04 | 9.59E+01 | 1.14E+01 |
| % importance of total exposure | 20.926 | 64.994 | 5.844 | 8.236 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 53.224 | | | | |

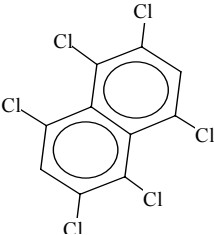
Rapportageformulier

85. loodacetaat (1335-32-6)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier 86. hexachloornaftaleen (1335-87-10)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Naftaleen, hexachloor | - |
| Structuurformule |  | |
| CAS-nummer | 1335-87-1 | - |
| Synoniemen | Hexachloornaftaleen | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | waarde | Ref. |
|--|--------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 334,85 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 4,44E-04 (geschat) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 118,3 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 370 | 2 |
| Log Kow | 7,35 (geschat) | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,0015 (geschat) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 98,2 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | - |
| pKa | - | - |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|-----------------------|------|
| BCF | 2,40E+05 (geschat) | 2 |
| | 8,92E+04 (geschat) | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| experimentele gegevens | LOAEL (84 dagen) rat: 0,002% | 10 |
| carcinogeniteit | Geen informatie gevonden | - |
| mutageniteit | Geen informatie gevonden | - |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | Opmerking | Ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | | LC50 | 0,002 | | 4 |
| | | NOEC | 0,010 | | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | | LC50 | 0,004 | | 4 |
| | | NOEC | 0,0019 | | 4 |
| Algen (QSAR) | | EC50 | 0,003 | | 4 |
| | | NOEC | 0,007 | | |
| andere organismen | | | | | |

Bovenstaande tabel minder betrouwbaar door hoge logKow en lage wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10
- s5. nee; AF3 = 10
- s6. ja
- s7. ja → AF4 = 1
- s8. nee
- s9. nee; MTIL = 15 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. nee
- s17. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

- s1. nee
- s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

- s1. nee
- s2. nee
- s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

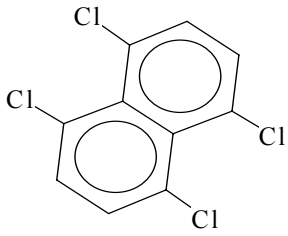
- s1. nee
- s2. nee
- s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| hexachloornaftaleen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|-------------------------|-----------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.019 | 0.019 | 5.88E-03 | 1.26E+03 | 1.26E+03 |
| MPC human | 1.63E-04 | 1.51E-03 | 5.05E-05 | 9.83E+01 | 2.18E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.16E+02 | 1.26E+01 | 1.16E+02 | 1.28E+01 | 5.78E+01 |
| Critical MPC | 1.63E-04 | 1.51E-03 | 5.05E-05 | 9.83E+01 | 2.18E+01 |
| % importance of total exposure | 5.283 | 53.313 | 14.326 | 27.078 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 52.647 | | | | |

Rapportageformulier 87. tetrachloornaftaleen (1335-88-2)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Naftaleen, tetrachloor | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 1335-88-2 | - |
| Synoniemen | | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|----------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 265,96 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 1,33E-04 (geschat) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 114-198 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 331,57 (geschat) | 5 |
| Log Kow | 5,86 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,0056 (25 °C, exp.) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 6,32 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | - |
| pKa | - | - |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--|------|
| BCF | 2,71 ^E +04 (geschat) | 5 |
| | 5100-3,3 ^E +04 (gemeten in vis) | 10 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------------------------|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | Geen informatie gevonden | - |
| mutageniteit | Geen informatie gevonden | - |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,024 | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,006 | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,034 | geschat | 4 |
| | 384 | NOEC | 0,011 | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,027 | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,030 | geschat | 4 |

Bovenstaande tabel minder betrouwbaar door hoge logKow en lage wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10
- s5. nee; AF3 = 10
- s6. nee; AF4 = 10
- s8. nee
- s9. nee; MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. nee
- s17. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

- s1. nee
- s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

- s1. nee
- s2. nee
- s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| tetrachloornaftaleen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.06 | 0.06 | 3.17E-03 | 2.50E+02 | 2.50E+02 |
| MPC human | 1.41E-03 | 2.25E-02 | 7.46E-05 | 9.13E+01 | 1.16E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 4.24E+01 | 2.67E+00 | 4.24E+01 | 2.74E+00 | 2.16E+01 |
| Critical MPC | 1.41E-03 | 2.25E-02 | 7.46E-05 | 9.13E+01 | 1.16E+01 |
| % importance of total exposure | 21.227 | 67.112 | 5.095 | 6.567 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 50.686 | | | | |

Rapportageformulier

88. PCB's (1336-36-3)

Voor PCB's zijn recent normen afgeleid door de Waterdienst (Rijkswaterstaat).

Rapportageformulier

89. tetracarbonylnikkel (13463-39-3)

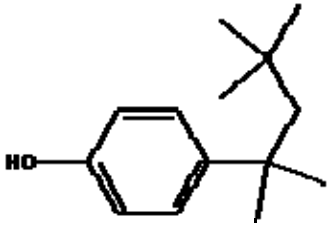
Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

90. para-tert-octylphenol (1,1,3,3-tetramethyl-4-butylphenol) (140-66-9)

Voor gedegen normen voor lucht en bodem voor deze stof zie RIVM rapport 601782003/2007 (26). Voor afleiding ad-hocnorm voor lucht zie hieronder.

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | 1,1,3,3-tetramethyl-4-butylphenol | |
| Structuurformule |  | |
| CAS-nummer | 140-66-9 | |
| Synoniemen | 4-tert-octylphenol, para-tert-octylphenol | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|--------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 206.33 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.063 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 85 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 158 | 2 |
| Log Kow | 5.28 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 5 | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 2.6 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| BCF | - | |
| (Aerobe bio)degradatie | - | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | | | | | |
| <i>Oryzias latipes</i> | 17d | LC50 | 0.45 | | 3 |
| Invertebraten (QSAR) | | | | | |
| <i>Acartia tonsa</i> | 120 | EC50 | 0.010 | | 3 |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0.070 | | 3 |
| <i>Americamysis bahia</i> | 96 | LC50 | 0.048 | | 3 |

| | | | | | |
|-------------------------------|----|------|------|--|---|
| Algen (QSAR) | | | | | |
| <i>Bellerochea polymorpha</i> | 48 | EC50 | 0.09 | | 3 |
| <i>Skeletonema costatum</i> | 72 | EC50 | 0.14 | | 3 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. ja, ad hoc MTR = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. ja; AFdoorvergiftiging = 10

s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen → AF = 1000

ad hoc MTRwater = 0.01/1000*10 = 1E-06 mg/l

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. ja

s7. ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater*Kp

Sabljić: formule 3 (fenolachtig) $\log K_{oc} = 0.90 + 0.63 \log K_{ow} = 4.23 \rightarrow$

$K_{oc} = 16842 \rightarrow K_p = 990 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodernEP} = 1E-06 * 990 = 0.001 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRlucht = ad hoc MTRwater*Kp

EUSES: $K_p = 1.1 E-03 \text{ m}^3/\text{m}^3 \rightarrow \text{ad hoc MTRluchtEP} = 1.1 E-09 \text{ g/m}^3$

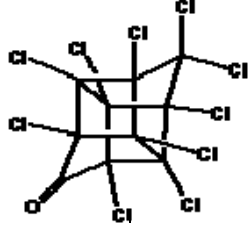
Output Humanex-resultaten

| para-tert-octylfenol | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| | 2.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.001 | 0.001 | 2.11E-05 | 1.00E+00 | 1.00E+00 |
| MPC human | 4.23E-03 | 3.36E-02 | 8.94E-05 | 3.27E+01 | 8.12E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.36E-01 | 2.98E-02 | 2.36E-01 | 3.06E-02 | 1.23E-01 |
| Critical MPC | 4.23E-03 | 3.36E-02 | 2.11E-05 | 1.00E+00 | 1.00E+00 |
| % importance of total exposure | 20.395 | 75.713 | 2.999 | 0.893 | |
| Dominant route of exposure | shower | | | | |
| % of dominant route | 44.255 | | | | |

Rapportageformulier

91. chloordecon (143-50-0)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|---|------|
| Stofnaam | Chloordecon | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 143-50-0 | - |
| Synoniemen | Kepone 1,2,3,4,5,5,6,7,9,10,10-dodecachlorooctahydro-1,3,4-metheno-2-cyclobuta-[c,d]-pentalone | 16 |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | waarde | Ref. |
|--|-----------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 490,68 | - |
| Dampdruk (Pa) | 3,0E-05 | 16 |
| Smeltpunt (°C) | 350 | 16 |
| Kookpunt (°C) | | 16 |
| Log Kow | 5,41 (exp.) | 16 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 7,6 (24 °C, exp.) | 16 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 1,88E-03 (geometrisch gem.) | 16 |
| Relatieve dichtheid | - | - |
| pKa | - | - |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--|------|
| BCF | 8,13E+00 (<i>Callinectes sapidus</i>)- 6,03E+04 (<i>Menidia menidia</i>) (exp) | 16 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet goed afbreekbaar | 16 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--|------|
| Experimentele gegevens | LD50 rat (oraal): 95 mg/kg bw | |
| Carcinogeniteit | 4,4E-05 (lifetime kanker risico per µg/l drinkwater) | 10 |
| Mutageniteit | negatief | 10 |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Anguilla rostrata</i> | 96 | LC50 | 0,018 | zoetwater | 3 |
| <i>Leiostomus xanthurus</i> | 96 | LC50 | 0,0066 | zoutwater | 3 |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|---------------------------|-----|------|--------|------------|---|
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,14 | | 3 |
| | 504 | NOEC | 0,025 | | 3 |
| Algen | | | | | |
| <i>Chlorococcum sp.</i> | 168 | EC50 | 0,350 | zoutwater | 3 |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Chironomus tentans</i> | 48 | LC50 | 0,170 | muggelarve | 3 |
| | 14 | NOEC | >0,018 | | 3 |
| <i>Americamysis bahia</i> | 96 | LC50 | 0,010 | garnaal | 3 |
| <i>Nitzschia sp.</i> | 168 | EC50 | 0,600 | diatoma | 3 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhuuman

s1. nee

s2. $4.4 \text{ E-}5 \mu\text{g/l}$ (lifetime kanker risico drinkwater) \rightarrow 2 l water per dag voor persoon van 70 kg (x2 en:70) \rightarrow
 $1.3 \text{ E-}06 \mu\text{g/kg bw/d}$

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. ja

s3. ja \rightarrow AF doorvergiftiging is 10

s4. LC50's aanwezig voor 3 groepen + NOEC voor kreeft

Laagste LC50 voor vis 0.0066 mg/l , NOEC voor kreeft 0.025 mg/l \rightarrow

ad hoc MTRwater = $\text{LC50}_{\text{min}}/1000 \cdot 10 = 6.6\text{E-}06 \text{ mg/l}$

ad hoc MTR bodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja \rightarrow ad hoc MTR bodemEP = ad hoc MTR water * kp

s7. Sabljic: formule 4 $\rightarrow \log K_{oc} = 1.09 + 0.47 \log K_{ow} = 3.63 \rightarrow K_{oc} = 4292 \rightarrow$

$K_p = 252 \text{ l/kg}$; ad hoc MTRbodemEP = $6.6\text{E-}06 \cdot 252 = 0.002 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * K_p

$K_p = (1.88 \text{ E-}03/2477.6) \cdot 1000 = 0.0008 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = $6.6 \text{ E-}06 \cdot 0.0008 = 5.3 \text{ E-}09 \text{ g/m}^3$

Output Humanex-resultaten

| chloordecon | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------------------|-----------------------|--------------------------|--------------------------|-----------------------|
| | ($\mu\text{g/kg bw/d}$) | ($\mu\text{g/m}^3$) | NO | | |
| | 1.30E-06 | N.A. | Surface water | Groundwater | Air |
| | | | ($\mu\text{g/l}$) | ($\mu\text{g/l}$) | ($\mu\text{g/m}^3$) |
| | | | Soil | Sediment | |
| | | | ($\mu\text{g/kg dwt}$) | ($\mu\text{g/kg dwt}$) | |
| MPC eco | 6.6E-03 | 6.6E-03 | 1.58E-07 | 2.00E+00 | 2.00E+00 |
| MPC human | 8.98E-07 | 7.44E-07 | 2.16E-11 | 1.85E-04 | 4.04E-04 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 7.35E+03 | 8.87E+03 | 2.16E-11 | 1.08E+04 | 4.95E+03 |
| Critical MPC | 8.98E-07 | 7.44E-07 | 2.16E-11 | 1.85E-04 | 4.04E-04 |
| % importance of total exposure | 85.959 | 13.866 | 0.081 | 0.093 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 85.959 | | | | |

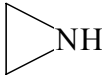
Rapportageformulier

92. chromyldichloride (14977-61-8)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier 93. aziridine (151-56-4)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | aziridine | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 151-56-4 | - |
| Synoniemen | Ethyleenimine; Dimethyleenimine; Azacyclopropan | 10 |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | waarde | Ref. |
|--|-----------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 43,07 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 2,84E+04 (exp, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -77,9 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 56 | 2 |
| Log Kow | -0,742 (geschat) | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1E+06 (exp) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 1,23 (geschat, 25 °C) | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | 8,04 (exp, 25 °C) | 2 |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------|------|
| BCF | 3,162 | 10 |
| (Aerobe bio)degradatie | Goed afbreekbaar | 10 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|---|------|
| experimentele gegevens | LD50 rat: 5 mg/kg bw LD50 konijn: 4,2 mg/kg bw | 11 |
| carcinogeniteit | In zoogdieren (mens onbekend) | 10 |
| mutageniteit | Positief | 10 |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|--|------------|-----------|---------------|---------------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 3,73 | geschat | 4 |
| | | NOEC | 0,36 | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 25,77 | geschat | 4 |
| | | NOEC | 1,83 | geschat | 4 |
| <i>Daphnia magna</i> | 24 | EC50 | 14 | experimenteel | 11 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 2,06 | geschat | 4 |
| | | NOEC | 0,50 | geschat | |
| <i>Scenedesmus quadricauda</i> | 192 | NOEC | 0,74 | Experimenteel | 11 |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Microcystis aeruginosa</i> (protozoa) | 192 | NOEC | 0,11 | experimenteel | 11 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. nee; AF3 = 10

s6. nee; AF4 = 10

s8. nee

s9. nee → MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja

s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee; s2. ja

s3. nee

s4. EC50 aanwezig voor 1 groep → AF = 10000 →

ad hoc MTRwater = 14/10000 = 0.0014 mg/l

NOEC aanwezig voor 1 groep basisset → AF = 1000

ad hoc MTRwater = 0.74/1000 = 0.0007 mg/l

ad hoc MTRbodembodem

s1. nee

s2. nee

s3. nee

s6. ja

s7. ad hoc MTRbodembodemEP = ad hoc MTRwater*Kp

Sabljić: niet hydrofoob → logKoc = 1.02 + 0.52logKow = 0.63 → Koc = 4.31 →

Kp = 0.25 l/kg → ad hoc MTRbodembodemEP = 0.0007*0.25 = 0.0002 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

EUSES: Kp = 5.16E-04 m³/m³ →

ad hoc MTRlucht EP = 0.0007 * 5.16E-04 = 3.6E-07 g/m³

Output Humanex-resultaten

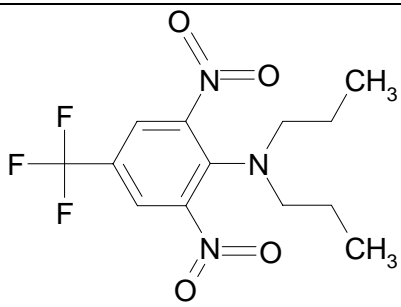
| aziridine | TDI | TCA | | Corrected for TCA: | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|--------------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | NO | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 7.00E-01 | 7.00E-01 | 1.34E-01 | 2.00E-01 | 2.00E-01 |
| MPC human | 2.59E-01 | 1.72E-01 | 4.98E-02 | 1.09E-01 | 5.45E-01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.70E+00 | 4.07E+00 | 2.70E+00 | 1.84E+00 | 3.67E-01 |
| Critical MPC | 2.59E-01 | 1.72E-01 | 4.98E-02 | 1.09E-01 | 2.00E-01 |
| % importance of total exposure | 0.288 | 26.629 | 73.082 | 0.001 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 71.149 | | | | |

Rapportageformulier

94. trifluraline (1582-09-8)

Voor deze stof zijn gedegen normen voor bodem en water afgeleid in RIVM rapport: 601501002/1997 (29).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | trifluraline |
| CAS-nummer | 1582-09-8 |
| Stofgroep | dinitrobenzenen |
| Synoniemen | 2,6-dinitro-N,N-dipropyl-4-(trifluormethyl)-benzeenamine |
| Molecuulformule | C13 H16 F3 N3 O4 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-----------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 335,29 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 49 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 139 bij 560 Pa | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,006 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,184 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 5,34 (exp) | 2 |
| LogKoc | 3,60 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 10,4 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 2581 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | niet afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-------------|------------|
| experimentele gegevens | RfD: 0.0075 | 9 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Lepomis macrochirus</i> | 48 | LC50 | 0,019 | | 7 |
| <i>Cyprinus carpio</i> | 48 | LC50 | 1 | | 7 |

| | | | | | |
|----------------------------|----|------|------|--|---|
| <i>Oncorhynchus mykiss</i> | 96 | LC50 | 0,21 | | 7 |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

RfD = 0.0075 mg/kg bw/d

1:106 = 1.3E-04 mg/kg bw/d

MTRwater = 0.038 µg/l

MTRsediment = 0.019 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja → ad hoc MTRluchtEP = MTRwater*kp

s6. Kp = (10.43/2477.6)*1000 = 4.2 m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 3.8E-05*4.2 = 0.0002 g/m³

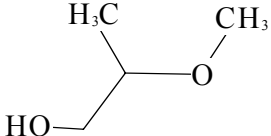
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|----------------------|----------------------|---------------------------|-------------|-----------------|
| trifluraline | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.038 | 0.038 | 2.62E-03 | 1.90E+01 | 1.90E+01 |
| MPC human | 5.05E-02 | 2.79E-01 | 3.49E-03 | 6.42E+01 | 2.09E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 7.52E-01 | 1.36E-01 | 2.62E-03 | 2.96E-01 | 9.10E-01 |
| Critical MPC | 5.05E-02 | 2.79E-01 | 2.62E-03 | 1.90E+01 | 1.90E+01 |
| % importance of total exposure | 42.171 | 51.158 | 6.378 | 0.293 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 42.171 | | | | |

Rapportageformulier

95. 2-methoxypropanol (1589-47-5)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | 2-methoxypropanol | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 1589-47-5 | - |
| Synoniemen | | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | waarde | Ref. |
|--|-----------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 90,12 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 749,3 (geschat) | 5 |
| Smeltpunt (°C) | -55,74 | 5 |
| Kookpunt (°C) | 124,07 | 5 |
| Log K _{ow} | -0,297 | 5 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 7,22E+05 | 5 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 9,35E-02 | 5 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------|------|
| BCF | 3,162 (geschat) | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | |
| Carcinogeniteit | | |
| Mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 9,64E+03 | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 1,21E+04 | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 8,81E+03 | geschat | 4 |
| | 384 | NOEC | 1,65E+02 | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 4,83E+03 | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 1,28E+02 | geschat | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee; MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s5. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| 2-methoxypropanol | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 1.28E+04 | 1.28E+04 | 1.26E+01 | 5.50E+03 | 5.50E+03 |
| MPC human | 6.81E-01 | 3.35E-02 | 6.71E-04 | 1.73E-02 | 1.35E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.88E+04 | 3.82E+05 | 6.71E-04 | 3.17E+05 | 4.09E+03 |
| Critical MPC | 6.81E-01 | 3.35E-02 | 6.71E-04 | 1.73E-02 | 1.35E+00 |
| % importance of total exposure | 98.435 | 0.264 | 1.301 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 97.345 | | | | |

Rapportageformulier

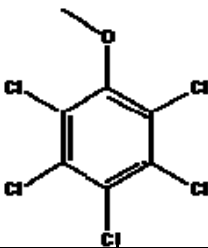
96. nikkelsulfide (16812-54-7)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hoc MTR's afgeleid.

Rapportageformulier

97. pentachlooranisol (1825-21-4)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Pentachlooranisol | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 1825-21-4 | - |
| Synoniemen | | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | waarde | Ref. |
|--|------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 280,37 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,79 (geschat) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 107-109 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 97,85 (geschat) | 5 |
| Log Kow | 5,45 (exp) | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,354 (geschat, 25 °C) | 18 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 633 | 2 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--|------|
| BCF | 3,162 (geschat) | 5 |
| | 1,5E+04 – 2,0E+04 in rainbow trout (exp) | 10 |
| | 9100 in guppies (exp) | 10 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--|------|
| experimentele gegevens | LD50 muis (oraal): 8,50 mg/kg bw | 10 |
| Carcinogeniteit | Enig bewijs voor carcinogeniteit in 2 jaren gavage studie met mannetjes ratten | 10 |
| Mutageniteit | Mouse lymphoma test: positief vanaf 31,25 mg/l | 10 |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | Parameter | waarde (mg/l) | Opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,179 | Geschat | 10 |
| | 720 | NOEC | 0,545* | Geschat | 10 |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 0,650 | exp | 3 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,241* | Geschat | 10 |
| | 384 | EC50 | 0,051 | geschat | 10 |

| | | | | | |
|----------------------|----|------|-------|---------|----|
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,027 | exp | 3 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,181 | Geschat | 10 |
| | 96 | NOEC | 0,119 | geschat | 10 |

*minder betrouwbaar door hoge logKow en lage wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja AF3 = 1

s6. ja

s7. ja; AF4 = 1

s8. nee

s9 nee; MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja

s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee; s2. ja

s3. ja → AFdoorvergiftiging = 10

s4. LC50 voor 2 groepen → AF = 3000

ad hoc MTRwater = 0.027/3000*10 = 0.0009 µg/l = 9 E-7 mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee; s2. nee; s3. nee; s6. ja

s7. ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater*Kp

Sabljić: hydrofoob → logKoc = 0.10 + 0.81 logKow = 4.51 → Koc = 32696 →

Kp = 1923 l/kg → ad hoc MTRbodemEP = 0.0009*1923 = 0.0017 µg/kg

ad hoc MTRLucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRLuchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

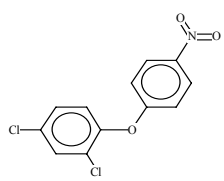
EUSES: Kp = 0.27 m³/m³ → ad hoc MTRLucht EP = 0.0002 mg/m³

Output Humanex-resultaten

| pentachlooranisol | TDI | TCA | | Corrected for TCA: | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|--------------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | NO | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.0009 | 0.0009 | 4.60E-04 | 0.0017 | 0.0017 |
| MPC human | 9.49E-03 | 1.67E-02 | 4.85E-03 | 3.15E+01 | 3.60E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 9.48E-02 | 5.39E-02 | 4.60E-04 | 5.39E-05 | 4.72E-05 |
| Critical MPC | 9.49E-03 | 1.67E-02 | 4.60E-04 | 3.15E+01 | 3.60E+01 |
| % importance of total exposure | 63.859 | 26.848 | 8.191 | 1.102 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 63.859 | | | | |

Rapportageformulier 98. nitrofen (1836-75-5)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | nitrofen | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 1836-75-5 | - |
| Synoniemen | Nitrochlor, Tokkorn, Niclofen, mezotox | 10 |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | waarde | Ref. |
|--|-----------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 284,10 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 1,07E-03 (exp, 40 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 70 | 2 |
| Kookpunt (°C) | | |
| Log Kow | 4,64 (exp.) | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1 (exp, 22 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 10.9 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|-------------------------|------|
| BCF | 746 (geschat) | 5 |
| | 1550 (vis, exp) | 10 |
| | 3190 (muggelarven, exp) | 10 |
| | 2770 (slakken, exp) | 10 |
| | 405 (algen, exp) | 10 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|----------------------------------|---|------|
| experimentele gegevens | LD50 rat (oraal): 116 mg/kg bw | 10 |
| | LD50 rat (oraal, 14d): 2,63 mg/kg bw | 3 |
| | LD50 muis (oraal): 450 mg/kg bw | 10 |
| | NOEL (2 jaar) hond: 200 mg/kg bw | 3 |
| | NOEL (13 weken) rat: 500 mg/kg bw | 3 |
| NOEL (78 weken) rat: 10 mg/kg bw | 3 | |
| carcinogeniteit | Voldoende bewijs in dieren | 10 |
| mutageniteit | Positief in mutageniteitstest met <i>Salmonella typhimurium</i> TA100 | 10 |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|---------------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,695 | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 1,914* | geschat | 4 |
| <i>Oncorhynchus mykiss</i> | 96 | LC50 | 7,0 | experimenteel | 3 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,893 | geschat | 4 |
| | 384 | EC50 | 0,145 | geschat | 4 |

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|---------------|------|
| <i>Ceriodaphnia dubia</i> | 48 | LC50 | 0,217 | experimenteel | 3 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,650 | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,299 | geschat | 4 |

* minder betrouwbaar door lage wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee → AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja → AF3 = 1

s6. ja

s7. ja → AF4 = 1

s8. ja → AF5 = 1

s10. Overall AF = 10x10x1x1x1 = 100

s12. MTIL = NOAEL/100 = 0.05 mg/kg bw/d

s14. ja; s15. ja

s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.05 mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee; s2. ja

s3. ja, doorvergiftiging AF = 5

s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000

ad hoc MTRwater = 0.22/3000*5 = 1.5E-05 mg/l = 0.015 µg/l

ad hoc MTRbodern

s1. nee; s2. nee; s3. nee; s6. ja

s7. ad hoc MTRbodern = ad hoc MTRwater*Kp

Sabljić: hydrofoob → $\log K_{oc} = 0.10 + 0.81 \log K_{ow} = 3.86 \rightarrow K_{oc} = 7218 \rightarrow$

$K_p = 424 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodern} = 1.5E-05 * 424 = 0.0064 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

s1. nee; s2. nee; s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

EUSES: $K_p = 4.68 E-05 \text{ m}^3/\text{m}^3 \rightarrow \text{ad hoc MTRluchtEP} = 1.5E-05 * 4.68 E-05 = 7 E-10 \text{ g/m}^3$

Output Humanex-resultaten

| nitrofen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 5.00E+01 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.015 | 0.015 | 1.24E-03 | 6.40E+00 | 6.40E+00 |
| MPC human | 2.63E+01 | 3.16E+02 | 2.17E+00 | 2.42E+05 | 3.93E+04 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 5.71E-04 | 4.75E-05 | 1.24E-03 | 2.64E-05 | 1.63E-04 |
| Critical MPC | 2.63E+01 | 3.16E+02 | 1.24E-03 | 6.40E+00 | 6.40E+00 |
| % importance of total exposure | 14.477 | 81.282 | 2.780 | 1.461 | |
| Dominant route of exposure | shower | | | | |
| % of dominant route | 32.011 | | | | |

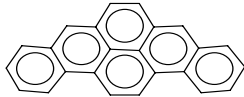
Rapportageformulier

99. chroom(VI)-verbindingen (18450-29-9)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hoc MTR's afgeleid.

Rapportageformulier 100. dibenzo[a,i]pyreen (189-55-9)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Dibenzo[a,i]pyreen (PAK) | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 189-55-9 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | waarde | Ref. |
|--|---------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 302,38 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 2,37E-09 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 281,5 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 275 bij 5,0E-02 mm Hg | 2 |
| Log Kow | 7,289 | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 5,54E-04 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 1,32E-03 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | - |
| pKa | - | - |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | 2,52E+04 (geschat) | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|-------------------------------|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | 0,08 ng/ kg bw/d (omgerekend) | 10 |
| mutageniteit | Positief | 10 |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,002* | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,00071* | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,004* | geschat | 4 |
| | 384 | EC50 | 0,00189* | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,003* | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,007* | geschat | 4 |

getallen zijn minder betrouwbaar door lage wateroplosbaarheid en hoge logKow van de stof

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhuuman

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. nee → AF1 = 10 AF2 = 10

s5. nee → AF3 = 10

s6. nee AF4 = 10

s8 nee.

s9. nee → MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja → 1/ 10 E-06 = 0.08 ng/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

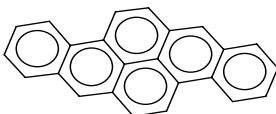
s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| dibenzo[a,i]pyreen | 8.00E-05 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.0014 | 0.0014 | 6.80E-07 | 8.30E+01 | 8.30E+01 |
| MPC human | 1.99E-06 | 6.96E-06 | 9.67E-10 | 4.06E-01 | 2.37E-01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 7.03E+02 | 2.01E+02 | 9.67E-10 | 2.05E+02 | 3.50E+02 |
| Critical MPC | 1.99E-06 | 6.96E-06 | 9.67E-10 | 4.06E-01 | 2.37E-01 |
| % importance of total exposure | 16.529 | 55.531 | 0.004 | 27.937 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 54.388 | | | | |

Rapportageformulier 101. dibenzo[a,h]pyreen (189-64-0)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Dibenzo[a,h]pyreen (PAK) | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 189-64-0 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|---------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 302,38 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 8,54E-10 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 317 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 514 | 5 |
| Log Kow | 7,289 | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 3,5E-05 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 7,34E-03 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | - |
| pKa | - | - |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | 2,52 ^E +04 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|---|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | Ja | 10 |
| mutageniteit | MDMC (in een salmonella test) >100 nmol/ml | 10 |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,002* | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,00071* | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,004* | geschat | 4 |
| | 384 | EC50 | 0,00189* | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,003* | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,007* | geschat | 4 |
| andere organismen | | | | | |

*getallen minder betrouwbaar door lage wateroplosbaarheid en hoge logKow

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. nee → AF1 = 10 AF2 = 10

s5. nee → AF3 = 10

s6. nee AF4 = 10

s8 nee.

s9. nee → MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja

s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRLucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRLucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| dibenzo[a,h]pyreen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.0014 | 0.0014 | 7.61E-07 | 8.00E+01 | 8.00E+01 |
| MPC human | 4.98E-04 | 1.74E-03 | 2.71E-07 | 1.02E+02 | 5.93E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.81E+00 | 8.05E-01 | 2.81E+00 | 7.87E-01 | 1.35E+00 |
| Critical MPC | 4.98E-04 | 1.74E-03 | 2.71E-07 | 8.00E+01 | 5.93E+01 |
| % importance of total exposure | 16.545 | 55.451 | 0.004 | 28.000 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 54.310 | | | | |

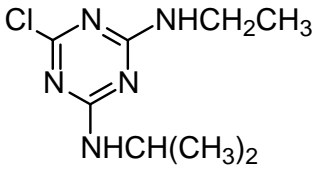
De gerapporteerde ad-hocnormen zijn de humane Humanex-output. De ecologische waarden zijn gebaseerd op de geschatte waarden. Deze zijn niet gebruikt voor de ad hoc normafleiding.

