

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht
Van: 1
CC:
Datum: 30 maart 2022
Ref: 58178003NL_M015
Re: Milieukwaliteitseisen voor 1-Dodecanol (CAS# 112-53-8)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof 1-dodecanol (CAS# 112-53-8) 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 1-dodecanol 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 1-dodecanol 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 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].

Overzicht van opmerkingen bij Microsoft Word - 58178003NL_M015 Voorstel milieukwaliteitseisen 1- Dodecanol

Pagina: 1

≡ Nummer: 1 Auteur:  Onderwerp: Tekstvak Datum: 28-3-2023 11:01:29

Memo

Date: 30 maart 2022

Ref: 58178003NL_M015

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}	0,066
iJG-MKE _{zoet, eco}	0,0013
iJG-MKE _{water, voedselketen}	2,269

De iJG-MKE in eerste instantie wordt bepaald door de laagste waarde van de parameters iJG-MKE_{zoet, eco} en iJG-MKE_{water, voedselketen}. Deze waarde bedraagt 0,0013 mg/L

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor 1-dodecanol (CAS# 112-53-8) zijn:

iMAC-MKE 66 µg/L
iJG-MKE 1,3 µg/L

Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 112-53-8, geraadpleegd op 17 Februari 2022

Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 112-53-8, geraadpleegd op 4 maart 2022

OECD, 2006. "SIDS initial assessment profile Long Chain Alcohols (C6 – C22 primary aliphatic alcohols)"; SIAM 22, 18 – 21 April 2006

RIVM, 2015. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen"; 1
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.


Memo

Date: 4 maart 2022

Ref: 58178003NL_M015

Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieuedrag van 1-Dodecanol

Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	1-Dodecanol
IUPAC-naam	Dodecan-1-ol
Synoniemen	Lauryl alcohol
CAS-nummer	112-53-8
Stofgroep Epiwin	Neutral organics
Geharmoniseerde classificatie	H319 Veroorzaakt ernstige oogirritatie H400 Zeer vergiftig voor in water levende organismen H411 Giftig voor in water levende organismen. Met langdurige gevolgen
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	C ₁₂ H ₂₆ O
Smiles	CCCCCCCCCCCCO
Structuurformule	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	186,34		ECHA
Smeltpunt (°C)	24		ECHA
Kookpunt (°C)	229		ECHA
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1		ECHA
Log K _{ow}	5,4		ECHA
Dampspanning (kPa)	0,0038		ECHA
Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol)	5,14		ECHA
Zuurconstante (pK _a)	n.v.t.		

Milieuedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Afbreekbaarheid	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar		ECHA
DT ₅₀ hydrolyse		Geen schatting mogelijk	EpiWin
DT ₅₀ water/sediment			
Log K _{oc} (L/kg)	3,7		ECHA
BCF	47,59		EpiWin

Pagina: 3

-
- Nummer: 1 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 29-8-2022 08:49:20
condities noemen (temp, pH) indien relevant; ook aangeven of het geschatte of experimentele waarde is
-
- Nummer: 2 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 29-8-2022 08:58:31
Epi geeft experimentele waarde 4 mg/L bij 25 C, die ook vermelden
-
- Nummer: 3 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 29-8-2022 11:20:17
Epi geeft experimentele waarde 5,13 bij 25 C, OECD SIDS 5,36 die ook vermelden
-
- Nummer: 4 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 29-8-2022 08:56:29
bij ca. 38 C; geëxtrapoleerde waarde bij 25 C is 0,049 Pa

EPI geeft experimentele waarde van 0,11 Pa bij 25 C, die ook vermelden
-
- Nummer: 5 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 29-8-2022 08:59:14
bij 12 C; berekend met EUSES
Epi geeft experimentele waarde 2,25 bij 25 C, die ook vermelden
-
- Nummer: 6 Auteur: _____ Onderwerp: Inserted Text Datum: 29-8-2022 08:50:11
waarom niet Pa
-
- Nummer: 7 Auteur: _____ Onderwerp: Inserted Text Datum: 29-8-2022 08:50:20
3,8
-
- Nummer: 8 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 29-8-2022 09:01:51
HPLC test OECD 121
ook exp waarden Epi vermelden: 3,52
-
- Nummer: 9 Auteur: _____ Onderwerp: Sticky Note Datum: 29-8-2022 09:05:53
REACH vermeldt 85 L/kg
QSAR uit handleiding komt op 4576 met log Kow 5.13; verschil komt denk ik door biotransformation half life. Motiveren waarom je lage waarde kiest

