

**Afleiding van het  
ecotoxicologisch deel voor 28  
ad hoc MTR's voor 2009**





**Afleiding van het ecotoxicologisch  
deel voor 28 ad hoc MTR's voor  
2009**

Leonard Osté (Deltares)  
Rineke Keijzers (Ecofide)  
Vincent Mastalerz (Deltares)

1203121-001





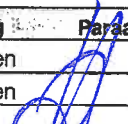



**Titel**  
Afleiding van het ecotoxicologisch deel voor 28 ad hoc MTR's voor 2009

<b>Opdrachtgever</b>	<b>Project</b>	<b>Kenmerk</b>	<b>Pagina's</b>
Rijkswaterstaat Waterdienst	1203121-001	1203121-001-ZWS-0005	116

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

**Samenvatting**

Dit rapport beschrijft de afleiding van het ecotoxicologisch deel van 28 ad hoc MTR's. Het is de bedoeling dat op een later tijdstip ook het humane deel wordt afgeleid, zodat een definitief ad hoc MTR kan worden vastgesteld. Dit gebeurt conform de eenvoudige procedure voor de afleiding van de ad hoc MTR's zoals beschreven in de Handreiking voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen (Interimversie 2009); RIVM-rapport 601782025/2009. Het gaat om de volgende stoffen: 3,5-xylylmethylcarbamaat, alanycarb, aminocarb, aziprotryn, carbosulfan, carpropamide, chloorbenseide, chloorfenapyr, chloorfenson, chloorfluazon, chloormefos, chloorpropylaate, chloorsulfuron, chlozolinaat, crufomaat, cyanofenfos, cyanofos, dicrotofos, fenbuconazool, fenthoaat, flutriafol, isoprothiolan, isoxaben, mecarbam, mefosfolan, pirimicarb-desmethyl, propamocarb, p-tolueensulfonamide.

Versie	Datum	Auteur	Paraaf	Review	Paraaf	Goedkeuring	Paraaf
1.0	23-08-2010	Leonard Osté		V. Harezlak		Toon Segeren	
2.0	11-10-2010	Leonard Osté		V. Harezlak		Toon Segeren	

**Status**  
definitief



## Inhoud

<b>1 Inleiding</b>	<b>1</b>
<b>2 Methode</b>	<b>3</b>
2.1 Rapportage van gegevens	3
2.2 Het stappenplan	3
<b>3 Resultaten</b>	<b>5</b>
<b>4 Literatuur</b>	<b>A-1</b>
 <b>Bijlage(n)</b>	
<b>A Rapportageformulier 3,5-xylylmethylcarbamaat (XMC)</b>	<b>A-1</b>
<b>B Rapportageformulier alanycarb</b>	<b>B-1</b>
<b>C Rapportageformulier aminocarb</b>	<b>C-1</b>
<b>D Rapportageformulier aziprotryn</b>	<b>D-1</b>
<b>E Rapportageformulier carbosulfan</b>	<b>E-1</b>
<b>F Rapportageformulier carpropamide</b>	<b>F-1</b>
<b>G Rapportageformulier chloorbenside</b>	<b>G-1</b>
<b>H Rapportageformulier chloorfenapyr</b>	<b>H-1</b>
<b>I Rapportageformulier chloorfenson</b>	<b>I-1</b>
<b>J Rapportageformulier chloorfluazuron</b>	<b>J-1</b>
<b>K Rapportageformulier chloormefos</b>	<b>K-1</b>
<b>L Rapportageformulier chloorpropylaat</b>	<b>L-1</b>
<b>M Rapportageformulier chloorsulfuron</b>	<b>M-1</b>
<b>N Rapportageformulier chlozolinaat</b>	<b>N-1</b>
<b>O Rapportageformulier crufomaat</b>	<b>O-1</b>
<b>P Rapportageformulier cyanofenfos</b>	<b>P-1</b>
<b>Q Rapportageformulier cyanofos</b>	<b>Q-1</b>

<b>R Rapportageformulier dicrotofos</b>	<b>R-1</b>
<b>S Rapportageformulier fenbuconazool</b>	<b>S-1</b>
<b>T Rapportageformulier fenthoaat</b>	<b>T-1</b>
<b>U Rapportageformulier flutriafol</b>	<b>U-1</b>
<b>V Rapportageformulier isoprothiolan</b>	<b>V-1</b>
<b>W Rapportageformulier isoxaben</b>	<b>W-1</b>
<b>X Rapportageformulier mecarbam</b>	<b>X-1</b>
<b>Y Rapportageformulier mefosfolan</b>	<b>Y-1</b>
<b>Z Rapportageformulier pirimicarb-desmethyl</b>	<b>Z-1</b>
<b>AA Rapportageformulier propamocarb</b>	<b>AA-1</b>
<b>BB Rapportageformulier p-tolueensulfonamide</b>	<b>BB-1</b>
<b>CC Rapportageformulier</b>	<b>CC-1</b>



## 1 Inleiding

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

Deltares heeft, samen met adviesbureau Ecofide, het chemisch en ecotoxicologische deel van de ad hoc MTR's uitgevoerd. Normaal gesproken berekent het RIVM het  $MTR_{\text{humaan}}$  en het resultante ad hoc MTR. Wegens capaciteitsgebrek bij het RIVM is dat nog niet gedaan en moet dit rapport gezien worden als het tussentijds vastleggen van uitgevoerde activiteiten.

Omdat de afleidingsprocedure nog niet is afgerond hebben de in dit rapport vermelde waarden (nog) niet de gebruikelijke procedure doorlopen, te weten: beoordeling door een interne RIVM toetsgroep, beoordeling door de Wetenschappelijke Klankbordgroep van INS vaststelling in de Stuurgroep Stoffen.



## 2 Methode

De ad hoc MTR's zijn afgeleid zoals beschreven in de Handreiking voor de afleiding van indicatieve milieukwaliteitsnormen (Van Herwijnen et al., 2009). De procedure voor het afleiden van het ad hoc MTR is gebaseerd op de integratie van een norm op basis van humaan-toxicologische eindpunten (ad hoc MTRhumaan) en op basis van ecotoxicologische eindpunten (ad hoc MTR eco). Het ad hoc MTR wordt gelijkgesteld aan de meest kritische.

De te volgen aanpak sluit zoveel mogelijk aan bij (inter)nationale gangbare methodieken. Omdat echter een minder uitvoerige literatuursearch naar gegevens wordt uitgevoerd en de gegevens minder zwaar worden getoetst op validiteit, worden strengere onzekerheidsfactoren toegepast dan in de gedegen methode. Voor stoffen waarvoor geen of slechts beperkt humaan-toxicologische gegevens beschikbaar zijn, wordt gewerkt met een standaardwaarde. Voor stoffen waarvoor geen of beperkt ecotoxicologische gegevens beschikbaar zijn, kan het voorkomen dat geen ad hoc MTReco kan worden afgeleid; in die gevallen wordt het ad hoc MTR slechts gebaseerd op het ad hoc MTR humaan. Als er gegevens voor het ad hoc MTR ontbreken worden deze in eerste instantie aangevuld via QSAR<sup>1</sup> berekeningen. Over het algemeen geeft dit minder betrouwbare waarden en kunnen de ad hoc MTR's alleen indicatief gebruikt worden.

### 2.1 Rapportage van gegevens

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

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

Een overzicht van de geraadpleegde databases en bronnen staan weergegeven in Van Herwijnen et al, (2009). In dit rapport zijn de rapportageformulieren (zie bijlagen) ingekort, omdat er anders een groot aantal lege tabellen werd gepresenteerd. Een volledig rapportageformulier is te vinden in bijlage CC.

### 2.2 Het stappenplan

De gevolgde procedure wordt beschreven in de vorm van een stappenplan. Via de opeenvolgende stappen wordt vastgesteld welke informatie beschikbaar is, of en welke onzekerheidsfactoren op basis daarvan moeten worden toegepast en op welke wijze het ad hoc MTR wordt afgeleid. Het stappenplan komt terug in het rapportageformulier en is weergegeven in Van Herwijnen et al. (2009), en staat weergegeven in Bijlage CC.

---

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



### 3 Resultaten

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

Tabel 3.1 Voorgestelde ad hoc MTR's

Stof	CAS nummer	Oppervlaktewater µg/l	Sediment µg/kg dwt	Bodem µg/kg dwt
3,5-xylylmethylcarbamaat	2655-14-3	0,025		
alanycarb	83130-01-2	0,33		
aminocarb	2032-59-9	0,012		
aziprotryn	4658-28-0	0,33		
carbosulfan	55285-14-8	0,06		
carpropamide	104030-54-8	2,0		
chloorbenside	103-17-3	0,13	44	
chloorfenapyr	122453-73-0	0,0020	1,2	1,0
chloorfenson	80-33-1	0,10		
chloorfluazuron*	71422-67-8	0,00030	5,2	
chloormefos	24934-91-6	0,013		
chloorpropylaate	5836-10-2	0,045		
chloorsulfuron*	64902-72-3	0,0011		
chlozolinaat	72391-46-9 en 84332-86-5	1,2		
crufomaat	299-86-5	0,080		
cyanofenos	13067-93-1	0,066		
cyanofos	2636-26-2	0,013		
dicrotofos	141-66-2	0,0042		
fenbuconazool	114369-43-6	2,3		
fenthoaat	2597-03-7	0,00060		
Flutriafol	76674-21-0	31		
Isoprothiolan	50512-35-1	4,6		
Isoxaben	82558-50-7	0,11		
Mecarbam	2595-54-2	0,0013		
Mefosfolan	950-10-7	0,013		
pirimicarb-desmethyl	30614-22-3	4,3 x 10 <sup>2</sup>		
propamocarb*	24579-73-5	7,1 x 10 <sup>2</sup>		
p-tolueensulfonamide*	70-55-3	2,7 x 10 <sup>2</sup>		

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



## 4 Literatuur

Traas, T.P. & D.M. Bontje, 2005. Environmental risk limits for alcohols, glycols, and some other relatively soluble and/or volatile compounds. 2. Integration of human and ecotoxicological risk limits. Report 601501027.

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

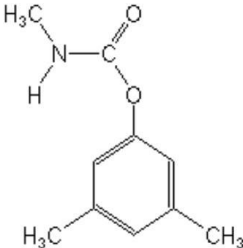




## A Rapportageformulier 3,5-xylylmethylcarbamaat (XMC)

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		3,5-xylylmethylcarbamaat (XMC)
<b>CAS-NUMMER</b>		2655-14-3
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,025 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	3,5-xylylmethylcarbamaat (XMC)
IUPAC naam	3,5-xylyl methylcarbamate
Synoniemen	3,5-Dimethylphenyl N-methylcarbamate; 3,5-Xmc; 3,5-Xylenol, methylcarbamate; Carbaron; Cosban; Methylcarbamic acid 3,5-xylyl ester; N-Methyl-3,5-xylyl carbamate
CAS-nummer	2655-14-3
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide
Toxiciteitsmechanisme	acetylcholinesterase (AChE) inhibitor
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>
Smiles (indien gebruikt)	CNC(=O)Oc1cc(C)cc(C)c1
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	179,22		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	99	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	266,91	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	$4,8 \times 10^{-2}$	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	470	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	2,27		ecosar
	<b>2,23</b>	experimenteel	Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,14	QSAR Esters	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	1,14	$K_{oc} \times f_{oc, susp}$	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$1,8 \times 10^{-2}$ <b><math>1,71 \times 10^{-5}</math></b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	15,5	Handreiking afleiding ind. MKN

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

## 4. TOXICITEIT

### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinus carpio</i>	4 dagen	LC50	40,0		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia pulex</i>	2 dagen	EC50	0,055		Footprint
<b>algen</b>					
Onbekende soort	3 dagen	EC50	12,3		Footprint
<b>insect</b>					
<i>Cloeon dipterum</i>	2 dagen	LD50	<b>0,025</b>		US-EPA Aquire
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

#### Opmerking:

Laagste waarde is opgegeven als LD50 ipv LC50. De eenheid is echter wel mg/l en niet een dosis (iets als mg/kg). Tevens zou 'dosis' kunnen suggereren dat het eenmalig is toegepast. Aangezien het echter de laatste waarde is, is toch met deze waarde verder gerekend.