Rapportageformulier

102. atrazine (1912-24-9)

Voor water en bodem zijn gedegen normen afgeleid in RIVM-rapport: 601501002/1997 (29).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | Atrazine |
| CAS-nummer | 1912-24-9 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₈ H ₁₄ ClN ₅ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|---------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 215,69 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 173 | 2 |
| Kookpunt (°C) | | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 3.9E-05 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 34,7 | 2 |
| Log Kow | 2,61 | 2 |
| LogKoc | 2,32 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,0002 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|----------------|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 5 µg/kg/d | 14 |
| Carcinogeniteit | | |
| Mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan
 TDI = 5 µg/kg bw/d
 RfD = 0.035 mg/kg bw/d

MTRwater = 0.0029 mg/l

MTRsediment = 0.026 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6.ad hoc MTRluchtEP = MTRwater*Kp

EUSES: Kp = 1.02 E-07 m³.m³ → ad hoc MTRlucht EP = 3 E-10 g/m³

Output Humanex-resultaten

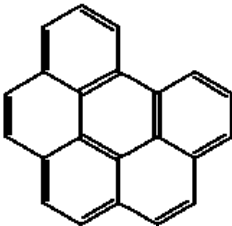
| atrazine | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 5.00E+00 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 2.9 | 2.9 | 6.48E-06 | 2.60E+01 | 2.60E+01 |
| MPC human | 1.88E+02 | 1.89E+01 | 4.19E-04 | 2.34E+02 | 2.95E+03 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.55E-02 | 1.53E-01 | 6.48E-06 | 1.11E-01 | 8.82E-03 |
| Critical MPC | 1.88E+02 | 1.89E+01 | 6.48E-06 | 2.60E+01 | 2.60E+01 |
| % importance of total exposure | 79.384 | 20.352 | 0.253 | 0.011 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 53.627 | | | | |

Rapportageformulier

103. benzo(ghi)peryleen (191-24-2)

Voor water en bodem zijn gedegen normen afgeleid in RIVM-rapport: 679101018/1995 (31)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | benzo(ghi)perylene |
| CAS-nummer | 191-24-2 |
| Stofgroep | PAK's |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C22H12 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|----------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 276.34 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 278 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 500 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | $1.33 \cdot 10^{-8}$ | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.00026 | 2 |
| Log Kow | 6.63 | 16 |
| LogKoc | 5.47 | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.034 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 30 µg/kg bw/d | 14 |
| Carcinogeniteit | | |
| Mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTR humaan

TDI = 30 µg/kg bw/d

MTRwater = 0.5 µg/l

MTRsediment = 8 mg/kg

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTRluchtEP = MTRwater*Kp

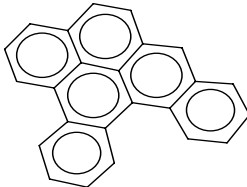
EUSES: Kp = 5.97 E-06 m³/m³ → ad hoc MTRluchtEP = 3 E-09 g/m³

Output Humanex-resultaten

| benzo[g,h,i]peryleen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.5 | 0.5 | 1.81E-04 | 8.00E+03 | 8.00E+03 |
| MPC human | 1.75E+00 | 5.92E+00 | 6.35E-04 | 1.01E+05 | 6.07E+04 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.85E-01 | 8.44E-02 | 1.81E-04 | 7.91E-02 | 1.32E-01 |
| Critical MPC | 1.75E+00 | 5.92E+00 | 1.81E-04 | 8.00E+03 | 8.00E+03 |
| % importance of total exposure | 41.469 | 39.921 | 0.033 | 18.577 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 41.469 | | | | |

Rapportageformulier 104. dibenzo[a,l]pyreen (191-30-0)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Dibenzo[a,l]pyreen (PAK) | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 191-30-0 | - |
| Synoniemen | Dibenzo(def, p) chrysene | 5 |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|-----------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 302,38 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 6,40E-08 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 162,4 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 513,65 (geschat) | 5 |
| Log Kow | 7,71 (experimenteel, 25 °C) | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 3,6E-04 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,054 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | - |
| pKa | - | - |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | 6,875E+03 (geschat) | 5 |
| | 4,26E+05 (geschat) | 10 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | Sterk carcinogeen | 10 |
| mutageniteit | MDMC: 3,7 nmol/ml (salmonella test) | 10 |
| | MDMC: 3,15 nmol/ml (humane MC5-cellen) | 10 |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 9,62E-04* | | 4 |
| | 720 | NOEC | 3,11E-04 | | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 1,53E-03* | | 4 |
| | 384 | EC50 | 9,54E-04* | | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 1,33E-03* | | 4 |
| | 96 | NOEC | 4E-03* | | 4 |

* minder betrouwbaar door hoge logKow en/of lage wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. nee → AF1 = 10 AF2 = 10

s5. nee → AF3 = 10

s6. nee AF4 = 10

s8 nee.

s9. nee → MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja

s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

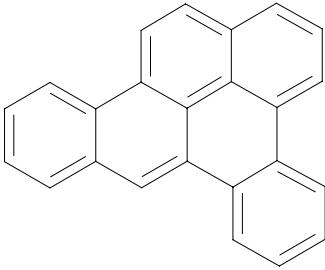
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|----------------------|----------------------|---------------------------|-------------|-----------------|
| dibenzo[a,l]pyreen | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 6.2E-03 | 6.2E-03 | 7.34E-06 | 8.00E+01 | 8.00E+01 |
| MPC human | 2.54E-04 | 9.00E-04 | 3.00E-07 | 1.15E+02 | 6.62E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.44E+01 | 6.89E+00 | 2.44E+01 | 6.93E-01 | 1.21E+00 |
| Critical MPC | 2.54E-04 | 9.00E-04 | 3.00E-07 | 8.00E+01 | 6.62E+01 |
| % importance of total exposure | 6.549 | 61.629 | 0.008 | 31.815 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 61.038 | | | | |

De gerapporteerde ad-hocnormen zijn de humane Humanex-output.

Rapportageformulier 105. dibenzo[a,e]pyreen (192-65-4)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Dibenzo[a,e]pyreen (PAK) | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 192-65-4 | - |
| Synoniemen | Naphtha[1,2,3,4-def]chrysene | 2 |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|-------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 302,38 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 9,37 E-09 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 233,5 | 2 |
| Kookpunt (°C) | | |
| Log Kow | 7,28 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| logKoc | 6 | 17 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 8,00 E-05 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,036 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,002 | | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,0007 | | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,004 | | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,003 | | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,007* | | 4 |

* minder betrouwbaar door lage wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. nee → AF1 = 10 AF2 = 10

s5. nee → AF3 = 10

s6. nee AF4 = 10

s8 nee.

s9. nee → MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja

s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

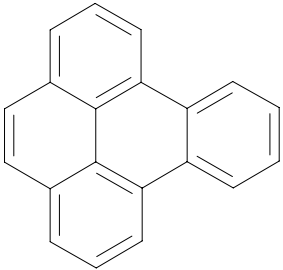
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| dibenzo[a,e]pyreen | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | TCA: | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.0014 | 0.0014 | 9.04E-07 | 8.00E+01 | 8.00E+01 |
| MPC human | 5.00E-04 | 1.76E-03 | 3.23E-07 | 1.02E+02 | 5.89E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.80E+00 | 7.94E-01 | 3.23E-07 | 7.86E-01 | 1.36E+00 |
| Critical MPC | 5.00E-04 | 1.76E-03 | 2.54E-07 | 8.00E+01 | 5.89E+01 |
| % importance of total exposure | 16.651 | 55.321 | 0.007 | 28.020 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 54.165 | | | | |

De gerapporteerde ad-hocnormen zijn de humane Humanex-output.

Rapportageformulier 106. benzo[e]pyreen (192-97-2)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | benzo[e]pyreen (PAK) | - |
| Structuurformule |  | |
| CAS-nummer | 192-97-2 | - |
| Synoniemen | | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | waarde | Ref. |
|--|------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 252.32 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 7.6 E-07 bij 25 °C (geschat) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 177.5 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 310 bij 133.289 Pa | 2 |
| Log Kow | 6.44 (exp) | 2 |
| logKoc | 5.32 | 17 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.0063 bij 25 °C | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.03 bij 25°C | 2 |
| Relatieve dichtheid | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,026 | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,006 | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,036 | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,029 | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,031 | geschat | 4 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee → AF1 = 10 AF2 = 10
- s5. nee → AF3 = 10
- s6. nee AF4 = 10
- s8 nee.
- s9. nee → MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. ja
- s15. ja
- s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

- s1. nee
- s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

- s1. nee
- s2. nee
- s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

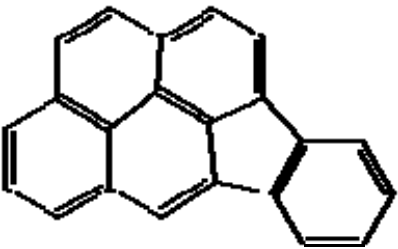
| benzo[e]pyreen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.012 | 0.012 | 3.94E-06 | 1.50E+02 | 1.50E+02 |
| MPC human | 1.47E-03 | 4.82E-03 | 4.82E-07 | 5.78E+01 | 3.58E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 8.17E+00 | 2.49E+00 | 8.17E+00 | 2.59E+00 | 4.19E+00 |
| Critical MPC | 1.47E-03 | 4.82E-03 | 4.82E-07 | 5.78E+01 | 3.58E+01 |
| % importance of total exposure | 49.313 | 36.602 | 0.129 | 13.956 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 49.313 | | | | |

Rapportageformulier

107. indeno(1,2,3-cd)pyreen (193-39-5)

Voor deze stof zijn voor bodem en water gedegen normen afgeleid in RIVM-rapport: 679101018/1995 (31)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | indeno(1,2,3-cd)pyreen (193-39-5) |
| CAS-nummer | 193-39-5 |
| Stofgroep | PAK's |
| Synoniemen | Indenopyrene |
| Molecuulformule | C12H22 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|---------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 276 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 164 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 536 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | $1,7 \cdot 10^{-8}$ | 2 |
| Oplosbaarheid in water (µg/L) | 0,00019 | 2 |
| Log Kow | 6,7 | 2 |
| LogKoc | 5,53 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,035 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|----------------------|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 0,05 µg/kg bw/d | 14 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTRhumaan

CRoraal = 0.005 mg/kg bw/d (1:104 risico)

MTRwater = 0.0004 mg/l

MTRsediment = 6 mg/kg

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTRluchtEP = MTRwater * Kp

Kp = (0.035 / 2477.6) * 1000 = 0.014 m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 0.0004 * 0.014 = 5.7E-06 g/m³

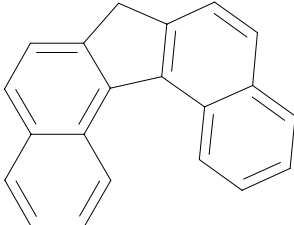
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|----------------------|----------------------|---------------------------|-------------|-----------------|
| indeno[1,2,3-cd]pyreen | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.4 | 0.4 | 1.51E-04 | 6.00E+03 | 6.00E+03 |
| MPC human | 2.68E-03 | 9.17E-03 | 1.01E-06 | 1.78E+02 | 1.07E+02 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.49E+02 | 4.36E+01 | 1.49E+02 | 3.36E+01 | 5.62E+01 |
| Critical MPC | 2.68E-03 | 9.17E-03 | 1.01E-06 | 1.78E+02 | 1.07E+02 |
| % importance of total exposure | 38.568 | 41.777 | 0.003 | 19.652 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 38.738 | | | | |

Rapportageformulier

108. dibenzo[c,g]carbazool (194-59-2)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | dibenzo[c,g]carbazool (PAK) | - |
| Structuurformule |  | 1 |
| CAS-nummer | 194-59-2 | - |
| Synoniemen | | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | waarde | Ref. |
|--|------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 267,33 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 4,5 E-07 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 158 | 2 |
| Kookpunt (°C) | | |
| Log Kow | 5,58 (geschat) | 2 |
| logKoc | 4,62 | 17 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,063 (exp) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,002 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| Mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,085 | | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,020 | | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,117 | | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,09 | | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,071 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee → AF1 = 10 AF2 = 10
- s5. nee → AF3 = 10
- s6. nee AF4 = 10
- s8 nee.
- s9. nee → MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. ja
- s15. ja
- s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

- s1. nee
- s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

- s1. nee
- s2. nee
- s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

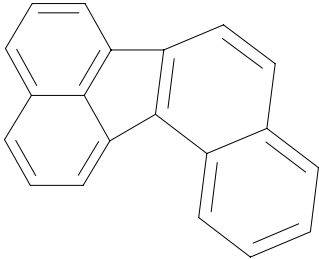
Output Humanex-resultaten

| 7H-dibenzo[c,g]carbazool | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.04 | 0.04 | 3.53E-06 | 1.00E+02 | 1.00E+02 |
| MPC human | 7.15E-03 | 1.72E-02 | 6.32E-07 | 4.16E+01 | 3.47E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 5.59E+00 | 2.32E+00 | 5.59E+00 | 2.40E+00 | 2.88E+00 |
| Critical MPC | 7.15E-03 | 1.72E-02 | 6.32E-07 | 4.16E+01 | 3.47E+01 |
| % importance of total exposure | 62.064 | 36.117 | 0.025 | 1.795 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 62.064 | | | | |

Rapportageformulier

109. benzo[j]fluorantheen (205-82-3)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | benzo[j]fluorantheen (PAK) | - |
| Structuurformule |  | |
| CAS-nummer | 205-82-3 | - |
| Synoniemen | | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 252,32 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 3,5 E-06 bij 25 °C (geschat) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 166 | 2 |
| Kookpunt (°C) | | |
| Log Kow | 6,11 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 5,05 | 17 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,0025 (exp) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,35 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,026 | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,006 | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,036 | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,029 | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,031 | geschat | 4 |

* minder betrouwbaar door lage wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee → AF1 = 10 AF2 = 10
- s5. nee → AF3 = 10
- s6. nee AF4 = 10
- s8 nee.
- s9. nee → MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. ja
- s15. ja
- s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

- s1. nee
- s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

- s1. nee
- s2. nee
- s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| benzo[j]fluorantheen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.012 | 0.012 | 2.19E-05 | 8.00E+01 | 8.00E+01 |
| MPC human | 1.97E-03 | 8.20E-03 | 3.61E-06 | 5.30E+01 | 2.59E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 6.08E+00 | 1.46E+00 | 6.08E+00 | 1.51E+00 | 3.09E+00 |
| Critical MPC | 1.97E-03 | 8.20E-03 | 3.61E-06 | 5.30E+01 | 2.59E+01 |
| % importance of total exposure | 55.614 | 37.098 | 0.977 | 6.310 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 55.614 | | | | |

Rapportageformulier

110. benzo[b]fluorantheen (205-99-2)

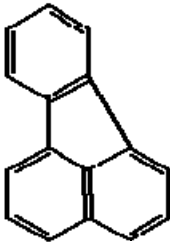
Voor deze stof is een EU-RAR beschikbaar. Gedegen normen voor water en grond zijn afgeleid in RIVM-rapport: 601782003 (26).

Rapportageformulier

111. fluorantheen (206-44-0)

Voor deze stof zijn voor water en grond gedegen normen afgeleid in RIVM-rapport: 679101018/1995 (31).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | Fluorantheen |
| CAS-nummer | 206-44-0 |
| Stofgroep | PAK |
| Synoniemen | Fluoranthene |
| Molecuulformule | C16 H10 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 202.26 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 108 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 384 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.0012 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.26 | 2 |
| Log Kow | 5.16 | 2 |
| LogKoc | 4.28 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.9 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---------------------|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 0.5 µg/kg bw/d | 14 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTR humaan

CR-oraal = 50 µg/kg bw (1:104 risico)

RfD = 0.04 mg/kg bw/d

MTRwater = 0.0005 mg/l

MTRsediment = 3 mg/kg

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTRluchtEP = MTRwater*Kp

Kp = (0.9/2477.6)*1000 = 0.36 m³/m³

ad hoc MTRlucht = 0.0005*0.36 = 0.0002 g/m³

Output Humanex-resultaten

| | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| fluorantheen | 5.00E-01 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.5 | 0.5 | 3.45E-03 | 3.00E+03 | 3.00E+03 |
| MPC human | 1.75E-01 | 8.08E-01 | 1.21E-03 | 8.89E+02 | 3.80E+02 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.86E+00 | 6.19E-01 | 2.86E+00 | 3.38E+00 | 7.90E+00 |
| Critical MPC | 1.75E-01 | 8.08E-01 | 1.21E-03 | 8.89E+02 | 3.80E+02 |
| % importance of total exposure | 26.676 | 69.654 | 2.835 | 0.835 | |
| Dominant route of exposure | shower | | | | |
| % of dominant route | 44.013 | | | | |

Rapportageformulier

112. benzo[k]fluorantheen (207-08-9)

Voor deze stof zijn voor water en grond gedegen normen afgeleid in RIVM-rapport: 679101018/1995 (31).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|----------------------|
| Stofnaam | Benzo[k]fluorantheen |
| CAS-nummer | 207-08-9 |
| Stofgroep | PAK |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C20 H12 |
| Structuurformule | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|---------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 252.32 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 217 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 480 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | $1.3 \cdot 10^{-7}$ | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.0008 | 2 |
| Log Kow | 6.11 | 2 |
| LogKoc | 5.05 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.06 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|----------------------|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 0.05 µg/kg bw/d | 14 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTR humaan

CR-oraal = 5 µg/kg bw (1:10⁴ risico)

MTRwater = 0.0002 mg/l

MTRsediment = 2 mg/kg

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTRluchtEP = MTRwater*Kp

Kp = (0.06/2477.6)*1000 = 0.024 m³/m³

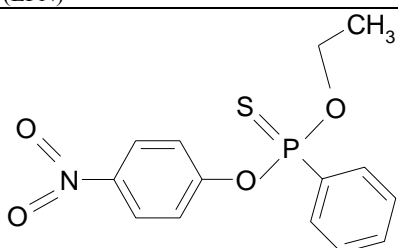
ad hoc MTRlucht = 0.0002*0.024 = 4.8E-06 g/m³

Output Humanex-resultaten

| | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: NO | | |
|---------------------------------------|-------------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| benzo[k]fluorantheen | 5.00E-02 | N.A. | | | |
| MPC eco | 0.2 | 0.2 | 7.65E-05 | 2.00E+03 | 2.00E+03 |
| MPC human | 5.54E-03 | 1.77E-02 | 2.12E-06 | 1.14E+02 | 7.29E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.61E+01 | 1.13E+01 | 2.12E-06 | 1.76E+01 | 2.74E+01 |
| Critical MPC | 5.54E-03 | 1.77E-02 | 2.12E-06 | 1.14E+02 | 7.29E+01 |
| % importance of total exposure | 62.514 | 32.006 | 0.068 | 5.412 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 62.514 | | | | |

Rapportageformulier 113. EPN (2104-64-5)

1. IDENTITEIT

| | | | |
|------------------|--|------|---|
| Stofnaam | ethyl-p-nitrophenylthiobenzeenfosfenaat (EPN) | Ref. | - |
| Structuurformule |  | | |
| CAS-nummer | 2104-64-5 | | - |
| Synoniemen | O-ethyl O-(4-nitrophenyl)phosphonothionaat | | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 323.31 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.0001 bij 25 °C (exp) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 36 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 215 bij 666 Pa | 2 |
| Log Kow | 4.78 (exp) | 2 |
| logKoc | 3.34 | 17 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 3.11 bij 23 °C (exp) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.01 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| BCF | 555 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|---|--------|
| experimentele gegevens | RfD = 1E-5 mg/kg bw/d Anas platyrhynchos 14 d LD50 = 3,08 mg/kg bw | 9 3 |
| Carcinogeniteit | | |
| Mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Lepomis macrochirus</i> | 96 | LC50 | 0,11 | | 20 |
| <i>Oncorhynchus mykiss</i> | 96 | LC50 | 0,21 | | 7 |
| <i>Cyprinus carpio</i> | 48 | LC50 | 0,35 | | 3 |
| <i>Lagodon rhomboides</i> | 96 | LC50 | 0,015 | | 3 |
| <i>Pimephales promelas</i> | 32 d | NOEC | 0,011 | | 3 |

| | | | | | |
|--------------------------------|------|------|---------|--|----|
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Gammarus lacustris</i> | 96 h | LC50 | 0,00056 | | 7 |
| <i>Americamysis bahia</i> | 96 | LC50 | 0,0025 | | 3 |
| <i>Americamysis bahia</i> | 28 d | NOEC | 0,0004 | | 3 |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Pteronarcys californica</i> | 96 | LC50 | 0,0074 | | 20 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. RfD = 1E-05 mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. ja; AFdoorvergiftiging = 5

s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen (vis, inverteb.) → AF = 3000

ad hoc MTRwater = $0.00056/3000 * 5 = 3.7E-08$ mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja

s7. ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * Kp

Sabljić: formule 4 → $\log K_{oc} = 1.09 + 0.47 \log K_{ow} = 3.34$ →

$K_{oc} = 2171$ → $K_p = 128$ l/kg → ad hoc MTRbodem = $3.7E-08 * 128 = 4.7E-06$ mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater Kp

EUSES: $K_p = 4.39 E-06$ m³/m³ →

ad hoc MTRlucht EP = $3.7E-08 * 4.39 E-06 = 1.6 E-13$ g/m³

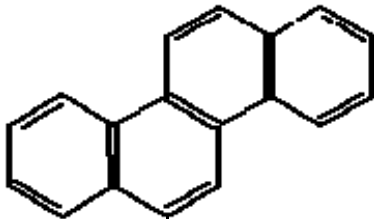
Output Humanex-resultaten

| EPN | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 1.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.7E-05 | 3.7E-05 | 3.03E-09 | 0.0047 | 0.0047 |
| MPC human | 2.29E-02 | 1.12E-02 | 1.88E-06 | 1.42E+00 | 4.82E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.62E-03 | 3.29E-03 | 3.03E-09 | 3.32E-03 | 9.76E-04 |
| Critical MPC | 2.29E-02 | 1.12E-02 | 3.03E-09 | 1.42E+00 | 4.82E+00 |
| % importance of total exposure | 89.942 | 9.564 | 0.448 | 0.047 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 83.029 | | | | |

Rapportageformulier

114. chryseen (218-01-9)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | Chrysene |
| CAS-nummer | 218-01-9 |
| Stofgroep | PAK |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C18H12 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|---------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 228.3 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 258 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 448 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | $8.3 \cdot 10^{-7}$ | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.002 | 2 |
| Log Kow | 5.81 | 2 |
| LogKoc | 4.81 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.53 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---------------------|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 0.5 µg/kg bw/d | 14 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTR humaan

CR-oraal: 50 µg/kg bw

MTRwater = 0.0009 mg/l

MTRsediment = 11 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater* Kp → Kp = (0.53/2477.6)*1000 = 0.21 m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 0.0009 * 0.21 = 0.0002 g/m³

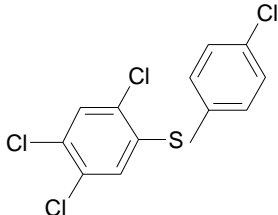
Output Humanex-resultaten

| chryseen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.9 | 0.9 | 2.80E-03 | 1.10E+04 | 1.10E+04 |
| MPC human | 8.20E-02 | 3.78E-01 | 2.55E-04 | 1.40E+03 | 6.14E+02 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.10E+01 | 2.38E+00 | 1.10E+01 | 7.86E+00 | 1.79E+01 |
| Critical MPC | 8.20E-02 | 3.78E-01 | 2.55E-04 | 1.40E+03 | 6.14E+02 |
| % importance of total exposure | 44.631 | 49.766 | 1.946 | 3.657 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 44.631 | | | | |

Rapportageformulier

115. tetrasul (2227-13-6)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | Tetrasul |
| CAS-nummer | 2227-13-6 |
| Stofgroep | Neutral |
| Synoniemen | p-chlorophenyl-2,4,5 trichlorophenyl sulfide Animert |
| Molecuulformule | C12 H6 Cl4 S |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|----------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 324,06 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | | 5 |
| Kookpunt (°C) | | |
| Dampdruk (Pa) | 0,0003 bij 25 °C (geschat) | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,03 bij 20 °C (exp.) | 2 |
| Log Kow | 6,87 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 4,32 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 3,24 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 38800 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | NOAEL = 0,5 mg/kg bw. Colinus virginianus 8 d LC50 = 1200 mg/kg dieet | 7 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Oncorhynchus mykiss</i> | 96 | LC50 | 11 | | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| | | | | | |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTR = 1,5 µg/p/d = 0,02 µg/kg bw/d

DOSE: 2 jaar dieet studie met ratten → NOAEL = 10 mg/kg dieet = 0,5 mg/kg bw/d

s4. nee; AF1 = 10, AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. ja

s7. ja; AF4 = 1

s8. ja; AF5 = 1

s10. Overall AF = 10*10*1*1*1 = 100

s11. ja

s12. MTIL = 0,5/100 = 0,005 mg/kg bw/d

s14. nee

s17. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0,005 mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. AFdoorvergiftiging = 10

s4. LC50 aanwezig voor 1 groep → AF = 10000

ad hoc MTRwater = 11/ 10000*10 = 0,00011 mg/l = 0,11 µg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja

s7. ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater *Kp

Sabljić: formule 4 → logKoc = 1,09 + 0,47logKow = 4,32 →

Koc = 20840 → Kp = 1225 l/kg → ad hoc MTRbodemEP = 0,00011*1225 = 0,13 mg/kg

ad hoc MTRLucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja.

s6. ad hoc MTRLuchtEP = ad hoc MTRwater *Kp

EUSES: Kp = 1,37 E-03 m³/m³

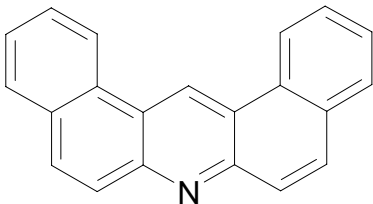
ad hoc MTRLuchtEP = 0,00011*1,37 E-03 = 1,5 E-07 g/m³

Output Humanex-resultaten

| tetrasul | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 5.00E+00 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.11 | 0.11 | 2.92E-03 | 1.30E+02 | 1.30E+02 |
| MPC human | 1.21E-01 | 1.18E+00 | 3.22E-03 | 1.42E+03 | 2.90E+02 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 9.06E-01 | 9.34E-02 | 9.06E-01 | 9.17E-02 | 4.48E-01 |
| Critical MPC | 1.21E-01 | 1.18E+00 | 2.92E-03 | 1.30E+02 | 1.30E+02 |
| % importance of total exposure | 17.624 | 70.550 | 10.263 | 1.562 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 68.029 | | | | |

Rapportageformulier 116. dibenz[a,j]acridine (224-42-0)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Dibenz[a,j]acridine (PAK) | - |
| CAS-nummer | 224-42-0 | - |
| Stofgroep | PAK | 5 |
| Synoniemen | | 2 |
| Molecuulformule | | |
| Structuurformule |  | 1 |

2. PHYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | waarde | Ref. |
|--|------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 279.34 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 2.5 E-07 bij 25 °C (geschat) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 216 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 476 | 5 |
| Log Kow | 5.63 (exp) | 2 |
| LogKoc | 4.66 | 17 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.018 bij 25 °C (geschat) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.0039 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------------------|------|
| BCF | 4638 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|---------|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | IARC 2B | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| | 96 | LC50 | 0.080 | QSAR | 4 |
| | 30 d | NOEC | 0.019 | QSAR | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0.11 | QSAR | 4 |

| | | | | | |
|--------------------------|----|------|-------|------|---|
| Algen | | | | | |
| | 96 | EC50 | 0.085 | QSAR | 4 |
| | 96 | NOEC | 0.069 | QSAR | 4 |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s14. ja

s15. ja

s16. nee

s17. ad hoc MTRhumaan = MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

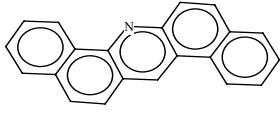
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|----------------------|----------------------|---------------------------|-------------|-----------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | | |
| dibenz[a,j]acridine | 2.00E-02 | N.A. | | | NO |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.04 | 0.04 | 4.28E-06 | 1.10E+02 | 1.10E+02 |
| MPC human | 6.60E-03 | 1.63E-02 | 7.05E-07 | 4.30E+01 | 3.51E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 6.06E+00 | 2.45E+00 | 6.06E+00 | 2.56E+00 | 3.13E+00 |
| Critical MPC | 6.60E-03 | 1.63E-02 | 7.05E-07 | 4.30E+01 | 3.51E+01 |
| % importance of total exposure | 63.112 | 34.812 | 0.054 | 2.022 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 63.112 | | | | |

Rapportageformulier

117. dibenz[a,h]acridine (226-36-8)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Dibenz[a,h]acridine (PAK) | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 226-36-8 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 279,34 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 4,56E-07 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 226 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 476 | 5 |
| Log Kow | 5,73 (exp.) | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,159 (experimenteel, 25 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 8,08 E-04 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|---|------|
| BCF | 5,2E+03 (geschat) | 5 |
| | 3500 (exp., <i>Daphnia pulex</i>) | 10 |
| | 100 (exp., <i>Pimephales promelas</i>) | 3 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 2 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--|------|
| experimentele gegevens | - | - |
| carcinogeniteit | Ja (geen waarde gevonden) | 10 |
| mutageniteit | Onduidelijk (zowel positieve als negatieve resultaten) | 10 |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | Parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,002* | | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,00071 | | 4 |

| | | | | | |
|-----------------------------|-----|------|----------|--|---|
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,004* | | 4 |
| | 384 | EC50 | 0,000189 | | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,003 | | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,007 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

* minder betrouwbaar door hoge logKow

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s14. ja

s15. ja

s16. nee

s17. ad hoc MTRhumaan = MTIL = 1.5 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

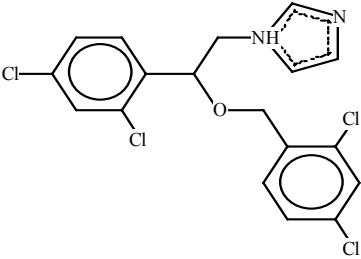
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | | |
| dibenz[a,h]acridine | 2.00E-02 | N.A. | | NO | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.03 | 0.03 | 1.12E-06 | 9.70E+01 | 9.70E+01 |
| MPC human | 5.42E-03 | 1.41E-02 | 2.02E-07 | 4.49E+01 | 3.49E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 5.54E+00 | 2.12E+00 | 5.54E+00 | 2.16E+00 | 2.78E+00 |
| Critical MPC | 5.42E-03 | 1.41E-02 | 2.02E-07 | 4.49E+01 | 3.49E+01 |
| % importance of total exposure | 63.019 | 34.426 | 0.029 | 2.526 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 63.019 | | | | |

Rapportageformulier

118. miconazolnitraat (22832-87-7)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Miconazolnitraat | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 22832-87-7 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|-----------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 416,14 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 2,4E-08 (25 °C, geschat) | 5 |
| Smeltpunt (°C) | 216 (geschat) | 5 |
| Kookpunt (°C) | 506 (geschat) | 5 |
| Log Kow | 5,812 (geschat) | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,026 (25 °C, geschat uit logKow) | 5 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 3,71E-04 (25 °C, geschat) | 5 |
| Relatieve dichtheid | - | - |
| pKa | - | - |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | 5,96E+03 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | - | - |
| carcinogeniteit | - | - |
| mutageniteit | - | - |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | Parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,218 | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,028 | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,225 | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,136 | geschat | 4 |

Getallen zijn minder betrouwbaar door geringe wateroplosbaarheid en hoge logKow

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee→ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee→baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee→baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee→baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| miconazoolnitraat | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| | 2.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.005 | 0.005 | 3.51E-07 | 1.00E+02 | 1.00E+02 |
| MPC human | 4.88E-03 | 1.32E-02 | 3.43E-07 | 4.89E+01 | 3.67E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.02E+00 | 3.80E-01 | 1.02E+00 | 2.05E+00 | 2.73E+00 |
| Critical MPC | 4.88E-03 | 1.32E-02 | 3.43E-07 | 4.89E+01 | 3.67E+01 |
| % importance of total exposure | 66.413 | 30.391 | 0.004 | 3.192 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 66.413 | | | | |

Rapportageformulier

119. trifluorjoodmethaan (2314-97-8)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|---|------|
| Stofnaam | Trifluoriodomethaan | - |
| Structuurformule | $ \begin{array}{c} \text{F} \\ \\ \text{F} - \text{C} - \text{F} \\ \\ \text{I} \end{array} $ | 5 |
| CAS-nummer | 2314-97-8 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|----------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 195,91 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 4,79E+05 (25 °C, geschat) | 5 |
| Smeltpunt (°C) | -98 (geschat) | 5 |
| Kookpunt (°C) | -22,5 | 2 |
| Log Kow | 2,085 | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 137,8 (25 °C, geschat, logKow) | 5 |
| | 867,6 (25 °C, geschat, fragment) | 5 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 6,8E+05 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | - |
| pKa | - | - |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | 8,044 (geschat) | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | - | - |
| carcinogeniteit | - | - |
| mutageniteit | - | - |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | Opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 120,83 | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 15,780 | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 130,23 | geschat | 4 |
| | 384 | EC50 | 6,93 | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 81,82 | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 8,593 | geschat | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

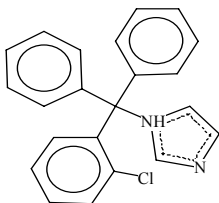
Output Humanex-resultaten

| trifluorjoodmethaan | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 9.60E+01 | 9.60E+01 | 3.30E+03 | 7.20E+02 | 7.20E+02 |
| MPC human | 2.03E-03 | 3.12E-07 | 6.99E-02 | 3.69E-05 | 2.04E-02 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 4.72E+04 | 3.08E+08 | 6.99E-02 | 1.95E+07 | 3.54E+04 |
| Critical MPC | 2.03E-03 | 3.12E-07 | 6.99E-02 | 3.69E-05 | 2.04E-02 |
| % importance of total exposure | 0.194 | 0.000 | 99.806 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 99.803 | | | | |

