


Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht
Van: 
CC:
Datum: 21 maart 2022
Ref: 58178003NL_M035
Re: Milieukwaliteitseisen voor 4-tert-butylcatechol (CAS# 98-29-3)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof 4-tert-butylcatechole (CAS# 98-29-3) 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 4-tert-butylcatechole 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 4-tert-butylcatechole 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 IUCN  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_M035 Voorstel milieukwaliteitseisen 4- tertbutylcatechol

Pagina: 1

≡ Nummer: 1 Auteur: f... Onderwerp: Tekstvak Datum: 28-3-2023 12:01:14

🗨 Nummer: 2 Auteur: ~~...~~ Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 19:41:44

Die brede screening hoort niet bij de indicatieve normafleiding. Er is geen internationale evaluatie voor deze stof dus dat is ook geen reden om daarop terug te vallen. CompTox hoort niet bij de standaard databronnen van de indicatieve methodiek

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M035

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} | 0,0012 |
| iJG-MKE _{zoet, eco} | 0,00012 |
| iJG-MKE _{water, voedselketen} | n.v.t. |

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor 4-tert-Butylcatechol (CAS# 98-29-3), afgerond op twee significante cijfers, zijn:

iMAC-MKE 1,2 µg/L
iJG-MKE 0,12 µg/L

Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 98-29-3, geraadpleegd op 10 Maart 2022

CompTox database [CompTox Chemicals Dashboard \(epa.gov\)](https://www.epa.gov/compotox), CAS# 98-29-3, geraadpleegd op 16 Maart

RIVM, 2015. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen"; al, RIVM-rapport 2015-0057. 1

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

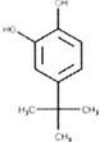
Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M035

Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieuedrag van 4-tert-butylcatechol

Identificatie en Classificatie

| Parameter | Waarde |
|--------------------------------|--|
| Stofnaam | 4-tert-butylcatechol |
| IUPAC-naam | 4-tert butylbenzeen-1,2-diol |
| Synoniemen | 4-tert-butylpyrocatechol 4-tert-Butyl-1,2-dihydroxybenzeen |
| CAS-nummer | 98-29-3 |
| Stofgroep Epiwin | Fenolen, poly |
| Geharmoniseerde classificatie | H302+H312 Schadelijk bij inslikken en contact met de huid H314 Veroorzaakt ernstige brandwonden en oogletsels H317 Kan allergische huidreactie veroorzaken H400 Zeer giftig voor in water levende organismen H411 Giftig voor in water levende organismen, met langdurige gevolgen |
| REACH / Zeer Zorgwekkende Stof | Nee |
| Molecuulformule | C ₁₀ H ₁₄ O ₂ |
| Smiles | CC(C)(C)C1=CC=C(O)C(O)=C1 |
| Structuurformule |  |

Fysisch-Chemische eigenschappen

| Parameter | Waarde | Opmerking | Ref. |
|--|-----------------|------------------------|--------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 166,22 | | ECHA |
| Smeltpunt (°C) | 54,95 | | ECHA |
| Kookpunt (°C) | 290,5 | | ECHA |
| Oplosbaarheid in water (g/L) | 4,2 | | ECHA |
| Log K _{ow} | 2,81 | | Epiwin |
| Dampspanning (kPa) | 2,004 31,187 | @ 165,4°C @243,1 °C | ECHA |
| Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol) | 1,87E-05 | | Epiwin |
| Zuurconstante (pK _a) | 9,53 | @20°C | ECHA |

Milieuedrag

| Parameter | Waarde | Opmerking | Ref |
|---------------------------------|---|--------------|-----------------------|
| Afbreekbaarheid | Gemakkelijk biologisch afbreekbaar ¹ | | ECHA |
| DT ₅₀ hydrolyse | | | |
| DT ₅₀ water/sediment | | ² | |
| Log K _{oc} (L/kg) | 1,37 | | ECHA |
| BCF | 40,57 | | EpiSuite ³ |

Pagina: 3

Nummer: 1 Auteur: ██████ Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 20:06:06
Volgens ECHA dossier inherently biodegradable

Nummer: 2 Auteur: ██████ Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 20:07:18
HPLC methode toevoegen bij opmerking

Nummer: 3 Auteur: ██████ Onderwerp: Inserted Text Datum: 28-4-2022 20:02:51
berekende waarde volgens handleiding gebruiken = 49

