

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht
Van: [1]
CC:
Datum: 21 maart 2022
Ref: 58178003NL_M038
Re: Milieukwaliteitseisen voor Hexamethyldisilazane (CAS# 999-97-3)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof hexamethyldisilazane (HMDS, CAS# 999-97-3) bevatten. Het afvalwater wordt via een persleiding op de rioolwaterzuivering Bath geloosd. RWZI-Bath loost haar effluent op de Westerschelde. [2]

De mogelijke effecten van de lozing van HMD op de functies van de Westerschelde moeten geëvalueerd met behulp van de immissie-toets. Om deze toetsing mogelijk te maken zijn ecologische waterkwaliteitsnormen. Omdat er momenteel geen ecologische waterkwaliteitsnormen beschikbaar zijn, worden hiertoe in deze rapportage voorstellen gedaan.

Datamining

In eerste instantie is de website van het RIVM geraadpleegd of voor HMDS al normen beschikbaar zijn. Hierbij is gezocht op het CAS#. Vervolgens zijn de databases van ECHA en US-EPA (Ecotox) geraadpleegd aan de hand van het CAS#. Aanvullend is gezocht naar een stofspecifiek IUCI ID [3] dan wel OECD-rapport en is een brede screening van openbare literatuur uitgevoerd [4].

De resultaten van dit literatuuronderzoek staan in Bijlage 1 (stofgegevens) en bijlage 2 (ecotoxicologische data) weergegeven.

Voorstel voor milieukwaliteitseisen

De hieronder voorgestelde waarden voor de indicatieve JG-MKE en de indicatieve MAC-MKE zijn afgeleid conform de geactualiseerde handleiding voor het afleiden van indicatieve milieukwaliteitsnormen van het RIVM [RIVM, 2022].

Overzicht van opmerkingen bij Microsoft Word - 58178003NL_M038 Voorstel milieukwaliteitseisen HMDS

Pagina: 1

≡ Nummer: 1 Auteur: _____ Onderwerp: Tekstvak Datum: 28-3-2023 10:47:59

≡ Nummer: 2 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 15:38:34

HMDS valt direct uiteen in water, is het dan wel relevant om een norm voor HMDS af te leiden? En hoe zit het met de ecotoxwaarden, zijn die voor HMDS of voor het mengsel van afbraakproducten?

≡ Nummer: 3 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 15:17:29

Die brede screening hoort eigenlijk niet bij de indicatieve normaflleiding. Inhoudelijk heb ik er geen moeite mee omdat je hiermee de dataset aanvult en verder de indicatieve methodiek toepast. Maar het lijkt me wel goed om op te merken dat je 'conform de handleiding gebruik hebt gemaakt van een bestaande internationale evaluaties'

Memo**Date:** 21 maart 2022**Ref:** 58178003NL_M038

In bijlage 3 is het stappenschema voor de afleiding van de iJG-MKE uitgewerkt. In bijlage 4 is het uitgewerkte stappenschema voor de afleiding van de iMAC-MKE weergegeven. De afgeleide waarden zijn in onderstaande tabel weergegeven:

Parameter	Waarde (mg/L)
iMAC-MKE _{zoet}	5,0
iJG-MKE _{zoet, eco}	0,0063
iJG-MKE _{water, voedselketen}	n.v.t.

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor Hexamethyldisilazane (CAS# 999-97-3) zijn:

iMAC-MKE 5000 µg/L
iJG-MKE 6,3 µg/L

Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 999-97-3, geraadpleegd op 11 Maart 2022

CompTox database [CompTox Chemicals Dashboard \(epa.gov\)](https://comptox.epa.gov/dashboard), CAS# 999-97-3, geraadpleegd op 11 Maart 2022

Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 999-97-3, accessed geraadpleegd op 11 Maart 2022

OECD, 2009. "SIDS initial Assessment Report – HMDZ (CAS# 999-97-3)"; SIAM29, 20 – 22 October 2009

PubChem database; [PubChem \(nih.gov\)](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov) geraadpleegd op 11 Maart 2022

RIVM, 2015. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen"; al, RIVM-rapport 2015-0057. 2

RIVM, 2022. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen – Deel 1 t/m Deel 5"; versie 1.0, RIVM-rapport.