Rapportageformulier

120. Clotrimazol

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | 1-[(2-chlorophenyl)diphenylmethyl]- 1H-Imidazole | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 23593-75-1 | - |
| Synoniemen | Clotrimazol | 2 |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|--------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 344,85 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 2,84E-07 (geschat, 25 °C) | 5 |
| Smeltpunt (°C) | 148 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 494,52 | 5 |
| Log Kow | 5,254 (geschat) | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,094 (geschat, 25 °C, logKow) | 5 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,001 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | - |
| pKa | - | - |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | 2216 (geschat) | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| experimentele gegevens | LD50 (Rat, oraal): 708 mg/kg | 10 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|--------------------------|------------|-----------|---------------|----------------------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,785* | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,088 | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,512* | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,242* | geschat | 4 |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Saprolegnia sp.</i> | 0,25-1 | LOEC | 10 | Schimmel (aquatisch) | 3 |

* minder betrouwbaar door lage wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10
- s5. nee; AF3 = 10
- s6. ja.
- s7. ja; AF4 = 1
- s8. nee
- s9. nee → MTIL = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. nee
- s17. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

- s1. nee
- s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

- s1. nee
- s2. nee
- s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

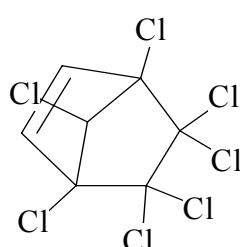
Output Humanex-resultaten

| clotrimazol | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 2.90E-02 | 2.90E-02 | 1.20E-06 | 2.00E+01 | 2.00E+01 |
| MPC human | 1.87E-02 | 1.34E-02 | 7.74E-07 | 2.82E+00 | 6.96E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.55E+00 | 2.16E+00 | 1.55E+00 | 7.10E+00 | 2.87E+00 |
| Critical MPC | 1.87E-02 | 1.34E-02 | 7.74E-07 | 2.82E+00 | 6.96E+00 |
| % importance of total exposure | 85.161 | 14.752 | 0.013 | 0.074 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 85.161 | | | | |

Rapportageformulier

121. heptachloornorborneen (28680-45-7)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Heptachloornorborneen | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 28680-45-7 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 335,27 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,156 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 93,04 (geschat) | 1 |
| Kookpunt (°C) | 280,99 (geschat) | 5 |
| Log Kow | 4,856 (geschat) | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,11 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 475 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| PKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | 1094 (geschat) | 5 |
| | 11200 (experimenteel) | 3 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | - | - |
| carcinogeniteit | - | - |
| mutageniteit | - | - |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | Opmerking | Ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|---------------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,093 | geschat | 4 |
| Pimephales promelas | 96 | LC50 | 0,086 | experimenteel | 3 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,087 | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,419 | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee; ad hoc MTR = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. AFdoorvergiftiging = 5

s4. LC50 aanwezig voor 1 groep → AF = 10000

ad hoc MTRwater = 0.086/10000*5 = 1.7E-06 mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja → ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater.Kp

s7. Sabljic: formule1 (hydrofoob) logKoc = 0.10 = 0.81*logKow = 4.03

Koc = 10798 → Kp = 635 l/kg → ad hoc MTRbodemEP = 1.7E-06*635 = 0.0011 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja → ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

EUSES: Kp = 0.201 m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 1.7E-06*0.201 = 3.4 E-07 g/m³

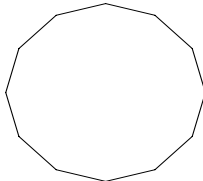
Output Humanex-resultaten

| heptachloornorborneen | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|-------------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | 2.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.0087 | 0.0087 | 4.19E-03 | 1.10E+01 | 1.10E+01 |
| MPC human | 2.58E-02 | 4.03E-02 | 1.24E-02 | 2.52E+01 | 3.11E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.37E-01 | 2.16E-01 | 3.37E-01 | 4.37E-01 | 3.53E-01 |
| Critical MPC | 2.58E-02 | 4.03E-02 | 4.19E-03 | 1.10E+01 | 1.10E+01 |
| % importance of total exposure | 54.746 | 26.103 | 18.712 | 0.440 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 54.746 | | | | |

Rapportageformulier

122. cyclododecaan (294-62-2)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Cyclododecaan | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 294-62-2 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|-----------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 168,33 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 3,93 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 60,4 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 247 | 2 |
| Log Kow | 6,708 (geschat) | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 10 (experimenteel, 20 °C) | 11 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 66,2 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/cm ³) | 0,83 (experimenteel, 65 °C) | 11 |
| PKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|---|------|
| BCF | 2,92 ^E +04 (geschat) | 5 |
| | 1,49 ^E +03 – 7,92 ^E +03 (experimenteel) | 10 |
| (Aerobe bio)degradatie | Gemakkelijk afbreekbaar | 5 |
| | 3% na 28 dagen (experimenteel) | 11 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|---|----------|
| Experimentele gegevens | LD50 (Rat, oraal) > 2500 mg/kg bw NOAEL (rat) 250 mg/kg bw | 11 11 |
| Carcinogeniteit | | |
| Mutageniteit | Negatief (experimenteel) | 11 |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | Opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,005* | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,00129 | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,007* | geschat | 4 |
| | 384 | EC50 | 0,003 | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,006* | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,009* | geschat | 4 |

* minder betrouwbaar door hoge logKow en/of lage wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. ja → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| cyclododecaan | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|-------------------------|-----------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.0026 | 0.0026 | 7.83E-04 | 5.20E+02 | 5.20E+02 |
| MPC human | 3.08E-04 | 4.07E-03 | 9.28E-05 | 8.00E+01 | 1.24E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 8.44E+00 | 6.39E-01 | 8.44E+00 | 6.50E+00 | 4.20E+01 |
| Critical MPC | 3.08E-04 | 4.07E-03 | 9.28E-05 | 8.00E+01 | 1.24E+01 |
| % importance of total exposure | 11.075 | 54.847 | 12.044 | 22.034 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 43.766 | | | | |

Rapportageformulier

123. looddiacetaat (301-04-2)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

124. hydrazine (302-01-2)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|-------------|------|
| Stofnaam | Hydrazine | - |
| Structuurformule | H_2N-NH_2 | 5 |
| CAS-nummer | 302-01-2 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|---------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 32,05 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 1,92E+03 (experimenteel, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 2 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 113,5 | 2 |
| Log Kow | -2,07 (experimenteel, 25 °C) | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1E+06 (experimenteel, 25 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 6,15E-02 (geschat, 25 °C) | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/cm ³) | 1,004 (experimenteel, 25 °C) | 11 |
| PKa | 7,96 (experimenteel) | 2 |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | (geschat) | 5 |
| | 316 (experimenteel, guppies) | 10 |
| (Aerobe bio)degradatie | Gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--|----------|
| experimentele gegevens | LD50 (Rat, oraal): 60 mg/kg LC50 (Rat, inhalatie, 4 uur): 570 mg/L | 10 10 |
| carcinogeniteit | Orale blootstelling: 3,3E-07 mg/kg bw/d Inhalatie blootstelling: 2,0E-07 mg/kg bw/d | 9 9 |
| mutageniteit | Ja (geen concentraties vermeld) | 10 |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | Opmerking | Ref. |
|----------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Ictalurus punctatus</i> | 96 | LC50 | 1,0 | Zoetwater | 3 |
| <i>Lepomis macrochirus</i> | 96 | LC50 | 1,0 | Zoetwater | 3 |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 2,25 | Zoetwater | 3 |
| <i>Poecilia reticulata</i> | 96 | LC50 | 0,61 | Zoetwater | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia pulex</i> | 48 | EC50 | 0,160 | | 3 |
| Algen | | | | | |
| <i>Selenastrum capricornutum</i> | 72 | EC50 | 6,0E-06 µL/L | | 3 |
| | 336 | NOEC | 3,3E-06 µL/L | | 3 |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Asselus sp.</i> | 96 | LC50 | 1,3 | | 3 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

$$1/10E+6 = 3.3E-07 \text{ mg/kg bw/d}$$

$$1/10E+6 = 1E-07 \text{ mg/m}^3$$

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. nee

s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen + NOEC voor 2 groepen →

NOECmin voor alg (0.0005 mg/l) en LC50min voor alg 0.0008 mg/l →

$$\text{ad hoc MTR} = \text{NOECmin}/100 = 5E-06 \text{ mg/l}$$

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 2 (niet hydrofoob) $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 * \log K_{ow} = -0.056 \rightarrow$

$$K_{oc} = 0.88 \rightarrow K_p = 0.052 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodemEP} = 5E-06 * 0.052 = 2.6E-07$$

mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * k_p

$$\text{EUSES: } K_p = 2.6 \text{ E-}05 \text{ m}^3/\text{m}^3$$

$$\text{ad hoc MTRluchtEP} = 5E-06 * 2.6 \text{ E-}05 = 1.3E-10 \text{ g/m}^3$$

Output Humanex-resultaten

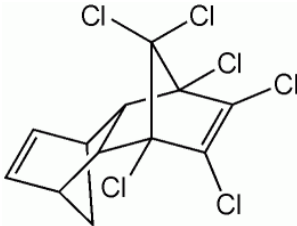
| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|--------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| hydrazine | 3.30E-04 | 1.00E-04 | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.005 | 0.005 | 2.35E-05 | 2.60E-04 | 2.60E-04 |
| MPC human | 1.92E-02 | 6.80E-03 | 9.04E-05 | 4.08E-03 | 3.98E-02 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.60E-01 | 7.35E-01 | 2.35E-05 | 6.38E-02 | 6.54E-03 |
| Critical MPC | 1.92E-02 | 6.80E-03 | 2.35E-05 | 2.60E-04 | 2.60E-04 |
| % importance of total exposure | 84.772 | 3.195 | 12.029 | 0.003 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 83.198 | | | | |

Rapportageformulier

125. aldrin (309-00-2)

Voor deze stof is voor bodem en water gedegen normen afgeleid in RIVM-rapport: 679101012/1994 (28).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | Aldrin |
| CAS-nummer | 309-00-2 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₁₂ H ₈ Cl ₆ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-----------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 364,92 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 104 °C | 2 |
| Kookpunt (°C) | 145 °C | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,0159 at 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,017 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 6,50 | 2 |
| LogKoc | 4,15 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 4,46 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| BCF | TDI: 0.1 µg/kg bw/d TCA: 0.35 µg/m ³ | 14 |
| (Aerobe bio)degradatie | | 14 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTRhumaan

TDI = 0,1 µg/kg bw/d

TCA = 0,35 µg/m³

MTRwater = 0,001 µg/l

MTRsediment = 0,006 mg/kg

ad hoc MTRLucht

ad hoc MTRLuchtEP = MTRwater*Kp

Kp = (4,46/2477,6)*1000 = 1,8 m³/m³

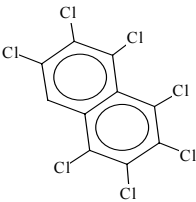
ad hoc MTRLuchtEP = 1E-06*1,8 = 1,8E-06 g/m³

Output Humanex-resultaten

| aldrin | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|----------------------|----------------------|---------------------------|-------------|-----------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.001 | 0.001 | 3.63E-05 | 6.00E+00 | 6.00E+00 |
| MPC human | 3.81E-03 | 3.64E-02 | 1.38E-04 | 2.94E+01 | 6.02E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.62E-01 | 2.75E-02 | 2.62E-01 | 2.04E-01 | 9.96E-01 |
| Critical MPC | 3.81E-03 | 3.64E-02 | 3.63E-05 | 6.00E+00 | 6.00E+00 |
| % importance of total exposure | 26.169 | 56.156 | 16.054 | 1.621 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 53.243 | | | | |

Rapportageformulier 126. heptachloornaftaleen (32241-08-0)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Heptachloornaftaleen | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 32241-08-0 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|--------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 369,29 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 1,22E-04 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 147,53 (geschat) | 5 |
| Kookpunt (°C) | 388,26 (geschat) | 5 |
| Log Kow | 7,707 | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 6,2E-04 (experimenteel, 25 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 71,5 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|----------------------------|------|
| BCF | 2,893E+04 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet makkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | ? | - |
| carcinogeniteit | ? | - |
| mutageniteit | ? | - |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 1,18E-03* | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 3,82E-04* | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 1,88E-03* | geschat | 4 |
| | 384 | EC50 | 1,17E-03* | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 1,63E-03* | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 4E-03* | geschat | 4 |
| andere organismen | | | | | |

* minder betrouwbaar door hoge logKow en/of lage wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee→ ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee→baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee→baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee→baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| heptachloornaftaleen | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|-------------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | 2.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 7.6E-04 | 7.6E-04 | 1.74E-04 | 2.00E+02 | 2.00E+02 |
| MPC human | 1.01E-04 | 8.35E-04 | 2.30E-05 | 1.06E+02 | 2.61E+01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 7.56E+00 | 9.11E-01 | 7.56E+00 | 1.88E+00 | 7.67E+00 |
| Critical MPC | 1.01E-04 | 8.35E-04 | 2.30E-05 | 1.06E+02 | 2.61E+01 |
| % importance of total exposure | 2.615 | 55.907 | 12.165 | 29.313 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 55.580 | | | | |

Rapportageformulier

127. pentabroomdifenylether (32534-81-9)

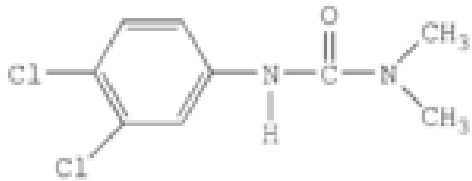
Voor deze stof is een EU-RAR beschikbaar. Voor water en bodem zijn gedegen normen afgeleid in RIVM-rapport: 601782003 (26).

Rapportageformulier

128. diuron (330-54-1)

Voor deze stof zijn MTRwater en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 601501002/1997 (29)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | Diuron |
| CAS-nummer | 330-54-1 |
| Stofgroep | Urea |
| Synoniemen | 3-(3,4-dichlorophenyl)-1,1-dimethylurea |
| Molecuulformule | C ₉ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|---------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 233,10 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 158 °C | 2 |
| Kookpunt (°C) | | |
| Dampdruk (Pa) | 9E-6 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 42 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 2,68 at 25 °C | 2 |
| LogKoc | 2,35 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 5,10E-05 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-----------------------|------------|
| experimentele gegevens | RfD: 0,002 mg/kg bw/d | 9 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

Reguliere milieukwaliteitsnorm beschikbaar

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan
RfD = 0,002 mg/kg bw/d

MTRwater = 430 ng/l (reguliere norm)

MTRsediment = 9 µg/kg (reguliere norm)

ad hoc MTRlucht
ad hoc MTRluchtEP = MTRwater*Kp
EUSES: Kp = 2,15 E-08 m³/m³
ad hoc MTRlucht = 0,00043*2,15 E-08 = 9,2 E-12 g/m³

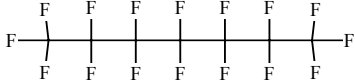
Output Humanex-resultaten

| diuron | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E+00 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.43 | 0.43 | 3.10E-07 | 9.00E+00 | 9.00E+00 |
| MPC human | 4.56E+01 | 4.81E+00 | 3.28E-05 | 6.39E+01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 9.43E-03 | 8.93E-02 | 9.43E-03 | 1.41E-01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 4.56E+01 | 4.81E+00 | 3.10E-07 | 9.00E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 85.462 | 14.487 | 0.044 | 0.007 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 65.126 | | | | |

Rapportageformulier

129. hexadecafluorheptaan (335-57-9)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Hexadecafluorheptaan | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 335-57-9 | - |
| Synoniemen | perfluorheptaan | 2 |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|---------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 388,05 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 1,02E+04 (experimenteel, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -78 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 82,5 | 2 |
| Log Kow | 3,915 (geschat) | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 7,12E-04 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 5,50E+09 (geschat, 25 °C) | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | 206,3 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 4,558* | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,800* | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 5,575* | geschat | 4 |
| | 384 | EC50 | 0,661* | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 3,891* | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 1,177* | geschat | 4 |
| andere organismen | | | | | |

* Waarden liggen boven de geschatte wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

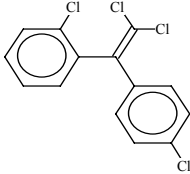
Output Humanex-resultaten

| hexadecafluorheptaan | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|-------------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | 2.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 4.00E+00 | 4.00E+00 | 1.81E+02 | 4.40E+02 | 4.40E+02 |
| MPC human | 1.54E-03 | 1.07E-10 | 6.95E-02 | 9.56E-05 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.60E+03 | 3.75E+10 | 2.60E+03 | 4.60E+06 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.54E-03 | 1.07E-10 | 6.95E-02 | 9.56E-05 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 0.653 | 0.000 | 99.347 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 99.316 | | | | |

Rapportageformulier

130. DDE, 2,4'-isomeer (3424-82-6)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | DDE, 2,4'-isomeer | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 3424-82-6 | - |
| Synoniemen | DDE, o,p-isomeer | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|---------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 318,03 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 8,26E-04 (experimenteel, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 363,29 | 5 |
| Kookpunt (°C) | 111,95 | 5 |
| Log Kow | 6,736 | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,14 (experimenteel, 25 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 1,87 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | 3,07E+04 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | - |
| carcinogeniteit | | - |
| mutageniteit | | - |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,005* | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,000423* | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,014* | geschat | 4 |
| andere organismen | | | | | |

* minder betrouwbaar door hoge logKow

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

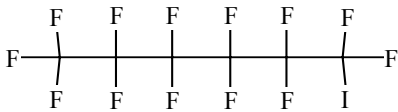
Output Humanex-resultaten

| DDE, 2,4'-isomeer | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| | 2.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 4.20E-03 | 4.20E-03 | 6.32E-05 | 0.045 | 0.045 |
| MPC human | 7.55E-04 | 5.17E-03 | 1.14E-05 | 5.38E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 5.56E+00 | 8.13E-01 | 5.56E+00 | 8.36E-03 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 7.55E-04 | 4.20E-03 | 1.14E-05 | 5.38E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 27.254 | 61.634 | 9.629 | 1.483 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 58.725 | | | | |

Rapportageformulier

131. 5,6,6-tridecafluoro-6-iodo-1,1,1,2,2,3,3,4,4,5- hexaan (355-43-1)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | 5,6,6-tridecafluoro-6-iodo-1,1,1,2,2,3,3,4,4,5-hexaan | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 355-43-1 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|---------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 445,95 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 2,72E+03 (geschat, 25 °C) | 5 |
| Smeltpunt (°C) | -46 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 118 | 2 |
| Log Kow | 4,265 | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,7991 (geschat, logKow, 25 °C) | 5 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 1,50E+06 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | 384 (geschat) | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | - |
| carcinogeniteit | | - |
| mutageniteit | | - |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 2,456* | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,456 | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 3,077* | geschat | 4 |
| | 384 | EC50 | 0,425 | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 2,192* | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,811* | geschat | 4 |
| andere organismen | | | | | |

* hoger dan beide geschatte waarden voor de wateroplosbaarheid (WS door ECOSAR geschat op 9,705 mg/L)

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee→ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee→baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee→baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRLucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee→baseer ad hoc MTRLucht op humane tox

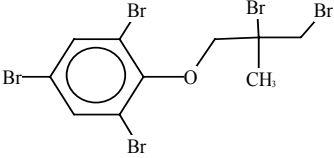
Output Humanex-resultaten

| 5,6,6-tridecafluor-6-jood-1,1,1,2,2,3,3,4,4,5-hexaan | TDI | TCA | | Corrected for TCA: | |
|--|-------------------------|-----------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | NO | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.9 | 0.9 | 3.00E+01 | 1.90E+02 | 1.90E+02 |
| MPC human | 2.07E-03 | 7.82E-09 | 6.89E-02 | 1.80E-04 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 4.35E+02 | 1.15E+08 | 4.35E+02 | 1.06E+06 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 2.07E-03 | 7.82E-09 | 6.89E-02 | 1.80E-04 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 1.471 | 0.000 | 98.529 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 98.461 | | | | |

Rapportageformulier

132. 1,3,5-tribroom-2-(2,3-dibroom-2-methylpropoxy)-benzeen (36065-30-2)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | 1,3,5-tribroom-2-(2,3-dibroom-2-methylpropoxy)-benzeen | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 36065-30-2 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|-----------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 544,70 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 4,40E-05 (geschat, 25 °C) | 5 |
| Smeltpunt (°C) | 159,64 (geschat) | 5 |
| Kookpunt (°C) | 400,71 (geschat) | 5 |
| Log Kow | 6,189 (geschat) | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,035 (geschat, fragmenten) | 5 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,69 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | 1,163E+04 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | - |
| carcinogeniteit | | - |
| mutageniteit | | - |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,047* | geschat | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,012 | geschat | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,067* | geschat | 4 |
| | 384 | EC50 | 0,021 | geschat | 4 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,053* | geschat | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,060* | geschat | 4 |
| andere organismen | | | | | |

* hoger dan beide geschatte waarden voor de wateroplosbaarheid (WS door ECOSAR geschat op 0,1292 mg/l)

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRLucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRLucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| 1,3,5-tribroom-2(2,3-dibroom-2-methylpropoxy)benzeen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|--|-------------------------|-----------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.024 | 0.024 | 1.15E-04 | 1.80E+02 | 1.80E+02 |
| MPC human | 1.68E-03 | 8.59E-03 | 8.01E-06 | 6.43E+01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.43E+01 | 2.79E+00 | 1.43E+01 | 2.80E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.68E-03 | 8.59E-03 | 8.01E-06 | 6.43E+01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 49.818 | 37.534 | 3.592 | 9.055 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 49.818 | | | | |

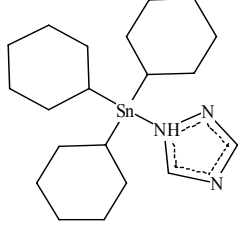
Rapportageformulier

133. loodrhodiumoxide (37240-96-3)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier 134. azocyclotin (41083-11-8)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | azocyclotin | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 41083-11-8 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|---------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 436,21 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 6,00E-11 (experimenteel, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 210 | 2 |
| Kookpunt (°C) | | |
| Log Kow | 5,30 (experimenteel) | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,12 (experimenteel, 20 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 2,18E-07 (geschat, 20 °C) | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | 5,36 (experimenteel) | 2 |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------------------------------|------|
| BCF | 2,40E+03 (geschat) | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar ? | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--|------|
| experimentele gegevens | LC50 (inhalatie, 4 uur) rat: ± 0,02 mg/l | 10 |
| carcinogeniteit | | - |
| mutageniteit | | - |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,225* | | 4 |
| | 720 | NOEC | 0,050 | | 4 |
| <i>Oncorhynchus mykiss</i> | 96 | LC50 | 0,004 | | 23 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,303* | | 4 |
| | 384 | EC50 | 0,068 | | 4 |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | EC50 | 0,04 | | 23 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,230* | | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,161* | | 4 |

* minder betrouwbaar door hoge logKow en/of lage wateroplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. ja → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. ja; AFdoorvergiftiging = 10

s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000

ad hoc MTR = $0.004/3000 * 10 = 1.33E-7$ mg/l

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 4 → $\log K_{oc} = 1.09 + 0.47 * \log K_{ow} = 3.6$ →

$K_{oc} = 3811$ → $K_p = 224$ l/kg → ad hoc MTRbodernEP = $1.33E-07 * 224 = 3E-05$ mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

EUSES: $K_p = 9.2 E-11$ m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = $1.33E-7 * 9.2 E-11 = 1.2E-17$ mg/m³

Output Humanex-resultaten

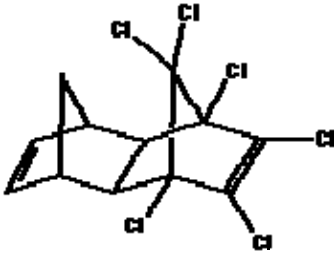
| azocyclotin | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 1.3E-04 | 1.3E-04 | 2.64E-09 | 3.00E-02 | 3.00E-02 |
| MPC human | 1.58E-02 | 1.93E-02 | 3.22E-07 | 8.81E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 8.22E-03 | 6.73E-03 | 8.22E-03 | 3.41E-03 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.58E-02 | 1.93E-02 | 2.64E-09 | 3.00E-02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 79.341 | 20.411 | 0.000 | 0.247 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 79.341 | | | | |

Rapportageformulier

135. isodrin (465-73-6)

Voor deze stof zijn inmiddels MTR water afgeleid in RIVM-rapport 601782003/2007 (26).

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | isodrin | |
| Structuurformule |  | |
| CAS-nummer | 465-73-6 | |
| Synoniemen | | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|--------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 364.9 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.0059 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 240 | 2 |
| Kookpunt (°C) | | |
| Log Kow | 6.75 | 2 |
| Log Koc | 4.26 | 17 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.0142 | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 152 | 18 |
| Relatieve dichtheid | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Cyprinidae</i> | 24 | LC50 | 0.006 | | 3 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. AFdoorvergiftiging = 10

s4. LC50 aanwezig voor 1 groep → AF = 10000
ad hoc MTR = 0.006/10000*10 = 6E-08 mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater*Kp

s7. Sabljic: formule 4 → $\log K_{oc} = 1.09 + 0.47 * \log K_{ow} = 4.26$ →

$K_{oc} = 183302$ → $K_p = 1076$ → ad hoc MTRbodemEP = 6E-08*1076 = 0.0001 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

EUSES: $K_p = 0.064 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = 6E-08*0.064 = 3.8E-09 g/m³

Output Humanex-resultaten

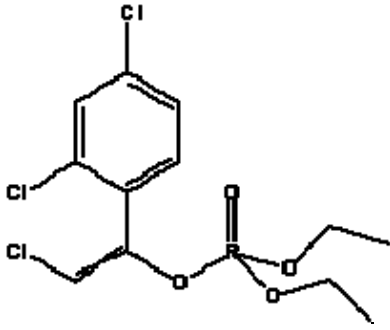
| isodrin | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 6.00E-02 | 6.00E-02 | 2.29E-02 | 1.00E+02 | 1.00E+02 |
| MPC human | 8.15E-04 | 4.07E-03 | 3.12E-04 | 4.29E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 7.36E+01 | 1.48E+01 | 7.36E+01 | 2.33E+01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 8.15E-04 | 4.07E-03 | 3.12E-04 | 4.29E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 29.449 | 48.514 | 20.856 | 1.180 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 47.088 | | | | |

Rapportageformulier

136. chloorfenvinfos (470-90-6)

Voor deze stof zijn MTR water en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 601501002/1997 (29)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | Chloorfenvinfos |
| CAS-nummer | 470-90-6 |
| Stofgroep | Organofosfor |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C12 H14 Cl3 O4 P |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 359.58 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -20 °C | 2 |
| Kookpunt (°C) | 167 – 170 °C | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.001 at 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 124 at 20 °C | 2 |
| Log Kow | 3.81 | 2 |
| LogKoc | 2.88 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.00293 at 25 °C | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-------------------------------------|------------|
| experimentele gegevens | chronic oral MRL: 0.0007 mg/kg bw/d | 12 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

Reguliere milieukwaliteitsnorm beschikbaar

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan
chronic oral MRL = 0,0007 mg/kg bw/d

MTRwater = 2 ng/l (reguliere norm)

MTRsediment = 0,06 µg/kg (reguliere norm)

ad hoc MTRlucht
ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp
EUSES: Kp = 1,22 E-06 m³/m³
ad hoc MTRluchtEP = 2E-06*1,22 E-06 = 2,4E-12 g/m³

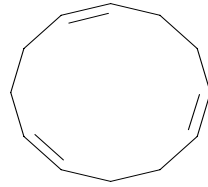
Output Humanex-resultaten

| chloorfenvinfos | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 7.00E-01 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.002 | 0.002 | 2.30E-08 | 0.06 | 0.06 |
| MPC human | 8.48E+00 | 1.71E+00 | 9.74E-05 | 7.58E+01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.36E-04 | 1.17E-03 | 2.36E-04 | 7.91E-04 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 8.48E+00 | 1.71E+00 | 2.30E-08 | 7.58E+01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 85.863 | 13.717 | 0.394 | 0.026 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 65.811 | | | | |

Rapportageformulier

137. 1,5,9-cyclododecatrieen (4904-61-4)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | 1,5,9-cyclododecatrieen | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 4904-61-4 | - |
| Synoniemen | Trieen cyclododecatrieen | 11 |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|----------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 162,28 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 11,1 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -17 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 240 | 2 |
| Log Kow | 5,25 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,39 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 4620 | 18 |
| Relatieve dichtheid | 0,892 g /cm ³ (20 °C) | 11 |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|--|---------|
| BCF | 3,43E+03 (geschat) | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar 0% na 28 dagen (experimenteel) | 5 11 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|---|------|
| experimentele gegevens | LC50 (inhalatie, 6 uur) rat: 7,5-8,9 mg/l | 11 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | Nee (tot 5000 µg/plaat) | 11 |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

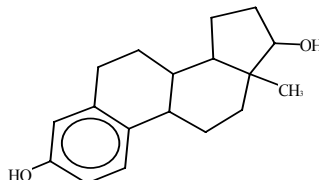
s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| 1,5,9-cyclododecatrien | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| | 2.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.3 | 0.3 | 3.13E-01 | 4.00E+02 | 4.00E+02 |
| MPC human | 1.47E-02 | 3.45E-03 | 1.53E-02 | 4.56E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.04E+01 | 8.70E+01 | 2.04E+01 | 8.77E+01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.47E-02 | 3.45E-03 | 1.53E-02 | 4.56E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 66.739 | 10.839 | 22.302 | 0.120 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 66.739 | | | | |

Rapportageformulier 138. beta-estradiol (50-28-2)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Beta-estradiol | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 50-28-2 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|---------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 272,39 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 1,68E-06 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 178,5 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 395,47 | 5 |
| Log Kow | 4,01 (experimenteel) | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 3,6 (experimenteel) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 1,30E-04 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|-------------------------|------|
| BCF | 244,2 (geschat) | 2 |
| (Aerobe bio)degradatie | Gemakkelijk afbreekbaar | 2 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | ja | 10 |
| mutageniteit | ja | 10 |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | | | | | |
| <i>Oncorhynchus mykiss</i> | 336 | NOEC | 2,3 ng/l | | 3 |
| <i>Oryzias latipes</i> | 600 | NOEC | 29,3 ng/l | | 3 |
| Invertebraten (QSAR) | | | | | |
| Algen (QSAR) | | | | | |
| andere organismen | | | | | |

* minder betrouwbaar door hoge logKow

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee→AF1 = 10; AF2 = 10
- s5. ja; AF3 = 1
- s6. ja
- s7. ja; AF4 = 1
- s8. nee
- s9. nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. ja
- s15. ja
- s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

- s1. nee
- s2. ja
- s3. AFdoorvergiftiging = 2
- s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen→AF = 3000
ad hoc MTRwater = 2E-06/3000*2 = 3.3E-10 mg/l

ad hoc MTRbodem

- s1. nee
- s2. nee
- s6. ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater*Kp
- s7. Sabljic: formule 3 (fenolachtig) $\log K_{oc} = 0.90 + 0.63 * \log K_{ow} = 3.33$ →
Koc = 2147→Kp = 126 l/kg→ad hoc MTRbodemEP = 3.3E-10*126 = 4.2E-08 mg/kg

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. ja
- s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp
EUSES: Kp = 5.36 E-08 m³/m³
ad hoc MTRluchtEP = 3.3E-10*5.36 E-08 = 1.8 E-17 g/m³

Output Humanex-resultaten

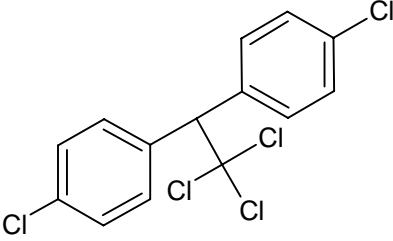
| beta-estradiol | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.3E-07 | 3.3E-07 | 1.03E-12 | 4.2E-05 | 4.2E-05 |
| MPC human | 1.43E-01 | 7.23E-02 | 4.45E-07 | 9.01E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.30E-06 | 4.56E-06 | 2.30E-06 | 4.66E-06 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.43E-01 | 7.23E-02 | 1.03E-12 | 9.01E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 57.548 | 42.301 | 0.040 | 0.111 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 57.548 | | | | |

Rapportageformulier

139. DDT, 4,4'- isomeer (50-29-3)

Voor deze stof zijn MTR water en bodem afgeleid in RIVM-rapport 679101012/1994 (28)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | DDT, 4,4'-isomeer |
| CAS-nummer | 50-29-3 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | P,P'-DDT |
| Molecuulformule | C ₁₄ H ₉ Cl ₅ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-----------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 354,49 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 108,5 °C | 2 |
| Kookpunt (°C) | | |
| Dampdruk (Pa) | 2,1E-5 at 20 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,0055 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 6,91 | 2 |
| LogKoc | 4,34 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,843 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---------------------|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 0,5 µg/kg bw/d | 14 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