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,025 µg/L	LD50 insect van 0,025 mg/l gebruikt. AF = 1000

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		K <sub>susp/water</sub> = 4,35 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

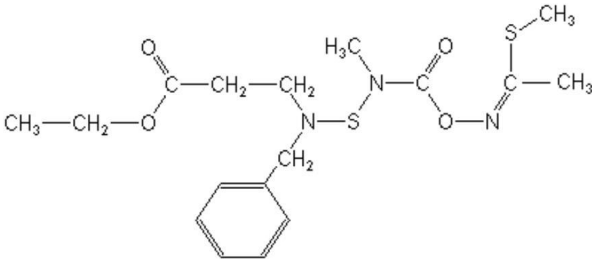
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 4,34 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	



## B Rapportageformulier alanycarb

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		alanycarb
<b>CAS-NUMMER</b>		83130-01-2
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,33 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	alanycarb
IUPAC naam	ethyl (Z)-N-benzyl-N-[[methyl(1-methylthioethylideneamino)oxycarbonyl]amino]thio]-β-alaninate
Synoniemen	5-Oxa-2,8-dithia-4,7,9-triazadodec-3-en-12-oic acid, 3,7-dimethyl-6-oxo-9-(phenylmethyl)-, ethyl ester, (Z)-
CAS-nummer	83130-01-2
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide
Toxiciteitsmechanisme	Contact and stomach action. Acetylcholinesterase (AChE) inhibitor
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C17H25N3O4S2
Smiles (indien gebruikt)	c1cccc1CN(SN(C)C(=O)ON=C(C)SC)CCC(=O)OCC
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	399,53		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	47	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	452,42	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	4,6 × 10 <sup>-6</sup>	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	20	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	3,16 3,43	experimenteel	ecosar Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,70	QSAR Esters	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	1,70	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	9,32 × 10 <sup>-5</sup> 8,71 × 10 <sup>-5</sup>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database Epiwin 3.12
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	162,2	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinidae</i>	4 dagen	LC50	1		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	9,4		Footprint
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,33 µg/L	LC50 vis van 1 mg/l gebruikt. AF = 3000

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		$K_{\text{susp/water}} = 13,4 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 15,20 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	

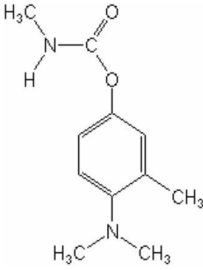




## C Rapportageformulier aminocarb

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		aminocarb
<b>CAS-NUMMER</b>		2032-59-9
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,012 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	aminocarb
IUPAC naam	4-dimethylamino-m-tolyl methylcarbamate
Synoniemen	(4-Dimethylamino-3-methyl-phenyl)N-methyl-carbamate; 3-Methyl-4-dimethylaminophenyl methylcarbamate; 4-(Dimethylamino)-3-methylphenol methyl carbamate (ester); 4-Dimethylamine m-cresyl methylcarbamate; Aminocarbe; Carbamic acid, methyl-, 4-(dimethylamino)-3-methylphenyl ester; Carbamic acid, methyl-, 4-(dimethylamino)-m-tolyl ester; Methylcarbamic acid 4-(dimethylamino)-m-tolyl ester; N-Methylcarbamate de 4-dimethylamino 3-methyl phenyle; Phenol, 4-(dimethylamino)-3-methyl-, methylcarbamate (ester); m-Cresol, 4-(dimethylamino)-, methylcarbamate (ester)
CAS-nummer	2032-59-9
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide
Toxiciteitsmechanisme	Non-systemic, acetylcholinesterase (AChE) inhibitor
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
Smiles (indien gebruikt)	CNC(=O)Oc1ccc(N(C)C)c(C)c1
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	208,26		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	93-94	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	297,88	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	0,291	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	915	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	1,90		ecosar
	<b>1,90</b>	experimenteel	Bio-Loom

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log $K_{oc}$ (log [L/kg])	1,98	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log $K_{p, susp-water}$ (log [L/kg])	0,98	$K_{oc} \times f_{oc,susp}$	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$5,71 \times 10^{-5}$ $6,17 \times 10^{-2}$	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	8,1	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	0,110		Footprint
<i>Ameiurus nebulosus</i>	4 dagen	LC50	100		US-EPA / Aquire
<i>Ictalurus punctatus</i>	4 dagen	LC50	0,075		US-EPA / Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	0,045		US-EPA / Aquire
<i>Micropterus salmoides</i>	4 dagen	LC50	3,15		US-EPA / Aquire
<i>Oncorhynchus clarki</i>	4 dagen	LC50	0,064		US-EPA / Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	0,036		US-EPA / Aquire
<i>Perca flavescens</i>	4 dagen	LC50	0,23		US-EPA / Aquire
<i>Pimephales promelas</i>	4 dagen	LC50	0,075		US-EPA / Aquire
<i>Salmo salar</i>	4 dagen	LC50	2,35		US-EPA / Aquire
<i>Salmo trutta</i>	4 dagen	LC50	3,15		US-EPA / Aquire
<i>Salvelinus fontinalis</i>	4 dagen	LC50	0,13		US-EPA / Aquire
<i>Sander vitreus</i>	4 dagen	LC50	0,88		US-EPA / Aquire
<i>Pimephales promelas</i>	33 dagen	NOEC	0,211		US-EPA / Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	0,019		US-EPA / Aquire
<i>Gammarus pseudolimnaeus</i>	4 dagen	LC50	<b>0,012</b>		US-EPA / Aquire
<i>Gammarus fasciatus</i>	4 dagen	LC50	<b>0,012</b>		US-EPA / Aquire
<i>Gammarus lacustris</i>	4 dagen	LC50	<b>0,012</b>		US-EPA / Aquire
<i>Asellus racovitzai</i>	4 dagen	LC50	12		US-EPA / Aquire
<i>Crangon septemspinosa</i>	4 dagen	LC50	0,2	marien	US-EPA / Aquire
<i>Orconectes limosus</i>	4 dagen	LC50	32,7		US-EPA / Aquire
<i>Orconectes propinquus</i>	0,04 dagen	LC50	1,18		US-EPA / Aquire
<i>Penaeus aztecus</i>	2 dagen	LC50	0,55	marien	e-toxbase
<b>algen</b>					
Onbekende soort	3 dagen	EC50	0,56		Footprint
Onbekende soort	1,2 dagen	EC50	0,56		e-toxbase
<b>insecten</b>					
<i>Chironomus riparius / thummi</i>	1 dag	LC50	0,377		Footprint
<i>Chironomus plumosus</i>	2 dagen	EC50	0,03		US-EPA / Aquire
<i>Acroeuria abnormis</i>	0,04 dagen	LC50	1,06		US-EPA / Aquire
<i>Isonychia sp.</i>	0,04 dagen	LC50	0,479		US-EPA / Aquire
<i>Ophiogomphus sp.</i>	2 dagen	LC50	0,478		US-EPA / Aquire
<i>Pteronarcella badia</i>	4 dagen	LC50	0,016		US-EPA / Aquire

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<i>Pycnopsyche sp.</i>	2 dagen	LC50	0,59		US-EPA / Aquire
<i>Simulium venustum</i>	0,04 dagen	LC50	0,344		US-EPA / Aquire
<i>Skwala sp.</i>	4 dagen	LC50	0,023		US-EPA / Aquire
<b>weekdieren</b>					
<i>Mytilus edulis</i>	4 dagen	LC50	114	marien	e-toxbase
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

In Aquire ruim 400 waarden gevonden. Hiervan is voor ieder organisme slechts de laagste waarde met de meest standaard testduur opgenomen in de bovenstaande tabel.

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,012 µg/L	LC50 kreeftachtigen van 0,012 mg/l gebruikt AF = 1000

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	Log K <sub>susp/water</sub> = 0.98
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

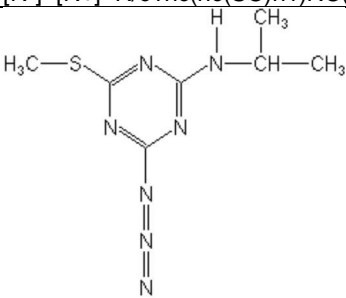
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## D Rapportageformulier aziprotryn

SAMENVATTING		
STOFNAAM		aziprotryn
CAS-NUMMER		4658-28-0
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,33 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	nvt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>
DATUM		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	aziprotryn
IUPAC naam	4-azido- <i>N</i> -isopropyl-6-methylthio-1,3,5-triazin-2-amine
Synoniemen	1,3,5-Triazin-2-amine, 4-azido- <i>N</i> -(1-methylethyl)-6-(methylthio)-; 2-Azido-4-isopropylamino-6-methylthio-1,3,5-triazine; Brasoran; Isopropylamino-4-azido-6-methylthio-1,3,5-triazin; Mezaroniil; s-Triazine, 2-azido-4-(isopropylamino)-6-(methylthio)-
CAS-nummer	4658-28-0
Stofgroep volgens EPIWin	Trazines, Azides
Bekend gebruik (beperkt)	Herbicide
Toxiciteitsmechanisme	Selective with residual activity
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>7</sub> S
Smiles (indien gebruikt)	[N-]=[N+]=N/c1nc(nc(SC)n1)NC(C)C
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	225,27		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	217,88	geschat	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	511,31	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	1,65 × 10 <sup>-8</sup>	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	55	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	3,27 <b>3,00</b>	experimenteel	ecosar Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,50	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	1,5	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	5,09 × 10 <sup>-8</sup> <b>6,32 × 10<sup>-8</sup></b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database Epiwin 3.12
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	70,8	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	1,0		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	26		US-EPA Aquire / Footprint
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,33 µg/L	LC50 vis van 1,0 mg/l gebruikt. AF = 3000

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		$K_{\text{susp/water}} = 8,81 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 9,69 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	





## E Rapportageformulier carbosulfan

SAMENVATTING		
<b>STOFNAAM</b>		carbosulfan
<b>CAS-NUMMER</b>		55285-14-8
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,06 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	carbosulfan
IUPAC naam	2,3-dihydro-2,2-dimethylbenzofuran-7-yl (dibutylaminothio)methylcarbamate
Synoniemen	Dibutylaminosulfenylcarbofuran; ((Dibutylamino)thio)methylcarbamate acid, 2,2-dimethyl-2,3-dihydro-7-benzofuranyl ester; 2,3-Dihydro-2,2-dimethyl-7-benzofuranyl ((dibutylamino)thio)methylcarbamate; Carbamic acid, ((dibutylamino)thio)methyl-, 2,2-dimethyl-2,3-dihydro-7-benzofuranyl ester;
CAS-nummer	55285-14-8
Stofgroep volgens EPIWin	Neutral Organics
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide, Acaricide
Toxiciteitsmechanisme	Systemic with contact and stomach action. Acetylcholine esterase inhibitor
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>20</sub> H <sub>32</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S
Smiles (indien gebruikt)	c1(O2)c(CC2(C)C)cccc1OC(=O)N(C)SN(CCCC)CCCC
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	380,55		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	176,02	geschat	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	441,52	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	4,09 × 10 <sup>-5</sup>	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	0,3	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	5,50 <b>2,20</b>	geschat	ecosar Bio-Loom CLogP
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,12	QSAR Carbamaten	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	1,12	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	5,18 × 10 <sup>-2</sup> 5,19 × 10 <sup>-2</sup>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	14,8	Handreiking afleiding ind. MKN

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

## 4. TOXICITEIT

### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Anguilla japonica</i>	2 dagen	LC50	1,3		US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	0,015		DAR
<i>Oncorhynchus mukiss</i>	14 dagen	NOEC	<b>0,003</b>		DAR
<i>Oncorhynchus mukiss</i>	21 dagen	NOEC	0,016		DAR
<i>Pimephales promelas</i>	30 dagen	NOEC	0,0083		DAR
<i>Pollimyrus isidori</i>	3 dagen	LC50	0,071		US-EPA Aquire
<i>Schilbe mystus</i>	3 dagen	LC50	0,14		US-EPA Aquire
<i>Tilapia nilotica</i>	2 dagen	LC50	0,17		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	0,0015		DAR
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,0032		DAR
<b>algen</b>					
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	4 dagen	EC50	>20		DAR
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	3 dagen	EC50	47		Footprint
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

#### Opmerking:

Volgens stappenschema beoordeeld of laagste NOEC in dezelfde groep als laagste LC50. Voor "ja" gekozen, omdat NOEC<sub>vis</sub> = NOEC<sub>daphnia</sub>, mits je het verschil in decimalen verdisconteerd.

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,06 µg/L	NOEC vis van 0,003 mg/l gebruikt. AF = 50

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		$K_{\text{susp/water}} = 4,51 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	

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

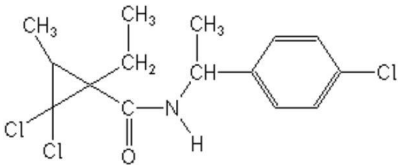
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 4,54 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	



## F Rapportageformulier carpropamide

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		carpropamide
<b>CAS-NUMMER</b>		104030-54-8
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	2 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	carpropamide
IUPAC naam	a mixture of (1 <i>R</i> ,3 <i>S</i> )-2,2-dichloro- <i>N</i> -[( <i>R</i> )-1-(4-chlorophenyl)ethyl]-1-ethyl-3-methylcyclopropanecarboxamide, (1 <i>S</i> ,3 <i>R</i> )-2,2-dichloro- <i>N</i> -[( <i>R</i> )-1-(4-chlorophenyl)ethyl]-1-ethyl-3-methylcyclopropanecarboxamide, (1 <i>S</i> ,3 <i>R</i> )-2,2-dichloro- <i>N</i> -[( <i>S</i> )-1-(4-chlorophenyl)ethyl]-1-ethyl-3-methylcyclopropanecarboxamide and (1 <i>R</i> ,3 <i>S</i> )-2,2-dichloro- <i>N</i> -[( <i>S</i> )-1-(4-chlorophenyl)ethyl]-1-ethyl-3-methylcyclopropanecarboxamide where the first two cited comprise at least 95% of the total
Synoniemen	Carpropamid; Cyclopropanecarboxamide, 2,2-dichloro- <i>N</i> -(1-(4-chlorophenyl)ethyl)-1-ethyl-3-methyl-; KTU 3616
CAS-nummer	104030-54-8
Stofgroep volgens EPIWin	Benzul Halides
Bekend gebruik (beperkt)	Fungicide
Toxiciteitsmechanisme	Systemic, protective - no curative properties
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>15</sub> H <sub>18</sub> Cl <sub>3</sub> NO
Smiles (indien gebruikt)	ClC1(Cl)C(C)C1(CC)C(=O)NC(C)c2ccc(Cl)cc2
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	334,68		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	174,64	geschat	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	418,73	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	2,51 × 10 <sup>-5</sup>	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1,8	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	4,63 <b>4,23</b>	experimenteel	ecosar Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	3,22	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	2,22	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	4,01 × 10 <sup>-3</sup> <b>6,14 × 10<sup>-3</sup></b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	Epiwin 3.12
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	786,1	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinidae</i>	4 dagen	LC50	5,6		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	410		Footprint
<b>algen</b>					
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	3 dagen	EC50	2		Footprint
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 2 µg/L	EC50 alg van 2 mg/l gebruikt. AF = 1000

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	log K <sub>susp/water</sub> = 2,22
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