Pagina: 2

≡ Nummer: 1 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 17:24:48

Het is mij volstrekt onduidelijk waar de norm op is gebaseerd. HDMS valt direct uiteen in TMS en ammoniak (NH₃). De acute studies hebben betrekking op een mengsel van TMS en ammoniak, maar worden in de bijlage gerapporteerd als HDMS. Uit OECD SIDS blijkt dat concentraties zijn gemeten als TOC, maar dat is dus ws TMS en niet HDMS.

Voor de chronische studies ga je vervolgens wel uit van de toxiciteit van ammoniak, maar daar zijn natuurlijk veel meer gegevens over dan alleen die Daphnia en visstudie. En ik vermoed dat acute tox van ammoniak ook hoger is dan van het HDMS hydrolyseproduct? Er is (hierdoor?) nu ook een bizar groot verschil tussen acuut en chronisch.

Wat mijns inziens moet gebeuren: eerst goede definitie van wat er in het milieu gebeurt na lozing. Dan voor de relevante stoffen een toetswaarde afleiden.

≡ Nummer: 2 Auteur: _____ Onderwerp: Tekstvak Datum: 28-3-2023 10:49:00

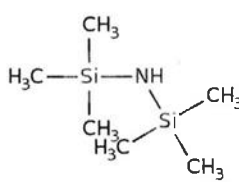
Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M038

Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieugedrag van HMDS

Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	Hexamethyldisilazane
IUPAC-naam	Bis(trimethylsilyl)amine
Synoniemen	1,1,1,3,3,3-hexamethyldisilazane 1,1,1-Trimethyl-N-(trimethylsilyl)silanamine HMDS
CAS-nummer	999-97-3
Stofgroep Epiwin	Neutral organic
Geharmoniseerde classificatie	geen ¹
Zelfclassificatie in REACH registratie	H302 Schadelijk bij inslikken H311 Giftig bij contact met de huid H332 Schadelijk bij inademing H412 Schadelijk voor in water levende organismen, met langdurige gevolgen
Molecuulformule	C ₆ H ₁₉ NSi ₂
Smiles	C[Si](C)(C)N[Si](C)(C)C
Structuurformule	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	161,9		PubChem
Smeltpunt (°C)	-76,2		ECHA ²
Kookpunt (°C)	125		ECHA ³
Oplosbaarheid in water (g/L)	0,392	@ 25°C	Epiwin ³
Log K _{ow}	0,906	berekend	CompTox ³
Dampspanning (kPa)	1,9 2,4	@ 20°C @ 25°C	ECHA
Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol)	n.v.t.		ECHA
Zuurconstante (pK _a)	n.v.t.		

Milieugedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	Niet gemakkelijk afbreekbaar biologisch		ECHA

Pagina: 3

-
- ⇒ Nummer: 1 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 15:29:16
niet compleet. Maar bedoeling is hier om de relevante gezondheidskundige classificatie te melden, dwz de H-zinnen die voedselketenroute triggeren. Dus kan ook weergegeven 'geen relevante gezondheidskundige classificatie'
-
- ⇒ Nummer: 2 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 15:39:50
wat zeggen deze waarden als de stof direct uiteen valt door hydrolyse?
-
- ⇒ Nummer: 3 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 15:40:20
waarom opeens CompTox??
EpiWin geeft 2,62 en BioLoom 1,956.
Maar gezien de hydrolysesnelheid is elke schatting irrelevant lijkt me
-
- ⇒ Nummer: 4 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 15:41:29
is dit dan niet de conclusie voor het hydrolyseproduct TMS?

Memo**Date:** 21 maart 2022**Ref:** 58178003NL_M038

DT ₅₀ hydrolyse	<<1 minuut	Valt uiteen in TMS en Ammoniak	ECHA
DT ₅₀ water/sediment			
Log K _{oc} (L/kg)	1,6	TMS	ECHA
BCF	21	berekend	PubChem

Memo

Date: 21 maart 2022
 Ref: 58178003NL_M038

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor Hexamethyldisilazane (CAS# 999-97-3)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings- duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>Geen gegevens beschikbaar</i>					
Algen					
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	72 h	EC50 growth	50	Hexamethyldisilazane	ECHA, OECD ¹
<i>Green algae</i>	72 h	EC50-biomassa	19	Hexamethyldisilazane	CompTox ²
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50	80	Hexamethyldisilazane	ECHA, OECD
<i>Daphnia magna</i>	48 h	LC50	186	Hexamethyldisilazane	PubChem
<i>Daphnia magna</i>	24 h	EC50-mobiliteit	89	Hexamethyldisilazane	CompTox
Vissen					
<i>Brachydanio rerio</i>	96 h	LC50	88	Hexamethyldisilazane	ECHA, OECD ⁴
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	167	Hexamethyldisilazane	PubMe ³