Reguliere milieukwaliteitsnorm beschikbaar

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTR humaan
 TDI = 0,5 µg/kg bw/d
 1:10E-6 = 2,9E-06 mg/kg bw/d

MTRwater = 0,9 ng/l (reguliere norm)

MTRsediment = 9 µg/kg (reguliere norm)

ad hoc MTRLucht
 ad hoc MTRLuchtEP = MTRwater*Kp
 Kp = (0,84 / 2477,6)*1000 = 0,34 m³/m³
 ad hoc MTRLuchtEP = 9E-07*0,34 = 3,1E-07 g/m³

Output Humanex-resultaten

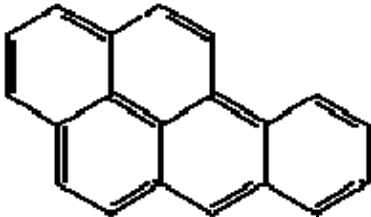
| DDT, 4,4'-isomeer | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 5.00E-01 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.0009 | 0.0009 | 4.32E-06 | 9.00E+00 | 9.00E+00 |
| MPC human | 2.07E-02 | 1.03E-01 | 9.97E-05 | 1.29E+02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 4.34E-02 | 8.74E-03 | 4.34E-02 | 6.98E-02 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 2.07E-02 | 1.03E-01 | 4.32E-06 | 9.00E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 30.065 | 65.894 | 2.619 | 1.422 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 64.004 | | | | |

Rapportageformulier

140. benzo[a]pyreen (50-32-8)

Voor deze stof zijn MTR water en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 679101018/1995 (31).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | benzo[a]pyreen |
| CAS-nummer | 50-32-8 |
| Stofgroep | PAKs |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C20H12 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|---------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 252.32 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 177 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 311 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | $7.3 \cdot 10^{-7}$ | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.0016 | 2 |
| Log Kow | 6.13 | 2 |
| LogKoc | 5.07 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.046 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-----------------------|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 0.005 µg/kg bw/d | 14 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |
| andere organismen | | | | | |

* minder betrouwbaar door hoge logKow

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTRhumaan

CR-oraal = 0.5 µg/kg bw/d (1:1E+4 risico)

1:10E+6 = 1.4E-07 mg/kg bw/d

MTRwater = 0.2 µg/l

MTRsediment = 3 mg/kg

MTRlucht = 0.001 µg/m³

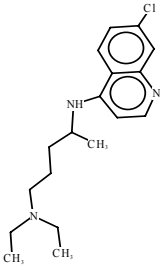
Output Humanex-resultaten

| benzo[a]pyreen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.2 | 0.2 | 6.94E-05 | 3.00E+03 | 3.00E+03 |
| MPC human | 5.44E-04 | 1.71E-03 | 1.89E-07 | 1.15E+01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.68E+02 | 1.17E+02 | 3.68E+02 | 2.61E+02 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 5.44E-04 | 1.71E-03 | 1.89E-07 | 1.15E+01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 62.209 | 31.977 | 0.113 | 5.701 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 62.209 | | | | |

Rapportageformulier

141. chloroquinebisfosfaat (50-63-5)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Chloorquinone bis(fosfaat) | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 50-63-5 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|-------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 319,88 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 2,56E-05 (geschat, 25 °C) | 5 |
| Smeltpunt (°C) | 156,54 (geschat) | 5 |
| Kookpunt (°C) | 411,94 (geschat) | 5 |
| Log Kow | 4,63 (geschat) | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 10,62 (geschat logKow, 25 °C) | 5 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 7,90E-04 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------|------|
| BCF | 733 (geschat) | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|--------|------|
| experimentele gegevens | - | - |
| carcinogeniteit | - | - |
| mutageniteit | - | - |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 2,213 | | 4 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,225 | | 4 |
| <i>Streptocephalus proboscideus</i> | 24 | LC50 | 7,2 | | 3 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 1,009 | | 4 |
| | 96 | NOEC | 0,401 | | 4 |

* minder betrouwbaar door hoge logKow

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

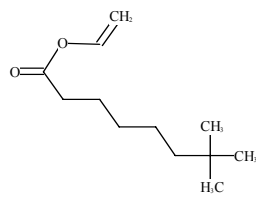
Output Humanex-resultaten

| chloroquinebisfosfaat | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| | 2.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.1 | 0.1 | 1.07E-06 | 1.60E+01 | 1.60E+01 |
| MPC human | 5.72E-02 | 3.38E-02 | 6.11E-07 | 5.25E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.75E+00 | 2.96E+00 | 1.75E+00 | 3.05E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 5.72E-02 | 3.38E-02 | 6.11E-07 | 5.25E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 77.274 | 22.544 | 0.104 | 0.079 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 77.274 | | | | |

Rapportageformulier

142. neodecaanzuur, ethenyl ester (51000-52-3)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Neodecanoic acid, ethenyl ester | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 51000-52-3 | - |
| Synoniemen | Vinyl neodecanoate | 11 |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|-------------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 198,31 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 11,38 (geschat, 25 °C) | 5 |
| Smeltpunt (°C) | 7,24 (geschat) | 5 |
| Kookpunt (°C) | 228,30 (geschat) | 5 |
| Log Kow | 4,729 | 6 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 4,84 (geschat logKow, 25 °C) | 5 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 466 | 18 |
| Relatieve dichtheid | 880 kg/m ³ (20 °C) | 11 |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|---|---------|
| BCF | 873,6 (geschat) 1,52E+04 (geschat) | 5 11 |
| (Aerobe bio)degradatie | Gemakkelijk afbreekbaar 14-17% na 28 dagen | 5 11 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|---|------|
| experimentele gegevens | LC50 (inhalatie 4 uur): > 2,6 mg/l NOAEL (inhalatie 13 weken): 0,25 mg/l | 11 |
| Carcinogeniteit | | |
| Mutageniteit | negatief | 11 |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Salmo gairdneri</i> | 96 | LC50 | 14 | | 11 |
| QSAR | 96 | LC50 | 0,403 | | 5 |
| QSAR | - | NOEC | 0,015 | | 5 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia amgna</i> | 48 | EC50 | 110* | | 11 |
| <i>Acartia tonsa</i> | 48 | EC50 | 0,06-1,3 | marine | 11 |
| QSAR | 48 | LC50 | 0,103 | | 5 |

| | | | | | |
|-------------------------------------|----|------|-------|--------------|----|
| Algen | | | | | |
| <i>Salenastrum capricornutum</i> | 96 | EC50 | 26* | | 11 |
| QSAR | 96 | EC50 | 0,036 | | 5 |
| QSAR | - | NOEC | 0,030 | | 5 |
| andere organismen | | | | | |
| 3.1.1.1.1 <i>Pseudomonas putida</i> | 6 | NOEC | ≥100 | groeiremming | 11 |

* minder betrouwbaar omdat de test containers niet afgesloten waren, test concentra-ties niet zijn gemeten en de gebruikte concentraties flink boven de wateroplosbaarheid lagen

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. AFdoorvergiftiging = 5

s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen → AF = 1000

ad hoc MTRwater = 14/1000*5 = 0.003 mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater*Kp

s7. Sabljic: formule 12 (ester) $\log K_{oc} = 1.05 + 0.49 * \log K_{ow} = 3.37$ →

$K_{oc} = 2329$ → $K_p = 137$ → ad hoc MTRbodemEP = 0.003*137 = 0.41 mg/kg

ad hoc MTRLucht

s1. nee

s2. nee

s4. ad hoc MTRLuchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

s6. ad hoc MTRLuchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

EUSES: $K_p = 0.197 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRLuchtEP = 0.003*0.197 = 0.0006 g/m³

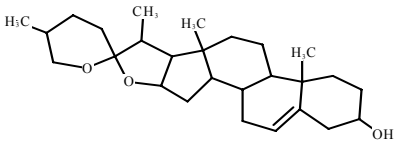
Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| neodecaanzuur, ethenyl ester | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.00E+00 | 3.00E+00 | 2.56E+00 | 3.60E+02 | 3.60E+02 |
| MPC human | 2.67E-02 | 1.60E-02 | 2.27E-02 | 2.16E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.13E+02 | 1.88E+02 | 1.13E+02 | 1.66E+02 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 2.67E-02 | 1.60E-02 | 2.27E-02 | 2.16E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 43.811 | 22.396 | 33.758 | 0.034 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 43.811 | | | | |

Rapportageformulier

143. spirost-5-en-3-ol, (3beta,25R)- (512-04-9)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|--|------|
| Stofnaam | Spirost-5-en-3-ol, (3beta,25R)- | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 512-04-9 | - |
| Synoniemen | - | - |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|-----------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 414,63 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 2,59E-09 (geschat, 25 °C) | 5 |
| Smeltpunt (°C) | 205,5 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 469,45 (geschat) | 5 |
| Log Kow | 5,912 (geschat) | 5 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,02 (experimenteel, 25 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 5,40E-05 | 18 |
| Relatieve dichtheid | - | |
| pKa | - | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| BCF | 7,12E+03 (geschat) | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet gemakkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|----------|------|
| experimentele gegevens | onbekend | - |
| carcinogeniteit | onbekend | - |
| mutageniteit | onbekend | - |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen (QSAR) | 96 | LC50 | 0,065* | geschat | 6 |
| | 720 | NOEC | 0,218* | geschat | 6 |
| Invertebraten (QSAR) | 48 | LC50 | 0,091* | geschat | 6 |
| | 384 | EC50 | 0,026* | geschat | 6 |
| Algen (QSAR) | 96 | EC50 | 0,071* | geschat | 6 |
| | 96 | NOEC | 0,068* | geschat | 6 |
| andere organismen | | | | | |

* minder betrouwbaar door hoge logKow en/of lage water oplosbaarheid

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.002µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

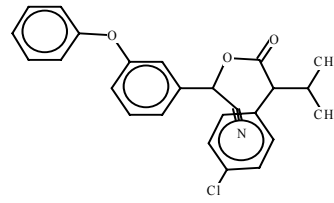
s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| spirost-5-en-3-ol,[3beta,25R]- | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|-------------------------|-----------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 7.00E-03 | 7.00E-03 | 2.67E-06 | 1.60E+03 | 1.60E+03 |
| MPC human | 2.37E-03 | 8.27E-03 | 9.03E-07 | 4.82E+02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.95E+00 | 8.46E-01 | 2.95E+00 | 3.32E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 2.37E-03 | 7.00E-03 | 9.03E-07 | 4.82E+02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 39.239 | 22.541 | 0.002 | 38.218 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 39.239 | | | | |

Rapportageformulier
144. fenvaleraat (51630-58-1)

1. IDENTITEIT

| | | Ref. |
|------------------|---|------|
| Stofnaam | Fenvaleraat | - |
| Structuurformule |  | 5 |
| CAS-nummer | 51-630-58-1 | - |
| Synoniemen | Methyl ester Somicidine Benzeneacetic acid, 4-chloro-alpha-(1-methylethyl)-, cyano(3-phenoxyphenyl)pydrin | 9 |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|--|---------------------------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 419,91 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 2,00E-07 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 45 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 300 (bij 4,93E+03 Pa) | 2 |
| Log Kow | 6,02 (exp.) | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,024 (exp., 22 °C) | 2 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 3,49E-03 (geschat, 25 °C) | 2 |
| Relatieve dichtheid | - | - |
| pKa | - | - |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Ref. |
|------------------------|---|------|
| BCF | 1,19 ^E +04 (geschat) | 5 |
| | 4494 – 41481 (<i>Daphnia galeata</i>) | 3 |
| | 85,7-320,7 (<i>Lepomis macrochirus</i>) | 3 |
| (Aerobe bio)degradatie | Niet makkelijk afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Parameter | Waarde | Ref. |
|------------------------|------------------------------|------|
| experimentele gegevens | Oral RfD: 2,5 mg/kg dag | 9 |
| | ADI (WHO): 0,02 mg/kg | 10 |
| carcinogeniteit | Geen bewijs | 10 |
| mutageniteit | Tot 1 mg/plaat niet mutageen | 10 |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | Duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Cyprinodon variegatus</i> | 96 | LC50 | 500 | zoutwater | 3 |

| | | | | | |
|--------------------------------|-----|------|----------------------|-----------|---|
| <i>Onchorhynchus mykiss</i> | 96 | LC50 | 172 | zoetwater | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Chrissia halyi</i> | 72 | LC50 | 400 | Garnaal | 3 |
| <i>Crangon semptemspinosa</i> | 96 | LC50 | 40 | garnaal | 3 |
| <i>Americamysis bahia</i> | 96 | LC50 | 3.2*10 ⁻⁵ | | 3 |
| <i>Gammarus pseudolimnaeus</i> | 96 | LC50 | 3.2*10 ⁻⁵ | | 3 |
| Algen (QSAR) | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Ana platyrhynchos</i> | 192 | LC50 | 5502 mg/kg | vogel | 3 |
| <i>Apis mellifera</i> | 48 | LD50 | 0,41 µg/org | honingbij | 3 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhuuman

s1. nee

s2. ja; RfD = 0.025 mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. AFdoorvergiftiging = 10

s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000

ad hoc MTRwater = $3.2E-5/3000*10 = 1.07E-09$ mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater*Kp

s7. Sabljic: formule 4 → $\log K_{oc} = 1.09 + 0.47*\log K_{ow} = 3.92$ →

$K_{oc} = 8306$ → $K_p = 488$ → ad hoc MTRbodemEP = $1.07E-09*488 = 5.2E-07$ mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee; s2. nee; s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

EUSES: $K_p = 1.48 E-06 m^3/m^3$

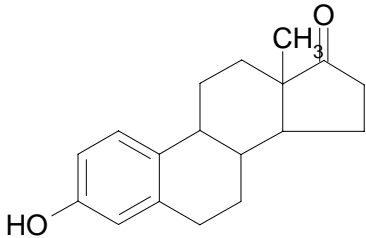
ad hoc MTRluchtEP = $1.07E-09*1.48 E-06 = 1.6E-15$ g/m³

Output Humanex-resultaten

| fenvaaraat | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.50E+01 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 1.1E-06 | 1.1E-06 | 8.65E-11 | 5.2E-04 | 5.2E-04 |
| MPC human | 4.08E+00 | 5.17E+00 | 3.21E-04 | 2.47E+03 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.70E-07 | 2.13E-07 | 2.70E-07 | 2.11E-07 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 4.08E+00 | 5.17E+00 | 8.65E-11 | 2.47E+03 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 86.200 | 13.604 | 0.001 | 0.195 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 86.200 | | | | |

Rapportageformulier 145. estron (53-16-7)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | estron |
| CAS-nummer | 53-16-7 |
| Stofgroep | fenol |
| Synoniemen | 1,3,5-estrrien-3-ol-17 one folliculine |
| Molecuulformule | C18 H22 O |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|-------------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 270,37 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 260,2 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 154 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 1,89 E-05 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 30 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 3,13 (exp) | 2 |
| LogKoc | 2,87 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 1,70E-04 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 51,3 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | niet afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 8,00 | | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 1,19 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Acartia tonsa</i> | 5 d | EC50 | 0,21 | | 3 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 5,02 | | |

| | | | | | |
|---------------------------|------|------|-------|--|---|
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 21 d | NOEC | 0,87 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 13,43 | | 4 |
| QSAR Green algae | 96 | NOEC | 2,58 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s14. ja

s15. ja

s16. nee → ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. AFdoorvergiftiging = 2

s4. LC50 aanwezig voor 1 groep → AF = 10000

ad hoc MTRwater = 0.21 / 100000 = 2.1E-06 mg/l = 0.0021 µg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja → ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 3 (fenolachtige stoffen) $\log K_{oc} = 0.90 + 0.63 \log K_{ow} = 2.87$ l/kg

→ $K_{oc} = 745$ → $K_p = 43.8$ → ad hoc MTRbodemEP = 2.1E-06 * 43.8 = 0.092 µg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

EUSES: $K_p = 7.19E-08$ m³/m³ →

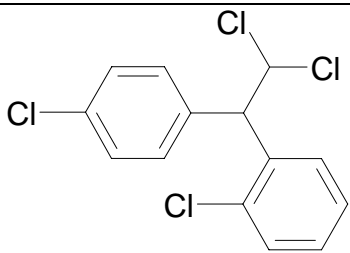
ad hoc MTRluchtEP = 2.1E-06 * 7.19 E-08 = 1.5 E-13 g/m³

Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| estron | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.0021 | 0.0021 | 4.00E-09 | 0.092 | 0.092 |
| MPC human | 3.22E-01 | 7.31E-02 | 6.13E-07 | 3.18E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 6.52E-03 | 2.87E-02 | 6.52E-03 | 2.90E-02 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 3.22E-01 | 7.31E-02 | 4.00E-09 | 3.18E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 76.340 | 23.519 | 0.105 | 0.037 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 45.997 | | | | |

Rapportageformulier 146. DDD, 2,4'-isomeer (53-19-0)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | 2,4'-DDD |
| CAS-nummer | 53-19-0 |
| Stofgroep | neutraal |
| Synoniemen | mitotane |
| Molecuulformule | C14 H10 Cl4 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 320,05 | 5 |
| Smeltpunt (°C) | 77 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 366,75 (geschat) | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 0,0003 (exp) bij 30 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,1 (exp.) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 5,87 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 3,85 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 0,96 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 6645 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | niet afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vissen | 96 h | LC50 | 0,06 | | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 0,013 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,08 | | 4 |
| Algen | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|----|------|-------|--|---|
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 0,060 | | 4 |
| QSAR Green algae | 96 | NOEC | 0,056 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. ja → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

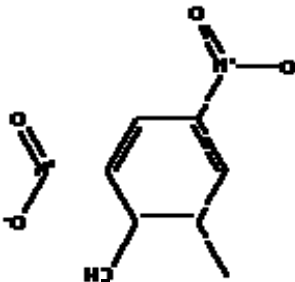
| DDD, 2,4'-isomeer | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 0.026 | 0.026 | 1.73E-04 | 1.00E+01 | 1.00E+01 |
| MPC human | 3.94E-03 | 1.24E-02 | 2.63E-05 | 5.05E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 6.60E+00 | 2.10E+00 | 6.60E+00 | 1.98E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 3.94E-03 | 1.24E-02 | 2.63E-05 | 5.05E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 60.283 | 33.674 | 5.673 | 0.370 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 60.283 | | | | |

Rapportageformulier

147. 2-methyl-4,6-dinitrofenol (534-52-1)

Voor deze stof zijn MTR water en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 601782003/2007.

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | 2-methyl-4,6-dinitrofenol |
| CAS-nummer | 534-52-1 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | dinitro-o-cresol |
| Molecuulformule | C7H6N2O5 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|--------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 198.14 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 87 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 378 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.014 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 198 | 2 |
| Log Kow | 2.12 | 2 |
| LogKoc | 2.18 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 0.14 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. ja

s7. ja

s8. nee

s9. nee → MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

MTRwater = 21 µg/l

MTRsediment = 0.28 mg/kg

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTRluchtEP = MTRwater * Kp

Kp = (0.14/2477.6) * 1000 = 0.006 m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 0.021 * 0.006 = 0.0012 g/m³

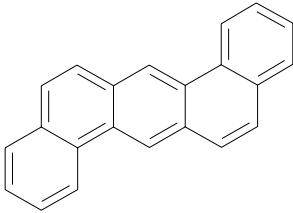
Output Humanex-resultaten

| 2-methyl-4,6-dinitrofenol | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 2.10E+01 | 2.10E+01 | 1.84E-02 | 2.80E+02 | 2.80E+02 |
| MPC human | 1.14E+00 | 8.94E-02 | 9.94E-04 | 8.24E-01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.85E+01 | 2.35E+02 | 1.85E+01 | 3.40E+02 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.14E+00 | 8.94E-02 | 9.94E-04 | 8.24E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 96.663 | 1.037 | 2.291 | 0.009 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 81.124 | | | | |

Rapportageformulier

148. dibenz[a,h]anthraceen (53-70-3)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | dibenz[a,h]anthraceen |
| CAS-nummer | 53-70-3 |
| Stofgroep | neutral |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C22 H14 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|-------------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 278,36 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 269,5 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 524 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 1,33 E-08 (geschat) bij 20 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,00249 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 6,75 (exp) | 2 |
| LogKoc | 5,57 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 0,0015 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 21670 | 5 |
| | 50119 (exp) | 3 |
| (Aerobe bio)degradatie | niet afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|----------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | IARC: 2A | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 0,007 | | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 0,002 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 24 | EC50 | 0,36 | | 3 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,011 | | 4 |
| Algen | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|----|------|-------|--|---|
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 0,009 | | 4 |
| QSAR Green algae | 96 | NOEC | 0,013 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s14. ja

s15. ja

s16. nee; ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. AFdoorvergiftiging = 10

s4. EC50 aanwezig voor 1 groep basisset: AF = 10000
ad hoc MTRwater = 0.36/100000 = 3.6 E-06 mg/l

ad hoc MTRbodern

s1 nee (wel voor totaal PAK- 40 mg/kg)

s2. nee

s6. ja → ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater*Kp

s7. Sabljic: formule 1 (hydrofoob) logKoc = 0.10+0.81logKow = 5.57→

Koc = 369403→Kp = 21721 l/kg→ad hoc MTRbodernEP = 3.6E-05*21721 = 0.78 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6.ad hoc MTRluchtEp = ad hoc MTRwater*Kp

EUSES: Kp = 6.27E-07 m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 3.6 E-06*6.27 E-07 = 2.26E-12 g/m³

Output Humanex-resultaten

| dibenzo[a,h]anthraceen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | Soil | Sediment |
| | Surface water | Groundwater | Air | | |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.60E-06 | 3.60E-06 | 7.92E-10 | 7.80E+02 | 7.80E+02 |
| MPC human | 1.02E-03 | 3.45E-03 | 2.25E-07 | 7.36E+01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.52E-03 | 1.04E-03 | 3.52E-03 | 1.06E+01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 3.60E-06 | 3.60E-06 | 7.92E-10 | 7.36E+01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 36.989 | 42.714 | 0.014 | 20.283 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 39.912 | | | | |

De in 2004 afgeleide ad-hocnormen zijn gebaseerd op humane waarden. De experimentele ecotoxicologische waarden waren toen niet beschikbaar.

Rapportageformulier

149. 3,3'-(ureyleendimethyleen)bis(3,5,5-trimethylcyclohexyl)diisocyaanat (55525-54-7)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | 3,3'-(ureyleendimethyleen)bis(3,5,5-trimethylcyclohexyl)diisocyaanat |
| CAS-nummer | 55525-54-7 |
| Stofgroep | ureum; isocyaanat |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₂₃ H ₃₈ N ₄) ₃ |
| Structuurformule | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|-------------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 418,58 | 5 |
| Smeltpunt (°C) | 214,3 | 5 |
| Kookpunt (°C) | 503,65 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 2,85 E-08 (geschat) bij 25 °C | 5 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,154 (fragment) | 5 |
| Log Kow | 6,3 | 6 |
| LogKoc | 5,2 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 8,1*10 ⁻⁵ | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 24460 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |

| | | | | | |
|---------------------------|------|------|----------|----------|---|
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 0,003 | neutraal | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 0,0009 | neutraal | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,005 | neutraal | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Algae | 4 | EC50 | 2,11 E-7 | ureum | 4 |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

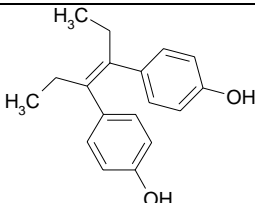
s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| 3,3'-[ureyleendimethyleen]-bis[3,5,5-trimethyl-cyclohexyl]diisocyaanat | 2.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 2.11E-03 | 2.11E-03 | 1.05E-07 | 2.00E+02 | 2.00E+02 |
| MPC human | 1.86E-03 | 5.87E-03 | 9.28E-08 | 5.43E+01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.13E+00 | 3.59E-01 | 1.13E+00 | 3.69E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.86E-03 | 2.11E-03 | 9.28E-08 | 5.43E+01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 58.796 | 31.540 | 0.003 | 9.661 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 58.796 | | | | |

Rapportageformulier 150. diethylstilbestrol (56-53-1)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | diethylstilbestrol |
| CAS-nummer | 56-53-1 |
| Stofgroep | fenol |
| Synoniemen | DES; oestromenin; agostilben; cyren; di-estryl |
| Molecuulformule | C18-H20-O2 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|-------------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 268,36 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 170,5 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 407,18 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 1,88 E-06 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 12 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 5,07 (exp.) | 2 |
| LogKoc | 4,09 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 4,30 E-05 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 1599 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-----------------------------|------------|
| experimentele gegevens | NOAEL=5 mg/kg bw/d (reprod) | 10 |
| carcinogeniteit | IARC: 1 | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| Species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|--------------------------|------------|-----------|---------------|----------------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 0,51 | | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 0,07 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,21 | | 3 |
| <i>Tisbe battagliai</i> | 10 d | NOEC | 0,01 | mort., reprod. | 3 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 0,26 | | 4 |
| QSAR Green algae | 96 | NOEC | 0,15 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. ja

s7. ja; AF4 = 1

s8. ja; AF5 = 1

s10. Overall AF = 10 x 10 x 1 x 1 x 1 = 100

s11. ja

s12. MTIL = NOAEL /overall AF = 5/100 = 0.05 mg/kg bw/d

s13. nee → ad hoc MTRhumaan = MTIL = 0.05 mg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja

s16. nee → ad hoc MTRhumaan = MTIL = 0.05 mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee; s2. ja

s3. AFdoorvergiftiging = 10

s4. LC50 aanwezig voor 1 groep → AF = 10000

ad hoc MTRwater = 0.21/100000 = 2.1E-06 mg/l = 0.0021 µg/l

NOEC aanwezig voor 1 groep → AF = 1000

ad hoc MTRwater = 0.01/10000 = 1E-06 mg/l = 0.001 µg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee; s2. nee

s6. ja → ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 3 (fenolachtige) $\log K_{oc} = 0.90 + 0.63 \log K_{ow} = 4.09$ →

$K_{oc} = 12419$ → $K_p = 730$ l/kg → ad hoc MTRbodemEP = $1E-06 * 730 = 0.0007$ mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee; s2. nee; s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

EUSES: $K_p = 1.77E-08$ m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = $1E-06 * 1.77 E-08 = 1.8 E-14$ g/m³

Output Humanex-resultaten

| DES | TDI | TCA | | Corrected for TCA: | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|--------------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | NO | |
| | 5.00E+01 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 1.00E-03 | 1.00E-03 | 1.39E-09 | 7.00E-01 | 7.00E-01 |
| MPC human | 4.86E+01 | 7.64E+01 | 6.76E-05 | 5.48E+04 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.06E-05 | 1.31E-05 | 2.06E-05 | 1.28E-05 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.00E-03 | 1.00E-03 | 1.39E-09 | 7.00E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 62.162 | 37.370 | 0.003 | 0.465 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 62.162 | | | | |

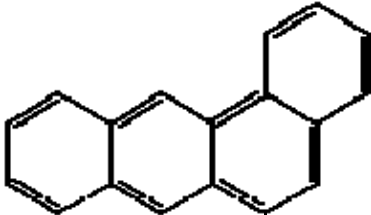
De in 2004 afgeleide ad-hocnormen zijn gebaseerd op humane waarden. De experimentele ecotoxicologische waarden waren toen niet beschikbaar.

Rapportageformulier

151. benz[a]anthraceen (56-55-3)

Voor deze stof is een EU-RAR beschikbaar. MTR water en bodem zijn afgeleid in RIVM-rapport: 679101018/1995 (31).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | Benzo[a]anthraceen |
| CAS-nummer | 56-55-3 |
| Stofgroep | PAK |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C18H12 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 228 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 84 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 438 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.0003 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.0094 | 2 |
| Log Kow | 5.76 | 2 |
| LogKoc | 4.77 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 1.22 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|----------------------|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 0.05 µg/kg bw/d | 14 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

humaan

CR-oraal = 0.005 mg/kg bw/d (1:10E+4 risico)

MTRwater = 0.03 µg/l

MTRsediment = 0.4 mg/kg

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTRluchtEp = ad hoc MTRwater*Kp

$Kp = (1.22/2477.6) * 1000 = 0.49 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRlucht EP = $3\text{E-}05 * 0.49 = 1.5\text{E-}05 \text{ g}/\text{m}^3$

Output Humanex-resultaten

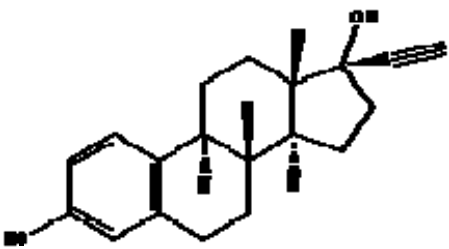
| | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| benzo[a]anthraceen | 5.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.00E-02 | 3.00E-02 | 2.71E-04 | 0.00E+00 | 0.00E+00 |
| MPC human | 6.97E-03 | 4.68E-02 | 6.29E-05 | 1.57E+02 | 5.22E-01 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 4.30E+00 | 6.41E-01 | 4.30E+00 | 0.00E+00 | 0.00E+00 |
| Critical MPC | 6.97E-03 | 3.00E-02 | 6.29E-05 | 0.00E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 34.424 | 57.891 | 3.939 | 3.746 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 35.104 | | | | |

Rapportageformulier

152. ethinylestradiol (57-63-6)

Voor deze stof is een EU-RAR beschikbaar. MTRwater en bodem zijn afgeleid in RIVM-rapport: 601782003/2007 (26).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | ethinylestradiol |
| CAS-nummer | 57-63-6 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₂₀ H ₂₄ O ₂ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|----------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 296 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 183 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 411 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 3.6*10 ⁻⁷ | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 11.3 | 2 |
| Log Kow | 3.67 | 2 |
| LogKoc | 3.21 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 9.4*10 ⁻⁶ | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

2. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

3. TOXICITEIT

3.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

3.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. ja

s7. nee; AF4 = 10

s8. nee

s9. MTIL = 0.15 µg/p/d = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja

s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTR water

s1. nee

s2. nee → baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| ethinylestradiol | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 1.40E-06 | 1.40E-06 | 8.44E-13 | 1.30E-04 | 1.30E-04 |
| MPC human | 1.89E-01 | 7.73E-02 | 1.14E-07 | 7.30E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 7.40E-06 | 1.81E-05 | 7.40E-06 | 1.78E-05 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.40E-06 | 1.40E-06 | 8.44E-13 | 1.30E-04 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 74.937 | 24.972 | 0.004 | 0.086 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 39.047 | | | | |

Rapportageformulier 153. vinylbromide (593-60-2)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|----------------------------------|
| Stofnaam | Vinyl bromide |
| CAS-nummer | 593-60-2 |
| Stofgroep | Vinyl allyl halide |
| Synoniemen | broometheen; broom ethyleen |
| Molecuulformule | C2 H3 Br |
| Structuurformule | $\text{Br}-\text{C}=\text{CH}_2$ |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 106,95 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -137,8 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 15,8 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 137288 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 7600 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 1,57 (exp) | 2 |
| LogKoc | 1,37 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 1930 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 3,228 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------------------|------------|
| experimentele gegevens | RfC: 0,003 mg/m ³ | 9 |
| carcinogeniteit | R45; IARC: 2A | 7 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 4,27 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 279 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Grren algaee | 96 | EC50 | 47,04 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. ja; RfC = 0.003 mg/m³

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee; baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

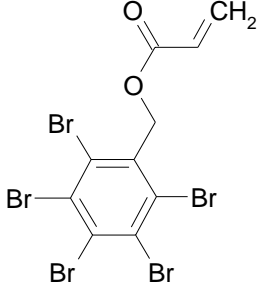
Output Humanex-resultaten

| vinylbromide | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 4.30E+00 | 4.30E+00 | 5.51E+01 | 6.00E+00 | 6.00E+00 |
| MPC human | 8.15E-01 | 1.45E-02 | 1.04E+01 | 2.99E-02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 5.28E+00 | 2.96E+02 | 5.28E+00 | 2.00E+02 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 8.15E-01 | 1.45E-02 | 1.04E+01 | 2.99E-02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 0.511 | 0.001 | 99.488 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 99.483 | | | | |