Memo

Date: 21 maart 2022
 Ref: 58178003NL_M035

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor 4-tert-butylcatechol (CAS# 98-29-3)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

| Soort | Blootstellings- duur | Eindpunt | Waarde (mg/L) | Stof | Bron |
|---------------------------------|-------------------------|---------------------------|---------------|----------------------|-------------------|
| Bacteriën | | | | | |
| Activated sludge | 3 h | EC50- Ademhalingssnelheid | 16 | 4-tert-butylcatechol | CompTox |
| Activated sludge | 3 h | EC50 | 16 | Respiration rate | ECHA |
| Activated sludge | 3 h | NOEC | 0,6 | Respiration rate | ECHA |
| Algen | | | | | |
| <i>Raphidocelis subcapitata</i> | 72 h | EC50-groei | 10,17 | 4-tert-butylcatechol | ECHA |
| Kreeftachtigen | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 24 h | EC50 | 0,94 | 4-tert-butylcatechol | ECHA |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 h | EC50 | 0,48 | 4-tert-butylcatechol | ECHA ¹ |
| <i>Clausocalanus furcatus</i> | 72 h | EC50 | 10,17 | 4-tert-butylcatechol | CompTox |
| Vissen | | | | | |
| <i>Brachydanio rerio</i> | 96 h | LC50 | 0,12 | 4-tert-butylcatechol | ECHA |

Pagina: 4

Nummer: 1 Auteur: Onderwerp: Sticky Note Datum: 28-4-2022 19:55:39

ik kan die waarde niet vinden in CompTox. Ik zie in CompTox sowieso alleen maar toxicologische informatie en geen ecotox. Onduidelijk waar dit getal vandaan komt. Het lijkt ook verdacht veel op de waarde voor R subcapitata of is dat toeval ...?

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M035

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

| Soort | Blootstellings-duur | Eindpunt | Waarde (mg/L) | Stof | Bron |
|---------------------------------|---------------------|-----------------------|---------------|----------------------|-------------------|
| Bacteriën | | | | | |
| Activated sludge | 3 h | EC50-respiration rate | 16 | 4-tert-butylcatechol | ECHA |
| Activated sludge | 3 h | NOEC-respiration rate | 0,6 | 4-tert-butylcatechol | ECHA |
| Algen | | | | | |
| <i>Raphidocelis subcapitata</i> | 72 h | EC10-groei | 2,29 | 4-tert-butylcatechol | ECHA ¹ |
| <i>Raphidocelis subcapitata</i> | 72 h | NOEC-groei | 0,2 | 4-tert-butylcatechol | CompTox |
| Kreeftachtigen | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 21 d | NOEC-reproductie | 0,135 | 4-tert-butylcatechol | ECHA |
| Vissen | | | | | |
| No data | | | | | |

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.

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M035

Bijlage 3 Uitwerking stappenschema afleiden iJG-MKE voor 4-tert butylcatechol

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_M035

| 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 4-tert-butylcatechol (CAS# 98-29-3)

| Step | Answer | Conclusion action | Go to |
|------|---|---|-------|
| 1 | Nee | | 2 |
| 2 | Nee | | 3 |
| 3 | Nee | | 4 |
| 4 | Ja | | 6 |
| 6 | Acuut en chronisch | $iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $0,12 / 1000 =$ $0,00012 \text{ mg/L}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 0,135 / 500 =$ $0,00027 \text{ mg/L}$ | 7 |
| 7 | Ja | | 8 |
| 8 | Nee | Kies laagste waarde stap 6 | 12 |
| 12 | | $iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,00012 / 10 =$ $0,000012 \text{ mg/L}$ | 13 |
| 13 | Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,00012 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,000012 \text{ mg/L}$ | | |

Er zijn ecotoxiciteitsgegevens beschikbaar voor zowel de complete acute basisset als ook chronische eindpunten voor algen en geleedpotigen 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: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M035

| Trigger | Criterium | Resultaat voor 4-tert-butylcatechol |
|--|---|-------------------------------------|
| (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_M035

Bijlage 4 Uitwerking stappenschema afleiden iMAC-MKE voor 4-tert-butylcatechol (CAS# 98-29-3)

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 niet voldoet aan het criterium voor een niet-specifiek werkingsmechanisme is een assessment-factor van 100 toegepast.

| Basisgroep | Acute toxiciteit | Log getransformeerde acute toxiciteit |
|-----------------------------|------------------|---------------------------------------|
| Alg | 10,1 | 1,007 |
| Geleedpotige | 0,48 | -0,319 |
| Vis | 0,12 | -0,921 |
| Berekende standaarddeviatie | | 0,986 |

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor 4-tert-butylcatechol (CAS# 98-29-3)

| 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 = 0,12 / 100 = 0,0012 mg/L | |
| | De iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 0,0012 mg/L De iMAC-MKE _{zout, eco} is afgeleid als 0,00012 mg/L | | |