Pagina: 5

-
- Nummer: 1 Auteur: * Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 15:43:20
deze waarden zijn niet voor HDMS, maar voor het mengsel van afbraakproducten. De tox waarden zijn uitgedrukt als TOC en niet als HMDS
-
- Nummer: 2 Auteur: L..... Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 15:45:08
CompTox en PubChem zijn geen bronnen waar we iets mee doen in de indicatieve afleiding. Ik vermoed dat CompTox verwijst naar OECD. Daar staat dit getal ook in. Referentie aanpassen dus
-
- + Nummer: 3 Auteur: * Onderwerp: Cross-Out Datum: 28-4-2022 15:47:19
alleen de laagste waarde per soort noemen. PubChem en CompTox verwijzen ongetwijfeld naar OECD SIDS. Dat als referentie opgeven. Maar je hoeft alleen de laagste waarde per soort te rapporteren
-
- Nummer: 4 Auteur: * Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 15:48:15
PubMed is geen bron voor indicatieve normen

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M038

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings- duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>No data</i>					
Algen					
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	72 h	NOEC	7,5	Hexamethyldisilazane	ECHA
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	29 d	NOEC	0,0066 0,063	Ammoniak (Hydrolyse product (HEW)), omgerekend naar HDMS	ECHA
Vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	73 d	NOEC-sterfte	0,014 0,133	Ammoniak (Hydrolyse product HDMS), omgerekend naar HDMS	ECHA, CompTox

Grijs gearceerde eindpunten zijn geselecteerd voor het afleiden van de indicatieve milieukwaliteitseisen. Testen waarvan de testduur significant afwijkt van het OECD-protocol voor het onderliggende organisme zijn niet geselecteerd als basis voor het afleiden van de iMKE.

Nummer: 1 Auteur: Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 16:00:09

dit geldt ook voor acute testen. En wat doe je met TMS afbraakproduct?

=> er zijn geen chronische studies en het hele idee van ecotoxstudies met HMDS is niet oke. Maar terugvallen op een enkele waarde voor ammoniak ook niet.

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M038

Bijlage 3 Uitwerking stappenschema afleiden iJG-MKE voor HDMS (CAS# 999-97-3)

Stappenschema 2 iJG-MKE_{zoet, eco} (Deel 5 [RIVM, 2022])

Nr.	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie / actie	Ga naar
1	Is er een gedegen Nederlandse JG-MKE of MTR beschikbaar voor landoppervlaktewater	Ja	iJG-MKE wordt niet afgeleid	STOP
		Nee		2
2	Is er een gedegen MTR _{zoet} beschikbaar?	Ja		3
		Nee		4
3	Voedselketenroute afgedekt door MTR _{zoet} ?	Ja	iJG-MKE wordt niet afgeleid	STOP
		Nee		4
4	Zijn er experimentele ecotoxiciteitsdata voor water?	Ja		6
		Nee		5
5	Is het gebruik van QSARs mogelijk (overleg met een expert)?	Ja		6
		Nee	iJG-MKE wordt niet afgeleid	STOP
6	Data voor	Alleen acuut	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} = L(E)C50_{min}/AF$	12
		Alleen chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} = NOEC_{min}/AF$	11
		Acuut en chronisch	Leid beide hierboven genoemde waarde af	7
7	Dataset voor gehele acute basisset en/of gehele chronische basisset	Ja		8
		Nee		10
8	NOEC voor tenminste kreeftachtige of vis en NOEC beschikbaar voor soort met $L(E)C50_{min}$?	Ja	$iJG-MKE_{zoet, eco} = iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	9
		Nee	$iJG-MKE_{zoet, eco} =$ laagste van $iJG-MKE_{zoet, eco-acuut}$ en $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	12
9	Potentieel gevoelige groep getest?	Ja	$iJG-MKE_{zoet, eco} = iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} * 10$	12
		Nee	$iJG-MKE_{zoet, eco} = iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	12
10	Is $NOEC_{min}$ voor dezelfde soort als $L(E)C50_{min}$?	Ja		11
		Nee	$iJG-MKE_{zoet, -eco} =$ laagste van $iJG-MKE_{zoet, eco-acuut}$ en $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	12