Rapportageformulier

154. 2-propeenzuur, (pentabroomfenyl)methylester (59447-55-1)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | (pentabroomfenyl)methyl acrylaat |
| CAS-nummer | 59447-55-1 |
| Stofgroep | acrylaat |
| Synoniemen | 2-propaanzuur, (pentabroomfenyl)methyl ester |
| Molecuulformule | C10 H5 Br5 O2 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-------------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 556,67 | 5 |
| Smeltpunt (°C) | 171,36 | 5 |
| Kookpunt (°C) | 411,72 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 1,76 E-05 (geschat) bij 25 °C | 5 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,132 (fragment) | 5 |
| Log Kow | 6,89 (geschat) | 5 |
| LogKoc | 5,68 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa·m ³ /mol) | 0,076 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 39990 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 1,11 | > oplosb. | 4 |
| QSAR vissen | 32 d | NOEC | 0,0014 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|---------------------------|----|------|-------|-----------|---|
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,17 | > oplosb. | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 0,022 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee; ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee; baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

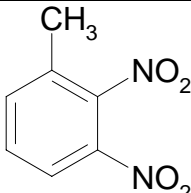
s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---|-------------------------|-----------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| 2-propeenzuur,- (pentabroomfenyl)methylester | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 1.40E-03 | 1.40E-03 | 1.23E-06 | 4.00E+02 | 4.00E+02 |
| MPC human | 8.48E-04 | 2.99E-03 | 7.43E-07 | 8.29E+01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.65E+00 | 4.68E-01 | 1.65E+00 | 4.82E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 8.48E-04 | 1.40E-03 | 7.43E-07 | 8.29E+01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 30.741 | 45.752 | 0.662 | 22.846 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 44.787 | | | | |

Rapportageformulier 155. 2,3-dinitrotolueen (602-01-7)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 2,3-dinitrotolueen |
| CAS-nummer | 602-01-7 |
| Stofgroep | dinitrobenzeen |
| Synoniemen | 1-methyl-2,3-dinitrobenzeen |
| Molecuulformule | C7 H6 N2 O4 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|---------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 182,14 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 60 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 284 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,053 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 220 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 2,18 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 1,87 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,044 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 9,45 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|--|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Lepomis macrochirus | 96 | LC50 | 0,33 | | 3 |
| <i>Cyprinodon variegatus</i> | 48 | LC50 | 2,3 | zoutwater | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 24 | EC50 | 0,66 | | 3 |
| <i>Americamysis bahia</i> | 96 | LC50 | 9,59 | zoutwater | 3 |
| Algen | | | | | |
| <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> | 96 | EC50 | 1,37 | | 3 |
| <i>Skeletonema castatum</i> | 96 | EC50 | 0,4 | | 3 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10
- s5. ja; AF3 = 1
- s6. nee; AF4 = 10
- s8. nee
- s9. nee; MTIL = 1.5 µg/p/d
- s14. ja
- s15. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

- s1. nee
- s2. ja; geen doorvergiftiging
- s3. nee
- s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen → AF = 1000
ad hoc MTRwater = LC50min/1000 = 0.33/1000 = 0.0003 mg/l

ad hoc MTRbodern

- s1. nee
- s2. nee
- s6. ja → ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater*Kp
- s7. Sabljic: formule 13 (nitrobenzenen) $\log K_{oc} = 0.55 + 0.77 \log K_{ow} = 2.23$ →
Koc = 169.3 → Kp = 10 l/kg → ad hoc MTRbodernEP = 0.0003*10 = 0.003 mg/kg

ad hoc MTRlucht

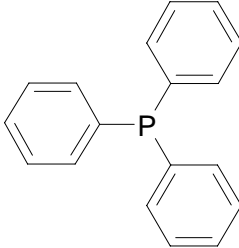
- s1. nee
- s2. nee
- s4. ja
- s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp
EUSES: Kp = 1.85E-05 m³/m³ →
ad hoc MTRluchtEP = 0.0003*1.85 E-05 = 5.6 E-09 g/m³

Output Humanex-resultaten

| 2,3-dinitrotolueen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | Air | Soil | Sediment |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.00E-01 | 3.00E-01 | 7.16E-05 | 3.00E+00 | 3.00E+00 |
| MPC human | 5.99E-01 | 4.28E-02 | 1.43E-04 | 4.36E-01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 5.01E-01 | 7.01E+00 | 5.01E-01 | 6.88E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 3.00E-01 | 4.28E-02 | 7.16E-05 | 4.36E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 98.689 | 0.673 | 0.632 | 0.005 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 85.520 | | | | |

Rapportageformulier 156. trifenylfosfine (603-35-0)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | trifenylfosfine |
| CAS-nummer | 603-35-0 |
| Stofgroep | neutraal |
| Synoniemen | trifenylfosfaan |
| Molecuulformule | C18 H15 P |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|----------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 262,29 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 80 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 210 bij 96 Pa | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,0014 (geschat) bij 25 °C | 5 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,279 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 5,69 (exp) | 2 |
| LogKoc | 4,7 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 1,31 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 4801 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | Goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 0,07 | | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 0,013 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | EC50 | 0,6 | | 11 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,09 | | 4 |
| Algen | | | | | |

| | | | | | |
|-------------------------------|-------|------|------|--|---|
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 0,07 | | 4 |
| QSAR Green algae | 96 | NOEC | 0,06 | | |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Vibrio fisheri</i> (bact.) | 5 min | EC50 | 1,54 | | 7 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. nee; AF3 = 10

s6. nee; AF4 = 10

s8. nee

s9. nee MTIL = 1.5 µg/p/d

s14. nee

s17. nee; ad hoc MTR = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. AFdoorvergiftiging = 10

s4. LC50 aanwezig voor 1 groep → AF = 10000

ad hoc MTR = 0.6/10000*10 = 6E-6 mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja → ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater*Kp

s7. Sabljic: formule 1 (hydrofoob) $\log K_{oc} = 0.10 + 0.81 \log K_{ow} = 4.70$ →

$K_{oc} = 51156$ → $K_p = 3008$ → ad hoc MTRbodemEP = 6E-06*3008 = 0.018 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

EUSES: $K_p = 5.55E-04 \text{ m}^3/\text{m}^3$

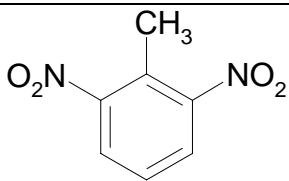
ad hoc MTRluchtEP = 6E-06*5.55 E-04 = 3.3 E-09 g/m³

Output Humanex-resultaten

| trifenyfosfine | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | Air | Soil | Sediment |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 6.00E-03 | 6.00E-03 | 6.19E-05 | 1.80E+01 | 1.80E+01 |
| MPC human | 3.33E-03 | 2.31E-02 | 3.43E-05 | 6.83E+01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.80E+00 | 2.60E-01 | 1.80E+00 | 2.64E-01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 3.33E-03 | 6.00E-03 | 3.43E-05 | 1.80E+01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 35.800 | 55.984 | 4.644 | 3.572 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 38.116 | | | | |

Rapportageformulier 157. 2,6-dinitrotolueen (606-20-2)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | 2,6-dinitrotolueen |
| CAS-nummer | 606-20-2 |
| Stofgroep | dinitrobenzeen |
| Synoniemen | 1-methyl-2,6-dinitrobenzeen |
| Molecuulformule | C7 H6 N2 O4 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|---------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 182,14 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 66 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 300 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,076 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 182 (geschat) bij 20 °C | 2 |
| Log Kow | 2,10 (exp) | 2 |
| LogKoc | 1,8 | 5 |
| Henry-coëfficiënt | 0,076 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 8,26 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | MRL, oral, chron: 0,004 mg/kg bw/d | 12 |
| carcinogeniteit | 1/10 ⁶ : 1,47 E-2 mg/kg bw/d (voor 2,4- en 2,6-mengsel) IARC: 2B | 9 |
| mutageniteit | in vivo UDS positief Ames test: positief | 7 10 |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 18,5 | | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | EC50 | 21,7 | | 3 |
| <i>Daphnia magna</i> | 21 d | NOEC | 0,06 | | 3 |
| Algen | | | | | |

| | | | | | |
|--|--------|------|-------|--|---|
| <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> | 96 | EC50 | 16,45 | | 3 |
| <i>Scenedesmus quadricauda</i> | 72 | EC50 | 11 | | 3 |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Tetrahymena pyriformis</i> (protoz) | 24 | EC50 | 100 | | 3 |
| <i>Vibrio fischeri</i> (bact.) | 15 min | EC50 | 2,9 | | 7 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. ja; $1/1E+6 = 1.47E-06$ mg/kg bw/d (Iris, mengsel 2,4- en 2,6)

MRL oral, interm. 0.004 mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee; s2. ja; s3. nee

s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen + 1 NOEC voor kreeft

NOECmin voor kreeft is 0.06 mg/l; LC50min voor alg 11 mg/l

$LC50min/1000 > NOECmin/100 \rightarrow$

ad hoc MTRwater = $NOECmin/100 = 0.0006$ mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja \rightarrow ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 1 (hydrofoob) $\log Koc = 0.10 + 0.81 * \log Kow = \rightarrow 1.8$

$Koc = 63.2 \rightarrow Kp = 3.72$ l/kg \rightarrow ad hoc MTRbodemEP = $0.0006 * 3.72 = 0.002$ mg/kg

ad hoc MTRLucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRLuchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

EUSES: $Kp = 3.21E-05$ m³/m³ \rightarrow

ad hoc MTRLuchtEP = $0.0006 * 3.2 E-05 = 1.93E-08$ g/m³

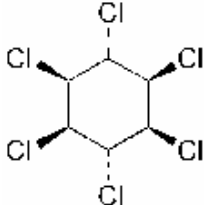
Output Humanex-resultaten

| 2,6-dinitrotolueen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 6.00E-01 | 6.00E-01 | 2.66E-04 | 2.00E+00 | 2.00E+00 |
| MPC human | 4.49E-02 | 3.13E-03 | 1.99E-05 | 2.78E-02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.34E+01 | 1.92E+02 | 1.34E+01 | 7.19E+01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 4.49E-02 | 3.13E-03 | 1.99E-05 | 2.78E-02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 98.597 | 0.587 | 0.812 | 0.004 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 87.256 | | | | |

De Humanex output komt niet overeen met de in 2004 vastgestelde ad-hocnormen voor lucht, water en bodem.

Rapportageformulier 158. hexachloorcyclo-hexaan (608-73-1)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | hexachloor |
| CAS-nummer | 608-73-1 |
| Stofgroep | insecticide |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₆ H ₆ Cl ₆ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 290,8 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 112,86 | 2 |
| Kookpunt (°C) | | |
| Dampdruk (Pa) | 0,104 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 8 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 4,26 | 2 |
| LogKoc | 3,55 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 3,78 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | 1/10E+6 = 0.00056 µg/kg bw/d based on carcinogenic classification. | 9 |
| carcinogeniteit | Group 2B: possibly carcinogenic to humans | 9, 10 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | Parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|----------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Oncorhynchus mykiss</i> | 24 | LC50 | 0,020 | | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Crangon crangon</i> | 48 | LC50 | 0,001 – 0,0033 | | 3 |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTRhumaan

$$1/10E+6 = 5,6E-07 \text{ mg/kg bw/d}$$

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. AFdoorvergiftiging = 5

s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000

$$\text{ad hoc MTRwater} = 0,001/3000 * 5 = 6,6E-08 \text{ mg/l}$$

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. ja → ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 1 (hydrofoob) $\log K_{oc} = 0,10 + 0,81 * \log K_{ow} = 3,55$ →

$$K_{oc} = 3553 \rightarrow K_p = 209 \rightarrow \text{ad hoc MTRbodernEP} = 6,6E-08 * 209 = 1,4E-05 \text{ mg/kg}$$

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

$$\text{EUSES: } K_p = 1,6 \text{ E-03 m}^3/\text{m}^3$$

$$\text{ad hoc MTRluchtEP} = 6,6E-08 * 1,6 \text{ E-03} = 1,1 \text{ E-10 g/m}^3$$

Output Humanex-resultaten

| hexachloorcyclohexaan | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|-------------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | 5.60E-04 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 6.60E-05 | 6.60E-05 | 2.52E-05 | 1.40E-02 | 1.40E-02 |
| MPC human | 6.68E-04 | 3.33E-03 | 2.55E-04 | 3.51E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 9.88E-02 | 1.98E-02 | 9.88E-02 | 3.99E-03 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 6.60E-05 | 6.60E-05 | 2.52E-05 | 1.40E-02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 15.621 | 49.635 | 33.122 | 1.622 | |
| Dominant route of exposure | leaf | | | | |
| % of dominant route | 21.049 | | | | |

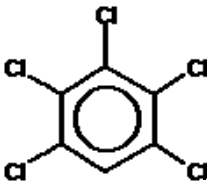
De in 2004 gerapporteerde ad-hocnormen voor water en bodern zijn gebaseerd op humane waarden. De reden hiervoor is niet bekend.

Rapportageformulier

159. pentachloorbenzeen (608-93-5)

Voor deze stof zijn MTRwater en bodem afgeleid in RIVM rapport: 679101012/1994 (28).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | Pentachloorbenzeen |
| CAS-nummer | 608-93-5 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C6 H Cl5 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 250.34 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 86 °C | 2 |
| Kookpunt (°C) | 277 °C | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.134655 at 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.831 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 5.17 | 2 |
| LogKoc | 4.29 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 71.21 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | RfD = 0.0008 mg/kg bw/d based on a LOAEL of 8.3 mg/kg bw/d an dliver and kidney effects in a subchronic oral rat (with weanlings) study. | 9 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTRhumaan

RfD = 0.0008 mg/kg bw/d

MTRwater = 0.3 µg/l

MTRsediment = 0.1 mg/kg

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTRluchtEP = MTRwater*Kp

$Kp = (71.21/2477.6)*1000 = 28.74 \text{ m}^3/\text{m}^3$

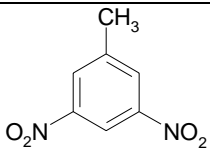
ad hoc MTRluchtEP = 0.0003*28.74 = 0.009 g/m³

Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|----------------------|----------------------|---------------------------|-------------|-----------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| pentachloorbenzeen | 8.00E-01 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.00E-01 | 3.00E-01 | 8.80E-02 | 1.00E+02 | 1.00E+02 |
| MPC human | 2.42E-01 | 2.07E+00 | 7.10E-02 | 2.32E+03 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.24E+00 | 1.45E-01 | 1.24E+00 | 4.31E-02 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 2.42E-01 | 3.00E-01 | 7.10E-02 | 1.00E+02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 23.556 | 70.708 | 4.357 | 1.379 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 33.011 | | | | |

Rapportageformulier 160. 3,5-dinitrotolueen (618-85-9)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 3,5-dinitrotolueen |
| CAS-nummer | 618-85-9 |
| Stofgroep | dinitrobenzeen |
| Synoniemen | 1-methyl-3,5-dinitrobenzeen |
| Molecuulformule | C7 H6 N2 O4 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|-----------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 182,14 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 93 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 315 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,054 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 150,62 (fragment) | 5 |
| Log Kow | 2,18 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 1,87 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 0,065 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 9,45 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 19 | | 3 |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 1,42 | | 4 |
| QSAR vissen | | NOEC | 0,024 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | EC50 | 45 | | 3 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 5,78 | | 4 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | | NOEC | 1,58 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 0,61 | | 4 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 0,16 | | 4 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee; AF1 = 10, AF2 = 10
- s5. ja; AF3 = 1
- s6. nee; AF4 = 10
- s8. nee
- s9. nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. ja
- s15. ja
- s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

- s1. nee
- s2. ja
- s3. nee
- s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000
ad hoc MTRwater = 19/3000 = 0.006 mg/l

ad hoc MTRbodem

- s1. nee
- s2. nee
- s6. ja; ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater *Kp
- s7. Sabljic: formule 1 (hydrofoob) $\log K_{oc} = 0.10 + 0.81 * \log K_{ow} = 1.87$
 $K_{oc} = 73.4 \rightarrow K_p = 4.32 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodemEP} = 0.006 * 4.32 = 0.026 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

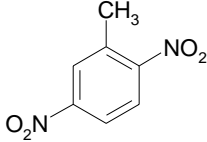
- s1. nee
- s2. nee
- s4. ja
- s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp
EUSES: $K_p = 2.77 \text{ E-}05 \text{ m}^3/\text{m}^3$
ad hoc MTRluchtEP = $0.006 * 2.77 \text{ E-}05 = 1.66 \text{ E-}07 \text{ g/m}^3$

Output Humanex-resultaten

| 3,5-dinitrotolueen | TDI | TCA | | Corrected for TCA: | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|--------------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | NO | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | Soil | Sediment |
| | Surface water | Groundwater | Air | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | | |
| MPC eco | 6.00E+00 | 6.00E+00 | 2.24E-03 | 2.60E+01 | 2.60E+01 |
| MPC human | 5.98E-01 | 4.47E-02 | 2.23E-04 | 4.55E-01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.00E+01 | 1.34E+02 | 1.00E+01 | 5.71E+01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 5.98E-01 | 4.47E-02 | 2.23E-04 | 4.55E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 98.596 | 0.624 | 0.774 | 0.005 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 85.421 | | | | |

Rapportageformulier 161. 2,5-dinitrotolueen (619-15-8)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 2,5-dinitrotolueen |
| CAS-nummer | 619-15-8 |
| Stofgroep | dinitrobenzeen |
| Synoniemen | 1-methyl-2,5-dinitrobenzeen |
| Molecuulformule | C7 H6 N2 O4 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|--------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 182,14 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 52,5 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 284 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,053 (geschat) bij 25°C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 220 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 2,18 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 1,87 | 17 |
| Henry-coëfficiënt | 0,044 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 9,45 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 1,3 | | 3 |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 1,42 | | 4 |
| QSAR vissen | | NOEC | 0,024 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | EC50 | 3,4 | | 3 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 5,78 | | 4 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | | NOEC | 1,58 | | |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 0,61 | | 4 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 0,16 | | 4 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee; AF1 = 10, AF2 = 10
- s5. ja; AF3 = 1
- s6. nee; AF4 = 10
- s8. nee
- s9. nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. ja
- s15. ja
- s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

- s1. nee
- s2. ja
- s3. nee
- s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000
ad hoc MTRwater = 1.3/3000 = 0.0004 mg/l

ad hoc MTRbodern

- s1. nee
- s2. nee
- s6. ja; ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater *Kp
- s7. Sabljic: formule 1 (hydrofoob) $\log K_{oc} = 0.10 + 0.81 * \log K_{ow} = 187$
 $K_{oc} = 73.4 \rightarrow K_p = 4.32 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodernEP} = 0.0004 * 4.32 = 0.0017 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp
- s6. EUSES: $K_p = 1.85 \text{ E-}05 \text{ m}^3/\text{m}^3$
ad hoc MTRluchtEP = 0.0004*1.85 E-05 = 7.4 E-09 g/m³

Output Humanex-resultaten

| 2,5-dinitrotolueen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 4.00E-01 | 4.00E-01 | 9.55E-05 | 1.70E+00 | 1.70E+00 |
| MPC human | 5.99E-01 | 4.28E-02 | 1.43E-04 | 4.36E-01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 6.68E-01 | 9.34E+00 | 6.68E-01 | 3.90E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 4.00E-01 | 4.28E-02 | 9.55E-05 | 4.36E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 98.689 | 0.673 | 0.632 | 0.005 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 85.520 | | | | |

De in 2004 gerapporteerde ad-hocnormen voor water is gebaseerd op de humane waarde. De reden hiervoor is niet bekend.

Rapportageformulier

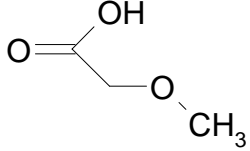
162. aniline (62-53-30)

Voor deze stof is voor alle drie compartimenten een gedegen norm beschikbaar.

Rapportageformulier

163. methoxyazijnzuur (625-45-6)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | methoxy azijnzuur |
| CAS-nummer | 625-45-6 |
| Stofgroep | neutraal, zuur |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C3 H6 O3 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 90,08 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 7,7 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 203,5 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 19,33 (exp.) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1000000 (exp) bij 20 °C | 2 |
| Log Kow | -0,68 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 0,66 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,0017 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 3,162 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 2,21 E+5 | | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 18460 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 1,97 E+5 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 1,05 E+5 | | 4 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 2237 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee; baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

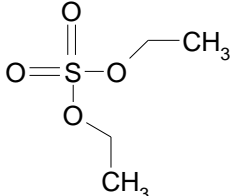
Output Humanex-resultaten

| | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| methoxyazijnzuur | 2.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 2.24E+04 | 2.24E+04 | 1.93E-01 | 6.11E+03 | 6.11E+03 |
| MPC human | 6.91E-01 | 1.66E-02 | 5.96E-06 | 7.88E-03 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.24E+04 | 1.35E+06 | 3.24E+04 | 7.76E+05 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 6.91E-01 | 1.66E-02 | 5.96E-06 | 7.88E-03 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 99.652 | 0.194 | 0.153 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 98.775 | | | | |

Rapportageformulier

164. diethylsulfaat (64-67-5)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | diethyl sulfaat |
| CAS-nummer | 64-67-5 |
| Stofgroep | ester |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₄ H ₁₀ O ₄ S |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 154,19 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -24 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 208 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 28,26 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 7000 (exp) bij 20 °C | 2 |
| Log Kow | 1,14 (exp) | 2 |
| LogKoc | 1,6 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,62 (geschat) bij 20 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 1,506 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-------------------------------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | IARC: 2A | |
| mutageniteit | in vivo en in vitro: positief | 7 |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Oncorhynchus mykiss</i> | 96 | LC50 | 20 | | 11 |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 67,32 | | 4 |
| QSAR vissen | | NOEC | 46,25 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 742 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 5,19 | | 4 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 3,95 | | 4 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee; AF1 = 10, AF2 = 10

s5. ja AF3 = 1

s6. ja

s7. ja; AF4 = 1

s8. nee

s9. nee → MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja

s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. nee

s4. LC50 aanwezig voor 1 groep → AF = 10000

ad hoc MTRwater = 20/10000 = 0.002 mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja; ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 4 (esters) logKoc = 1.09 + 0.47 logKow = 1.6

Koc = 42.2 → Kp = 2.48 l/kg → ad hoc MTRbodemEP = 0.002 * 2.48 = 0.005 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

s6. EUSES: Kp = 2.63 E-04 m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 0.002 * 2.63 E-04 = 5.3 E-07 g/m³

Output Humanex-resultaten

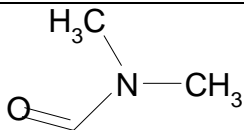
| diethylsulfaat | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 2.00E+00 | 2.00E+00 | 8.28E-03 | 5.00E+00 | 5.00E+00 |
| MPC human | 6.50E-01 | 3.43E-02 | 2.69E-03 | 9.35E-02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.08E+00 | 5.83E+01 | 3.08E+00 | 5.35E+01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 6.50E-01 | 3.43E-02 | 2.69E-03 | 9.35E-02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 95.624 | 0.281 | 4.094 | 0.001 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 92.889 | | | | |

De Humanex output komt niet overeen met de in 2004 vastgestelde ad-hocnormen voor lucht, water en bodem.

Rapportageformulier

165. N,N'-dimethylformamide (68-12-2)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | N,N'-dimethylformamide |
| CAS-nummer | 68-12-2 |
| Stofgroep | neutraal |
| Synoniemen | N,N'-dimethylmethaan amide; N-formyldimethylamine; DMF |
| Molecuulformule | C ₃ H ₇ N O |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 73,10 | 5 |
| Smeltpunt (°C) | -60,4 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 154 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 516 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1000000 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | -1,01 (exp) | 2 |
| LogKoc | 0,62 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,038 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 3,162 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-------------------------------|------------|
| experimentele gegevens | RfC: 0,03 mg/m ³ | 9 |
| carcinogeniteit | IARC: 2B | |
| mutageniteit | in vivo en in vitro: positief | 7 |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Oncorhynchus mykiss</i> | 96 | LC50 | 1020 | | 11 |
| <i>Brachydanio rerio, embryo</i> | | NOEC | 11000 | | 11 |
| <i>Salvelinus fontinalis (2 gen.)</i> | 12 m | NOEC | 70,5 | | 11 |
| <i>Pimephales promelas (2 gen.)</i> | 4 m | NOEC | 8 | | |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 28 d | NOEC | 1,85 | | 11 |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | EC50 | 13 | | 11 |
| <i>Tanytarsus dissimilis (insect)</i> | 24 | LC50 | 4700 | | 11 |
| Algen | | | | | |

| | | | | | |
|------------------------------------|------|------|------|--|----|
| Scenedesmus quadricauda | | NOEC | 10 | | 11 |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Anabaena inaequalis</i> (bact.) | 10 d | EC50 | 570 | | 11 |
| <i>Pseudomonas putida</i> (bact.) | | NOEC | 2210 | | 11 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. ja, RfC = 0.03 mg/m³

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. nee

s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen + NOEC's voor 3 groepen →

ad hoc MTRwater = NOECmin/10 = 1.85/10 = 0.19 mg/l

SIDS: PNEC = 22.8 mg/l (NOEC = 1140 mg/l en AF = 50)

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja; ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 8 (amiden) logKoc = 1.25 + 0.62 logKow = 0.62

Koc = 4.2 → Kp = 0.25 l/kg → ad hoc MTRbodemEP = 0.19 * 0.25 = 0.047 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

s6. EUSES: Kp = 1.59 E-05 m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 0.19 * 1.59 E-05 = 3.02 E-06 g/m³

Output Humanex-resultaten

| N,N-dimethylformamide | TDI | TCA | | Corrected for TCA: | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|--------------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | NO | |
| | 2.00E-02 | 3.00E+01 | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 1.90E+02 | 1.90E+02 | 9.77E-02 | 4.70E+01 | 4.70E+01 |
| MPC human | 6.84E-01 | 4.36E-02 | 3.52E-04 | 2.74E-02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.78E+02 | 4.36E+03 | 2.78E+02 | 1.72E+03 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 6.84E-01 | 4.36E-02 | 3.52E-04 | 2.74E-02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 98.717 | 0.340 | 0.942 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 97.778 | | | | |

Rapportageformulier

166. telluriumslakken (69029-86-3)

Vor deze stof zijn geen ad hoc MTRs afgeleid.

Rapportageformulier 167. flucythrinaat (70124-77-5)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | flucythrinaat |
| CAS-nummer | 70124-77-5 |
| Stofgroep | ester |
| Synoniemen | Cybolt; Guardian; Pay-Off; Stock-Guard |
| Molecuulformule | C ₂₆ H ₂₃ F ₂ N O ₄ |
| Structuurformule | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|---------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 451,47 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | < 25 °C | 2 |
| Kookpunt (°C) | 108 bij 47 Pa | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 1,16 E-06 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,06 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 6,20 (exp) | 2 |
| LogKoc | 4 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,009 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 11860 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|--------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Lepomis macrochirus</i> | 96 | LC50 | 0,00071 | | 10 |
| <i>Ictalurus punctatus</i> | 96 | LC50 | 0,00051 | | 10 |
| <i>Pimephales promelas e.a</i> | 96 | LC50 | 0,00032 | | 7 |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 0,39 | | 4 |
| QSAR vissen | | NOEC | 0,009 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,054 | | 4 |
| Algen | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|----|------|-------|--|---|
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 0,036 | | 4 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 0,03 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. ja

s7. ja

s8. nee

s9. MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee; s2. ja;

s3. ja; AFdoorvergiftiging = 10

s4. LC50 aanwezig voor 1 groep → AF = 10000

ad hoc MTRwater = 0.00032/100000 = 3.2 E-09 mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja; ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater *Kp

s7. Sabljic: formule 4 → logKoc = 1.09 + 0.47 logKow = 4

Koc = 10093 → Kp = 593 l/kg → ad hoc MTRbodemEP = 3.2E-09 * 593 = 1.9E-06 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

s6. EUSES: Kp = 3.81 E-06m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 3.2E-09*3.81 E-06 = 1.22E-14 g/m³

Output Humanex-resultaten

| flucythrinaat | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | Surface water | Air | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.20E-06 | 3.20E-06 | 3.34E-10 | 1.90E-03 | 1.90E-03 |
| MPC human | 2.75E-03 | 3.91E-03 | 2.87E-07 | 2.29E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.16E-03 | 8.18E-04 | 1.16E-03 | 8.29E-04 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 3.20E-06 | 3.20E-06 | 3.34E-10 | 1.90E-03 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 82.142 | 17.526 | 0.002 | 0.329 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 82.142 | | | | |

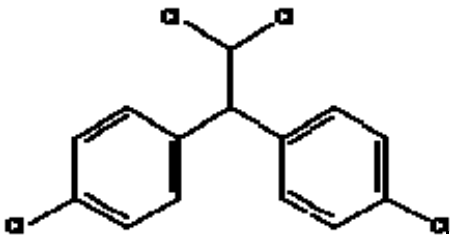
De in 2004 gerapporteerde ad hoc norm voor water is gebaseerd op de humane waarde. De reden hiervoor is niet bekend.

Rapportageformulier

168. DDD, 4,4'-isomeer (72-54-8)

Voor deze stof zijn gedegen normen voor water en bodem beschikbaar in RIVM-rapport: 679101012/1994 (28).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | DDD, 4,4'-isomeer |
| CAS-nummer | 72-54-8 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₁₄ H ₁₀ Cl ₄ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 320.05 | 2 |
| Smelpunt (°C) | 110 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 350 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.0002 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.09 | 2 |
| Log Kow | 6.02 | 2 |
| LogKoc | 3.92 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.67 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|----------|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 0.5 | 14 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTRhumaan

TDI = 0.5 µg/kg bw/d

MTRwater = 0.0005 µg/l

MTRsediment = 0.002 mg/kg

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

$Kp = (0.67/2477.6) * 1000 = 0.27 \text{ m}^3/\text{m}^3$

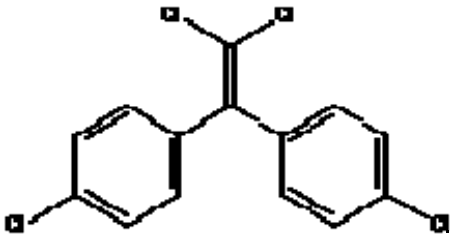
ad hoc MTRluchtEP = $5E-07 * 0.27 = 1.35E-07 \text{ g}/\text{m}^3$

Output Humanex-resultaten

| DDD, 4,4'-isomeer | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 5.00E-04 | 5.00E-04 | 2.38E-06 | 2.00E+00 | 2.00E+00 |
| MPC human | 6.59E-02 | 1.86E-01 | 3.13E-04 | 8.91E+01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 7.58E-03 | 2.69E-03 | 7.58E-03 | 2.24E-02 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 5.00E-04 | 5.00E-04 | 2.38E-06 | 2.00E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 69.695 | 25.822 | 4.130 | 0.352 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 69.695 | | | | |

Rapportageformulier
169. DDE, 4,4'-isomeer (72-55-9)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | DDE, 4,4'-isomeer |
| CAS-nummer | 72-55-9 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₁₄ H ₈ Cl ₄ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 318.03 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 89 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 336 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.0008 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.04 | 2 |
| Log Kow | 6.51 | 2 |
| LogKoc | 4.15 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 4.21 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|----------|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 0.5 | 14 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTRhumaan

TDI = 0.5 µg/kg bw/d

MTRwater = 0.0004 µg/l

MTRsediment = 0.001 mg/kg

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

$Kp = (4.21/2477.6)*1000 = 1.7 \text{ m}^3/\text{m}^3$

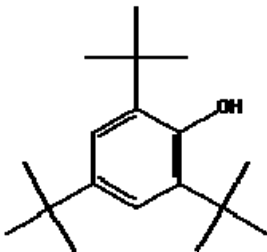
ad hoc MTRluchtEP = $4\text{E-}07*1.7 = 6.8\text{E-}07 \text{ g}/\text{m}^3$

Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|-------------------------|-----------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| DDE, 4,4'-isomeer | 5.00E-01 | N.A. | | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 4.00E-04 | 4.00E-04 | 1.35E-05 | 1.00E+00 | 1.00E+00 |
| MPC human | 1.89E-02 | 1.80E-01 | 6.38E-04 | 1.46E+02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.11E-02 | 2.23E-03 | 2.11E-02 | 6.84E-03 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 4.00E-04 | 4.00E-04 | 1.35E-05 | 1.00E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 26.047 | 57.317 | 15.025 | 1.611 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 53.470 | | | | |

Rapportageformulier
170. decylfenol (732-26-3)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 2,4,6-tris(1,1-dimethylethyl)-fenol |
| CAS-nummer | 732-26-3 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | decylfenol |
| Molecuulformule | C18H30O |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 262.44 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 131 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 278 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.03 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 35 | 2 |
| Log Kow | 6.06 | 2 |
| LogKoc | 4.72 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.68 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| | | | | | |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee; baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| decylfenol | 2.00E-03 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 6.10E-04 | 6.10E-04 | 3.21E-06 | 1.90E+01 | 1.90E+01 |
| MPC human | 1.95E-04 | 9.76E-04 | 1.03E-06 | 2.95E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.12E+00 | 6.25E-01 | 3.12E+00 | 6.43E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.95E-04 | 6.10E-04 | 1.03E-06 | 2.95E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 53.158 | 39.869 | 3.805 | 3.169 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 53.158 | | | | |

Rapportageformulier

171. beryllium en -verbindingen (7440-41-7)

Voor deze stofgroep zijn MTR bodem en water afgeleid in RIVM-rapport 601501001 (30).