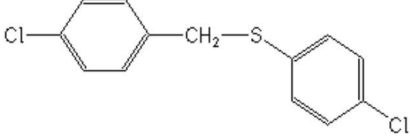
#### Ad hoc MTR<sub>eco, bodem</sub>

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

## G Rapportageformulier chloorbenside

SAMENVATTING		
STOFNAAM		chloorbenside
CAS-NUMMER		103-17-3
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,13 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	44,1 µg/kg dwt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>
DATUM		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	chloorbenside
IUPAC naam	4-chlorobenzyl 4-chlorophenyl sulfide
Synoniemen	(4-Chloor-benzyl)-(4-chloor-fenyl)-sulfide; Benzene, 1-chloro-4-(((4-chlorophenyl)methyl)thio)-; Chloorbenside; Chloracide; Chlorsulphacide; Sulfide, p-chlorobenzyl p-chlorophenyl; p-Chlorobenzyl p-chlorophenyl sulfide
CAS-nummer	103-17-3
Stofgroep volgens EPIWin	Neutral Organics
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide, Acaricide, Miticide
Toxiciteitsmechanisme	
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> Cl <sub>2</sub> S
Smiles (indien gebruikt)	Clc2ccc(CSc1ccc(Cl)cc1)cc2
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	269,19		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	75	experimenteel	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	352,90	geschat	SRC PhysProp database
Dampdruk (Pa)	5,04 × 10 <sup>-3</sup>	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	0,3104	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Log K <sub>ow</sub>	5,59 <b>5,75</b>	geschat	ecosar Bio-Loom CLogP
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	4,76	QSAR hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	3,75	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	0,70 <b>4,37</b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database Epiwin 3.12
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	15399,3	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
Fish	4 dagen	LC50	0,14	QSAR	Ecosar v1.00h
Fish	30 dagen	NOEC	<b>0,013</b>	QSAR, ChV=0,019	Ecosar v1.00h
Fish (Salt Water)	4 dagen	LC50	0,15	QSAR	Ecosar v1.00h
Fish (Salt Water)	30 dagen	NOEC	0,12	QSAR, ChV=0,17	Ecosar v1.00h
<b>kreeftachtigen</b>					
Daphnid	2 dagen	LC50	0,14	QSAR	Ecosar v1.00h
Daphnid		NOEC	0,020	QSAR, ChV=0,028	Ecosar v1.00h
Mysid Shrimp	4 dagen	LC50	0,011	QSAR	Ecosar v1.00h
Mysid Shrimp		NOEC	0,00023	QSAR, ChV=0,00033	Ecosar v1.00h
<b>algen</b>					
Green Algae	4 dagen	EC50	0,31	QSAR, mogelijk niet oplosbaar genoeg	Ecosar v1.00h
Green Algae		NOEC	0,15	QSAR, ChV=0,22	Ecosar v1.00h
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad hoc MTR-afleiding. NOEC is berekend uit =  $ChV / \sqrt{2}$

#### Opmerking:

Resultaten van de zoutwatertesten voor kreeftachtigen liggen aanzienlijk lager dan voor Daphnia. De waarden zijn wel opgenomen in de tabel, maar niet gebruikt voor de afleiding van de ad-hoc MTR. Wanneer de ad-hoc MTR gebruikt wordt voor lozen op zoutwater zal een nieuwe waarde afgeleid moeten worden.

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja	QSAR Ecosar; neutral organics; n=30; R2=0,74
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,13 µg/L	Gebruikt: NOEC vis = 0,013mg/l; AF = 10 * 10 (extra veiligheidsfactor vanwege QSAR)



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

stap	resultaat	opmerking
1	ja	
2	nee	
3	nee	
4		
5	ja	
6		
7	<p>ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub> = ad hoc MTR<sub>eco, water</sub> x K<sub>p</sub><sub>susp/water</sub> x 1000/1150 (RHO<sub>susp. matter</sub>) = 0,13 µg/L x 1439,49 / 1,15 = 162,72 µg/kg<sub>wwt</sub>.</p> <p>Omrekening naar NL-sediment op basis van drooggewicht: 162,72 x 2,71 = 440,98 µg/kg<sub>dwt</sub></p>	<p>K<sub>susp/water</sub> = 1439,49 m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>. (K<sub>p</sub> berekend met EUSES)</p> <p>MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NLstandaard sediment.</p>
8	440,98/10 = 44,1 µg/kg <sub>dwt</sub>	Log Kow = 5,75
9	nee	
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is 44,1 µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

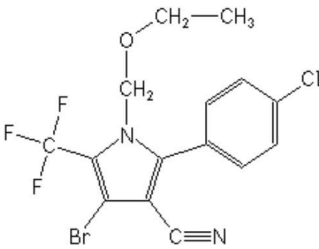
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## H Rapportageformulier chloorfenapyr

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		chloorfenapyr
<b>CAS-NUMMER</b>		122453-73-0
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,0020 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	1,21 µg/kg dwt
	<b>bodem</b>	1,01 µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	chloorfenapyr
IUPAC naam	4-bromo-2-(4-chlorophenyl)-1-ethoxymethyl-5-trifluoromethyl-1H-pyrrole-3-carbonitrile
Synoniemen	1H-Pyrrole-3-carbonitrile, 4-bromo-2-(4-chlorophenyl)-1-(ethoxymethyl)-5-(trifluoromethyl)-
CAS-nummer	122453-73-0
Stofgroep volgens EPIWin	Neutral Organics
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide, Acaricide
Toxiciteitsmechanisme	Limited systemic activity, mainly stomach but some contact action. Uncoupler of oxidative phosphorylation
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>15</sub> H <sub>11</sub> BrClF <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O
Smiles (indien gebruikt)	Clc2ccc(c1c(C#N)c(Br)c(n1COCC)C(F)(F)F)cc2
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	407,62		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	100,5	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	421,89	experimenteel	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	5,96 × 10 <sup>-5</sup>	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	0,1119	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Log K <sub>ow</sub>	5,51 <b>4,83</b>	experimenteel	ecosar Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	4,01	QSAR hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	3,01	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	5,8 × 10 <sup>-4</sup> <b>0,22</b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	2543	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	0,007		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	<b>0,0061</b>		Footprint
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,0020 µg/L	EC50 Daphnia van 0,0061 mg/l gebruikt. AF = 3000

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

stap	resultaat	opmerking
1	ja	
2	nee	
3	nee	
4		
5	ja	
6		
7	ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> = ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> × K <sub>susp/water</sub> × 1000/1150 (RHO <sub>susp. matter</sub> ) = 0,002 µg/L × 307,2 / 1,15 = 0,534 µg/kg <sub>wwt</sub> .  Omrekening naar NL-sediment op basis van drooggewicht: 0,534 × 2,71 = 1,45 µg/kg <sub>dwt</sub>	K <sub>susp/water</sub> = 307,2 (berekend met EUSES)  MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NLstandaard sediment.
8	nee	
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is 1,21 µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

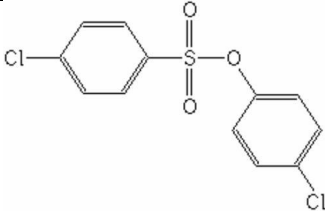
stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3		
4	Ja	
5		
6	<p>ad hoc MTR<sub>eco, bodem</sub> = ad hoc MTR<sub>eco, water</sub> x K<sub>bodem/water</sub> x 1000/1700 (RHO<sub>bodem</sub>) = 0,002 µg/L x 256,8 / 1,7 = 0,302 µg/kg<sub>wwt</sub>.</p> <p>Omrekening naar NL-sediment op basis van drooggewicht: 0,302 x 3,33 = 1,01 µg/kg<sub>dwt</sub></p>	K <sub>bodem/water</sub> = 256,72 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> . (Berekend met EUSES)
7	nee	
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is 1,01 µg/kg <sub>dwt</sub>	



## I Rapportageformulier chloorfenson

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		chloorfenson
<b>CAS-NUMMER</b>		80-33-1
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,10 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	chloorfenson
IUPAC naam	4-chlorophenyl 4-chlorobenzenesulfonate
Synoniemen	Ovex ; Chlorfenson; Trichlorfenson ; 4-Chloor-fenyl)-4-chlor-benzeen-sulfonate; 4-Chlorophenyl 4-chlorobenzenesulfonate; Ester sulfonate; p-Chlorobenzenesulfonic acid, p-chlorophenyl ester; Benzenesulfonic acid, 4-chloro-, 4-chlorophenyl ester; Benzenesulfonic acid, p-chloro-, p-chlorophenyl ester (8Cl); Parachlorophenyl parachlorobenzene sulfonate; Onex; Orochlor; Orthotran; Otracid; Ovatan; Ephirsulphonate; Corotran; Benzolsulfonate
CAS-nummer	80-33-1
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Acaricide, fungicide, bactericide, wood preservative
Toxiciteitsmechanisme	Acts by inhibiting oxidative phosphorylation
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S
Smiles (indien gebruikt)	Clc2ccc(OS(=O)(=O)c1ccc(Cl)cc1)cc2
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Molecuulgewicht (g/mol)	303,17		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	86,5	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	402,30	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	$2,51 \times 10^{-4}$	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	2,961	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Log K <sub>ow</sub>	4,21	geschat	Epiwin 3.12
	<b>4,66</b>	geschat	Bio-Loom CLogP
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	3,28	QSAR Esters	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	2,28	$K_{oc} \times f_{oc,susp}$	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$1,66 \times 10^{-2}$ <b><math>2,57 \times 10^{-2}</math></b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database
pKa			
Molecuulgewicht (g/mol)	303,17		Epiwin 3.12

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	1819,7	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	0,70		US-EPA Aquire / Footprint
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	2,2		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	2,5		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	0,62		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	0,623		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	0,693		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<b>algen</b>					
<b>insecten</b>					
<i>Pteronarcys californicus</i>	4 dagen	LC50	<b>0,31</b>		US-EPA Aquire
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

Opmerking: Het insect *Pteronarcys* is gebruikt als vervanging voor de basisgroep kreeftachtigen

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,10 µg/L	EC50 insect van 0,31 mg/l gebruikt. AF = 3000



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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

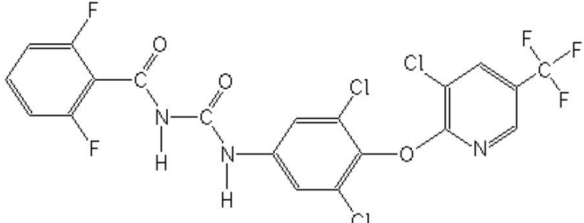
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 57,36 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## J Rapportageformulier chloorfluazuron

SAMENVATTING		
<b>STOFNAAM</b>		chloorfluazuron
<b>CAS-NUMMER</b>		71422-67-8
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,00030 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	5,2 µg/kg dwt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	chloorfluazuron
IUPAC naam	1-[3,5-dichloro-4-(3-chloro-5-trifluoromethyl-2-pyridyloxy)phenyl]-3-(2,6-difluorobenzoyl)urea
Synoniemen	Benzamide, N-(((3,5-dichloro-4-((3-chloro-5-(trifluoromethyl)-2-pyridinyl)oxy)phenyl)amino)carbonyl)-; Atabron; Chlorfluazuron
CAS-nummer	71422-67-8
Stofgroep volgens EPIWin	Imides
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide, Growth regulator / Fertilizer
Toxiciteitsmechanisme	Acts as an anti-moulting agent killing larvae and pupae
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>20</sub> H <sub>9</sub> Cl <sub>3</sub> F <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
Smiles (indien gebruikt)	<chem>C1=CC(=C(C(=C1)F)C(=O)NC(=O)NC2=CC(=C(C(=C2)Cl)OC3=C(C=C(N3)C(F)(F)F)Cl)Cl)F</chem>
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	540,66		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	226,5	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	642,12	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	$5,3 \times 10^{-12}$	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	0,004362	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Log K <sub>ow</sub>	5,87 <b>6,63</b>	experimenteel	ecosar Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	5,47	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	4,47	$K_{oc} \times f_{oc,susp}$	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$1,82 \times 10^{-7}$	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
pKa	8,1	experimenteel	SRC PhysProp database

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	46198.6	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinidae</i>	4 dagen	LC50	300		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	<b>0,00091</b>		Footprint
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,00030 µg/L	EC50 Daphnia van 0,00091 mg/l gebruikt. AF = 3000

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

stap	resultaat	opmerking
1	ja	
2	nee	
3	nee	
4		
5	ja	
6		
7	<p>ad hoc MTR<sub>eco, sediment</sub> = ad hocMTR<sub>eco, water</sub> x K<sub>p</sub><sub>susp/water</sub> x 1000/1150 (RHO<sub>susp. matter</sub>) = 0,0003 µg/L x 7378,92 / 1,15 = 1,92 µg/kg<sub>wwt</sub>.</p> <p>Omrekening naar NL-sediment op basis van drooggewicht: 1,92 x 2,71 = 5,216 µg/kg<sub>dwt</sub></p>	<p>K<sub>susp/water</sub> = 7378,92 m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>. (K<sub>p</sub> volgens EUSES; nieuwe handleiding gebruikt EUSES niet meer)</p> <p>MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NLstandaard sediment.</p>
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

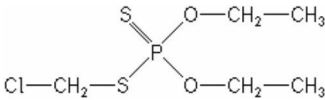
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6	<p>Ad hoc MTR<sub>eco, bodem</sub> = ad hoc MTR<sub>eco, water</sub> x K<sub>p</sub><sub>bodem/water</sub> x 1000/1700 (RHO<sub>bodem</sub>) = 0,0003 µg/L x 8853,82 / 1,7 = 1,56 µg/kg<sub>wwt</sub>.</p> <p>Omrekening naar NL-bodem op basis van drooggewicht: 1,56 x 3,33 = 2,203 µg/kg<sub>dwt</sub></p>	<p>K<sub>bodem/water</sub> = 8853,82 m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup>.</p> <p>MTR moet ook gecorrigeerd worden voor de karakteristieken van NL standaard bodem.</p>
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## K Rapportageformulier chloormefos

SAMENVATTING		
<b>STOFNAAM</b>		chloormefos
<b>CAS-NUMMER</b>		24934-91-6
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,013 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	chloormefos
IUPAC naam	S-chloromethyl O,O-diethyl phosphorodithioate
Synoniemen	Chlormephos; Phosphorodithioic acid, S-(chloromethyl) O,O-diethyl ester; S-(Chloromethyl) O,O-diethylphosphorodithioate; Phosphorodithioic acid, S-(chloromethyl) O,O-diethyl ester; Dotan
CAS-nummer	24934-91-6
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide
Toxiciteitsmechanisme	Non-systemic with contact and stomach action. Acetylcholine esterase inhibitor
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> ClO <sub>2</sub> PS <sub>2</sub>
Smiles (indien gebruikt)	CCOP(=S)(OCC)SCCl
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	234,70		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	287,44	geschat	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	83	experimenteel, 13,3 Pa geschat	SRC PhysProp database Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	5,45	experimenteel, 30°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	60	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	3,04 <b>3,21</b>	geschat geschat	Epiwin 3.12 Bio-Loom CLogP
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,60	QSAR Esters	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	1,60	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	29,7 <b>19,9</b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	107,1	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Rasbora heteromorpha</i>	4 dagen	LC50	2,5		US-EPA Aquire / Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Echinogammarus tibaldii</i>	4 dagen	LC50	<b>0,04</b>		US-EPA Aquire
<i>Gammarus italicus</i>	4 dagen	LC50	0,78		US-EPA Aquire
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,013 µg/L	LC50 kreeftachtige van 0,04 mg/l gebruikt. AF = 3000