Memo

Date: 4 maart 2022
 Ref: 58178003NL_M015

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor 1-Dodecanol (CAS# 112-53-8)

1

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings- duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>Brachionus calyciflorus</i>	48 h	EC50	0,81 – 0,88	1-Dodecanol	ECHA, Ecotox
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	48 h	IC50	1,49	1-Dodecanol	Ecotox
Algen					
<i>Desmodesmus subspicatus</i>	72h	EC50	0,66	1-Dodecanol	ECHA
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50	0,765	1-Dodecanol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50	320 ¹	1-Dodecanol	ECHA
<i>Nitocra spinipes (SW)</i>	96 h	LC50	0,9	1-Dodecanol	Ecotox
Vissen					
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	1,01	1-Dodecanol	ECHA, Ecotox
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 h	LC50	> 1	1-Dodecanol	ECHA

¹ De waarde van dit eindpunt bedraagt meer dan tweemaal de oplosbaarheid in water. In voorkomende gevallen is deze waarde niet gebruikt in de afleiding van de milieukwaliteitsis maar is deze geïnterpreteerd als "niet toxisch tot aan de maximale oplosbaarheid in water".

Pagina: 4

-
- Nummer: 1 Auteur: [redacted] Onderwerp: Sticky Note Datum: 29-8-2022 09:34:30
misschien goed om op te merken dat er in REACH dossiers meer studies zitten, maar met verwante verbindingen
-
- Nummer: 2 Auteur: [redacted] Onderwerp: Sticky Note Datum: 29-8-2022 09:24:51
Brachyonus is een rotifer, hoort bij de evertebraten en niet bij bacteriën
-
- Nummer: 3 Auteur: [redacted] Onderwerp: Inserted Text Datum: 29-8-2022 09:25:35
alleen laagste waarde per soort

Memo

Date: 30 maart 2022
 Ref: 58178003NL_M015

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellingsduur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
No data					
Algen					
<i>Desmodesmus subspicatus</i>	4 dagen	NOEC ¹	0,27	1-Dodecanol	ECHA
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC ²	0,013	1-Dodecanol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC	1	1-Dodecanol	ECHA
Vissen					
<i>Pimephales promelas</i>	35 ⁴ dagen	NOEC	0,14 ⁵	1-Pentadecanol ⁶	ECHA

Grijs gearceerde eindpunten zijn geselecteerd voor het afleiden van de indicatieve milieukwaliteitseisen.

Pagina: 5

■ Nummer: 1 ErC10	Auteur: [redacted]	Onderwerp: Inserted Text	Datum: 29-8-2022 09:35:21
■ Nummer: 2 EC10	Auteur: [redacted]	Onderwerp: Inserted Text	Datum: 29-8-2022 09:38:10
⊕ Nummer: 3	Auteur: [redacted]	Onderwerp: Cross-Out	Datum: 29-8-2022 09:38:17
■ Nummer: 4 33	Auteur: [redacted]	Onderwerp: Inserted Text	Datum: 29-8-2022 09:41:05
■ Nummer: 5 NOEC 0,26 mg/L test met penta geen effect bij hoogste concentraties en er is test met goede stof	Auteur: [redacted]	Onderwerp: Inserted Text	Datum: 29-8-2022 09:42:55
■ Nummer: 6 1-dodecanol	Auteur: [redacted]	Onderwerp: Inserted Text	Datum: 29-8-2022 09:42:22

Memo

Date: 4 maart 2022

Ref: 58178003NL_M015

Bijlage 3 Uitwerking stappenschema afleiden iJG-MKE

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: 30 maart 2022

Ref: 58178003NL_M015

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 1-Dodecanol (CAS# 112-53-8)

Step	Answer	Conclusion action	Go to	
1	Nee		2	
2	Nee		4	
4	Ja		6	
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $0,66 / 1000 =$ $0,00066 \text{ mg/L}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $0,013 / 100 =$ $0,00013 \text{ mg/L}$	7	
7	Ja		8	
8	Ja	Kies $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	9	
9	Ja (geen specifiek werkingsmechanisme verwacht)	$iJG-MKE_{zoet, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} * 10 =$ $0,00013 * 10 =$ $0,0013 \text{ mg/L}$	12	
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,0013 / 10 =$ $0,00013 \text{ mg/L}$	13	
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,0013 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,00013 \text{ mg/L}$			

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

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

Memo

Date: 30 maart 2022

Ref: 58178003NL_M015

Trigger	Criterium	Resultaat voor Decanol
(Potentiële) zeer zorgwekkende stof	https://rvs.rivm/zeer-zorgwekkende-stoffen	Nee
Bioaccumulerende	Log K _{ow} >3 of Gemeten BCF (BAF) > 100 L/kg	Ja
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 dient de humane route meegenomen te worden bij het afleiden van de iJG-MKE.