Rapportageformulier

172. broomethaan (74-83-9)

Voor deze stofgroep zijn MTR bodem, water en lucht afgeleid in RIVM-rapport: 601782003 (26).

Rapportageformulier

173. tributyltin-verbindingen (7486-35-3)

Voor stofgroepen worden geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier 174. formamide (75-12-7)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---------------------------------|
| Stofnaam | formamide |
| CAS-nummer | 75-12-7 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | carbamalaldehyde; methaan amide |
| Molecuulformule | C H ₃ N O |
| Structuurformule | $O=C-NH_2$ |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 45,04 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 2,55 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 220 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 8,13 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1000000 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | -1,51 (exp) | 2 |
| LogKoc | 0,23 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,00037 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | -0,48 (exp) bij 25 °C | 2 |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 3,16 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|----------------------|------------|
| experimentele gegevens | NOAEL: 50 mg/kg bw/d | 10 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Brachydanio rerio</i> | 96 | LC50 | 9135 | | 11 |
| <i>Leuciscus idus melanotus</i> | 96 | LC50 | 4600 | | 11 |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 66529 | | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 4868 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | EC50 | >500 | | 11 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 55939 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 28573 | | 4 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 376 | | 4 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. nee; AF3 = 10

s6. ja

s7. ja; AF4 = 1

s8. ja; AF5 = 1

s10. overall AF = 10x10x10x1x1 = 1000

s11. ja

s12. MTIL = NOAEL/1000 = 50/1000 = 0.05 mg/kg bw/d

s13. nee; ad hocMTR = MTIL = 0.05 mg/kg bw/d

s14. nee

s17. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.05 mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee; s2. ja; s3. nee

s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000

ad hoc MTRwater = 4600/3000 = 1.5 mg/l

ad hoc MTRbodern

s1. nee; s2. nee

s6. ja; ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater *Kp

s7. Sabljic: formule 2 (niet hydrofoob) $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 * \log K_{ow} = 0.23$

$K_{oc} = 1.72 \rightarrow K_p = 0.10 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodernEP} = 1.5 * 0.10 = 0.15 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

s1. nee; s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

s6. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

EUSES: $K_p = 1.55 \text{ E-}07 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = $1.5 * 1.55 \text{ E-}07 = 2.33 \text{ E-}07 \text{ g/m}^3$

Output Humanex-resultaten

| formamide | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 5.00E+01 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 1.50E+03 | 1.50E+03 | 1.06E-03 | 1.50E+02 | 1.50E+02 |
| MPC human | 1.73E+03 | 1.81E+01 | 1.22E-03 | 1.29E+01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 8.66E-01 | 8.31E+01 | 8.66E-01 | 1.17E+01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.50E+03 | 1.81E+01 | 1.06E-03 | 1.29E+01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 99.853 | 0.110 | 0.037 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 98.952 | | | | |

Rapportageformulier

175. koolstofdissulfide (75-15-0)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--------------------|
| Stofnaam | koolstof disulfide |
| CAS-nummer | 75-15-0 |
| Stofgroep | neutraal |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C S ₂ |
| Structuurformule | $S=C=S$ |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|---|-----------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 76,14 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -111,5 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 46 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 48000 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1180 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 1,94 (exp) | 2 |
| LogKoc | 1.01 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa·m ³ ·mol ⁻¹) | 1450 (exp) bij 24 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 6,22 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---|------------|
| experimentele gegevens | RfD: 0,1 mg/kg bw/d RfC: 0,7 mg/m ³ | 9 |
| carcinogeniciteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Poecilia reticulata</i> | 96 | LC50 | 4 | | 11 |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 64 | | 4 |
| QSAR vissen | | NOEC | 8,20 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | EC50 | 2,1 | | 11 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 69 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| <i>Chlorella pyrenoidosa</i> | 96 | EC50 | 21 | | 11 |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 43 | | 4 |
| QSAR Green algae | 96 | NOEC | 4,13 | | 4 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. ja; RfD = 0.1 mg/kg bw/d; RfC = 0.7 mg/m³

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. nee

s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen → AF = 1000

ad hoc MTRwater = 2.1/1000 = 0.0021 mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja; ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 2 (niet hydrofoob) $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 \log K_{ow} = 1.01$

$K_{oc} = 10.2 \rightarrow K_p = 0.6 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodemEP} = 0.0021 * 0.6 = 0.0013 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

s6. $K_p = (1450/2477.6) * 1000 = 585 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = 0.0021 * 585 = 1.23 g/m³

Output Humanex-resultaten

| koolstofdissulfide | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 2.10E+00 | 2.10E+00 | 2.63E+01 | 1.30E+00 | 1.30E+00 |
| MPC human | 2.77E+01 | 6.02E-01 | 3.48E+02 | 7.30E-01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 7.57E-02 | 3.49E+00 | 7.57E-02 | 1.78E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 2.10E+00 | 6.02E-01 | 2.63E+01 | 7.30E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 0.609 | 0.001 | 99.390 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 99.383 | | | | |


De in 2004 gerapporteerde ad-hocnorm voor water is gebaseerd op humane waarde. De reden hiervoor is niet bekend.

Rapportageformulier

176. oxiraan (ethyleenoxide) (75-21-8)

Voor deze stof zijn MTR water en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 679101011/1993 (27)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | Oxiraan |
| CAS-nummer | 75-21-8 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | Etyleenoixide |
| Molecuulformule | C2 H4 O |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 44.05 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -111.7 ° | 2 |
| Kookpunt (°C) | 10.6 °C | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 174651.82 at 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1E+6 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | -0.30 | 2 |
| LogKoc | 0.86 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 14.9961 at 25 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---|------------|
| experimentele gegevens | MTIL = 0.02 µg/kg bw/d | |
| carcinogeniteit | Group 1: carcinogenic to humans (a directly acting alkylating agent). | 10 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTR_{humaan}

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. ja

s7. ja; AF4 = 1

s8. nee

s9. nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja

s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

MTR_{water} = 84 µg/l

MTR_{bodem} = 0.002 mg/kg

ad hoc MTR_{lucht} = MTR_{water}*K_p

K_p = (15/2477.6)*1000 = 6.05 m³/m³ → ad hoc MTR_{lucht} = 0.084*6.05 = 0.5 g/m³

Output Humanex-resultaten

| oxiraan (ethyleenoxide) | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 8.40E+01 | 8.40E+01 | 1.34E+02 | 2.00E+00 | 2.00E+00 |
| MPC human | 4.07E-02 | 1.32E-02 | 6.49E-02 | 9.69E-03 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.06E+03 | 6.37E+03 | 2.06E+03 | 2.06E+02 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 4.07E-02 | 1.32E-02 | 6.49E-02 | 9.69E-03 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 6.953 | 0.102 | 92.945 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 92.735 | | | | |

Rapportageformulier

177. pentachloroethaan (76-01-7)

Voor deze stof zijn MTR water en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 679101011/1993 (27)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|----------------------------------|
| Stofnaam | Pentachloorethaan |
| CAS-nummer | 76-01-7 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₂ H Cl ₅ |
| Structuurformule | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 202.30 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -29 °C | 2 |
| Kookpunt (°C) | 159.8 °C | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 467 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 480 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 3.22 | 2 |
| LogKoc | 2.71 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 196.57 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | MTIL = 0.02 µg/kg bw/d | |
| carcinogeniteit | Group 3: not classifiable as to its carcinogenicity to humans. | 10 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. nee; AF4 = 10

s8. nee

s9. nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja

s16. nee; ad hoc MTRhumaan = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

MTRwater = 0.23 mg/l

MTRsediment = 49 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

s6. EUSES: Kp = 0.0831 m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 0.23 * 0.0831 = 0.019 g/m³

Output Humanex-resultaten

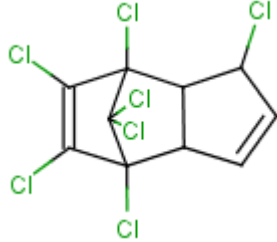
| pentachloorethaan | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 2.30E+02 | 2.30E+02 | 1.76E+02 | 4.90E+04 | 4.90E+04 |
| MPC human | 7.66E-02 | 2.41E-02 | 5.85E-02 | 7.22E-01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.00E+03 | 9.55E+03 | 3.00E+03 | 6.79E+04 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 7.66E-02 | 2.41E-02 | 5.85E-02 | 7.22E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 15.524 | 0.603 | 83.865 | 0.008 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 83.595 | | | | |

Rapportageformulier

178. heptachloor (76-44-8)

Voor deze stof zijn MTR water en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 679101012/1994 (28)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | Heptachlor |
| CAS-nummer | 76-44-8 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C10 H5 Cl7 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 373.32 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 95.5 °C | 2 |
| Kookpunt (°C) | 310 °C | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.053329 at 25 ° | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.18 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 6.10 | 2 |
| LogKoc | 3.96 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 29.7896 at 25 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | RfD = 0.0005 mg/kg bw/d based on a NOAEL of 0.15 mg/kg in a 2-years rat diet study. Effects: increases of liver weight and histopathological effects in males. | 9 |
| carcinogeniteit | Group 2B: possibly carcinogenic to humans. 1:10E+6 = 2.2E-7 mg/kg bw/d. | 9, 10 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTR_{humaaan}

RfD = 0.0005 mg/kg bw/d

1:10E+6 = 2.2E-07 mg/kg bw/d

MTR_{water} = 0.0005 µg/l

MTR_{sediment} = 0.068 mg/kg

ad hoc MTR_{lucht}

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTR_{luchtEP} = ad hoc MTR_{water}*K_p

s6. K_p = (29.8/2477.6)*1000 = 12 m³/m³

ad hoc MTR_{luchtEP} = 0.0005*12 = 0.006 mg/m³

Output Humanex-resultaten

| heptachloor | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 5.00E-01 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 5.00E-04 | 5.00E-04 | 8.41E-05 | 6.80E+01 | 6.80E+01 |
| MPC human | 3.66E-02 | 3.16E-01 | 6.16E-03 | 1.65E+02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.36E-02 | 1.58E-03 | 1.36E-02 | 4.12E-01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 5.00E-04 | 5.00E-04 | 8.41E-05 | 6.80E+01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 41.043 | 47.953 | 10.235 | 0.770 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 44.329 | | | | |

Rapportageformulier

179. kobaltchloride (7646-79-9)

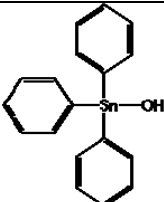
Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

180. fentinhydroxide (76-87-9)

Voor deze stof zijn MTRwater en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 601501002/1997 (29)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | Fentinhydroxide |
| CAS-nummer | 76-87-9 |
| Stofgroep | organotin |
| Synoniemen | trifenyyltinhydroxide |
| Molecuulformule | C18 H16 OSn |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 367.02 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 119 | 2 |
| Kookpunt (°C) | | |
| Dampdruk (Pa) | 0.47E-4 at 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.4 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 3.53 | 2 |
| LogKoc | 2.75 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.04316 at 25 °C | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | NOAEC = 0.014 mg/m ³ based on severe effects in the lungs in an inhalation study . Immunotoxic effects. | 10 |
| carcinogeniteit | They are not carcinogenic, but some data show that they are co-clastogenic. → MTIL = 0.02 µg/kg bw/d | 10 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Pimeales promelas</i> | 96 | EC50 | 0.0047 | | 3 |
| <i>Cyprinus carpio</i> | 24 | LC50 | 0.0074 | | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Americamysis bahia</i> | 96 | LC50 | 0,0028 | | 3 |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee→AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. ja

s7. ja→AF4 = 1

s8. ja→AF5 = 1

s10. overall AF = 100

s11. ja

s12. MTIL = NOAEL/overall AF = 0.014/100 = 0.00014 mg/m³ = 0.14 µg/m³

s13. ja; ad hoc MTR = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. ja; AF doorvergiftiging = 2

s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen basisset→AF = 3000

ad hoc MTRwater = 0.0028/3000*2 = 5 E-07 mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja; ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater*Kp

s7. Koc = 561→Kp = 32.99 l/kg

ad hoc MTRbodemEP = 5 E-07*32.99 = 1.6 E-05 mg/kg

ad hoc MTRLucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja

s6. ad hoc MTRLuchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

EUSES: Kp = 1.82 E-05 m³/m³

ad hoc MTRLuchtEP = 5 E-07*1.82 E-05 = 9.1 E-12 g/m³

Output Humanex-resultaten

| fentinhydroxide | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 3.00E+00 | 1.40E-01 | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 5.00E-04 | 5.00E-04 | 1.31E-07 | 1.60E-02 | 1.60E-02 |
| MPC human | 4.47E+01 | 8.19E+00 | 1.17E-02 | 2.68E+02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.12E-05 | 6.11E-05 | 1.12E-05 | 5.96E-05 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 5.00E-04 | 5.00E-04 | 1.31E-07 | 1.60E-02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 92.689 | 4.978 | 2.312 | 0.021 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 46.735 | | | | |

Rapportageformulier

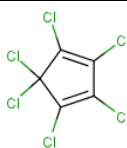
181. chroomzuur (7738-94-5)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

182. Hexachloorcyclopentadien (77-47-4)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | Hexachloorcyclopentadien |
| CAS-nummer | 77-47-4 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | 1,3-cyclopentadien, 1,2,3,4,5,5-hexachloor |
| Molecuulformule | C5 Cl6 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 272,77 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -9 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 239 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 7,999 at 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1,8 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 5,04 | 2 |
| LogKoc | 4,18 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 2735,77 at 25 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---|------------|
| experimentele gegevens | RfD = 0.006 mg/kg bw/d based on chronic irritation in a subchronic rat gavage study. RfC = 0.0002 mg/m ³ based on inflammation of the nose in a chronic inhalation study in mice. | 9 9 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Pimephales promelas</i> | 30 d | LC50 | 0,0067 | | 3 |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 0,007 | | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0.030 | | 3 |
| Algen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan
 RfD = 0.006 mg/kg bw/d
 RfC = 0.0002 mg/m³

ad hoc MTRwater
 s1. nee
 s2. ja
 s3. ja ; AFdoorvergiftiging = 10
 s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000
 ad hoc MTRwater = 0.0067/3000*10 = 2.2E-07 mg/l

ad hoc MTRbodem
 s1. nee
 s2. nee
 s6. ja; ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater *Kp
 s7. Sabljic: formule 1 (hydrofoob) logKoc = 0.10 + 0.81 logKow = 4.18
 Koc = 15219 → Kp = 895 l/kg → ad hoc MTRbodemEP = 2.2E-07* 895 = 0.0002 mg/kg

ad hoc MTRlucht
 s1. nee
 s2. nee
 s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp
 s6. Kp = (2735/2477.6)*1000 = 1104 m³/m³
 ad hoc MTRluchtEP = 2.2E-07*1104 = 0.0002 g/m³

Output Humanex-resultaten

| hexachloorcyclopentadien | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: YES | | |
|--------------------------------|-------------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------|-------------------------|
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 2.20E-04 | 2.20E-04 | 1.22E-04 | 2.00E-01 | 2.00E-01 |
| MPC human | 3.61E-01 | 1.24E-01 | 2.00E-01 | 1.10E+02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 6.09E-04 | 1.77E-03 | 6.09E-04 | 1.82E-03 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 2.20E-04 | 2.20E-04 | 1.22E-04 | 2.00E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 72.101 | 8.501 | 19.249 | 0.149 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 72.101 | | | | |

De in 2004 gerapporteerde ad-hocnormen voor water en bodem zijn gebaseerd op humane waarden. De reden hiervoor is niet bekend.

Rapportageformulier

183. kaliumbromaat (7758-01-2)

Voor deze stof is geen ad-hoc MTR afgeleid.

Rapportageformulier

184. dimethylsulfaat (77-78-1)

Voor deze stof is een EU-RAR beschikbaar.

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | dimethylsulfaat |
| CAS-nummer | 77-78-1 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₂ H ₆ O ₄ S |
| Structuurformule | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 126.13 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -27 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 188 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 90 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 28000 | 2 |
| Log Kow | 0.16 | 2 |
| LogKoc | 1.1 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.41 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-------------------------------|------------|
| experimentele gegevens | NOAEL: 0.29 µg/m ³ | 10 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. ja

s4. nee; AF1 = 10, AF2 = 10

s5. ja → AF3 = 1

s6. nee → AF4 = 10

s8. ja → AF5 = 1

s10. overall AF = 10x10x1x10x1 = 1000

s11. ja

s12. MTIL = NOAEL/overall AF = 0.29/1000 = 0.00029 µg/m³

PNECwater = 14 µg/l

Sabljić: $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 \log K_{ow} = 1.10 \rightarrow K_{oc} = 12.5 \rightarrow K_p = 0.74 \text{ l/kg}$

MTRwater = PNEC(1 + K_p*0.001*0.03) = 14*1 = 14 µg/l

PNECbodem = 2 µg/kg

MTRbodem = PNEC*1.13*2.9 = 0.0066 mg/l

ad hoc MTRLucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRLuchtEP = ad hoc MTRwater*K_p

s6. EUSES: K_p = 1.7 E-04 m³/m³

ad hoc MTRLuchtEP = 0.014*1.7 E-04 = 2.38 E-06 g/m³

Output Humanex-resultaten

| dimethylsulfaat | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|--------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 1.40E+01 | 1.40E+01 | 3.82E-02 | 6.60E+00 | 6.60E+00 |
| MPC human | 6.68E-01 | 2.40E-02 | 1.83E-03 | 2.69E-02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.10E+01 | 5.84E+02 | 2.10E+01 | 2.46E+02 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 6.68E-01 | 2.40E-02 | 1.83E-03 | 2.69E-02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 96.988 | 0.187 | 2.824 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 95.455 | | | | |

Rapportageformulier

185. arseenzuur en -zouten (7778-39-4)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

186. calciumarsenaat (7778-44-1)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

187. kaliumdichromaat (7778-50-9)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

188. loodarsenaat (7784-40-9)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

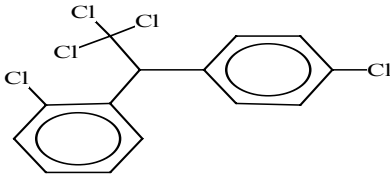
189. cadmiumfluoride (7790-79-6)

Voor metaalzouten zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier

190. DDT, 2,4'-isomeer (789-02-6)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | DDT, 2,4'-isomeer |
| CAS-nummer | 789-02-6 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | O, P'-DDT |
| Molecuulformule | C14 H9 Cl5 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 354.49 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | | |
| Kookpunt (°C) | | |
| Dampdruk (Pa) | 0.18E-3 at 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0.085 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 6.79 | 2 |
| LogKoc | 5.6 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.83 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | Group 2 B → MTIL = 0.02 µg/kg bw/d. zie ook DDT, 4,4'-isomeer (50-29-3) | 10 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Orconectes nais</i> | 96 | LC50 | 0.00018* | | 10 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Palaemonetes kadiakensis</i> | 96 | LC50 | 0.0023* | | 10 |
| Algen | | | | | |

*Deze waarden zijn waarschijnlijk voor p,p'-DDT.

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. ja

s7. ja; AF4 = 1

s8. nee

s9. nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja

s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. ja; AFdoorvergiftiging = 10

s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000

ad hoc MTRwater = $0.00018/3000*10 = 6E-09$ mg/l

ad hoc MTRbodemp

s1. nee

s2. nee

s6. ad hoc MTRbodempEP = ad hoc MTRwater*Kp

s7. Sabljic: formule 4: $\log K_{oc} = 1.09 + 0.47*\log K_{ow} = 4.28$ →

$K_{oc} = 19112$ → $K_p = 1124$ → ad hoc MTRbodempEP = $6E-09*1124 = 6.7E-06$ mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja. ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

s6. EUSES: $K_p = 3.52 E-04 m^3/m^3$

ad hoc MTRluchtEP = $6E-09*3.52 E-04 = 2.1 E-12 g/m^3$

Output Humanex-resultaten

| DDT, 2,4'-isomeer | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|--------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 6.00E-06 | 6.00E-06 | 2.80E-08 | 6.70E-03 | 6.70E-03 |
| MPC human | 9.81E-04 | 4.66E-03 | 4.58E-06 | 5.16E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 6.12E-03 | 1.29E-03 | 6.12E-03 | 1.30E-03 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 6.00E-06 | 6.00E-06 | 2.80E-08 | 6.70E-03 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 35.523 | 60.201 | 2.854 | 1.421 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 58.070 | | | | |

De in 2004 gerapporteerde ad hoc norm voor bodemp is gebaseerd op de humane waarde. De reden hiervoor is niet bekend.

Rapportageformulier

191. N-methylacetamide (79-16-3)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|-----------------------------------|
| Stofnaam | N-methylacetamide |
| CAS-nummer | 79-16-3 |
| Stofgroep | neutraal |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₃ H ₇ N O |
| Structuurformule | |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|----------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 73,10 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 28 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 205 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 58,65 (exp) bij 23 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1000000 (exp) bij 20 °C | 2 |
| Log Kow | -1,05 (exp) | 2 |
| LogKoc | 0,47 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,0043 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 3,16 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 39892 | | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 3143 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 34625 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 18161 | | 4 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 312 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee → ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee; baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

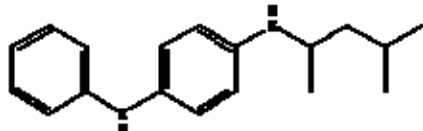
| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| N-methylacetamide | 2.0E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.12E+03 | 3.12E+03 | 6.64E-02 | 1.47E+03 | 1.47E+03 |
| MPC human | 6.82E-01 | 3.47E-02 | 1.45E-05 | 2.33E-01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 4.58E+03 | 8.99E+04 | 4.58E+03 | 6.32E+03 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 6.82E-01 | 3.47E-02 | 1.45E-05 | 2.33E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 99.516 | 0.307 | 0.175 | 0.003 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 98.638 | | | | |

Rapportageformulier

192. 4-(dimethylbutylamino)difenylamine (793-24-8)

Voor deze stof is voor de compartimenten water en bodem een MTR afgeleid in RIVM-rapport: 601782003/2007 (26).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | 4-(dimethylbutylamino)difenylamine |
| CAS-nummer | 793-24-8 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | N-(1,3-dimethylbutyl-N'-fenyl)-1,4-benzenediamine; 6PPD |
| Molecuulformule | C ₁₈ H ₂₄ N ₂ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 268 | 5 |
| Smeltpunt (°C) | 122 | 5 |
| Kookpunt (°C) | 370 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 0.0007 | 5 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 2.83 | 5 |
| Log Kow | 4.68 | 5 |
| LogKoc | 3.45 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.07 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10
- s5. nee; AF3 = 10
- s6. nee; AF4 = 10
- s8. nee
- s9. nee → MTIL = 0.02 µg/kgbw/d
- s14. nee
- s17. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kgbw/d

ad hoc MTRwater

- s1. nee
- s2. ja
- s3. ja; AFdoorvergiftiging = 5
- s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen → AF = 1000 →
ad hoc MTRwater = 0.14/1000*5 = 2.8E-05 mg/l

ad hoc MTRbodern

- s1. nee
- s2. nee
- s6. ja; ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater * Kp
- s7. Sabljic formule 8 (amiden) $\log K_{oc} = 1.25 + 0.33 \log K_{ow} = 2.79$
Koc = 622.9 → Kp = 366 l/kg → ad hoc MTRbodernEP = 2.8E-05 * 366 = 0.001 mg/kg

ad hoc MTRlucht

- s1. nee
- s2. nee
- s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp
- s6. EUSES: Kp = 2.8 E-05 m³/m³
ad hoc MTRluchtEP = 2.8E-05 * 2.8 E-05 = 7.8 E-10 g/m³

Output Humanex-resultaten

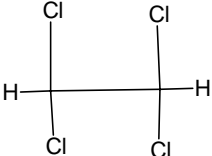
| 4-[dimethylbutylamino]- difenylamine | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 2.80E-02 | 2.80E-02 | 1.32E-05 | 1.00E+00 | 1.00E+00 |
| MPC human | 5.38E-02 | 1.07E-02 | 2.53E-05 | 3.89E-01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 5.21E-01 | 2.63E+00 | 5.21E-01 | 2.57E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 2.80E-02 | 1.07E-02 | 1.32E-05 | 3.89E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 93.314 | 3.674 | 3.006 | 0.006 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 80.109 | | | | |

Rapportageformulier

193. 1,1,2,2-tetrachloor-ethaan (79-34-5)

Voor deze stof is voor de compartimenten water en bodem een MTR afgeleid in RIVM-rapport: 679101011/1993 (27).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 1,1,2,2-tetrachloorethaan |
| CAS-nummer | 79-34-5 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₂ H ₂ Cl ₄ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 167.85 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -43.8 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 146.5 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 615.95 at 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 2830 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 2.39 | 2 |
| LogKoc | 1.9 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 37.1863 at 25 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------------|------------|
| experimentele gegevens | MRL = 0.04 mg/kg bw/d. | 12 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. ja; chronicMRL = 0.04 mg/kg bw/d (ATSDR)

MTRwater = 3.3 mg/l

MTRsediment = 14 mg/kg

MTRbodem = 14 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = MTRwater*Kp

s6. $Kp = (37.10/2477.6)*1000 = 15 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = $3.3*15 = 4.95E+01 \text{ g}/\text{m}^3$

Output Humanex-resultaten

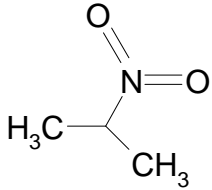
| 1,1,2,2-tetrachloorethaan | TDI ($\mu\text{g}/\text{kg bw}/\text{d}$) | TCA ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--|---|-------------------------------------|---|---|
| | 4.00E+01 | N.A. | NO | | |
| | Surface water ($\mu\text{g}/\text{l}$) | Groundwater ($\mu\text{g}/\text{l}$) | Air ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) | Soil ($\mu\text{g}/\text{kg dwt}$) | Sediment ($\mu\text{g}/\text{kg dwt}$) |
| MPC eco | 3.30E+03 | 3.30E+03 | 5.20E+02 | 1.40E+04 | 1.40E+04 |
| MPC human | 4.71E+02 | 6.02E+01 | 7.42E+01 | 2.99E+02 | 1.82E+10 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 7.01E+00 | 5.48E+01 | 7.01E+00 | 4.69E+01 | 7.69E-07 |
| Critical MPC | 4.71E+02 | 6.02E+01 | 7.42E+01 | 2.99E+02 | 1.40E+04 |
| % importance of total exposure | 46.474 | 0.345 | 53.180 | 0.002 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 52.994 | | | | |

In 2004 is voor lucht een ad hoc norm gerapporteerd van $9.42*10^{+01}$. Dit is waarschijnlijk een overname fout.

Rapportageformulier

194. 2-nitropropan (79-46-9)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 2-nitropropan |
| CAS-nummer | 79-46-9 |
| Stofgroep | neutraal |
| Synoniemen | isonitropropan; dimethylnitropropan |
| Molecuulformule | C ₃ H ₇ N O ₂ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|---------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 89,09 | 5 |
| Smeltpunt (°C) | -91,3 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 120,2 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 2293 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 17000 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 0,93 (exp) | 2 |
| LogKoc | 1,5 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 12,05 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | 7,68 (exp) bij 25 °C | 2 |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 3,16 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-----------------------------|------------|
| experimentele gegevens | RfC: 0,02 mg/m ³ | 9 |
| carcinogeniteit | IARC: 2B | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Brachydanio rerio</i> | 48 | LC50 | 620 | | 11 |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 4,7 | | 7 |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 669 | | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 73 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------------|----|------|------|--|----|
| <i>Daphnia magna</i> | 24 | EC50 | 290 | | 11 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 666 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| <i>Scenedesmus subspicatus</i> | 72 | EC50 | 1088 | | 11 |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 392 | | 4 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 21 | | 4 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. ja; RfC = 0.02 mg/m³

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. nee

s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen → AF = 100

ad hoc MTRwater = 4.7/1000 = 0.0047 mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja; ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 2 (niet hydrofoob) $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 \log K_{ow} = 1.5$

$K_{oc} = 31.9 \rightarrow K_p = 1.87 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodemEP} = 0.0047 * 1.87 = 0.009 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

s6. EUSES: $K_p = 5.07 \text{ E-}03 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = 0.0047 * 5.07 E-03 = 2.4 E-05 g/m³

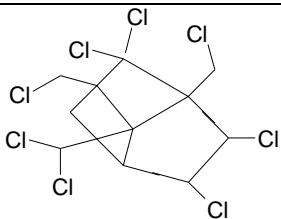
Output Humanex-resultaten

| 2-nitropropan | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 4.70E+00 | 4.70E+00 | 9.16E-01 | 9.00E+00 | 9.00E+00 |
| MPC human | 2.26E-01 | 2.39E-02 | 4.40E-02 | 5.33E-02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.08E+01 | 1.97E+02 | 2.08E+01 | 1.69E+02 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 2.26E-01 | 2.39E-02 | 4.40E-02 | 5.33E-02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 36.771 | 0.189 | 63.038 | 0.001 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 62.842 | | | | |

Rapportageformulier

195. toxafeen (8001-35-2)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | toxafeen |
| CAS-nummer | 8001-35-2 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C10 H9 Cl19 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 448,26 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 77 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 382,58 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 0,0009 (exp) bij 20 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,55 (exp) bij 20 °C | 2 |
| Log Kow | 5,90 (exp) | 2 |
| LogKoc | 3,86 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,61 (exp) bij 20 °C | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 5631 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | 1/10 ⁶ : 9,1 E-07 mg/kg bw /d | 9 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Cyprinodon variegatus</i> | 96 | LC50 | 0,0011 | | 3 |
| <i>Lagodon rhomboides</i> | 96 | LC50 | 0,00053 | | 3 |
| <i>Salvelinus fontinalis</i> | 32 d | NOEC | 0,000039 | | 3 |
| Invertebraten | | | | | |

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| <i>Acartia tonsa</i> | 96 | EC50 | 0,0000072 | | 3 |
| <i>Aedes aegypti (insect)</i> | 24 | LC50 | 0,056 | | 3 |
| <i>Americamysis bahia</i> | 96 | LC50 | 0,027 | | 3 |
| <i>Anodonta imbecilis (moll.)</i> | 96 | LC50 | 0,74 | | 3 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 0,093 | | 4 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 0,082 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Ambystoma maculatum (amphib)</i> | 96 | LC50 | 0,034 | | 3 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhuuman

s1. nee

s2. $1/106 = 9.1E-07$ mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee; s2. ja

s3. ja: AFdoorvergiftiging = 10;

s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen + NOEC voor 2 groepen →
 NOECmin voor vis en LC50min voor kreeft → $LC50min < NOEC min$ →
 ad hoc MTRwater = $LC50min/100 * 10 = 7.2E-09$ mg/l

ad hoc MTRbodern

s1. nee; s2. nee

s6. ja; ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 4 → $\log Koc = 1.09 + 0.47 \log Kow = 3.86$

$Koc = 7295 \rightarrow Kp = 429$ l/kg → ad hoc MTRbodernEP = $7.2E-09 * 429 = 3.09E-06$ mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee; s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

s6. EUSES: $3.1 E-04$ m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = $7.2E-09 * 3.1 E-04 = 2.2 E-12$ g/m³

Output Humanex-resultaten

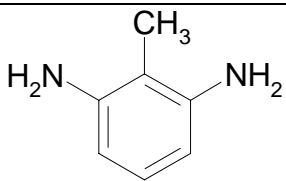
| toxafeen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 9.10E-04 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 7.20E-06 | 7.20E-06 | 4.01E-06 | 3.09E-03 | 3.09E-03 |
| MPC human | 2.67E-05 | 2.63E-06 | 1.49E-05 | 1.12E-03 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.69E-01 | 2.73E+00 | 2.69E-01 | 2.77E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 7.20E-06 | 2.63E-06 | 4.01E-06 | 1.12E-03 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 9.558 | 0.142 | 90.298 | 0.002 | |
| Dominant route of exposure | leaf | | | | |
| % of dominant route | 41.637 | | | | |

De in 2004 gerapporteerde ad hoc norm voor water is gebaseerd op de humane waarde. De reden hiervoor is niet bekend.