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



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

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## L Rapportageformulier chloorpropylaat

SAMENVATTING		
STOFNAAM		chloorpropylaat
CAS-NUMMER		5836-10-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,045 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	nvt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>
DATUM		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	chloorpropylaat
IUPAC naam	isopropyl 4,4'-dichlorobenzilate
Synoniemen	1-Methylethyl 4-chloro-alpha-(4-chlorophenyl)-alpha-hydroxybenzeneacetate; Benzeneacetic acid, 4-chloro-alpha-(4-chlorophenyl)-alpha-hydroxy-, 1-methylethyl ester; Chloropropylate; Isopropyl 2-(4,4'-dichlorophenyl)-2-hydroxyacetate; Isopropyl 4,4'-dichlorobenzilate; Propyl p,p'-dichlorobenzilate
CAS-nummer	5836-10-2
Stofgroep volgens EPIWin	Esters, Benzyl Alcohols
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide, Acaricide,
Toxiciteitsmechanisme	Specific with contact action
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C17H16Cl2O3
Smiles (indien gebruikt)	Clc1ccc(cc1)C(O)(c2ccc(Cl)cc2)C(=O)OC(C)C
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	339,22		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	73	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	148-150 407,93	experimenteel, 66,4 Pa	SRC PhysProp database Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	2,39 × 10 <sup>-9</sup>	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1,5	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	4,41 <b>4,67</b>	geschat	ecosar Bio-Loom CLogP
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	3,88	QSAR hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log $K_{p, \text{susp-water}}$ (log [L/kg])	2,88	$K_{oc} \times f_{oc, \text{susp}}$	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$8,1 \times 10^{-4}$ $7,1 \times 10^{-3}$	geschat, 25°C $MW \times VP / WS$	SRC PhysProp database
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	1859,9	Handreiking afleiding ind. MKN

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

## 4. TOXICITEIT

### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	0,45		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,045 µg/L	LC50 vis van 0,45 mg/l gebruikt. AF = 10.000

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	Log Kp = 2,88
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## M Rapportageformulier chloorsulfuron

SAMENVATTING		
<b>STOFNAAM</b>		chloorsulfuron
<b>CAS-NUMMER</b>		64902-72-3
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,0011 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	chloorsulfuron
IUPAC naam	1-(2-chlorophenylsulfonyl)-3-(4-methoxy-6-methyl-1,3,5-triazin-2-yl)urea
Synoniemen	1-((o-Chlorophenyl)sulfonyl)-3-(4-methoxy-6-methyl-s-triazin-2-yl)urea; 1-(2-Chlorophenylsulfonyl)-3-(4-methoxy-6-methyl-1,3,5-triazin-2-yl)urea; 1-(2-Chlorophenylsulphonyl)-3-(4-methoxy-6-methyl-1,3,5-triazin-2-yl)urea; 2-Chloro-N-((4-methoxy-6-methyl-1,3,5-triazin-2-yl)aminocarbonyl)-benzenesulfonamide; 2-Chloorsulfuron; Benzenesulfonamide, 2-chloro-N-(((4-methoxy-6-methyl-1,3,5-triazin-2-yl)amino)carbonyl)-
CAS-nummer	64902-72-3
Stofgroep volgens EPIWin	Triazines
Bekend gebruik (beperkt)	Herbicide
Toxiciteitsmechanisme	Selective, systemic, absorbed by roots and foliage, acts by inhibiting cell division
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> ClN <sub>5</sub> O <sub>4</sub> S
Smiles (indien gebruikt)	n1c(OC)nc(C)nc1NC(=O)NS(=O)(=O)c2ccccc2Cl
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	357,80		Mackay et al. (2006)
Smeltpunt (°C)	174-178		Mackay et al. (2006)
Kookpunt (°C)	192		Mackay et al. (2006)
Dampdruk (Pa)	$6,13 \times 10^{-4}$	experimenteel, 20-25°C	Mackay et al. (2006)
Oplosbaarheid in water (mg/L)	7000	experimenteel, 20-25°C	Mackay et al. (2006)
Log K <sub>ow</sub>	2,26 <b>2,14</b>	experimenteel	ecosar Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	1,60		Mackay et al. (2006)
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	0,6	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$1,98 \times 10^{-5}$	berekend, 22,5°C	Mackay et al. (2006)
pKa	3,4	experimenteel	SRC PhysProp database

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	4,19	berekend, Mackay et al. (2006)

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

## 4. TOXICITEIT

### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	77 dagen	NOEC	32		DAR
<i>Ictalurus punctatus</i>	4 dagen	LC50	50		US-EPA Aquire / OPP
<i>Salmo trutta</i>	4 dagen	LC50	40		US-EPA Aquire
<i>Salmo trutta</i>	4 dagen	LC50	38		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	122 <sup>1</sup>		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	12		DAR / Footprint
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	370		US-EPA Aquire / OPP
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	112		Footprint
<i>Americamysis bahia</i>	4 dagen	LC50	89	marien	US-EPA Aquire / OPP
<i>Americamysis bahia</i>	4 dagen	LC50	71	marien	Footprint
<b>algen</b>					
<i>Anabaena flosaquae</i>	5 dagen	EC50	0,609		DAR
<i>Chlamydomonas noctigama</i>	3 dagen	EC50	0,6		US-EPA Aquire
<i>Chlorella fusca vacuolata</i>	0,58 dag	EC50	0,56		US-EPA Aquire
<i>Chlorella fusca vacuolata</i>	1 dag	EC50	0,4		US-EPA Aquire
<i>Chlorella fusca vacuolata</i>	1 dag	EC50	0,016		US-EPA Aquire
<i>Chlorella saccharophila</i>	4 dagen	EC50	54		US-EPA Aquire
<i>Chlorella saccharophila</i>	4 dagen	NOEC	9,3		US-EPA Aquire
<i>Cryptomonas pyrenoidifera</i>	6 dagen	EC50	60		US-EPA Aquire
<i>Cyclotella sp.</i>	6 dagen	EC50	10		US-EPA Aquire
<i>Microcystis aeruginosa</i>	6 dagen	EC50	10		US-EPA Aquire
<i>Pseudanabaena galeata</i>	4 dagen	EC50	16,3		US-EPA Aquire
<i>Pseudanabaena galeata</i>	3 dagen	EC50	14,5		US-EPA Aquire
<i>Pseudanabaena galeata</i>	4 dagen	EC50	21,1		US-EPA Aquire
<i>Pseudanabaena galeata</i>	4 dagen	NOEC	3,9		US-EPA Aquire
<i>Pseudanabaena galeata</i>	4 dagen	NOEC	3,7		US-EPA Aquire
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	3 dagen	EC50	0,135		US-EPA Aquire
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	3 dagen	EC50	0,068		Footprint
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	4 dagen	EC50	0,68		US-EPA Aquire
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	4 dagen	EC50	0,7		US-EPA Aquire
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	4 dagen	EC50	0,81		US-EPA Aquire
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	4 dagen	EC50	0,22		US-EPA Aquire
<i>Scenedesmus acutus</i>	4 dagen	EC50	0,1		US-EPA Aquire
<i>Scenedesmus acutus</i>	4 dagen	NOEC	0,15		US-EPA Aquire
<i>Selenastrum capricornutum</i>	3 dagen	EC50	0,068		DAR
<i>Synechococcus leopoliensis</i>	5 dagen	EC50	370		US-EPA Aquire



species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>waterplanten</b>					
<i>Lemna gibba</i>	14 dagen	EC50	0,00035		DAR
<i>Lemna minor</i>	14 dagen	EC50	<b>0,00011</b>		DAR
<i>Lemna minor</i>	4 dagen	EC50	0,0007		US-EPA Aquire
<i>Lemna minor</i>	7 dagen	EC50	0,00035		Footprint
<b>weekdieren</b>					
<i>Crassostrea virginica</i>	2 dagen	EC50	376	marien	US-EPA Aquire / OPP
<b>sediment (indien getriggerd)</b>					
<b>bodem</b>					
<b>lucht (indien getriggerd)</b>					

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

<sup>1</sup>: Waarde staat in de DAR als >122 vermeld!

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,0011 µg/L	EC50 waterplant van 0,00011 mg/l gebruikt. AF = 100 (EC50,min < NOECmin)

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		$K_{\text{susp/water}} = 1,89 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 1,39 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## N Rapportageformulier chlozolinaat

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		chlozolinaat
<b>CAS-NUMMER</b>		72391-46-9 en 84332-86-5
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	1,18 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Chlozolinaat
IUPAC naam	ethyl (RS)-3-(3,5-dichlorophenyl)-5-methyl-2,4-dioxo-1,3-oxazolidine-5-carboxyla
Synoniemen	Dichlozolinat; Ethyl (+)-3-(3,5-dichlorophenyl)-5-methyl-2,4-dioxo-1,3-oxazolidine-5-carboxylate; Ethyl 3-(3,5-dichlorophenyl)-5-methyl-2,4-dioxo-5-oxazolidine carboxylate
CAS-nummer	72391-46-9 en 84332-86-5
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Fungicide
Toxiciteitsmechanisme	Systemic with protective and curative action, exact mode of action unclear
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> Cl <sub>2</sub> NO <sub>5</sub>
Smiles (indien gebruikt)	O=C2OC(C(=O)N2c1cc(Cl)cc(Cl)c1)(C(=O)OCC)C
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	332,14		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	112,6	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	485,41	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	1,26 × 10 <sup>-5</sup>	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	2	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	2,22 <b>3,15</b>	experimenteel	ecosar Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,57	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	1,57	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	2,40 × 10 <sup>-5</sup> 2,09 × 10 <sup>-3</sup>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	94,95	Handreiking ind. MKN      afleiding

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Salmonidae</i>	4 dagen	LC50	27,5		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	<b>1,18</b>		Footprint
<b>algen</b>					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	3 dagen	EC50	30		Footprint
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 1,18 µg/L	EC50 kreeftachtige van 1,18 mg/l gebruikt. AF = 1000

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	log Kp = 1,57
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## O Rapportageformulier crufomaat

SAMENVATTING		
<b>STOFNAAM</b>		crufomaat
<b>CAS-NUMMER</b>		299-86-5
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,080 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Crufomaat
IUPAC naam	( <i>RS</i> )-(4-tert-butyl-2-chlorophenyl methyl methylphosphoramidate)
Synoniemen	4-t-Butyl-2-chlorophenyl methyl methylphosphoramidate; 2-Chloro-4-(1,1-dimethylethyl)phenyl methyl methylphosphoramidate; Methylphosphoramidic acid 2-chloro-4-(1,1-dimethylethyl)phenyl methyl ester; O-(4-tert Butyl-2-chloor-fenyl)-O-methyl-fosforzuur-N-methyl-amide; Phosphoramidic acid, 4-tert-butyl-2-chlorophenylphosphoramidate
CAS-nummer	299-86-5
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide, Nematocide
Toxiciteitsmechanisme	Systemic, acts via the uncoupling of oxidative phosphorylation
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> ClNO <sub>3</sub> P
Smiles (indien gebruikt)	Clc1cc(ccc1OP(=O)(OC)NC)C(C)(C)C
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	291,72		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	60	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	117-118	experimenteel, 1,33Pa	SRC PhysProp database
Dampdruk (Pa)	4,99 × 10 <sup>-3</sup>	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	200	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	3,30 <b>3,42</b>	experimenteel	Ecosar v1.00a Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,69	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	1,69	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	8,87 × 10 <sup>-2</sup> 7,28 × 10 <sup>-2</sup>	geschat, 25°C MW × VP / WS	ind. MKN Epiwin 3.12
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	161,06	

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	32		Footprint
<i>Ictalurus punctatus</i>	2 dagen	LC50	34,8		US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	1,8		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	2 dagen	LC50	32		US-EPA Aquire
<i>Salmo trutta</i>	2 dagen	LC50	25,7		US-EPA Aquire
<i>Salvelinus fontinalis</i>	2 dagen	LC50	35		US-EPA Aquire
<i>Salvelinus namaycush</i>	2 dagen	LC50	27		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Gammarus fasciatus</i>	4 dagen	LC50	3,7		US-EPA Aquire
<i>Gammarus fasciatus</i>	4 dagen	LC50	3,5		US-EPA Aquire
<i>Gammarus fasciatus</i>	1 dag	LC50	<b>0,24</b>		e-toxbase
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,080 µg/L	LC50 kreeftachtige van 0,24 mg/l gebruikt. AF = 3000



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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		$K_{\text{susp/water}} = 13,4 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	

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

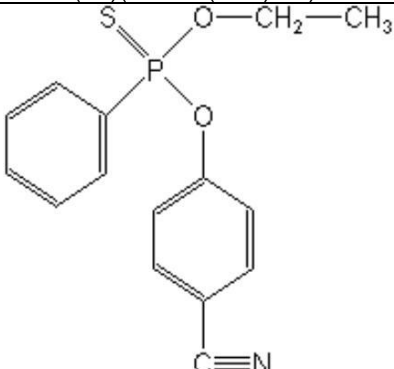
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 15,1 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	



## P Rapportageformulier cyanofenos

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		cyanofenos
<b>CAS-NUMMER</b>		13067-93-1
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,066 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Cyanofenos
IUPAC naam	(RS)-(O-4-cyanophenyl O-ethyl phenylphosphonothioate)
Synoniemen	O-Ethyl O-4-cyanophenyl phenylphosphonothioate; O-Ethyl phenylphosphonothioate, O-ester with p-hydroxybenzonitrile; O-p-Cyanophenyl O-ethyl phenyl-phosphonothioate; Phenylphosphonothioic acid O-ethyl ester O-ester with p-hydroxybenzonitrile; Phosphonothioic acid, phenyl-, O-(4-cyanophenyl) O-ethylester
CAS-nummer	13067-93-1
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide
Toxiciteitsmechanisme	Acetylcholine esterase inhibitor
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>2</sub> PS
Smiles (indien gebruikt)	CCOP(=S)(Oc1ccc(C#N)cc1)c2ccccc2
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	303,32		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	83	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	411,59	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	1,61 × 10 <sup>-4</sup>	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	0,6	experimenteel, 30 °C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	4,20 <b>4,29</b>	experimenteel	Ecosar v1.00a Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	3,10	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	2,10	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	3,53 × 10 <sup>-2</sup> <b>8,70 × 10<sup>-2</sup></b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	Epiwin 3.12
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>884,09</b>	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Gambusia affinis</i>	2 dagen	LC50	1,51		US-EPA Aquire
<i>Poecilia sp.</i>	2 dagen	LC50	<b>0,66</b>		US-EPA Aquire
<i>Tilapia sp.</i>	2 dagen	LC50	1,35		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<b>algen</b>					
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,066 µg/L	LC50 vis van 0,66 mg/l gebruikt. AF = 10.000