Er is een subchronische studie voor 1-teradecanol beschikbaar [ECHA], zie ook onderstaande tabel.

Test organisme	Protocol	Parameter	Blootstellings-duur	Waarde (mg/kg-lg/dag)
Wistar rats	OECD408	NOAEL	90 d	3548

Er zijn geen aanwijzingen voor genotoxiciteit en het werkingsmechanisme is duidelijk [ECHA], [IUCRID].

Op basis van het bovenstaande zijn de in onderstaande tabel weergegeven assessment factoren gehanteerd om de iHL te berekenen.

Assessment factor	Type	Waarde	Verklaring
AF1	Interspecies	10	Orale studie
AF2	Intraspecies	10	
AF3	Semi / sub(chronisch)	2	Subchronische studie
AF4/5	Data lacunes	1	Niet gerapporteerd
AF6	Genotoxiciteit	1	Niet te verwachten
AF7	extrapolatie	1	Basis is NOAEL

Pagina: 8

Nummer: 1 Auteur: Onderwerp: Sticky Note Datum: 30-8-2022 09:09:56

ik denk dat je ook moet verwijzen naar EFSA beoordelingen;
docecanol

<https://efsa.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.2903/j.efsa.2019.5591>

zie decanol: <https://efsa.onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/10.2903/j.efsa.2010.1715>

volgens mij worden deze stoffen in het lichaam snel omgezet en zou dat een reden kunnen zijn om de route humane visconsumptie niet relevant te verklaren

Nummer: 2 Auteur: Onderwerp: Inserted Text Datum: 29-8-2022 09:55:10

tetradecanol

Memo

Date: 30 maart 2022

Ref: 58178003NL_M015

$$\begin{aligned}
 iHL &= \text{NOAEL} / (\text{AF1} * \text{AF2} * \text{AF3} * \text{AF4} * \text{AF5} * \text{AF6} * \text{AF7}) \\
 &= 3548 / (10 * 10 * 2 * 1 * 1 * 1 * 1) \\
 &= 17,74 \text{ mg/kg-lg/dag}
 \end{aligned}$$

De $iJG\text{-MKE}_{\text{water, voedselketen}}$ kan vervolgens worden berekend aan de hand van vergelijking 1 en vergelijking 2 uit Deel 2 van de handleiding [RIVM, 2022].

$$\begin{aligned}
 iMKE_{\text{humaan, voedsel}} &= 0,1 * \text{DNEL} * 70 / 0,115 && \text{(vergelijking 3)} \\
 &= 0,1 * 17,74 * 70 / 0,115 \\
 &= 1080 \text{ mg/kg voedsel}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 iMKE_{\text{water, voedselketen}} &= iMKE_{\text{humaan, voedsel}} / (\text{BCF}_{\text{voedselorganisme}} * \text{BMF}) && \text{(vergelijking 4)} \\
 &= 1080 / (47,59 * 10) \\
 &= 2,269 \text{ mg/L}
 \end{aligned}$$

De waarde voor de bio-concentratiefactor BCF^{1} (= 47,59) is overgenomen uit de informatie in bijlage 1. De waarde voor de biomagnificatiefactor is bepaald conform het schema in paragraaf 2.2.7 van Deel 2 van de handleiding [RIVM, 2022]. Omdat er geen betrouwbare experimentele BCF beschikbaar is de waarde voor de BMF geselecteerd uitgaande van de $\log K_{ow}$.

Memo

Date: 30 maart 2022
Ref: 58178003NL_M015

Bijlage 4 Uitwerking stappenschema afleiden iMAC-MKE

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	0,66	-0,180
Geleedpotige	0,765	-0,116
Vis	1,01	0,004
Berekende standaarddeviatie		0,094

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor 1-Dodecanol (CAS# 112-53-8)

Stap	Antwoord	Conclusie actie	Ga naar
1	Nee		2
2	Ja		4
3	-		
4	Bereken iMAC-MKE _{zoet, eco}	iMAC-MKE _{zoet, eco} = L(E)C50 _{min} / AF = 0,66 / 10 = 0,066 mg/l	
	De iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 0,066 mg/L De iMAC-MKE _{zout, eco} is afgeleid als 0,0066 mg/L		