Rapportageformulier

196. 2,6-tolueendiamine (823-40-5)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | 2,6-tolueendiamine |
| CAS-nummer | 823-40-5 |
| Stofgroep | aromatische amine |
| Synoniemen | 2,6-diaminotolueen |
| Molecuulformule | C7 H10 N2 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|---------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 122,17 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 106 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 260 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,33 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 72500 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 0,16 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 1,18 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,0006 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 3,16 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 884 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 3,74 | | 4 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | | NOEC | 0,056 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 1,71 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. nee; AF4 = 10

s8. nee

s9. nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee; baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

s1. nee; s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee; s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

ad hoc MTRwater gebaseerd op QSAR's:

LC50 aanwezig voor 3 groepen + NOEC voor 1 groep →

NOECmin voor kreeft en EC50min voor alg →

ad hoc MTRwater = NOECmin/100 = 0.00056 mg/l

ad hoc MTRbodern

ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater *Kp

Sabljic: formule 2 (niet hydrofoob) $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 * \log K_{ow} = 1.10$

$K_{oc} = 12.68 \rightarrow K_p = 0.75 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodernEP} = 0.00056 * 0.75 = 0.0004 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater *Kp

EUSES: $K_p = 2.35 \text{ E-}07 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = $0.00056 * 2.35 \text{ E-}07 = 1.3 \text{ E-}10 \text{ g/m}^3$

Output Humanex-resultaten

| 2,6-tolueenamine | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 5.60E-01 | 5.60E-01 | 6.64E-07 | 4.00E-01 | 4.00E-01 |
| MPC human | 6.90E-01 | 8.03E-03 | 8.18E-07 | 7.21E-03 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 8.11E-01 | 6.97E+01 | 8.11E-01 | 5.54E+01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 5.60E-01 | 8.03E-03 | 6.64E-07 | 7.21E-03 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 99.591 | 0.362 | 0.047 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 98.599 | | | | |

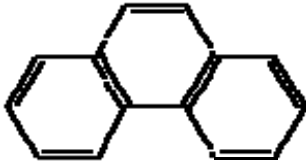
De in 2004 gerapporteerde ad hoc norm voor water is gebaseerd op de humane waarde. De reden hiervoor is niet bekend.

Rapportageformulier

197. fenanthreen (85-01-8)

Voor deze stof zijn MTRwater en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 679101018/1995 (31).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | Fenanthreen |
| CAS-nummer | 85-01-8 |
| Stofgroep | PAK |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C14H10 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 178 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 99 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 340 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0.015 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1.15 | 2 |
| Log Kow | 4.46 | 2 |
| LogKoc | 3.71 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 4.29 | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 40 µg/kg bw/d | 14 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

MTR humaan

TDI = 40 µg/kg bw/d

MTRwater = 0.3 µg/l

MTRsediment = 0.5 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

s6. $K_p = (4.29/2477.6)*1000 = 1.73 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = $0.0003*1.73 = 5.19\text{E-}04 \text{ g}/\text{m}^3$

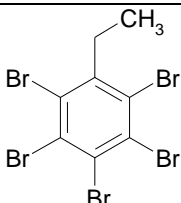
Output Humanex-resultaten

| fenanthreen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 4.00E+01 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.00E-01 | 3.00E-01 | 9.57E-03 | 5.00E-01 | 5.00E-01 |
| MPC human | 2.28E+01 | 1.21E+02 | 7.28E-01 | 3.60E+04 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.31E-02 | 2.49E-03 | 1.31E-02 | 1.39E-05 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 3.00E-01 | 3.00E-01 | 9.57E-03 | 5.00E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 11.053 | 87.075 | 1.624 | 0.249 | |
| Dominant route of exposure | shower | | | | |
| % of dominant route | 67.513 | | | | |

Rapportageformulier

198. pentabroomethyl-benzeen (85-22-3)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | pentabroomethylbenzeen |
| CAS-nummer | 85-22-3 |
| Stofgroep | neutraal |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₈ H ₅ Br ₅ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|----------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 500,65 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 138 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 363,21 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 0,0006 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 0,0467 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 7,48 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 6,16 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 6,39 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 14140 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 0,03 | | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 0,00082 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,004 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 0,004 | | 4 |
| QSAR Green algae | | NOEC | 0,008 | > oplosb. | 4 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. nee

s3. nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee; baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodem op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

Output Humanex-resultaten

| | TDI (µg/kg bw/d) | TCA (µg/m ³) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------|--------------------------------|
| pentabroomethylbenzeen | 2.00E-02 | N.A. | NO | | |
| | Surface water (µg/l) | Groundwater (µg/l) | Air (µg/m ³) | Soil (µg/kg dwt) | Sediment (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 8.20E-03 | 8.20E-03 | 3.21E-04 | 7.00E+02 | 7.00E+02 |
| MPC human | 1.95E-04 | 1.29E-03 | 7.63E-06 | 1.08E+02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 4.21E+01 | 6.36E+00 | 4.21E+01 | 6.49E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.95E-04 | 1.29E-03 | 7.63E-06 | 1.08E+02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 5.889 | 57.668 | 6.752 | 29.691 | |
| Dominant route of exposure | root | | | | |
| % of dominant route | 57.249 | | | | |

Rapportageformulier

199. C10-13 chlooralkanen (85535-84-8)

Voor deze stofgroep is een EU-RAR beschikbaar en voor de compartimenten die niet in de RAR staan wordt geen ad hoc norm afgeleid omdat het een stofgroep betreft.

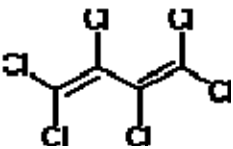
Rapportageformulier

200. hexachloorbutadien (87-68-3)

Voor deze stof is een gedegen MTR bodem afgeleid in RIVM-rapport: 601782002/2007 (32)

Voor deze stof is een gedegen MTR water beschikbaar in de KRW-factsheet.

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | Hexachloorbutadien |
| CAS-nummer | 87-69-3 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C4 Cl6 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 260.76 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -21 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 215 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 29.331 at 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 3.2 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 4.78 | 2 |
| LogKoc | 3.97 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 1043.647 at 20 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---|------------|
| experimentele gegevens | TDI: 0.013 µg/kg bw/d | 9 |
| carcinogeniteit | Group 3: not classifiable as to its carcinogenicity to humans. (IARC). In one animal study a higher % tumours were determined. | 10 12 |
| mutageniteit | In-vitro assays on mutagenicity gave a mixed result | 12 |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 0.09 | | 10 |
| <i>Poecilia reticulata</i> | 14d | LC50 | 0.4 | | 10 |

| | | | | | |
|---------------------------|----|------|-------|--|----|
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Americamysis bahia</i> | 96 | LC50 | 0.059 | | 24 |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

$$1:10E+6 = 1.3E-05 \text{ mg/kg bw/d}$$

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. AFdoorvergiftiging = 5

s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000

$$\text{ad hoc MTRwater} = 0.06/3000 * 5 = 4E-06 \text{ mg/l}$$

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. ja; ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 1 (hydrofoob) $\log K_{oc} = 0.10 + 0.81 \log K_{ow} = 3.97$

$$K_{oc} = 9371 \rightarrow K_p = 551 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodernEP} = 4E-06 * 551 = 0.0022 \text{ mg/kg}$$

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

$$s6. K_p = (1043.39/2477.6) * 1000 = 421 \text{ m}^3/\text{m}^3$$

$$\text{ad hoc MTRluchtEP} = 4E-06 * 421 = 0.0017 \text{ g/m}^3$$

Output Humanex-resultaten

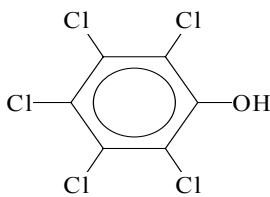
| hexachloorbutadieen | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------------------|-----------------------|-----------------------|--------------------------|--------------------------|
| | ($\mu\text{g/kg bw/d}$) | ($\mu\text{g/m}^3$) | NO | | |
| | 1.30E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | ($\mu\text{g/l}$) | ($\mu\text{g/l}$) | ($\mu\text{g/m}^3$) | ($\mu\text{g/kg dwt}$) | ($\mu\text{g/kg dwt}$) |
| MPC eco | 4.00E-03 | 4.00E-03 | 3.90E-03 | 2.20E+00 | 2.20E+00 |
| MPC human | 1.69E-02 | 1.21E-02 | 1.65E-02 | 6.55E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 2.37E-01 | 3.32E-01 | 2.37E-01 | 3.36E-01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 4.00E-03 | 4.00E-03 | 3.90E-03 | 2.20E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 47.093 | 15.757 | 36.984 | 0.166 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 47.093 | | | | |

Rapportageformulier

201. pentachloorfenol (87-86-5)

Voor deze stof zijn MTRwater en bodem afgeleid in RIVM-rapport: 679101012/1994 (28).

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | Pentachloorfenol |
| CAS-nummer | 87-86-5 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C6 H Cl5 O |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 266.34 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 174 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 309.5 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 1.467E-2 at 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 14 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 5.12 | 2 |
| LogKoc | 2.25 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.002482 at 22 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | 4.7 at 25 °C | 2 |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---|------------|
| experimentele gegevens | Chronic MRL = 0.001 mg/kg/d. based on a LOAEL of 1 mg/kg/day in a multigeneration study; effect on thyroid gland and a decrease in thyroxine concentration. | 12 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------|--|--|--|--|--|
| | | | | | |
| Algen | | | | | |
| | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

ATSDR: chronic MRL = 0.001 mg/kg bw/d

MTRwater = 0.004 mg/l

MTRbodem = 0.17 mg/kg

MTRsediment = 0.31 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater*Kp

s6. $Kp = (0.0025/2477.6)*1000 = 0.001 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = $0.004*0.001 = 4\text{E-}06 \text{ g}/\text{m}^3$

Output Humanex-resultaten

| | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---|------------------------------|------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|
| | ($\mu\text{g}/\text{kg bw}/\text{d}$) | ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) | | | |
| pentachloorfenol | 1.00E+00 | N.A. | | | NO |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | ($\mu\text{g}/\text{l}$) | ($\mu\text{g}/\text{l}$) | ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) | ($\mu\text{g}/\text{kg dwt}$) | ($\mu\text{g}/\text{kg dwt}$) |
| MPC eco | 4.00E+00 | 4.00E+00 | 9.02E-05 | 1.70E+02 | 1.70E+02 |
| MPC human | 1.34E+00 | 1.14E-01 | 3.01E-05 | 1.23E+00 | 1.20E+04 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 3.00E+00 | 3.50E+01 | 3.00E+00 | 1.38E+02 | 1.42E-02 |
| Critical MPC | 1.34E+00 | 1.14E-01 | 3.01E-05 | 1.23E+00 | 1.70E+02 |
| % importance of total exposure | 98.354 | 1.518 | 0.128 | 0.001 | |
| Dominant route of exposure | fish | | | | |
| % of dominant route | 94.147 | | | | |

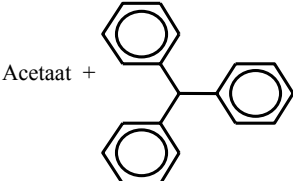
In 2004 is voor lucht een ad hoc norm van $3.07\text{E-}05$ gerapporteerd. Dit is waarschijnlijk een fout.

Rapportageformulier

202. Trifenylinacetaat (900-95-8)

Voor deze stof is een gedegen MTRwater afgeleid, bron: Staatscourant 22-december-2004, nr 247.

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | Trifenylinacetaat |
| CAS-nummer | 900-95-4 |
| Stofgroep | Organotin compound |
| Synoniemen | Fentinacetaat |
| Molecuulformule | C ₂₀ H ₁₈ O ₂ Sn |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|-----------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 409.0 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 121 – 123 | 2 |
| Kookpunt (°C) | | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 1.77E-4 at 30 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 9 at 20 °C and pH = 5 | 2 |
| Log Kow | 3.43 | 2 |
| LogKoc | 2.7 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.0046 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | 1.5 at 20 °C | 2 |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---|------------|
| experimentele gegevens | NOAEL = 5 mg/kg feed in a 2 years study on dogs. NOAEL = 0.1 mg/kg/day in a 2 years study on rats. | 12 12 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

De NOAEL van 0.1 mg/kg/days is lager dan de gebruikte NOAEL (5 mg/kg). Deze lagere waarde is in 2004 niet meegenomen in de afleiding.

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (µg/l) | opmerking | ref. |
|------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Cyprinus carpio</i> | 96 | LC50 | 19 | | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | EC50 | 90 | | 3 |
| Algen | | | | | |

| | | | | | |
|--------------------------------|----|------|----|-------|---|
| <i>Scenedusmus subspicatus</i> | 72 | EC50 | 32 | groei | 3 |
| <i>Scenedusmus subspicatus</i> | 72 | NOEC | 10 | groei | 3 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTR_{humaaan}

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. ja

s7. ja; AF4 = 1

s8. ja; AF5 = 1

s10. overallAF = 10x10x1x1x1 = 100

s11. ja

s12. MTIL = 5/100 = 0.05 mg/kg bw/d

s13. nee → ad hoc MTR = MTIL = 0.05 mg/kg bw/d

s14. ja

s15. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.05 mg/kg bw /d

MTR_{water}

s1. nee; s2. ja

s3. ja; AF_{doorvergiftiging} = 2

s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen basisset + 1 NOEC voor alg

LC50_{min}/1000 = 0.019 µg/l; NOEC_{min}/100 = 0.1 µg/l →

ad hoc MTR_{water} = 1.9 E-04/1000*2 = 9.5 E-08 mg/l

ad hoc MTR_{bodem}

s1. nee; s2. nee

s6. ja; ad hoc MTR_{bodemEP} = MTR_{water}*K_p

s7. Sabljic: formule 4: logK_{oc} = 1.09 + 0.47*logK_{ow} = 2.70 →

K_{oc} = 503.62 → K_p = 29.6 → ad hoc MTR_{bodemEP} = 9.5 E-08*29.6 = 2.8 E-06 mg/kg

ad hoc MTR_{lucht}

s1. nee; s2. nee

s4. ja; ad hoc MTR_{lucht} = ad hoc MTR_{water}*K_p

s6. EUSES: K_p = 1.92 E-06 m³/m³

ad hoc MTR_{luchtEP} = 9.5 E-08*1.92 E-06 = 1.8 E-13 g/m³

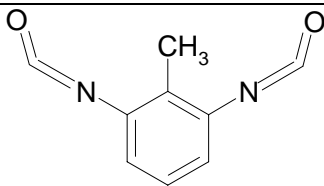
Output Humanex-resultaten

| trifenylnitacetaat | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | 5.00E+01 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 9.50E-05 | 9.50E-05 | 3.72E-09 | 2.80E-03 | 2.80E-03 |
| MPC human | 7.93E+02 | 1.24E+02 | 3.10E-02 | 3.67E+03 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.20E-07 | 7.65E-07 | 1.20E-07 | 7.63E-07 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 9.50E-05 | 9.50E-05 | 3.72E-09 | 2.80E-03 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 87.709 | 10.954 | 1.320 | 0.017 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 45.289 | | | | |

De Humanex output komt niet overeen met de in 2004 vastgestelde ad hoc norm voor bodem.

Rapportageformulier 203. 2,6-toluendiisocyaan (91-08-7)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | 2,6-toluendiisocyaan |
| CAS-nummer | 91-08-7 |
| Stofgroep | isocyaan |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₉ H ₆ N ₂ O ₂ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 174,16 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 18,3 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 227,05 | 5 |
| Dampdruk (Pa) | 2,79 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 37,6 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Log Kow | 3,74 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 3.13 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 12.9 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 151 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|----------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | IARC: 2B | 10 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 164 | | 10 |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Vibrio fisheri</i> | 30 min | EC50 | 41,8 | | 7 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaaan

- s1. nee
- s2. nee
- s3. ja
- s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10
- s5. ja; AF3 = 1
- s6. nee; AF4 = 10
- s8. nee
- s9 nee; MTIL = 0.02 µg/kg bw/d
- s14. ja
- s15. ja
- s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

- s1. nee
- s2. ja
- s3. ja; AFdoorvergiftiging = 2
- s4. LC50 aanwezig voor 1 groep → AF = 10000
ad hoc MTRwater = $164/10000*2 = 0.008$ mg/l

ad hoc MTRbodern

- s1. nee
- s2. nee
- s6. ja; ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater *Kp
- s7. Sabljic: formule 1 (hydrofoob) $\log K_{oc} = 0.10 + 0.81 \log K_{ow} = 3.13$
 $K_{oc} = 1347 \rightarrow K_p = 79.2$ l/kg → ad hoc MTRbodernEP = $0.008 * 79.2 = 0.63$ mg/kg

ad hoc MTRlucht

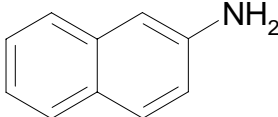
- s1. nee
- s2. nee
- s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater *Kp
- s6. EUSES: $K_p = 5.45 \text{ E-}03 \text{ m}^3/\text{m}^3$
ad hoc MTRluchtEP = $0.008 * 5.45 \text{ E-}03 = 4.4 \text{ E-}05$ g/m³

Output Humanex-resultaten

| 2,6-tolueendiisocyaan | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|--------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 8.00E+00 | 8.00E+00 | 6.07E-01 | 6.30E+02 | 6.30E+02 |
| MPC human | 6.29E-02 | 1.38E-01 | 4.77E-03 | 1.09E+01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.27E+02 | 5.78E+01 | 1.27E+02 | 5.80E+01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 6.29E-02 | 1.38E-01 | 4.77E-03 | 1.09E+01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 14.884 | 77.181 | 7.806 | 0.129 | |
| Dominant route of exposure | shower | | | | |
| % of dominant route | 50.010 | | | | |

Rapportageformulier 204. 2-naftaleenamine (91-59-8)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | 2-naftaleenamine |
| CAS-nummer | 91-59-8 |
| Stofgroep | aromatische amine |
| Synoniemen | 2-naftylamine |
| Molecuulformule | C ₁₀ H ₉ N |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 143,19 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 113 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 300 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,034 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 6,4 (exp) bij 18 °C | 2 |
| Log Kow | 2,28 (exp) | 2 |
| LogKoc | 1,95 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0,0082 (exp) bij 25 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | 4,16 (exp) bij 25 °C | 2 |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 11,37 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-----------------------------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | IARC: 1 | 7 |
| mutageniteit | invtro en in vivo: positief | 7 |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 27,73 | | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 0,16 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,82 | | 4 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | | NOEC | 0,02 | | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | | NOEC | 2,54 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. nee; AF4 = 10

s8. nee

s9. nee; ad hoc MTRhumaan = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja; s15. ja

s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. nee; baseer ad hoc MTRwater op humane tox

ad hoc MTRbodern

s1. nee; s2. nee

s6. nee → baseer ad hoc MTRbodern op humane tox

ad hoc MTRlucht

s1. nee; s2. nee

s4. nee → baseer ad hoc MTRlucht op humane tox

ad hoc MTRwater gebaseerd op QSAR's:

LC50 aanwezig voor 2 groepen → AF = 3000

ad hoc MTRwater = 0.82/3000 = 0.0003 mg/l

NOEC aanwezig voor 2 groepen → AF = 300

ad hoc MTRwater = 0.02/300 = 0.0001 mg/l

ad hoc MTRbodern

ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater * Kp

Sabljić: formule 1 (hydrofoob) $\log K_{oc} = 0.10 + 0.81 \log K_{ow} = 1.95$

$K_{oc} = 88.5 \rightarrow K_p = 5.2 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodernEP} = 0.0001 * 5.2 = 0.0005 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

$K_p = (0.0082/2477.6) * 1000 = 0.003 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = 0.0001 * 0.003 = 3.3E-07 g/m³

Output Humanex-resultaten

| 2-naftaleenamine | TDI | TCA | | Corrected for TCA: | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|--------------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | NO | |
| | 2.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 1.00E-01 | 1.00E-01 | 5.95E-06 | 5.00E-01 | 5.00E-01 |
| MPC human | 5.40E-01 | 3.00E-02 | 3.22E-05 | 1.65E-01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.85E-01 | 3.34E+00 | 1.85E-01 | 3.03E+00 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.00E-01 | 3.00E-02 | 5.95E-06 | 1.65E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 98.173 | 1.229 | 0.596 | 0.002 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 77.211 | | | | |

De Humanex output komt niet overeen met de in 2004 vastgestelde ad-hocnormen voor water en bodern.

Rapportageformulier

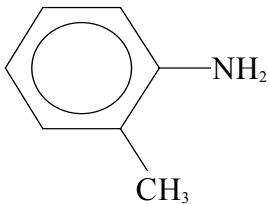
205. 3,3'-dichloorbenzidine (91-94-1)

Voor deze stof is voor alle drie compartimenten een gedegen MTR afgeleid in RIVM-rapport: 601782003/2007 (26)

Rapportageformulier

206. 2-methylbenzeenamine (95-53-4)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | 2-methylbenzeenamine |
| CAS-nummer | 95-53-4 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | o-toluidine |
| Molecuulformule | C7 H9 O |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 107.16 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -16.3 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 200.3 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 34.66 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 1.66E+4 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 1.32 | 2 |
| LogKoc | 1.71 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 0.2006 at 25 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | 998400 | 19 |
| pKa | 4.44 at 25 °C | 2 |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-----------------------|------------|
| BCF | 2.4 | 19 |
| (Aerobe bio)degradatie | Readily biodegradable | 19 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-------------------------|------------|
| experimentele gegevens | MTIL = 0.02 µg/kg bw/d. | 10 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|--------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Cyprinidae</i> | 48 h | LC50 | 78,5 | | 3 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 h | LC50 | 0,31 | | 3 |
| Algen | | | | | |
| <i>Scenedesmus subspicatus</i> | 96 h | EC50 | 3,70 | | 3 |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee; s2. nee; s3. ja

s4. nee; AF1 = 10; AF2 = 10

s5. ja; AF3 = 1

s6. ja

s7. ja; AF4 = 1

s8. nee

s9. nee → MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

s14. ja

s15. ja

s16. nee; ad hoc MTR = MTIL = 0.02 µg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee; s2. ja

s3. ja; AFdoorvergiftiging = 0

s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen → AF = 1000

ad hoc MTRwater = 0.31/1000 = 0.0003 mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee; s2. nee

s6. ja; ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 2 (niet hydrofoob) $\log K_{oc} = 1.02 + 0.52 * \log K_{ow} = 1.71$

$K_{oc} = 50.9 \rightarrow K_p = 2.99 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodemEP} = 0.0003 * 2.99 = 0.0009 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht

s1. nee; s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

s6. $K_p = (0.20/2477.6) * 1000 = 0.081 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = 0.0003 * 0.081 = 2.4E-05 g/m³

Output Humanex-resultaten

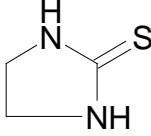
| 2-methylbenzeenamine | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 3.00E-01 | 3.00E-01 | 3.90E-04 | 9.00E-01 | 9.00E-01 |
| MPC human | 6.55E-01 | 0.00E+00 | 8.51E-04 | 1.60E-02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 4.58E-01 | #DIV/0! | 4.58E-01 | 5.61E+01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 3.00E-01 | 0.00E+00 | 3.90E-04 | 1.60E-02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 98.525 | 0.000 | 1.474 | 0.000 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 93.590 | | | | |

De Humanex output komt niet overeen met de in 2004 vastgestelde ad-hocnormen voor water en bodem.

Rapportageformulier

207. ethylethioureum (96-45-7)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | ethylethioureum |
| CAS-nummer | 96-45-7 |
| Stofgroep | neutraal? |
| Synoniemen | 2-imidazolidinethione; ETU 4,5-dihydroimidazole-2(3H)-thione |
| Molecuulformule | C3 H6 N2 S |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 102,16 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 203 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 347,18 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 0,0003 (exp) bij 25°C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 20000 (exp) bij 30 °C | 2 |
| Log Kow | -0,66 (exp) | 2 |
| LogKoc | 2,07 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 1,5 E-06 (geschat) bij 25 °C | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|------------------|------------|
| BCF | 3,15 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | goed afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|-----------------------|------------|
| experimentele gegevens | RfD= 8 E-5 mg/kg bw/d | 9 |
| carcinogeniteit | IARC: 2B | 7 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|---------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Creek chub</i> | 24 | LC50 | 7000 | | 7 |
| QSAR vissen | 96 | LC50 | 23696 | | 4 |
| QSAR vissen | 30 d | NOEC | 2011 | | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 26,4 | | 3 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 21372 | | 4 |
| Algen | | | | | |

| | | | | | |
|------------------------------|--------|------|-------|--|---|
| <i>Chlorella pyrenoidosa</i> | 96 | EC50 | 6600 | | 3 |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 11464 | | 4 |
| QSAR Green algae | 96 | NOEC | 246 | | 4 |
| andere organismen | | | | | |
| <i>Vibrio fisheri (bact)</i> | 15 min | EC50 | 2080 | | 7 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaaan

s1. nee

s2. RfD = 8E-05 mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. nee

s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen → AF = 1000

ad hoc MTRwater = 26.4/1000 = 0.026 mg/l

ad hoc MTRbodern

s1. nee

s2. nee

s6. ja; ad hoc MTRbodernEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: logKoc = 2.07 (artikel)

Koc = 117.5 → Kp = 6.9 l/kg → ad hoc MTRbodernEP = 0.026 * 6.9 = 0.18 mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

s6. EUSES: Kp = 6.47 E-10 m³/m³

ad hoc MTRluchtEP = 0.026 * 6.47 E-10 = 1.7 E-11 g/m³

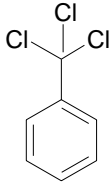
Output Humanex-resultaten

| ethyleenthioureum | TDI | TCA | | Corrected for TCA: | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|--------------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | NO | |
| | 8.00E-02 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 2.60E+01 | 2.60E+01 | 6.52E-08 | 1.80E+02 | 1.80E+02 |
| MPC human | 2.75E+00 | 1.07E-01 | 6.89E-09 | 7.68E-01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 9.46E+00 | 2.44E+02 | 9.46E+00 | 2.34E+02 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 2.75E+00 | 1.07E-01 | 6.89E-09 | 7.68E-01 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 98.985 | 1.013 | 0.000 | 0.002 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 98.132 | | | | |

Rapportageformulier

208. trichloormethylbenzeen (98-07-7)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | trichloormethylbenzeen |
| CAS-nummer | 98-07-7 |
| Stofgroep | benzyl halide |
| Synoniemen | benzotrichloride; alpha,alpha, alpha-trichloortolueen; benzoic-trichloride; fenylchloroform; benzenyltrichloride- |
| Molecuulformule | C7 H5 Cl3 |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|------------------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 195,48 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | -5 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 221 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 55 (geschat) bij 25 °C | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 53 (exp) bij 5 °C | 2 |
| Log Kow | 3,90 (geschat) | 2 |
| LogKoc | 3,26 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 203 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------------------|------------|
| BCF | 200 | 5 |
| (Aerobe bio)degradatie | slecht afbreekbaar | 5 |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---------|------------|
| experimentele gegevens | | |
| carcinogeniteit | 1/10E+6 | 9 |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Carassius auratus</i> | 48 | LC50 | 40 | | 7 |
| QSAR <i>vissen</i> | 96 | LC50 | 0,18 | clogp | 4 |
| Invertebraten | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 24 | EC50 | 50 | | 11 |
| QSAR <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 0,18 | clogp | 4 |
| Algen | | | | | |
| QSAR Green algae | 96 | EC50 | 0,18 | clogp | 4 |
| <i>Microcystus aeruginosa</i> | 8 d | NOEC | 34 | | 11 |

| | | | | |
|--------------------------------------|--------|------|------|----|
| andere organismen | | | | |
| <i>Chilomonas paramaecium</i> (prot) | 48 | NOEC | 27 | 11 |
| <i>Entosiphon sulcatum</i> (prot) | | NOEC | 56 | 7 |
| <i>Vibrio fisheri</i> (bact) | 15 min | EC50 | 17,8 | 7 |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan

s1. nee

s2. $1/106 = 8E-08$ mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater

s1. nee

s2. ja

s3. ja; AFdoorvergiftiging = 2

s4. LC50 aanwezig voor 2 groepen \rightarrow AF = 3000 \rightarrow ad hoc MTRwater = $40/6000 = 0.0067$ mg/l

NOEC aanwezig voor 1 groep \rightarrow AF = 1000 \rightarrow ad hoc MTRwater = $34/2000 = 0.017$ mg/l

ad hoc MTRbodem

s1. nee

s2. nee

s6. ja; ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * Kp

s7. Sabljic: formule 1 (hydrofoob) $\log K_{oc} = 0.10 + 0.81 \log K_{ow} = 3.26$

Koc = 1816 \rightarrow Kp = 107 l/kg \rightarrow ad hoc MTRbodemEP = $0.0067 * 107 = 0.72$ mg/kg

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

s6. EUSES: Kp = $0.0825 \text{ m}^3/\text{m}^3$

ad hoc MTRluchtEP = $0.0067 * 0.0825 = 0.0006$ g/m³

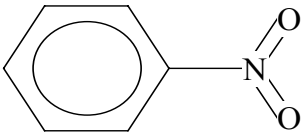
Output Humanex-resultaten

| trichloormethylbenzeen | TDI ($\mu\text{g}/\text{kg}$ bw/d) | TCA ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---|---|-------------------------------------|--|--|
| | 8.00E-05 | N.A. | NO | | |
| | Surface water ($\mu\text{g}/\text{l}$) | Groundwater ($\mu\text{g}/\text{l}$) | Air ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) | Soil ($\mu\text{g}/\text{kg}$ dwt) | Sediment ($\mu\text{g}/\text{kg}$ dwt) |
| MPC eco | 1.70E+01 | 1.70E+01 | 1.16E+01 | 7.20E+02 | 7.20E+02 |
| MPC human | 2.19E-04 | 2.06E-04 | 1.49E-04 | 2.17E-02 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 7.78E+04 | 8.24E+04 | 7.78E+04 | 3.32E+04 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 2.19E-04 | 2.06E-04 | 1.49E-04 | 2.17E-02 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 17.692 | 28.163 | 54.079 | 0.066 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 53.362 | | | | |

Rapportageformulier

209. nitrobenzeen (98-95-3)

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|--|
| Stofnaam | Nitrobenzeen |
| CAS-nummer | 98-95-3 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | |
| Molecuulformule | C ₆ H ₅ N O ₂ |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|---------------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 123.11 | 2 |
| Smeltpunt (°C) | 5.7 | 2 |
| Kookpunt (°C) | 210.8 | 2 |
| Dampdruk (Pa) | 32.66 | 2 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 2090 at 25 °C | 2 |
| Log Kow | 1.85 | 2 |
| LogKoc | 1.6 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 2.43 at 25 °C | 2 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--|------------|
| experimentele gegevens | RfD = 5E-4 mg/kg/day based on a LOAEL of 5 mg/kg /day in a subchronic inhalation study. Effects: hematologic, adrenal, hepatic and renal lesions. | 9 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|----------------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| <i>Pimephales promelas</i> | 96 | LC50 | 105 | | 10 |
| <i>Oryzias latipes</i> | 48 | LC50 | 1.8 | | 3 |
| Invertebraten | | | | | |

| | | | | | |
|------------------------------|----|------|------|--|----|
| <i>Daphnia magna</i> | 48 | LC50 | 27 | | 10 |
| <i>Americamysis bahia</i> | 96 | LC50 | 6.68 | | 3 |
| Algen | | | | | |
| <i>Chlorella pyrenoidosa</i> | 96 | EC50 | 18 | | 3 |
| andere organismen | | | | | |
| | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTRhumaan
RfD = 0.0005 mg/kg bw/d

ad hoc MTRwater
s1. nee
s2. ja
s3. nee
s4. LC50 aanwezig voor 3 groepen → AF = 1000
ad hoc MTRwater = 1.8/1000 = 0.0018 mg/l

ad hoc MTRbodem
s1. nee
s2. nee
s6. ja; ad hoc MTRbodemEP = ad hoc MTRwater * Kp
Sabljić: formule 1 (hydrofoob) $\log K_{oc} = 0.10 + 0.81 * \log K_{ow} = 1.60$
 $K_{oc} = 39.7 \rightarrow K_p = 2.33 \text{ l/kg} \rightarrow \text{ad hoc MTRbodemEP} = 0.0018 * 2.33 = 0.0042 \text{ mg/kg}$

ad hoc MTRlucht
s1. nee
s2. nee
s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp
s6. $K_p = (2.43/2477.6) * 1000 = 0.98 \text{ m}^3/\text{m}^3$
ad hoc MTRluchtEP = 0.0018 * 0.98 = 0.0018 g/m³

Output Humanex-resultaten

| nitrobenzeen | TDI | TCA | | Corrected for TCA: | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|--------------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | | NO | |
| | 5.00E-01 | N.A. | | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 1.80E+00 | 1.80E+00 | 2.82E-02 | 4.20E+00 | 4.20E+00 |
| MPC human | 1.32E+01 | 1.77E+00 | 2.06E-01 | 1.04E+01 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 1.37E-01 | 1.01E+00 | 1.37E-01 | 4.06E-01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 1.80E+00 | 1.77E+00 | 2.82E-02 | 4.20E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 87.274 | 0.649 | 12.073 | 0.005 | |
| Dominant route of exposure | drw | | | | |
| % of dominant route | 75.157 | | | | |

De Humanex output komt niet overeen met de in 2004 vastgestelde ad-hocnormen voor lucht, water en bodem.

eRapportageformulier**210. PCDFs**

Voor stofgroepen zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier**211. PCDD's**

Voor stofgroepen zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier**212. PCB's**

Voor stofgroepen zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier**Polybroomdibenzodioxines**

Voor stofgroepen zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier**Polybroomdibenzofuranen**

Voor stofgroepen zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier**Polyhalogeen-dibenzodioxines**

Voor stofgroepen zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier**Polyhalogeen-dibenzofuranen**

Voor stofgroepen zijn geen ad-hocnormen afgeleid.