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		K <sub>susp/water</sub> = 32,8 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

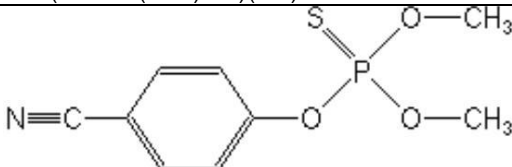
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 38,5 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	



## Q Rapportageformulier cyanofos

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		cyanofos
<b>CAS-NUMMER</b>		2636-26-2
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,013 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Cyanofos
IUPAC naam	O-4-cyanophenyl O,O-dimethyl phosphorothioate
Synoniemen	O,O-Dimethyl O-(4-cyanophenyl) thionophosphate; O,O-Dimethyl O-4-cyanophenyl phosphorothioate; O,O-Dimethyl O-4-cyanophenyl thiophosphate; O,O-Dimethyl phosphorothioate O-ester with p-hydroxybenzonitrile (8Cl); 4-(Dimethoxyphosphinothioxy)benzonitrile
CAS-nummer	2636-26-2
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide
Toxiciteitsmechanisme	Acetylcholinesterase (AChE) inhibitor
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>3</sub> PS
Smiles (indien gebruikt)	S=P(Oc1ccc(C#N)cc1)(OC)OC
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	243,22		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	14,54	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	119-120	experimenteel, 12Pa	SRC PhysProp database
Dampdruk (Pa)	0,105	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	46	experimenteel, 30°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	2,48 <b>2,75</b>	experimenteel	Ecosar v1.00a Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,38	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	1,38	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	0,113 <b>0,837</b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	Epiwin 3.12
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	43,40	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinidae</i>	4 dagen	LC50	8,2		Footprint
<i>Rasbora heteromorpha</i>	2 dagen	LC50	14		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	0,097		Footprint
<b>algen</b>					
Onbekende soort	3 dagen	EC50	4,8		Footprint
<b>Insecten</b>					
<i>Cloeon dipterum</i>	2 dagen	LC50	<b>0,013</b>		US-EPA Aquire
<b>Weekdieren</b>					
<i>Cipangopaludina malleata</i>	2 dagen	LC50	38		US-EPA Aquire
<i>Indoplanorbis exustus</i>	2 dagen	LC50	74		US-EPA Aquire
<i>Physella acuta</i>	2 dagen	LC50	25		US-EPA Aquire
<i>Semisulcospira libertina</i>	2 dagen	LC50	40		US-EPA Aquire
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,013 µg/L	LC50 insect van 0,013 mg/l gebruikt. AF = 1000



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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		$K_{\text{susp/water}} = 6,93 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	

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

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 7,44 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	



## R Rapportageformulier dicrotofos

SAMENVATTING		
STOFNAAM		dicrotofos
CAS-NUMMER		141-66-2
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,0042 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	nvt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>
DATUM		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	dicrotofos
IUPAC naam	(E)-2-dimethylcarbamoyl-1-methylvinyl dimethyl phosphate
Synoniemen	(E)-2-Dimethylcarbamoyl-1-methylvinyl dimethyl phosphate; (E)-3-(Dimethylamino)-1-methyl-3-oxo-1-propenyl dimethyl phosphate (9CI); (E)-Phosphoric acid, 3-(dimethylamino)-1-methyl-3-oxo-1-propenyl dimethyl ester; 2-Dimethyl cis-2-dimethyl-carbamoyl-1-methylvinyl phosphate; 3-(Dimethoxyphosphinyloxy)-N,N-dimethyl-cis-crotonamide; 3-(Dimethylamino)-1-methyl-3-oxo-1-propenyl dimethyl phosphate (E)-isomer; 3-Dimethoxyphosphinoxyloxy-N,N-dimethylisocrotonamide; Bidrin; Carbicron; Carbomicron; Crotonamide, 3-hydroxy-N,N-dimethyl-, dimethyl phosphate, (E)-; Crotonamide, 3-hydroxy-N,N-dimethyl-, dimethyl phosphate, cis-; Dimethyl (E)-2-dimethyl-carbamoyl-1-methylvinyl phosphate; Dimethyl 1-dimethylcarbamoyl-1-propen-2-yl phosphate; Dimethyl 2-dimethylcarbamoyl-1-methyl-vinyl phosphate; Dimethyl phosphate ester with (E)-3-hydroxy-N,N-dimethylcrotonamide (8CI); Dimethyl phosphate ester with 3-hydroxy-N,N-dimethyl-cis-crotonamide; Dimethyl phosphate of 3-hydroxy-N,N-dimethyl-cis-crotonamide; O,O-Dimethyl-O-(1-methyl-2-N,N-dimethyl-carbamoyl)-vinyl-phosphat
CAS-nummer	141-66-2
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide, acaricide, avicide
Toxiciteitsmechanisme	Systemic with contact and stomach action. Acetylcholinesterase (AChE) inhibitor
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>5</sub> P
Smiles (indien gebruikt)	COP(=O)(OC)OC(C)=CC(=O)N(C)C
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	237,20		Mackay et al. (2006)
Smeltpunt (°C)	79,21	liquid	Mackay et al. (2006) Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	400		Mackay et al. (2006)

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Dampdruk (Pa)	0,0093	experimenteel, 20°C	Mackay et al. (2006)
Oplosbaarheid in water (mg/L)	$1 \times 10^0$	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Log $K_{ow}$	-1.10 <b>0,0</b>		ecosar Mackay et al. (2006)
Log $K_{oc}$ (log [L/kg])	1,09	QSAR Ester	Handreiking afleiding ind. MKN
Log $K_{p, susp-water}$ (log [L/kg])	0,09	$K_{oc} \times f_{oc,susp}$	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$5,05 \times 10^{-6}$	berekend, 22,5°C	Mackay et al. (2006)
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>0,01</b>	berekend, Mackay et al. (2006)

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Aphanius fasciatus</i>	4 dagen	LC50	13,18	marien	US-EPA Aquire
<i>Cyprinodon variegatus</i>	4 dagen	LC50	83,8	marien	US-EPA Aquire
<i>Ictalurus punctatus</i>	4 dagen	LC50	7,66		US-EPA Aquire
<i>Ictalurus punctatus</i>	4 dagen	LC50	7,70		US-EPA Aquire / OPP
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	24,2		US-EPA Aquire / OPP
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	2,8		US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	6,3		US-EPA Aquire / Footprint / OPP
<i>Lepomis macrochirus</i>	2 dagen	EC50	0,077		e-toxbase
<i>Cyprinodon variegatus</i>	4 dagen	EC50	<b>0,013</b>		e-toxbase
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	<b>0,013</b>		US-EPA Aquire / OPP / Footprint
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	1		e-toxbase
<i>Penaeus aztecus</i>	2 dagen	EC50	1,25	marien	e-toxbase
<i>Penaeus aztecus</i>	2 dagen	EC50	0,25	marien	US-EPA Aquire / OPP
<i>Penaeus aztecus</i>	2 dagen	LC50	0,15	marien	US-EPA OPP
<i>Simocephalus serrulatus</i>	2 dagen	EC50	0,27		US-EPA Aquire / OPP
<i>Americamysis bahia</i>	4 dagen	LC50	0,077	marien	US-EPA Aquire / Footprint
<i>Mysidopsis bahia</i>	4 dagen	EC50	6,3		e-toxbase
<i>Mysidopsis bahia</i>	28 dagen	NOEC	1		e-toxbase
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	2 dagen	LC50	0,019		US-EPA Aquire
<i>Gammarus fasciatus</i>	4 dagen	LC50	2,6		US-EPA Aquire / OPP
<i>Gammarus lacustris</i>	4 dagen	LC50	0,54		US-EPA Aquire / OPP
<i>Orconectes nais</i>	4 dagen	LC50	6,0		US-EPA Aquire

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<i>Orconectes nais</i>	4 dagen	LC50	5,5		US-EPA Aquire / OPP
<i>Procambarus acutus acutus</i>	4 dagen	LC50	1,25		US-EPA Aquire
<i>Procambarus clarkii</i>	3 dagen	LC50	3,0		US-EPA Aquire
<b>algen</b>					
<b>insecten</b>					
<i>Culex pipiens quinquefasciata</i>	1 dag	LC50	0,5		US-EPA Aquire
<i>Pteronarcys californicus</i>	4 dagen	LC50	0,43		US-EPA Aquire / OPP
<i>Culex pipiens</i>	1 dag	LC50	10,0		US-EPA Aquire
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

Opmerking: Toxdata aanwezig voor 2 van de 3 basisgroepen. NOEC ligt (veel) hoger dan de laagste acute EC50, dus niet gebruikt in de afleiding. AF gebaseerd op de aanwezigheid van een (E)LC50 voor 2 van de 3 basisgroepen.

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,0042 µg/L	LC50 Daphnia/vis van 0,013 mg/l gebruikt. AF = 3000

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		$K_{\text{susp/water}} = 0,57 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 1,21 \text{ m}^3/\text{m}^3$ .
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	

## S Rapportageformulier fenbuconazool

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		fenbuconazool
<b>CAS-NUMMER</b>		114369-43-6
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	2,3 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	fenbuconazool
IUPAC naam	4-(4-chlorophenyl)-2-phenyl-2-(1H-1,2,4-triazol-1-ylmethyl)butyronitrile
Synoniemen	4-(4-Chlorophenyl)-2-phenyl-2-(1H-1,2,4-triazol-1-ylmethyl)butyronitrile; alpha-(2-(4-Chlorophenyl)ethyl)-alpha-phenyl-1H-1,2,4-triazole-1-propanenitrile; 1H-1,2,4-Triazole-1-propanenitrile, alpha-(2-(4-chlorophenyl)ethyl)-alpha-phenyl-
CAS-nummer	114369-43-6
Stofgroep volgens EPIWin	Neutral Organics
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Systemic protectant and curative, acts by inhibiting sterol biosynthesis in fungi
Classificatie	Fungicide
Molecuulformule	C19H17ClN4
Smiles (indien gebruikt)	
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	336,83		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	125	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	468,06	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	$5,0 \times 10^{-6}$	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	0,2	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	4,23 <b>3,23</b>	experimenteel	ecosar Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,61	QSAR Triazolen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	1,62	$K_{oc} \times f_{oc,susp}$	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$8,42 \times 10^{-3}$ <b><math>8,42 \times 10^{-3}</math></b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	110,9	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	4 dagen	LC50	1,8	marien	DAR / US-EPA Aquire
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	0,68		DAR / US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	1,5		DAR / US-EPA Aquire / Footprint
<i>Cyprinodon variegatus</i>	4 dagen	NOEC	0,89	marien	DAR
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	NOEC	0,42		DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	NOEC	0,7		DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	0,32		DAR / Footprint
<i>Pimephales promelas</i>	33 dagen	NOEC	0,082		DAR
<i>Pimephales promelas</i>	Full life cycle	NOEC	<b>0,023</b>		DAR
<i>Pimephales promelas</i>	244 dagen	NOEC	0,027		e-toxbase
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	2,3		DAR / US-EPA Aquire / Footprint
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	NOEC	0,75		DAR
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,078		DAR / Footprint
<i>Americamysis bahia</i>	4 dagen	LC50	0,75	marien	DAR / Footprint
<i>Americamysis bahia</i>	4 dagen	NOEC	0,4	marien	DAR
<i>Americamysis bahia</i>	4 dagen	LC50	0,633	marien	US-EPA Aquire / e-toxbase
<b>algen</b>					
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	3 dagen	EC50	0,33		DAR / Footprint
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	4 dagen	EC50	0,42		DAR
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	5 dagen	EC50	0,51		DAR
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	5 dagen	NOEC	0,29		DAR
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	5 dagen	EC50	0,41		US-EPA Aquire
Onbekende soort	4 dagen	NOEC	0,18		Footprint
<i>Selenastrum capricornutum</i>	5 dagen	EC50	0,41		e-toxbase
<i>Selenastrum capricornutum</i>	5 dagen	NOEC	<0,091		e-toxbase
<b>weekdieren</b>					
<i>Crassostrea virginica</i>	4 dagen	EC50	1,2	marien	DAR / US-EPA Aquire
<i>Crassostrea virginica</i>	4 dagen	NOEC	5,3	marien	DAR
<b>insecten</b>					
<i>Chironomus riparius</i>	31 dagen	NOEC	1,73		DAR
<i>Chironomus riparius</i>	28 dagen	NOEC	1,73		Footprint
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					



species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>insecten</b>					
<i>Chironomus riparius</i>	31 dagen	NOEC	8,0 mg/kg		DAR
<i>Chironomus riparius</i>	28 dagen	NOEC	8,0 mg/kg		Footprint
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

**Opmerking:**

In de dar staan ook waarden voor testen waarbij gebruik is gemaakt van de formule Indar 5EC. Deze zijn wel lager, maar niet opgenomen

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 2,3 µg/L	NOEC vis van 0,023 mg/l gebruikt. AF = 10

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	Log Kp = 1,62
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

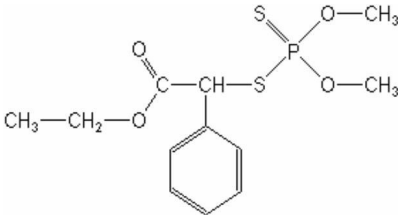
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## T Rapportageformulier fenthoaat

