

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

Van:

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.

De mogelijke effecten van de lozing van HMDS 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 stof-specifiek IUCLID dan wel OECD-rapport en is een brede screening van openbare literatuur uitgevoerd.

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].

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

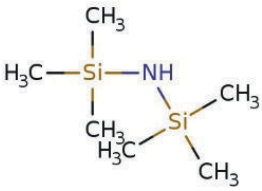
- ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 999-97-3, geraadpleegd op 11 Maart 2022
- CompTox database [CompTox Chemicals Dashboard \(epa.gov\)](https://comptox.epa.gov/dashboard), CAS# 999-97-3, geraadpleegd op 11 Maart 2022
- Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 999-97-3, accessed 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"; L.R.M. de Poorter et al, RIVM-rapport 2015-0057.
- RIVM, 2022. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen – Deel 1 t/m Deel 5"; versie 1.0, RIVM-rapport.

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M038

Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieuedrag 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
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
Kookpunt (°C)	125		ECHA
Oplosbaarheid in water (g/L)	0,392	@ 25°C	Epiwin
Log K _{ow}	0,906	berekend	CompTox
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.		

Milieuedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	Niet gemakkelijk biologisch afbreekbaar		ECHA

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
<i>Green algae</i>	72 h	EC50-biomassa	19	Hexamethyldisilazane	CompTox
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
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	167	Hexamethyldisilazane	PubMed

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M038

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellingsduur	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 HDMS), 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.

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

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 werkings-mechanisme 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.

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M038

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		