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M038

Nr.	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie / actie	Ga naar
11	Data voor tenminste gehele chronische dataset en potentieel gevoelige groep getest	Ja	$iJG-MKE_{zoet, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} * 10$	12
		Nee	$iJG-MKE_{zoet, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	12
12	$iJG-MKE_{zout, eco} = iJG-MKE_{zoet, eco} / 10$			13
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout}$			

Resultaat voor afleiding $iJG-MKE_{zoet, eco}$ voor HDMS (CAS# 999-97-3)

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	Nee		2
2	Nee		3
3	Nee		4
4	Ja		6
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $50 / 1000 =$ $0,050 \text{ mg/L}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 0,063 / 100 =$ $0,00063 \text{ mg/L}$	7
7	Ja		8
8	Nee	Kies $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	9
9	Ja (geen specifiek werkingsmechanisme verwacht)	$iJG-MKE_{zoet, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} * 10 =$ $0,00063 * 10 =$ $0,0063 \text{ mg/L}$	12
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,0063 / 10 =$ $0,00063 \text{ mg/L}$	13
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,0063 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,00063 \text{ mg/L}$		

Er zijn ecotoxiciteitsgegevens beschikbaar voor zowel de complete acute basisset als ook de chronische basisset beschikbaar, zie ook bijlage 1. De gehanteerde assessment factoren zijn overgenomen van tabel 1 van Deel 5 van de handleiding [RIVM, 2022].

Memo**Date:** 21 maart 2022**Ref:** 58178003NL_M038

In onderstaande tabel zijn de triggers weergegeven om te bepalen of er mogelijk sprake is van doorvergiftiging in de voedselketen.

Trigger	Criterium	Resultaat voor Acetophenon
(Potentiële) zeer zorgwekkende stof	https://rvs.rivm/zeer-zorgwekkende-stoffen	Nee
Bioaccumulerende	Log K _{ow} >3 of Gemeten BCF (BAF) > 100 L/kg	Nee
OF: bekend of verdacht carcinogeen	H350 of H351	Nee
OF: bekend of verdacht mutageen voor geslachtscellen	H340 of H341	Nee
OF: bekend of verdacht effect op reproductie (op ongeboren kind of borstvoeding)	H360, H361 of H362	Nee
OF: IARC-classificatie als (verdacht) carcinogeen	Ingedeeld als IARC-groep 1, 2A of 2B	Nee

Op basis van de gegevens in bovenstaande tabel hoeft de humane route niet meegenomen te worden bij het afleiden van de iJG-MKE.

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M03B

Bijlage 4 Uitwerking stappenschema afleiden iMAC-MKE voor HDMS (CAS# 999-97-3)

Stappenschema 3 iMAC-MKE_{zoet}

Nr.	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie / actie	Ga naar
1	Is er een gedegen Nederlandse MAC-MKE of MAC _{eco} beschikbaar voor landoppervlaktewater	Ja	iMAC-MKE wordt niet afgeleid	STOP
		Nee		2
2	Zijn er experimentele ecotoxiciteitsdata voor water?	Ja		4
		Nee		3
3	Is het gebruik van QSARs mogelijk (overleg met een expert)?	Ja		4
		Nee	iMAC-MKE wordt niet afgeleid	STOP
4	Bereken iMAC-MKE _{zoet, eco}		iMAC-MKE _{zoet, eco} = L(E)C50 _{min} /AF	5
5	Bereken iMAC-MKE _{zoet, eco}		iMAC-MKE _{zout, eco} = iMAC-MKE _{zoet, eco} / 10	5

Er zijn ecotoxiciteitsgegevens beschikbaar voor de complete acute basisset, zie ook bijlage 1. De gehanteerde assessment factoren zijn overgenomen van tabel 2 van Deel 5 van de handleiding [RIVM, 2022]. Omdat de standaarddeviatie voor de log getransformeerde acute dataset voldoet aan het criterium voor een niet-specifiek werkingsmechanisme is een assessment-factor van 10 toegepast.

Basisgroep	Acute toxiciteit	Log getransformeerde acute toxiciteit
Alg	50	1,699
Geleedpotige	80	1,903
Vis	88	1,944
Berekende standaarddeviatie		0,131

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor HMDS (CAS# 999-97-3)

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	No		2
2	Yes		4
3	-		
4	Bereken iMAC-MKE _{zoet, eco}	iMAC-MKE _{zoet, eco} = L(E)C50 _{min} /AF = 50 / 10 = 5,0 mg/L	
	De iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 5,0 mg/L De iMAC-MKE _{zout, eco} is afgeleid als 0,5 mg/L		