SAMENVATTING		
<b>STOFNAAM</b>		fenthoaat
<b>CAS-NUMMER</b>		2597-03-7
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,0006 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	fenthoaat
IUPAC naam	S- $\alpha$ -ethoxycarbonylbenzyl O,O-dimethyl phosphorodithioate
Synoniemen	Phenthoate; Acetic acid, (O,O-dimethyldithiophosphorylphenyl)-, ethyl ester; Acetic acid, mercaptophenyl-, ethyl ester, S-ester with O,O-dimethyl phosphorodithioate; Benzeneacetic acid, alpha-((dimethoxyphosphinothioyl)thio)-, ethyl ester; Cidemul; Cidial; Ethyl 2-dimethoxythiophosphorylthio-2-phenylacetate; Ethyl mercaptophenylacetate-O,O-dimethylphosphorodithioate; O,O-Dimethyl S-alpha-ethoxycarbonylbenzyl phosphorodithioate; S-alpha-Ethoxycarbonylbenzyl O,O-dimethyl phosphorodithioate; Tagson; Tanone; Tsidial
CAS-nummer	2597-03-7
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide, Acaricide
Toxiciteitsmechanisme	Non-systemic with contact and stomach action. Acetylcholinesterase (AChE) inhibitor
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> O <sub>4</sub> PS <sub>2</sub>
Smiles (indien gebruikt)	CCOC(=O)C(SP(=S)(OC)OC)c1ccccc1
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	320,4		Mackay et al. (2006)
Smeltpunt (°C)	17,5		Mackay et al. (2006)
Kookpunt (°C)	79		Mackay et al. (2006)
Dampdruk (Pa)	$3,5 \times 10^{-4}$	20-25 °C	Mackay et al. (2006)
Oplosbaarheid in water (mg/L)	11	20-25 °C	Mackay et al. (2006)
Log K <sub>ow</sub>	3,47 <b>3,69</b>		ecosar Mackay et al. (2006)
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	3,00	geschat, 22,5 °C	Mackay et al. (2006)
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	2,00	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	0,01019 <b>1,17 × 10<sup>-2</sup></b>	geschat MW × VP / WS	Mackay et al. (2006)
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>50,1</b>	gemiddeld, Mackay et al. (2006)

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

## 4. TOXICITEIT

### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinidae</i>	4 dagen	LC50	2,5		Footprint
<i>Anabas testudineus</i>	2 dagen	LC50	0,617		US-EPA Aquire
<i>Anguilla japonica</i>	2 dagen	LC50	0,28		US-EPA Aquire
<i>Carassius auratus</i>	2 dagen	LC50	2,4		US-EPA Aquire
<i>Channa punctata</i>	2 dagen	LC50	0,44		US-EPA Aquire
<i>Channa punctata</i>	2 dagen	LC50	0,426		US-EPA Aquire
<i>Channa punctata</i>	2 dagen	LC50	0,436		US-EPA Aquire
<i>Channa punctata</i>	2 dagen	LC50	0,440		US-EPA Aquire
<i>Channa punctata</i>	2 dagen	LC50	0,400		US-EPA Aquire
<i>Channa punctata</i>	2 dagen	LC50	0,473		US-EPA Aquire
<i>Channa punctata</i>	2 dagen	LC50	0,520		US-EPA Aquire
<i>Channa punctata</i>	2 dagen	LC50	0,211		US-EPA Aquire
<i>Channa punctata</i>	2 dagen	LC50	0,473		US-EPA Aquire
<i>Chasmichthys dolichognathus</i>	2 dagen	LC50	0,038	marien	US-EPA Aquire
<i>Chasmichthys dolichognathus</i>	2 dagen	LC50	0,016	marien	US-EPA Aquire
<i>Chasmichthys dolichognathus</i>	2 dagen	LC50	0,0088	marien	US-EPA Aquire
<i>Chasmichthys dolichognathus</i>	2 dagen	LC50	0,0091	marien	US-EPA Aquire
<i>Chasmichthys dolichognathus</i>	1 dag	LC50	0,008	marien	US-EPA Aquire
<i>Chasmichthys dolichognathus</i>	2 dagen	LC50	0,008	marien	US-EPA Aquire
<i>Cyprinus carpio</i>	3 dagen	LC50	0,022		US-EPA Aquire
<i>Cyprinus carpio</i>	3 dagen	LC50	0,039		US-EPA Aquire
<i>Gambusia affinis</i>	2 dagen	LC50	0,009		US-EPA Aquire
<i>Girella punctata</i>	2 dagen	LC50	0,0032	marien	US-EPA Aquire
<i>Girella punctata</i>	4 dagen	LC50	0,0042	marien	US-EPA Aquire
<i>Girella punctata</i>	4 dagen	LC50	0,005	marien	US-EPA Aquire
<i>Girella punctata</i>	1 dag	LC50	0,0023	marien	US-EPA Aquire
<i>Girella punctata</i>	2 dagen	LC50	0,0021	marien	US-EPA Aquire
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	0,0086		US-EPA Aquire
<i>Oreochromis mossambicus</i>	2 dagen	LC50	0,610		US-EPA Aquire
<i>Oreochromis mossambicus</i>	2 dagen	LC50	0,980		US-EPA Aquire
<i>Oreochromis mossambicus</i>	2 dagen	LC50	0,046		US-EPA Aquire
<i>Oreochromis mossambicus</i>	2 dagen	LC50	0,670		US-EPA Aquire
<i>Oreochromis mossambicus</i>	3 dagen	LC50	0,460		US-EPA Aquire
<i>Oreochromis mossambicus</i>	3 dagen	LC50	0,610		US-EPA Aquire
<i>Oryzias latipes</i>	2 dagen	LC50	0,170		US-EPA Aquire
<i>Seriola quinqueradiata</i>	1 dag	LC50	0,002	marien	US-EPA Aquire
<i>Tilapia sp.</i>	2 dagen	LC50	0,0225		US-EPA Aquire
<i>Zacco platypus</i>	1 dag	LC50	4,1		US-EPA Aquire
<i>Channa punctata</i>	90 dagen	LC0	0,211		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<i>Daphnia carinata</i>	2 dagen	EC50	0,0017		US-EPA Aquire Footprint
<i>Daphnia pulex</i>	0,125 dagen	LC50	0,0015		US-EPA Aquire
<i>Metapenaeus monoceros</i>	4 dagen	LC50	0,012	marien	US-EPA Aquire
<i>Metapenaeus monoceros</i>	4 dagen	LC50	0,015	marien	US-EPA Aquire
<i>Metapenaeus monoceros</i>	4 dagen	LC50	0,017	marien	US-EPA Aquire
<i>Moina macrocopa</i>	0,125 dagen	LC50	0,0075		US-EPA Aquire
<i>Penaeus japonicus</i>	1 dag	LC50	1,48	marien	US-EPA Aquire
<i>Penaeus japonicus</i>	1 dag	LC50	0,0058	marien	US-EPA Aquire
<i>Penaeus japonicus</i>	1 dag	LC50	0,0059	marien	US-EPA Aquire
<i>Penaeus japonicus</i>	1 dag	LC50	5	marien	US-EPA Aquire
<i>Penaeus japonicus</i>	1 dag	LC50	5,3	marien	US-EPA Aquire
<i>Penaeus japonicus</i>	1 dag	LC50	0,0066	marien	US-EPA Aquire
<i>Penaeus japonicus</i>	1 dag	EC50	0,00063	Enzym, marien	e-toxbase
<b>algen</b>					
<b>insecten</b>					
<i>Anax sp.</i>	2 dagen	LC50	0,054		US-EPA Aquire
<i>Anopheles albimanus</i>	1 dag	LC50	0,035		US-EPA Aquire
<i>Anopheles stephensi</i>	1 dag	LC50	0,045		US-EPA Aquire
<i>Chironomus decorus</i>	1 dag	LC50	0,016		US-EPA Aquire
<i>Chironomus sp.</i>	1 dag	LC50	0,0035		US-EPA Aquire
<i>Chironomus utahensis</i>	1 dag	LC50	0,0025		US-EPA Aquire
<i>Cricotopus sp.</i>	1 dag	LC50	0,020		US-EPA Aquire
<i>Cricotopus sp.</i>	1 dag	LC50	0,033		US-EPA Aquire
<i>Cricotopus sp.</i>	1 dag	LC50	0,0053		US-EPA Aquire
<i>Culex tritaeniorhynchus</i>	1 dag	LC50	0,0013		US-EPA Aquire
<i>Orthetrum albistylum speciosum</i>	2 dagen	LC50	0,062		US-EPA Aquire
<i>Plecoptera</i>	1 dag	LC50	<b>0,0006</b>		US-EPA Aquire
<i>Procladius sp.</i>	1 dag	LC50	0,0019		US-EPA Aquire
<i>Tanytarsus sp.</i>	1 dag	LC50	0,0086		US-EPA Aquire
<i>Cloeon dipterum</i>	2 dagen	LC50	0,0022		US-EPA Aquire
<b>weekdieren</b>					
<i>Cipangopaludina malleata</i>	2 dagen	LC50	18		US-EPA Aquire
<i>Indoplanorbis exustus</i>	2 dagen	LC50	8,5		US-EPA Aquire
<i>Physella acuta</i>	2 dagen	LC50	12		US-EPA Aquire
<i>Semisulcospira libertina</i>	2 dagen	LC50	7,5		US-EPA Aquire
<i>Tapes philippinarum</i>	1 dag	LC50	5,6		US-EPA Aquire
<i>Tapes philippinarum</i>	4 dagen	LC50	2,3		US-EPA Aquire
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,0006 µg/L	LC50, insect = 0,0006 mg/l. AF=1000

**Opmerking:** Gekozen voor AF van 1000 omdat er van 3 groepen acute LC50 waarden zijn. Weliswaar missen de algen, maar het is een insecticide, dus de aanwezigheid van extra informatie over insecten als gevoelige groep is belangrijk.

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	Log K <sub>p, susp-water</sub> = 2
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

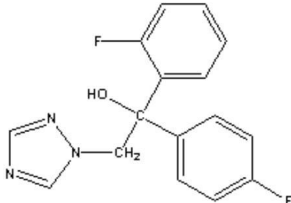
### Ad hoc MTR<sub>eco, bodem</sub>

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

## U Rapportageformulier flutriafol

SAMENVATTING		
STOFNAAM		flutriafol
CAS-NUMMER		76674-21-0
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	31 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	nvt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>
DATUM		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	flutriafol
IUPAC naam	(RS)-2,4'-difluoro-α-(1H-1,2,4-triazol-1-ylmethyl)benzhydryl alcohol
Synoniemen	alpha-(2-Fluorophenyl)-alpha-(4-fluorophenyl)-1H-1,2,4-triazole-1-ethanol; 1H-1,2,4-Triazole-1-ethanol, alpha-(2-fluorophenyl)-alpha-(4-fluorophenyl)-
CAS-nummer	76674-21-0
Stofgroep volgens EPIWin	Benzyl Alcohols
Bekend gebruik (beperkt)	Fungicide, bactericide, wood preservative
Toxiciteitsmechanisme	Broad-spectrum, systemic, contact action with eradicant and protective properties
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> F <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>1</sub>
Smiles (indien gebruikt)	C1=CC=C(C(=C1)C(CN2C=NC=N2)(C3=CC=C(C=C3)F)O)F
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	301,30		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	130	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	396,93	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	$7,10 \times 10^{-9}$	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	130	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	2,52 <b>2,30</b>	experimenteel	ecosar Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,17	QSAR Triazolen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	1,17	$K_{oc} \times f_{oc,susp}$	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$1,65 \times 10^{-8}$ <b><math>2,17 \times 10^{-8}</math></b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	17,8	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	61		DAR
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	33		DAR / Footprint
<i>Cyprinus carpio</i>	4 dagen	LC50	77		DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	6,2		DAR / Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	67		DAR / Footprint
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	<b>0,31</b>		DAR / Footprint
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	1,0		DAR
<b>algen</b>					
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	3 dagen	EC50	1,9		DAR
<i>Selenastrum capricornutum</i>	4 dagen	EC50	12		DAR
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	3 dagen	NOEC	0,32		DAR
<i>Selenastrum capricornutum</i>	4 dagen	NOEC	2,4		DAR
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	3 dagen	EC50	12		Footprint
<b>insecten</b>					
<i>Chironomus riparius</i>	28 dagen	NOEC	1,6		DAR / Footprint
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 31 µg/L	NOEC kreeftachtige van 0,31 mg/l gebruikt. AF = 10



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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	Log Kp = 1,17
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

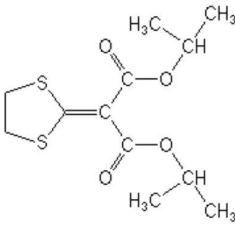
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## V Rapportageformulier isoprothiolan

SAMENVATTING		
STOFNAAM		isoprothiolan
CAS-NUMMER		50512-35-1
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	4,58 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	nvt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>
DATUM		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Isoprothiolan
IUPAC naam	diisopropyl 1,3-dithiolan-2-ylidenemalonate
Synoniemen	Di-isopropyl 1,3-dithiolane-2-ylidenemalonate; Bis(1-methylethyl) 1,3-dithiolan-2-ylidenepropanedioate (9CI); Fudiolan; IPT
CAS-nummer	50512-35-1
Stofgroep volgens EPIWin	Acrylates
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Systemic with protective and curative action. Lipid synthesis inhibitor.
Classificatie	Fungicide, Plant growth regulator
Molecuulformule	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> O <sub>4</sub> S <sub>2</sub>
Smiles (indien gebruikt)	CC(C)OC(=O)C(C(=O)OC(C)C)=C1SCCS1
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	290,39		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	54	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	332,48	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	1,91	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	54	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	2,79 <b>3,32</b>	experimenteel	ecosar Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,75	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	1,65	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	10,2 <b>10,3</b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database
pKa	-		

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	131,8	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	6,8		Footprint
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	8,1		US-EPA Aquire
<i>Oryzias latipes</i>	2 dagen	LC50	5,9		US-EPA Aquire
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	62		Footprint
<b>algen</b>					
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	3 dagen	EC50	<b>4,58</b>		Footprint
<b>amfibien</b>					
<i>Rana limnocharis</i>	2 dagen	LC50	21,70		US-EPA Aquire
<i>Rana limnocharis</i>	2 dagen	LC50	7,79		US-EPA Aquire
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 4,58 µg/L	EC50 alg van 4,58 mg/l gebruikt. AF = 1000