Rapportageformulier**Acrilonitrile**

Voor deze stof is een EU-RAR beschikbaar. Voor deze stof is een gedegen MTRwater bodem en lucht afgeleid in RIVM-rapport 679101011 (27).

Rapportageformulier**Benzeen**

Voor deze stof is een EU-RAR beschikbaar. Voor deze stof is een gedegen MTRwater bodem en lucht afgeleid in RIVM-rapport 679101011 (27).

Rapportageformulier**1,2-dichloorethaan**


Voor deze stof is een EU-RAR beschikbaar. Voor deze stof is een gedegen MTRwater bodem en lucht afgeleid in RIVM-rapport 679101011 (27).

Rapportageformulier

1,2-epoxypropaan (75-56-9)

Voor deze stof is een EU-RAR beschikbaar.

1. IDENTITEIT

| | |
|------------------|---|
| Stofnaam | 1,2-epoxypropaan |
| CAS-nummer | 75-56-9 |
| Stofgroep | |
| Synoniemen | propylene oxide |
| Molecuulformule | C ₃ H ₆ O |
| Structuurformule |  |

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|--|--------|------------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 58.08 | 16 |
| Smeltpunt (°C) | -112 | 16 |
| Kookpunt (°C) | 34 | 16 |
| Dampdruk (Pa) | 70930 | 16 |
| Oplosbaarheid in water (mg/l) | 405000 | 16 |
| Log Kow | 0.23 | 16 |
| LogKoc | 1.477 | 17 |
| Henry-coëfficiënt (Pa.m ³ /mol) | 10.2 | 18 |
| Relatieve dichtheid (g/m ³) | | |
| pKa | | |

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|--------|------------|
| BCF | | |
| (Aerobe bio)degradatie | | |

4. TOXICITEIT

4.1 Gezondheidseffecten

| Eigenschap | Waarde | Referentie |
|------------------------|---|------------|
| experimentele gegevens | OSF: 0.24 mg/kg bw/d RfC: 0.03 mg/m ³ | 9 9 |
| carcinogeniteit | | |
| mutageniteit | | |

4.2 Ecotoxiciteit

| species | duur (uur) | parameter | waarde (mg/l) | opmerking | ref. |
|-------------------|------------|-----------|---------------|-----------|------|
| Vissen | | | | | |
| Invertebraten | | | | | |
| Algen | | | | | |
| andere organismen | | | | | |

5. AFLEIDING AD HOC MTR via stappenschema

ad hoc MTR humaan

$$RfC = 0.03 \text{ mg/m}^3$$

$$OSF = 0.24 \text{ mg/kg bw/d}; 1/10E+6 = 2.17E-04 \text{ mg/kg bw/d}$$

ad hoc MTRwater

$$PNEC_{\text{water}} = 0.052 \text{ mg/l}$$

$$PNEC_{\text{bodemp}} = 0.0165 \text{ mg/kg}$$

bron: EU-RAR

ad hoc MTRlucht

s1. nee

s2. nee

s4. ja; ad hoc MTRluchtEP = ad hoc MTRwater * Kp

$$s6. Kp = (10.2/2477.6) * 1000 = 4.12 \text{ m}^3/\text{m}^3$$

$$\text{ad hoc MTRluchtEP} = 0.052 * 4.12 = 0.214 \text{ g/m}^3$$

Output Humanex-resultaten

| 1,2-epoxypropan | TDI | TCA | Corrected for TCA: | | |
|---------------------------------------|---------------|----------------------|----------------------|-------------|-------------|
| | (µg/kg bw/d) | (µg/m ³) | NO | | |
| | Surface water | Groundwater | Air | Soil | Sediment |
| | (µg/l) | (µg/l) | (µg/m ³) | (µg/kg dwt) | (µg/kg dwt) |
| MPC eco | 5.20E+01 | 5.20E+01 | 6.11E+01 | 1.65E+01 | 1.65E+01 |
| MPC human | 5.94E-01 | 2.88E-01 | 6.98E-01 | 1.64E+00 | 0.00E+00 |
| Ratio MPC eco/MPC human | 8.75E+01 | 1.81E+02 | 8.75E+01 | 1.01E+01 | #DIV/0! |
| Critical MPC | 5.94E-01 | 2.88E-01 | 6.98E-01 | 1.64E+00 | 0.00E+00 |
| % importance of total exposure | 8.837 | 0.203 | 90.959 | 0.002 | |
| Dominant route of exposure | air | | | | |
| % of dominant route | 90.652 | | | | |

De Humanex output komt niet overeen met de in 2004 vastgestelde ad-hocnormen voor lucht, water en bodem.

Rapportageformulier

Vinylchloride

Voor deze stof is een EU-RAR beschikbaar. Voor deze stof is een gedegen MTRwater bodem en lucht afgeleid in RIVM-rapport 679101011 (27).

Referenties

1. CHEMFATE, Environmental Fate Database (Syracuse Research Corp.)
<http://www.syrres.com/esc/chemfate.htm>
2. PHYSPROP. Physical properties database (Syracuse Research Corp.)
<http://www.syrres.com/esc/physdemo.htm>
3. ECOTOX, Aquatic toxicity database (US EPA).
http://www.epa.gov/cgi-bin/ecotox_quick_search
4. ECOSAR, QSAR based aquatic toxicity database (US EPA).
<http://www.epa.gov/oppt/newchems/21ecosar.htm>
5. EPIWIN, US EPA, (Syracuse Research Corp.)
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/docs/episuitedi.htm>
6. MEDCHEM, database for experimental (logPstar) and QSAR based logKow.
<http://www.daylight.com/cgi-bin/contrib/pmodels.cgi>
7. DOSE- Dictionaire of Substances and their Effects. The Royal Society of Chemistry (CD-ROM).
8. MERCK index, An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Published by Merck & Co., Inc. Rahway. N.J. USA.
9. IRIS, Integrated Risk Information System for carcinogenicity and reference doses. US National Library of Medicine
<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?IRIS>
10. HSDB, Hazardous Substances Database, US National Library of Medicine
<http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>
11. IUCLID, International Uniform Chemical Information system
<http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/>
12. ATSDR. Agency for Toxic Substances and Disease Registry. Minimal Risk Levels (MRLs) for hazardous substances
<http://www.atsdr.cdc.gov/mrls.html>
13. Stoffen en Normen. Overzicht van belangrijke stoffen en normen in het milieubeleid. 1999. Directoraat-Generaal Milieubeheer, Ministerie van Volkshuisvesting, Ruimtelijke Ordening en Milieubeheer. Samson, Alphen aan de Rijn.
14. Baars AJ, Theelen RMC, Janssen PJCM, Hess JM, van Apeldoorn ME, Meijerink MCM, Verdam L, Zeilmaker MJ. 2001. Re-evaluation of human-toxicological maximum permissible risk levels. RIVM report 711701 025.
15. INS, Normen afgeleid voor stoffen in het kader van project Integrale Normstelling Stoffen, <http://www.rivm.nl/stoffen-risico/NL/index.html>
16. Mackay D, Shiu WY, Ma KC. Physical-chemical properties and environmental fate handbook Chapman & Hall/CRCnetBASE 2000. (CD-ROM)
17. Sabljic A, Güsten H, Verhaar H, Hermens J. 1995. QSAR modelling of soil sorption. Improvements and systematics of logKoc vs. logKow correlations. Chemosphere 31 (11/12):4489-4515.
18. EUSES 1.00. European Union System for the evaluation of Substances.
19. SIDS, Chemicals Screening Information Datasets for high Volume Chemicals
<http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/OECD/SIDS/indexcasnumb.htm>

20. Mayer FL Jr, Ellersieck MR. 1986. Manual of acute toxicity: Interpretation and Database for 410 chemicals and 66 species of freshwater animals. United States Department of the Interior, Fish and Wildlife Service, Resource Publication 160. Washington D.C.
21. The Agrochemical Handbook. The Royal Society of Chemistry, Thomas Graham House, Science Park, Milton Road, Cambridge CB4 4WF England.
22. EU RAR, risk assessment report European Chemical Bureau (ECB)
<http://ecb.jrc.it/existing-chemicals/>
23. Product factsheet Bayer, <http://www.bayer.com>
24. Stof specifieke factsheet voor de kaderlichtlijn water
25. Slooff W, Bont PFH, Hesse JM, van der Poel P. 1996. Exploratory Report Chlorotoluenes. RIVM rapport 601503004.
26. Van Vlaardingen PLA, de Poorter LRM, Fleuren RHLJ, Janssen PJCM, Posthuma-Doodeman CJAM, Verbruggen EMJ, Vos JH. 2007 Environmental risk limits for twelve substances, prioritised on the basis of indicative risk limits. RIVM rapport 601782003.
27. Van de Plassche EJ, Bockting GJM. 1993 Towards integrated environmental quality objectives for several volatile compounds. RIVM rapport 679101011.
28. Van de Plassche EJ. Towards integrated environmental quality objectives for several compounds with a potential for secondary poisoning. 1994. RIVM Rapport 679101012.
29. Crommentuijn T, Kalf DF, Polder MD, Posthumus R, van de Plassche EJ. 1997. Maximum Permissible Concentrations and Negligible Concentrations for pesticides. RIVM rapport 601501002.
30. Crommentuijn T, Polder MD, van de Plassche EJ. 1997. Maximum Permissible Concentrations and Negligible Concentrations for metals, taking background concentrations into account. RIVM rapport 601501001.
31. Kalf DF, Crommentuijn GH, Posthumus R, van de Plassche EJ. 1995. Integrated Environmental Quality Objectives for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs). RIVM rapport 679101018.
32. Jong FMW de, Posthuma-Doodeman CJAM, Verbruggen EMJ. 2007. Ecotoxicologically based environmental risk limits for several volatile aliphatic hydrocarbons. RIVM rapport 601782002.

Uitvoer EUSES

Onderstaande tabel geeft per stof een overzicht van de met EUSES berekende PEC waarden die voor het HUMANEX model zijn gebruikt.

| | CAS-nr | stof | PECreg-water (dissolved) mg/l | PECreg-air mg/m ³ | PECreg-agric,soil mg/kgwwt | PECreg-agric,porew mg/l |
|----|------------|--------------------------|-------------------------------|------------------------------|----------------------------|-------------------------|
| 51 | 100-44-7 | chloormethylbenzeen | 3.98E-04 | 1.38E-04 | 1.04E-04 | 5.98E-05 |
| 52 | 100-63-0 | fenylhydrazine | 0.232 | 2.3E-10 | 4.47E-03 | 4.74E-03 |
| 53 | 101-20-2 | triclocarban | 0.0971 | 8.7E-07 | 2.36 | 0.054 |
| 54 | 10124-43-3 | kobaltsulfaat | | | | |
| 55 | 10190-55-3 | loodmolybdaat | | | | |
| 56 | 106-89-8 | chloormethoxyoxiraan | 2.72E-03 | 1.74E-04 | 1.2E-04 | 2.76E-04 |
| 57 | 106-93-4 | 1,2-dibroomethaan | 2.69E-04 | 1.81E-04 | 2.85E-05 | 2.31E-05 |
| 58 | 106-99-0 | 1,3-butadiene | 1.65E-05 | 5.60E-04 | 2.52E-07 | 8.02E-08 |
| 59 | 107-20-0 | chlooracetaldehyde | 2.31E-05 | 1.77E-04 | 4.21E-05 | 1.30E-04 |
| 60 | 107-22-2 | ethaandial | 1.21E-03 | 3.45E-04 | 1.01E-04 | 7.06E-04 |
| 61 | 108-70-3 | 1,3,5-trichloorbenzeen | 1.76E-04 | 1.21E-04 | 0.0147 | 2.67E-04 |
| 62 | 109-86-4 | 2-methoxyethanol | 0.0125 | 1.43E-04 | 2.75E-04 | 1.94E-03 |
| 63 | 110-49-6 | 2-methoxyethylacetaat | 0.0537 | 2.47E-05 | 1.27E-03 | 3.75E-03 |
| 64 | 110-80-5 | 2-ethoxyethanol | 0.0103 | 1.25E-04 | 1.89E-03 | 0.012 |
| 65 | 111-15-9 | 2-ethoxyethylacetaat | 0.0318 | 8.86E-05 | 2.97E-04 | 1.33E-03 |
| 66 | 115-32-2 | dicofol | 0.0861 | 2.53E-05 | 2.78 | 0.0559 |
| 67 | 118-74-1 | hexachloorbenzeen | 7.33E-04 | 3.04E-04 | 4.41 | 4.53E-03 |
| 68 | 120-82-1 | 1,2,4-trichloorbenzeen | 1.98E-04 | 1.21E-04 | 0.0114 | 2.85E-04 |
| 69 | 121-14-2 | 2,4-dinitrotolueen | 0.181 | 3.64E-06 | 0.019 | 8.57E-03 |
| 70 | 122-14-5 | fenitrothion | 0.0853 | 5.38E-05 | 0.106 | 0.0135 |
| 71 | 123-31-9 | hydrochinon | 0.232 | 1.81E-09 | 1.32E-03 | 2.95E-03 |
| 72 | 123-73-9 | 2-butanal | 3.9E-03 | 1.7E-04 | 2.23E-04 | 4.36E-04 |
| 73 | 127-19-5 | N,N-dimethylacetaat | 0.0612 | 5.56E-11 | 5.21E-03 | 0.0177 |
| 74 | 1303-28-2 | arsenpentoxide | | | | |
| 75 | 1304-56-9 | berylliumoxide | | | | |
| 76 | 1306-23-6 | cadmiumsulfide | | | | |
| 77 | 1313-99-1 | nikkeloxide | | | | |
| 78 | 1314-06-3 | dinikkeltrioxide | | | | |
| 79 | 1314-64-8 | vanadiumpentoxide | | | | |
| 80 | 1321-64-8 | pentachloornaftaleen | 2.12E-03 | 2.18E-04 | 211 | 0.0318 |
| 81 | 1321-65-9 | trichloornaftaleen | 7.74E-04 | 3.04E-04 | 2.79 | 4.74E-03 |
| 82 | 1327-53-3 | arseentrioxide | | | | |
| 83 | 1333-82-0 | chromoxide | | | | |
| 84 | 133-49-3 | pentachloorbenzeenthiool | 1.25E-03 | 2.86E-04 | 31.3 | 0.0214 |
| 85 | 1335-32-6 | loodacetaat | | | | |
| 86 | 1335-87-1 | hexachloornaftaleen | 7.95E-04 | 2.46E-04 | 146 | 7.33E-03 |
| 87 | 1335-88-2 | tetrachloornaftaleen | 4.34E-03 | 2.29E-04 | 85.5 | 0.069 |
| 88 | 1336-36-3 | PCB's | | | | |
| 89 | 13463-39-3 | tetracarbonylnikkel | | | | |
| 90 | 140-66-9 | para-tert-octylfenol | 0.0106 | 2.24E-04 | 25 | 0.0842 |
| 91 | 143-50-0 | chloordecon | 0.0908 | 2.18E-06 | 5.7 | 0.0752 |
| 92 | 14977-61-8 | chromylchloride | | | | |
| 93 | 151-56-4 | aziridine | 1.78E-03 | 3.42E-04 | 2.28E-04 | 1.18E-03 |

| | CAS-nr | stof | PECreg- water (dissolved) mg/l | PECreg- air mg/m ³ | PECreg- agric,soil mg/kgwwt | PECreg- agric,porew mg/l |
|-----|------------|--|---|-------------------------------------|-----------------------------------|--------------------------------|
| 94 | 1582-09-8 | trifluraline | 4.1E-03 | 2.83E-04 | 1.59 | 0.0226 |
| 95 | 1589-47-5 | 2-methoxypropanol | 0.0466 | 4.59E-05 | 3.62E-04 | 2.29E-03 |
| 96 | 16812-54-7 | nikkelsulfide | | | | |
| 97 | 1825-21-4 | pentachlooranisol | 6.03E-04 | 3.08E-04 | 0.611 | 1.06E-03 |
| 98 | 1836-75-5 | nitrofen | 3.32E-03 | 2.74E-04 | 9.35 | 0.0399 |
| 99 | 18540-29-9 | chrom(VI)verbindingen | | | | |
| 100 | 189-55-9 | dibenzo[a,i]pyreen | 7.72E-03 | 3.75E-06 | 480 | 0.027 |
| 101 | 189-64-0 | dibenzo[a,h]pyreen | 7.71E-03 | 4.19E-06 | 480 | 0.0269 |
| 102 | 1912-24-9 | atrazine | 0.107 | 2.39E-07 | 0.0407 | 0.0108 |
| 103 | 191-24-2 | benzo[g,h,i]peryleen | 0.0201 | 7.28E-06 | 354.0 | 0.0679 |
| 104 | 191-30-0 | dibenzo[a,l]pyreen | 3.75E-03 | 4.44E-06 | 521 | 0.0133 |
| 105 | 192-65-4 | dibenzo[a,e]pyreen | 7.71E-03 | 4.98E-06 | 479 | 0.0272 |
| 106 | 192-97-2 | benzo[e]pyreen | 0.0253 | 8.31E-06 | 304 | 0.0831 |
| 107 | 193-39-5 | indeno[1,2,3-cd]pyreen | 0.0183 | 6.91E-06 | 371.0 | 0.0625 |
| 108 | 194-59-2 | 7H-dibenzo[c,g]carbazon | 0.0557 | 4.92E-06 | 98.8 | 0.134 |
| 109 | 205-82-3 | benzo[j]fluorantheen | 0.0262 | 4.79E-05 | 215 | 0.109 |
| 110 | 205-99-2 | benzo[b]fluorantheen | 0.0438 | 2.57E-05 | 134.0 | 0.125 |
| 111 | 206-44-0 | fluorantheen | 0.0236 | 1.63E-04 | 36.6 | 0.109 |
| 112 | 207-08-9 | benzo[k]fluorantheen | 0.0345 | 1.32E-05 | 216.0 | 0.11 |
| 113 | 2104-64-5 | EPN | 0.0954 | 7.82E-06 | 1.8 | 0.0468 |
| 114 | 218-01-9 | chryseen | 0.0265 | 8.24E-05 | 138.0 | 0.122 |
| 115 | 2227-13-6 | tetrasul | 8.56E-03 | 2.27E-04 | 30.5 | 0.083 |
| 116 | 224-42-0 | dibenz[a,i]acridine | 0.0538 | 5.75E-06 | 107 | 0.133 |
| 117 | 226-36-8 | dibenz[a,h]acridine | 0.051 | 1.90E-06 | 129 | 0.133 |
| 118 | 22832-87-7 | miconazoolnitraat | 0.0478 | 3.36E-06 | 146 | 0.129 |
| 119 | 2314-97-8 | trifluorjoodmethaan | 1.63E-05 | 5.60E-04 | 9.02E-08 | 2.50E-09 |
| 120 | 23593-75-1 | clotrimazol | 0.0924 | 3.82E-06 | 4.24 | 0.0661 |
| 121 | 28680-45-7 | heptachloornorborneen | 6.39E-04 | 3.08E-04 | 0.19 | 9.97E-04 |
| 122 | 294-62-2 | cyclododecaan | 9.16E-04 | 2.76E-04 | 72.6 | 0.0121 |
| 123 | 301-04-2 | looddiacetaat | | | | |
| 124 | 302-01-2 | hydrazine | 0.0221 | 1.04E-04 | 1.43E-03 | 7.82E-03 |
| 125 | 309-00-2 | aldrin | 6.84E-03 | 2.48E-04 | 16.1 | 0.0653 |
| 126 | 32241-08-0 | heptachloornaftaleen | 8.42E-04 | 1.93E-04 | 272 | 6.99E-03 |
| 127 | 32534-81-9 | pentabroomdifenylether | 4.01E-03 | 8.03E-06 | 515 | 0.0145 |
| 128 | 330-54-1 | diuron | 0.107 | 7.71E-08 | 0.0458 | 0.0113 |
| 129 | 335-57-9 | hexadecafluorheptaan | 1.53E-05 | 6.91E-04 | 2.9E-07 | 1.06E-12 |
| 130 | 3424-82-6 | DDE, 2,4'-isomeer | 0.0137 | 2.06E-04 | 29.8 | 0.0937 |
| 131 | 355-43-1 | 5,6,6-tridecafluor-6-jood-1,1,1,2,2,3,3,4,4,5-hexaan | 1.61E-05 | 5.36E-04 | 4.27E-07 | 6.08E-11 |
| 132 | 36065-30-2 | 1,3,5-tribroom-2(2,3-dibroom-2-methylpropoxy)benzeen | 0.0188 | 8.97E-05 | 220 | 0.0963 |
| 133 | 37240-96-3 | loodrhodiumoxide | | | | |
| 134 | 41083-11-8 | azocyclotin | 0.0836 | 1.7E-06 | 14.2 | 0.102 |
| 135 | 465-73-6 | isodrin | 7.98E-04 | 3.05E-04 | 1.28 | 3.98E-03 |
| 136 | 470-90-6 | chloorfenvinfos | 0.176 | 2.02E-06 | 0.48 | 0.0355 |
| 137 | 4904-61-4 | 1,5,9-cyclododecatrien | 1.17E-04 | 1.22E-04 | 0.0111 | 2.75E-05 |
| 138 | 50-28-2 | beta-estradiol | 0.0985 | 3.06E-07 | 1.89 | 0.0497 |
| 139 | 50-29-3 | DDT, 4,4'-isomeer | 0.0254 | 1.22E-04 | 48.2 | 0.126 |
| 140 | 50-32-8 | benzo[a]pyreen | 0.0343 | 1.19E-05 | 221.0 | 0.108 |
| 141 | 50-63-5 | chloroquinebisfosfaat | 0.0964 | 1.03E-06 | 2.7 | 0.057 |

| | CAS-nr | stof | PECreg- water (dissolved) mg/l | PECreg- air mg/m ³ | PECreg- agric,soil mg/kgvwt | PECreg- agric,porew mg/l |
|-----|------------|--|---|-------------------------------------|-----------------------------------|--------------------------------|
| 142 | 51000-52-3 | neodecaanzuur, ethenyl ester | 1.43E-04 | 1.22E-04 | 3.54E-03 | 8.58E-05 |
| 143 | 512-04-9 | spirost-5-en-3-ol,[3beta,25R]- | 7.77E-03 | 2.96E-06 | 482 | 0.0271 |
| 144 | 51630-58-1 | fenvaleraat | 0.0796 | 6.26E-06 | 14.7 | 0.101 |
| 145 | 53-16-7 | estron | 0.104 | 1.98E-07 | 0.313 | 0.0236 |
| 146 | 53-19-0 | DDD, 2,4'-isomeer | 0.0261 | 1.74E-04 | 10.2 | 0.0819 |
| 147 | 534-52-1 | 2-methyl-4,6-dinitrofenol | 0.136 | 1.19E-04 | 0.0301 | 0.0107 |
| 148 | 53-70-3 | dibenzo[a,h]anthraceen | 0.0175 | 3.85E-06 | 384 | 0.0589 |
| 149 | 55525-54-7 | 3,3'-[ureyleendimethyleen]- bis[3,5,5-rimethylcyclohexyl]- diisocynaat | 0.0307 | 1.53E-06 | 273 | 0.0968 |
| 150 | 56-53-1 | DES | 0.0776 | 1.08E-07 | 26.7 | 0.122 |
| 151 | 56-55-3 | benzo[a]anthraceen | 0.0164 | 1.48E-04 | 113.0 | 0.11 |
| 152 | 57-63-6 | ethinylestradiol | 0.101 | 6.09E-08 | 1.19 | 0.0413 |
| 153 | 593-60-2 | vinylbromide | 2.73E-05 | 3.50E-04 | 3.06E-07 | 4.87E-07 |
| 154 | 59447-55-1 | 2-propeenzuur, (pentabroomfenyl)methylester | 0.0137 | 1.20E-05 | 409 | 0.0483 |
| 155 | 602-01-7 | 2,3-dinitrotolueen | 0.165 | 3.94E-05 | 0.0367 | 0.0118 |
| 156 | 603-35-0 | trifenyfosfine | 0.0157 | 1.62E-04 | 98.3 | 0.109 |
| 157 | 606-20-2 | 2,6-dinitrotolueen | 0.155 | 6.88E-05 | 0.0293 | 0.0108 |
| 158 | 608-73-1 | hexachloorcyclohexaan | 7.98E-04 | 3.05E-04 | 1.28 | 3.98E-03 |
| 159 | 608-93-5 | pentachloorbenzeen | 1.03E-03 | 3.02E-04 | 3.01 | 8.8E-03 |
| 160 | 618-85-9 | 3,5-dinitrotolueen | 0.158 | 5.90E-05 | 0.0367 | 0.0118 |
| 161 | 619-15-8 | 2,5-dinitrotolueen | 0.165 | 3.94E-05 | 0.0367 | 0.0118 |
| 162 | 62-53-3 | aniline | 0.116 | 1.52E-04 | 2.59E-03 | 4.55E-03 |
| 163 | 625-45-6 | methoxyazijnzuur | 0.174 | 1.50E-06 | 6.05E-04 | 4.19E-03 |
| 164 | 64-67-5 | diethylsulfaat | 0.0688 | 2.85E-04 | 3.02E-03 | 3.63E-03 |
| 165 | 68-12-2 | N,N-dimethylformamide | 0.0529 | 2.72E-05 | 6.46E-04 | 3.37E-03 |
| 166 | 69029-86-3 | telluriumslakken | | | | |
| 167 | 70124-77-5 | flucythrinaat | 0.0759 | 7.93E-06 | 19.3 | 0.108 |
| 168 | 72-54-8 | DDD, 4,4'-isomeer | 0.032 | 1.52E-04 | 13.2 | 0.0902 |
| 169 | 72-55-9 | DDE, 4,4'-isomeer | 7.21E-03 | 2.43E-04 | 17.0 | 0.0684 |
| 170 | 732-26-3 | decylfenol | 0.0234 | 1.23E-04 | 108 | 0.117 |
| 171 | 7440-41-7 | beryllium en-verbindingen | | | | |
| 172 | 74-83-9 | broommethaan | 3.02E-05 | 3.5E-04 | 1.3E-06 | 1.4E-06 |
| 173 | 7486-35-3 | tributyltinverbindingen | | | | |
| 174 | 75-12-7 | formamide | 0.233 | 1.64E-07 | 5.28E-04 | 2.43E-03 |
| 175 | 75-15-0 | koolstofdisulfide | 2.79E-05 | 3.5E-04 | 2.24E-07 | 6.06E-07 |
| 176 | 75-21-8 | oxiraan (ethyleenoxide) | 2.19E-04 | 3.49E-04 | 1.59E-05 | 7.09E-05 |
| 177 | 76-01-7 | pentachloorethaan | 1.82E-04 | 1.39E-04 | 5.23E-04 | 5.72E-05 |
| 178 | 76-44-8 | heptachloor | 1.76E-03 | 2.96E-04 | 2.42 | 0.0152 |
| 179 | 7646-79-9 | kobaltchloride | | | | |
| 180 | 76-87-9 | fentinydroxide | 0.0949 | 2.49E-05 | 0.174 | 0.0174 |
| 181 | 7738-94-5 | chromzuur | | | | |
| 182 | 77-47-4 | hexachloorcyclopentadien | 5.58E-04 | 3.09E-04 | 0.0517 | 1.92E-04 |
| 183 | 7758-01-2 | kaliumbromaat | | | | |
| 184 | 77-78-1 | dimethylsulfaat | 0.0864 | 2.36E-04 | 1.06E-03 | 3.10E-03 |
| 185 | 7778-39-4 | arsenzuur en -zouten | | | | |
| 186 | 7778-44-1 | calciumarsenaat | | | | |
| 187 | 7778-50-9 | kaliumdichromaat | | | | |
| 188 | 7784-40-9 | loodarsenaat | | | | |
| 189 | 7790-79-6 | cadmiumfluoride | | | | |

| | CAS-nr | stof | PECreg-water (dissolved) mg/l | PECreg-air mg/m ³ | PECreg-agric,soil mg/kgwwt | PECreg-agric,porew mg/l |
|-----|------------|---|-------------------------------------|---------------------------------|-------------------------------|----------------------------|
| 190 | 789-02-6 | DDT, 2,4'-isomeer | 0.0261 | 1.22E-04 | 41.9 | 0.124 |
| 191 | 79-16-3 | N-methylaceetamide | 0.172 | 3.66E-06 | 0.0179 | 8.75E-03 |
| 192 | 793-24-8 | 4-[dimethylbutylamino]- difenylamine | 0.0888 | 4.18E-05 | 0.196 | 0.0176 |
| 193 | 79-34-5 | 1,1,2,2-tetrachloorethaan | 1.11E-03 | 1.75E-04 | 2.15E-04 | 1.42E-04 |
| 194 | 79-46-9 | 2-nitropropan | 9.18E-04 | 1.79E-04 | 6.62E-05 | 9.71E-05 |
| 195 | 8001-35-2 | toxafeen | 5.55E-04 | 3.09E-04 | 7.07E-03 | 5.47E-05 |
| 196 | 823-40-5 | 2,6-tolueenamine | 0.232 | 2.75E-07 | 7.40E-04 | 2.70E-03 |
| 197 | 85-01-8 | fenanthreen | 8.15E-03 | 2.6E-04 | 3.92 | 0.0431 |
| 198 | 85-22-3 | pentabroomethylbenzeen | 2.63E-03 | 1.03E-04 | 444 | 0.0174 |
| 199 | 85535-84-8 | C10-13 chlooralkanen | | | | |
| 200 | 87-68-3 | hexachloorbutadieen | 1.25E-04 | 1.22E-04 | 0.0148 | 8.92E-05 |
| 201 | 87-86-5 | pentachloorfenol | 0.106 | 2.39E-06 | 0.0299 | 9.08E-03 |
| 202 | 900-95-8 | trifenylinacetaat | 0.104 | 4.07E-06 | 0.147 | 0.0163 |
| 203 | 91-08-7 | 2,6-tolueendiisocynaat | 3.85E-03 | 2.92E-04 | 0.203 | 8.48E-03 |
| 204 | 91-59-8 | 2-naftaleenamine | 0.105 | 6.25E-06 | 9.77E-03 | 5.82E-03 |
| 205 | 91-94-1 | 3,3'-dichloorbenzidine | 0.106 | 2.82E-06 | 0.0496 | 0.0107 |
| 206 | 95-53-4 | 2-methylbenzeenamine | 0.117 | 1.52E-04 | 8.74E-04 | |
| 207 | 96-45-7 | ethyleenthioureum | 0.231 | 5.79E-10 | 0.0197 | 8.97E-03 |
| 208 | 98-07-7 | trichloormethylbenzeen | 1.77E-04 | 1.21E-04 | 5.36E-03 | 1.67E-04 |
| 209 | 98-95-3 | nitrobenzeen | 0.0258 | 4.04E-04 | 6.2E-03 | 3.48E-03 |
| 210 | | PCDFs | | | | |
| 211 | | PCDD's | | | | |
| 212 | | PCB's | | | | |
| | 75-56-9 | 1,2-epoxypropan | 2.97E-04 | 3.49E-04 | 2.50E-04 | 1.44E-04 |

RIVM

Rijksinstituut
voor Volksgezondheid
en Milieu

Postbus 1
3720 BA Bilthoven
www.rivm.nl