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		$K_{\text{susp/water}} = 14,84 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

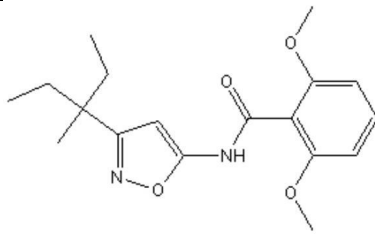
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 16,93 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	



## W Rapportageformulier isoxaben

SAMENVATTING		
STOFNAAM		isoxaben
CAS-NUMMER		82558-50-7
VOORGESTELDE ad hoc MTR	opp. water	0,11 µg/L
	grondwater	XXXX µg/L
	sediment	nvt
	bodem	XXXX µg/kg dwt
	lucht	XXXX µg/m <sup>3</sup>
DATUM		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	isoxaben
IUPAC naam	N-[3-(1-ethyl-1-methylpropyl)-1,2-oxazol-5-yl]-2,6-dimethoxybenzamide
Synoniemen	2,6-Dimethoxy-N-(3-(1-ethyl-1-methylpropyl)-5-isoxazolyl)benzamide; Benzamizole; N-(3-(1-Ethyl-1-methylpropyl)-5-isoxazolyl)-2,6-dimethoxybenzamide; Prolan; Benzamide, 2,6-dimethoxy-N-(3-(1-ethyl-1-methylpropyl)-5-isoxazolyl)-; Benzamide, N-(3-(1-ethyl-1-methylpropyl)-5-isoxazolyl)-2,6-dimethoxy-
CAS-nummer	82558-50-7
Stofgroep volgens EPIWin	Neutral Organics
Bekend gebruik (beperkt)	Herbicide
Toxiciteitsmechanisme	Selective, disrupts root and stem development in germinating seeds
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>18</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
Smiles (indien gebruikt)	COc1cccc(OC)c1C(=O)Nc2onc(C(C)(CC)CC)c2
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	332,40		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	177,5	experimenteel	SRC PhysProp database
Kookpunt (°C)	469,11	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	5,5 × 10 <sup>-7</sup>	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1,42	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	3,97 <b>3,94</b>	experimenteel	ecosar Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	3,07	QSAR niet hydr. stoffen	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	2,07	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	1,3 × 10 <sup>-4</sup> <b>1,2 × 10<sup>-4</sup></b>	geschat MW × VP / WS	SRC PhysProp database
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	446,7	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Salmo gairdneri</i>	4 dagen	LC50	>1,0		DAR
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	>1,0		DAR
<i>Cyprinus carpio</i>	4 dagen	LC50	>1,1		DAR
<i>Cyprinodon variegatus</i>	4 dagen	LC50	>0,87		DAR
<i>Salmo gairdneri</i>	66 dagen	NOEC	0,42		DAR
<i>Pimephales promelas</i>	33 dagen	NOEC	0,40		DAR
<i>Cyprinodon variegatus</i>	4 dagen	LC50	0,87 <sup>1</sup>		Footprint
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	0,42		Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	>1,3		DAR
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	0,69		DAR / Footprint
<i>Palaemonetes pugio</i>	4 dagen	EC50	>1,0		DAR
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	1,3		Footprint
<b>algen</b>					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	4 dagen	EC50	>1,4		DAR
<i>Navicula pelliculosa</i>	3 dagen	EC50	>86		DAR
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	3 dagen	EC50	1,4		Footprint
Onbekende soort	4 dagen	NOEC	10		Footprint
<i>Selenastrum capricornutum</i>	14 dagen	NOEC	>1,4		e-toxbase
<b>insecten</b>					
<i>Chironomus riparius</i>	28 dagen	NOEC	8,0		DAR / Footprint
<b>waterplanten</b>					
<i>Lemna gibba</i>	7 dagen	EC50	<b>0,011</b>		DAR / Footprint
<b>weekdieren</b>					
<i>Mercenaria mercenaria</i>	2 dagen	EC50	>0,96		DAR
<b>sediment (indien getriggerd)</b>					
<b>bodem</b>					
<b>lucht (indien getriggerd)</b>					

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

<sup>1</sup>: Opmerkelijk dat deze waarde in de DAR als > wordt aangeduid.



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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,11 µg/L	EC50 waterplant van 0,011 mg/l gebruikt. AF = 100*

\*= LC50, min < NOEC min én uit andere groep

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2		
3		
4		
5		
6		
7		$K_{\text{susp/water}} = 218,64 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 261,48 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## X Rapportageformulier mecarbam

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		mecarbam
<b>CAS-NUMMER</b>		2595-54-2
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,0013 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	mecarbam
IUPAC naam	S-(N-ethoxycarbonyl-N-methylcarbamoylmethyl) O,O-diethyl phosphorodithioate
Synoniemen	Criotox; Dithiophosphate de O,O-diethyle et de S-N-methyl N-carboethoxy carbamoylmethyle; Ethyl (diethoxyphosphinothiylthio)acetyl(methyl)carbamate; Ethyl N-(diethoxythiophosphorylthio)acetyl-N-methylcarbamate; Ethyl(((diethoxyphosphinothiyl)thio)acetyl)methylcarbamate; Murphotox; O,O-Diethyl S-((ethoxycarbonyl)methylcarbamoyl)methyl phosphorodithioate; S-((Ethoxycarbonyl)methylcarbamoyl)methyl O,O-diethyl phosphorodithioate; Pestan; 7-Oxa-5-thia-2-aza-6-phosphanonanoic acid, 6-ethoxy-2-methyl-3-oxo-, ethyl ester, 6-sulfide; Carbamic acid, (mercaptoacetyl)methyl-, ethyl ester, O,O-diethyl phosphorodithioate
CAS-nummer	2595-54-2
Stofgroep volgens EPIWin	Esters, Imides
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide, Acaricide
Toxiciteitsmechanisme	Contact and stomach action with slight systemic properties
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>5</sub> PS <sub>2</sub>
Smiles (indien gebruikt)	CCOC(=O)N(C)C(=O)CSP(=S)(OCC)OCC
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	329,38		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	84,12	geschat	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	144	experimenteel, 2.6 Pa	SRC PhysProp database
	416,83	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	4,3 × 10 <sup>-4</sup>	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1000	experimenteel, 21 °C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	2,29		ecosar
	<b>3,26</b>	geschat	Bio-Loom CLogP
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	2,62	QSAR Esters	Handreiking afleiding ind. MKN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log $K_{p, \text{susp-water}}$ (log [L/kg])	1,62	$K_{oc} \times f_{oc, \text{susp}}$	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$9,12 \times 10^{-5}$ $13,4 \times 10^{-5}$	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database Epiwin 3.12
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	117,5	Handreiking afleiding ind. MKN

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

## 4. TOXICITEIT

### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Aphanius fasciatus</i>	4 dagen	LC50	0,052	marien	US-EPA Aquire
<i>Rasbora heteromorpha</i>	4 dagen	LC50	<b>0,004</b>		US-EPA Aquire / Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
<b>algen</b>					
<b>amfibien</b>					
<i>Bufo vulgaris formosus</i>	1 dag	LC50	14,0		US-EPA Aquire
<i>Bufo vulgaris formosus</i>	1 dag	LC50	18,0		US-EPA Aquire
<i>Bufo vulgaris formosus</i>	1 dag	LC50	24,0		US-EPA Aquire
<i>Bufo vulgaris formosus</i>	1 dag	LC50	27,0		US-EPA Aquire
<b>insecten</b>					
<i>Cloeon dipterum</i>	2 dagen	LD50	0,15		US-EPA Aquire
<b>weekdieren</b>					
<i>Cipangopaludina malleata</i>	2 dagen	LC50	23,0		US-EPA Aquire
<i>Indoplanorbis exustus</i>	2 dagen	LC50	17,0		US-EPA Aquire
<i>Physella acuta</i>	2 dagen	LC50	5,7		US-EPA Aquire
<i>Semisulcospira libertina</i>	2 dagen	LC50	25,0		US-EPA Aquire
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

Opmerking: De toxdata van de ongewervelde groepen insecten en weekdieren zijn gebruikt als vervanging voor de ongewervelde basisgroep kreeftachtigen

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,0013 µg/L	LC50 vis van 0,004 mg/l gebruikt. AF = 3000

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		$K_{\text{susp/water}} = 11,32 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	

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

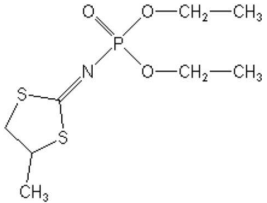
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 12,70 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	



## Y Rapportageformulier mefosfolan

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		mefosfolan
<b>CAS-NUMMER</b>		950-10-7
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	0,013 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Mefosfolan
IUPAC naam	diethyl [( <i>EZ</i> )-4-methyl-1,3-dithiolan-2-ylidene]phosphoramidate
Synoniemen	Cytrolane; Mephosfolan; (40-Methyl-1,3-dithiolan-2-ylidene)phosphoramidic acid diethyl ester; (Diethoxyphosphinyl)dithioimidocarbonic acid cyclic propylene ester; 1,2-Propanedithiol, cyclic ester with P,P-diethyl phosphonodithioimidocarbonate; 2-(Diethoxyphosphinylimino)-4-methyl-1,3-dithiolane; O,O-Diethyl(4-methyl-1,3-dithiolan-2-ylidene)phosphoramidate; P,P-Diethyl cyclic propylene ester of phosphonodithioimidocarbonic acid; Phosphonodithioimidocarbonic acid cyclic propylene P,P-diethyl ester; Phosphoramidic acid, (4-methyl-1,3-dithiolan-2-ylidene)-, diethyl ester; 1,3-Dithiolane, 2-(diethoxyphosphinylimino)-4-methyl-; Phosphoramidic acid, (4-methyl-1,3-dithiolan-2-ylidene)-, diethyl ester; Phosphoramidic acid, N-(4-methyl-1,3-dithiolan-2-ylidene)-, diethyl ester
CAS-nummer	950-10-7
Stofgroep volgens EPIWin	Ester
Bekend gebruik (beperkt)	Insecticide
Toxiciteitsmechanisme	Systemic
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>3</sub> PS <sub>2</sub>
Smiles (indien gebruikt)	O=P(OCC)(OCC)N=C(SCC1C)S1
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	269,32		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	83,56	geschat	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	352,44 120	geschat experimenteel, 0,13 Pa	Epiwin 3.12 SRC PhysProp database
Dampdruk (Pa)	4,24 × 10 <sup>-3</sup>	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	57	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	1,58 <b>1,04</b>	experimenteel	ecosar Bio-Loom

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Log $K_{oc}$ (log [L/kg])	1,58	QSAR Ester	Handreiking afleiding ind. MKN
Log $K_{p, susp-water}$ (log [L/kg])	0,58	$K_{oc} \times f_{oc, susp}$	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$1,21 \times 10^{-5}$ <b><math>2,00 \times 10^{-2}</math></b>	geschat, 25°C $MW \times VP / WS$	SRC PhysProp database
pKa			

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	<b>33,7</b>	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Carassius auratus</i>	4 dagen	LC50	<b>0,04</b>	Lage betrouwbaarheid	Footprint
<b>kreeftachtigen</b>					
Onbekende soort	2 dagen	EC50	0,0003	Lage betrouwbaarheid	Footprint
<b>algen</b>					
Onbekende soort	3 dagen	EC50	52,8	Lage betrouwbaarheid	Footprint
<b>insecten</b>					
<i>Culex pipiens quinquefasciata</i>	1 dag	LC50	0,17		US-EPA Aquire / e-toxbase
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

**Opmerking:** Toxdata van onbekende soort zijn niet meegenomen in de afleiding van de ad hoc MTR<sub>eco</sub>.

Het insect *Culex* is gebruikt als vervanging voor de basisgroep kreeftachtigen

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

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 0,013 µg/L	LC50 vis van 0,04 mg/l gebruikt. AF = 3000



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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		$K_{\text{susp/water}} = 1,85 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	

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

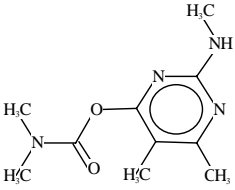
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 1,34 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX $\mu\text{g}/\text{kg}_{\text{dwt}}$	



## Z Rapportageformulier pirimicarb-desmethyl

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		pirimicarb-desmethyl
<b>CAS-NUMMER</b>		30614-22-3
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	433,1 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	pirimicarb-desmethyl
IUPAC naam	5,6-dimethyl-2-(methylamino)-4-pyrimidinyl ester
Synoniemen	Carbamic acid, dimethyl-, 5,6-dimethyl-2-(methylamino)-4-pyrimidinyl ester (8CI9CI); Carbamic acid, dimethyl-, 5,6-dimethyl-2-(methylamino)-4-pyrimidinyl ester; Desmethyl-pirimicarb, Pestanal; Dimethylcarbamic acid 5,6-dimethyl-2-(methylamino)-4-pyrimidinyl ester; Pirimicarb III
CAS-nummer	30614-22-3
Stofgroep volgens EPIWin	Esters
Bekend gebruik (beperkt)	
Toxiciteitsmechanisme	
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>
Smiles (indien gebruikt)	<chem>n(c(c(C)c1OC(=O)N(C)C)c(n1)NC</chem>
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	224,26		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	113,59	geschat	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	324,88	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	$9,2 \times 10^{-3}$	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	6115	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Log K <sub>ow</sub>	0,85 <b>1,12</b>	geschat	ecosar Bio-Loom CLogP
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	1,62	QSAR Esters	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	0,62	$K_{oc} \times f_{oc,susp}$	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	$3,37 \times 10^{-4}$	MW × VP / WS	
pKa			

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	1,78	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
Fish	4 dagen	LC50	134,22	QSAR carbamate esters	Ecosar v1.00h
Fish		NOEC	1,34	QSAR carbamate esters; ChV=1,90	Ecosar v1.00h
Fish (SW)	4 dagen	LC50	0,34	QSAR carbamate esters	Ecosar v1.00h
Fish (SW)		NOEC	0,020	QSAR carbamate esters; ChV=0,028	Ecosar v1.00h
Fish	4 dagen	LC50	1617,39	QSAR neutral organics	Ecosar v1.00h
Fish		NOEC	111,36	QSAR neutral organics; ChV=157,48	Ecosar v1.00h
<b>kreeftachtigen</b>					
Daphnid	2 dagen	LC50	3,04	QSAR carbamate esters	Ecosar v1.00h
Daphnid		NOEC	0,13 <sup>3</sup>	QSAR carbamate esters; ChV=0,19 <sup>3</sup>	Ecosar v1.00h
Daphnid	2 dagen	LC50	812,36	QSAR neutral organics	Ecosar v1.00h
Daphnid		NOEC	<b>43,31</b>	QSAR neutral organics; ChV=61,25	Ecosar v1.00h
<b>algen</b>					
Green Algae	4 dagen	EC50	1,73*10 <sup>5</sup>	QSAR carbamate esters <sup>3</sup>	Ecosar v1.00h
Green Algae		NOEC	2647,10	QSAR carbamate esters; ChV=3743,56	Ecosar v1.00h
Green Algae	4 dagen	EC50	218,67	QSAR neutral organics	Ecosar v1.00h
Green Algae		NOEC	45,38	QSAR neutral organics; ChV=64,18	Ecosar v1.00h
<b>sediment (indien getriggerd)</b>					
<b>bodem</b>					
<b>lucht (indien getriggerd)</b>					

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

#### Opmerking:

- 1) Ecosar werkt met twee QSAR's. Die van de carbamate esters kent voor alle organismen echter een te lage n (n<5) en/of een te lage r<sup>2</sup> (r<sup>2</sup><0,70) en kunnen we dus niet gebruiken. Ad hoc MTR daarom gebaseerd op QSAR voor neutral organics, die wel beduidend hoger ligt.
- 2) NOEC is berekend uit ChV/√2.
- 3) Minder betrouwbaar, waarde afgeleid van een geschatte SAR waarbij gebruik is gemaakt van acuut:chronisch ratio en regressie technieken, dan wel de stof is niet oplosbaar genoeg om het voorspelde effect te meten.

Vis acuut: r2 te laag

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja	QSAR Ecosar; neutral organics; n=23; R <sup>2</sup> =0,86
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 433,1 µg/L	Gebruikt: NOEC daphnia = 43,31 mg/l; AF = 10 * 10 (extra veiligheidsfactor vanwege QSAR)

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

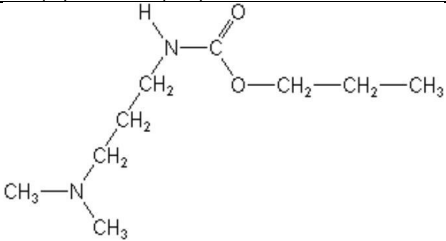
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## AA Rapportageformulier propamocarb

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		propamocarb
<b>CAS-NUMMER</b>		24579-73-5
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	710 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

## 1. IDENTITEIT

Stofnaam	Propamocarb
IUPAC naam	Propyl-3-(dimethylamino)propylcarbamate
Synoniemen	Carbamic acid, (3-(dimethylamino)propyl)-, propyl ester (8CI)(9CI); Propyl (3-(dimethylamino)propyl)carbamate; Carbamic acid, (3-(dimethylamino)propyl)-, propyl ester; Propyl (3-(dimethylamino)propyl)carbamate
CAS-nummer	24579-73-5
Stofgroep volgens EPIWin	Aliphatic Amines, Esters
Bekend gebruik (beperkt)	Pesticide
Toxiciteitsmechanisme	Systemic, with protective action absorbed by roots and leaves and translocated. Lipid synthesis inhibitor
Classificatie	Fungicide
Molecuulformule	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
Smiles (indien gebruikt)	CN(C)CCCNC(=O)OCCC
Structuurformule	

## 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	288,27		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	37,42	geschat	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	244,93	geschat	Epiwin 3.12
Dampdruk (Pa)	7,30	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Oplosbaarheid in water (mg/L)	9 × 10 <sup>5</sup>	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	1,13 <b>1,12</b>	experimenteel	ecosar Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	1,61	QSAR Esters	Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	0,62	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	1,5 × 10 <sup>-9</sup>	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
pKa	9,5	experimenteel	SRC PhysProp database

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)	1,78	Handreiking afleiding ind. MKN

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

### 4. TOXICITEIT

#### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
<i>Cyprinodon variegatus</i>	4 dagen	LC50	>96,8		e-toxbase
<i>Cyprinodon variegatus</i>	4 dagen	LC50	96,8		Footprint
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	>99	Propamocarb HCl	DAR
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	>92	Propamocarb HCl	DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	4 dagen	LC50	>100	Propamocarb HCl	DAR
<i>Lepomis macrochirus</i>	4 dagen	LC50	240	Propamocarb HCl	DAR
<i>Cyprinus carpio</i>	4 dagen	LC50	>100	Propamocarb HCl	DAR
<i>Cyprinodon variegatus</i>	4 dagen	LC50	>110	Propamocarb HCl	DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	21 dagen	NOEC	≥57	Propamocarb HCl	DAR
<i>Pimephales promelas</i>	21 dagen	NOEC	<b>6,3*</b>	Propamocarb HCl	DAR
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	28 dagen	NOEC	90	Propamocarb HCl	DAR
<i>Pimephales promelas</i>	21 dagen	NOEC	37,5**	Propamocarb HCl	DAR
<b>kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	>106	Propamocarb HCl	DAR
<i>Mysidopsis bahia</i>	4 dagen	LC50	>105	Propamocarb HCl	DAR
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	>100	Propamocarb HCl	DAR
<i>Americamysis bahia</i>	4 dagen	LC50	50	Propamocarb HCl	DAR
<i>Americamysis bahia</i>	4 dagen	NOEC	15	Propamocarb HCl	DAR
<i>Daphnia magna</i>	2 dagen	EC50	106		Footprint
<i>Americamysis bahia</i>	4 dagen	LC50	104,7		Footprint
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	12,3	Propamocarb HCl	DAR
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	30	Propamocarb HCl	DAR
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	8,9		e-toxbase
<b>algen</b>					
<i>Scenedesmus quadricauda</i>	3,875 dagen	EC50	301		US-EPA Aquire
<i>Scenedesmus quadricauda</i>	3 dagen	EC50	301		Footprint
<i>Scenedesmus quadricauda</i>	3 dagen	EC50	286	Propamocarb HCl	DAR
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	3 dagen	EC50	>85	Propamocarb HCl	DAR
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	3 dagen	EC50	176	Propamocarb HCl	DAR
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	3 dagen	NOEC	71	Propamocarb HCl	DAR
<i>Scenedesmus quadricauda</i>	3,875 dagen	NOEC	22,4		e-toxbase
<b>weekdieren</b>					
<i>Crassostrea virginica</i>	4 dagen	EC50	43,9	Propamocarb HCl	DAR
<i>Crassostrea virginica</i>	4 dagen	EC50	46	Propamocarb HCl	DAR
<i>Crassostrea virginica</i>	4 dagen	NOEC	<b>7,1</b>	Propamocarb HCl	DAR
<b>waterplanten</b>					
<i>Lemna gibba</i>	14 dagen	EC50	>18	Propamocarb HCl	DAR
<i>Lemna minor</i>	7 dagen	NOEC	166	Propamocarb HCl	DAR



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

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

Vis en kreeftachtigen uit footprint staan in US-EPA OPP vermeld als >, dar opvragen

\* the result is likely to have been influenced by a temporary increase in test concentrations due to a malfunction in the dosing system which resulted in measured concentrations of up to 146 mg/l on day 14. Therefore, the NOEC is a conservative estimate of chronic toxicity. Daarom gekozen voor 1 na laagste NOEC (die is 7,1 ipv 6,3)

\*\* gebruikt door de DAR als laagste vis, maar in test is geen effect waargenomen en is dit de hoogste testconcentratie

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Ja	
3		
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 710 µg/L	Laagste NOEC weekdier = 7,1 mg/l; AF=10

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		$K_{\text{susp/water}} = 1,40 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

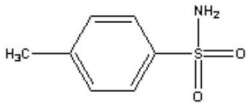
stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		$K_{\text{bodem/water}} = 1,90 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## BB Rapportageformulier p-tolueensulfonamide

<b>SAMENVATTING</b>		
<b>STOFNAAM</b>		p-tolueensulfonamide
<b>CAS-NUMMER</b>		70-55-3
<b>VOORGESTELDE ad hoc MTR</b>	<b>opp. water</b>	266,8 µg/L
	<b>grondwater</b>	XXXX µg/L
	<b>sediment</b>	nvt
	<b>bodem</b>	XXXX µg/kg dwt
	<b>lucht</b>	XXXX µg/m <sup>3</sup>
<b>DATUM</b>		

### 1. IDENTITEIT

Stofnaam	p-tolueensulfonamide
IUPAC naam	
Synoniemen	4-Methylbenzenesulfonamide; 4-Toluenesulfonamide; 4-Toluenesulfonic acid, amide; Benzenesulfonamide, 4-methyl-; Toluene-4-sulfonamide; Toluene-p-sulphonamide; p-Methylbenzenesulfonamide; p-Tosylamide; p-Tolylsulfonamide ; para-Toluenesulfonamide
CAS-nummer	70-55-3
Stofgroep volgens EPIWin	Neutral Organics
Bekend gebruik (beperkt)	Fungicide, mildewicide in paints and coatings
Toxiciteitsmechanisme	
Classificatie	Pesticide
Molecuulformule	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub> S
Smiles (indien gebruikt)	O=S(=O)(N)c(ccc(c1)C)c1
Structuurformule	

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	waarde	Opmerking	ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	171,22		Epiwin 3.12
Smeltpunt (°C)	138,5	geschat	Epiwin 3.12
Kookpunt (°C)	307,16 214	geschat experimenteel, 1,33 × 10 <sup>3</sup> Pa	Epiwin 3.12 SRC PhysProp database
Dampdruk (Pa)	1,28 × 10 <sup>-2</sup>	geschat, 25°C	Epiwin 3.12
Oplosbaarheid in water (mg/L)	3160	experimenteel, 25°C	SRC PhysProp database
Log K <sub>ow</sub>	0,92 <b>0,82</b>	experimenteel	ecosar .Bio-Loom
Log K <sub>oc</sub> (log [L/kg])	<b>1,82</b>  1,44	geschat  QSAR niet hydr. stoffen	HSDB (toxnet.nlm.nih.gov/ Handreiking afleiding ind. MKN
Log K <sub>p, susp-water</sub> (log [L/kg])	0,44	K <sub>oc</sub> × f <sub>oc,susp</sub>	Handreiking afleiding ind. MKN
Henry coëfficiënt (Pa·m <sup>3</sup> /mol)	4,76 × 10 <sup>-2</sup> <b>6,94 × 10<sup>-4</sup></b>	geschat, 25°C MW × VP / WS	SRC PhysProp database
pKa	10,2	experimenteel, 20°C	SRC PhysProp database

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
------------	--------	------

BCF (L/kg)	0,001	geschat, HSDB (toxnet.nlm.nih.gov/)
------------	-------	--

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

## 4. TOXICITEIT

### 4.2 Ecotoxiciteit

species	duur	parameter	waarde (mg/l)	opmerking	ref.
<b>vissen</b>					
Fish	4 dagen	LC50	158,28	QSAR amides	Ecosar v1.00h
Fish		NOEC	0,66	QSAR amides; ChV=0,94	Ecosar v1.00h
Fish	4 dagen	LC50	1086,85	QSAR neutral organics	Ecosar v1.00h
Fish		NOEC	74,72	QSAR neutral organics; ChV=105,67	Ecosar v1.00h
<b>kreeftachtigen</b>					
Daphnid	2 dagen	LC50	61,34	QSAR amides	Ecosar v1.00h
Daphnid		NOEC	0,57	QSAR amides; ChV=0,81	Ecosar v1.00h
Daphnid	2 dagen	LC50	550,23	QSAR neutral organics	Ecosar v1.00h
Daphnid		NOEC	<b>26,68</b>	QSAR neutral organics; ChV=41,97	Ecosar v1.00h
<b>Algen</b>					
Green Algae	4 dagen	EC50	0,75	QSAR amides	Ecosar v1.00h
Green Algae		NOEC	0,21	QSAR amides; ChV=0,29	Ecosar v1.00h
Green Algae	4 dagen	EC50	152,15	QSAR neutral organics	Ecosar v1.00h
Green Algae		NOEC	31,95	QSAR neutral organics; ChV=45,19	Ecosar v1.00h
<b>sediment</b> (indien getriggerd)					
<b>bodem</b>					
<b>lucht</b> (indien getriggerd)					

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

#### Opmerking:

- 4) Ecosar werkt met twee QSAR's. Die van de amides kent voor alle organismen echter een te lage n (n<5) en kunnen we dus niet gebruiken. Ad hoc MTR daarom gebaseerd op QSAR voor neutral organics, die wel beduidend hoger ligt.
- 5) NOEC is berekend uit ChV/√2.

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

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

Stap	resultaat	opmerking
1	Nee	
2	Nee	
3	Ja	QSAR Ecosar; neutral organics; n=23; R <sup>2</sup> =0,86
4		
5	Het ad hoc MTR <sub>eco, water</sub> is 266,8 µg/L	Gebruikt: NOEC daphnia = 26,68 mg/l; AF = 10 * 10 (extra veiligheidsfactor vanwege QSAR)

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

stap	resultaat	opmerking
1	nee	stop
2		
3		
4		
5		
6		
7		K <sub>susp/water</sub> = 2,55 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> . (EUSES-berekening).
8		
9		
10		
11	Het ad hoc MTR <sub>eco, sediment</sub> is XXXX µg/kg <sub>dwt</sub>	

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

stap	resultaat	opmerking
1		
2		
3		
4		
5		
6		K <sub>bodem/water</sub> = 2,18 m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> . (EUSES-berekening)
7		
8		
9	Het ad hoc MTR <sub>eco, bodem</sub> is XXX µg/kg <sub>dwt</sub>	



## CC Rapportageformulier

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

### 1. IDENTITEIT

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

### 2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

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

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

### 3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	waarde	ref.
BCF (L/kg)		

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

## 4. TOXICITEIT

### 4.1 Humane toxiciteit

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

### 4.2 Ecotoxiciteit

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

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

## 5. Ad hoc MTR (VIA STAPPENSHEMA)

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## Bepaling uiteindelijke ad hoc MTR

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

gg. = geen gegevens  
 nt. = niet getriggerd