

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

Van:

CC:

Datum: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M003

Re: Milieukwaliteitseisen voor Acetaldehyde (CAS# 75-07-0)

Het afvalwater van Shell Raffinaderij Nederland (vestiging Moerdijk) kan Acetaldehyde (CAS# 75-07-0) 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 Acetaldehyde op de functies van het Westerschelde moeten geëvalueerd met behulp van de immissie-toets. Om deze toetsing mogelijk te maken zijn ecologisch waterkwaliteitsnormen en de drinkwater-richtwaarde noodzakelijk. 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 Acetaldehyde 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: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M003

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}	0,155
iJG-MKE _{zoet, eco}	0,0021
iJG-MKE _{water, voedselketen}	1,203

De waarde voor de iJG-MKE wordt bepaald door de laagste waarde van de parameters iJG-MKE_{zoet, eco} en iJG-MKE_{water, voedselketen}. De waarde bedraagt 0,021 mg/L

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor Acetaldehyde (CAS# 75-07-0) zijn:

iMAC-MKE	160 µg/L
iJG-MKE	2,1 µg/L

Referenties

Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 75-07-7, geraadpleegd op 17 Februari 2022

Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 75-07-7, geraadpleegd op 15 Februari 2022

CERI. "Hazard Assessment Report – Acetaldehyde 75-07-0"; Chemicals Evaluation and Research Institute (CERI) Japan.

RIVM, 2015. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen"; 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: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M003

Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieuedrag van Acetaldehyde

Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	Acetaldehyde
IUPAC-naam	
Synoniemen	Acetic aldehyde, Ethanal
CAS-nummer	75-07-0
Stofgroep Epiwin	Aldehydes
Geharmoniseerde classificatie	H319 Veroorzaakt ernstige oogirritatie H335 Kan irritatie van de luchtwegen veroorzaken H351 Verdacht van het veroorzaken van kanker
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Ja
Molecuulformule	C ₂ H ₄ O
Smiles	CC=O
Structuurformule	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	44,05		ECHA
Smeltpunt (°C)	-123,5		ECHA
Kookpunt (°C)	20,1		ECHA
Oplosbaarheid in water (g/L)			ECHA
Log K _{ow}	0,45		ECHA
Dampspanning (kPa)	120		ECHA
Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol)	0,000675		ECHA
Zuurconstante (pK _a)	n.v.t.		

Milieuedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	gemakkelijk afbreekbaar		ECHA
DT ₅₀ hydrolyse		Geen schatting mogelijk	EpiWin
DT ₅₀ water/sediment			
Log K _{oc} (L/kg)	3,219		EpiWin
BCF (L/kg)	3,162		EpiWin

Memo

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M008

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor Acetaldehyde (CAS# 75-07-0)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	9 h	IC50	44	Acetaldehyde	CERI, ECHA
<i>Photobacterium phosphoreum</i>	0,5 h	EC50	342	Acetaldehyde	CERI
<i>Entosiphon sulcatum</i>	72 h	EC5	52	Acetaldehyde	CERI, Ecotox
<i>Entosiphon sulcatum</i>	Niet gerapporteerd	Niet gerapporteerd	52	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Uronema parduzi</i>	20 h	EC5	57	Acetaldehyde	
<i>Chilomonas paramecium</i>	Niet gerapporteerd	Niet gerapporteerd	82	Acetaldehyde	CERI, Ecotox
Algen					
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	72h	EC50	> 100	Acetaldehyde	ECHA
<i>Navicula seminulum</i>	96 h	EC50	236,6	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Chlorococcales</i>	24 h	EC50	270	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	48 h	EC50 fotosynthese	3,359	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	48 h	EC50 populatie	4,439	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Navicula seminulum</i>	96 h	EC50	249,1	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Nitzschia linearis</i>	120 h	LC50	236,6	Acetaldehyde	CERI, Ecotox
<i>Chlamydomonas reinhardtii</i>	2 h ²	EC5	23	Acetaldehyde	CERI, Ecotox

¹ Ecotox geeft naast het CAS# voor deze rapportage geen details wat betreft de samenstelling van de geteste stof in termen van chemical grade en zuiverheid. In voorkomende gevallen is geen analyse op het testmedium uitgevoerd en wordt wat betreft het eindpunt een gehalte gerapporteerd zonder duidelijke referentie naar de onderliggende stof.

² Duur van de test wijkt significant af van het OECD-protocol voor dit organismen

Memo

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M003

Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48h	EC50	57,4	Acetaldehyde	ECHA
<i>Crangon crangon (SW)</i>	48 h	LC50	> 100	Acetaldehyde	CERI, Ecotox
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50	48,25	Acetaldehyde	CERI, Ecotox
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50	4,7	Acetaldehyde	CERI
<i>Americamysis bahia (SW)</i>	96 h	LC50	27,36	Acetaldehyde	CERI, Ecotox
<i>Americamysis bahia (SW)</i>	96 h	LC50	22,4	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Gammarus pseudolimnaeus</i>	96 h	LC50	19,3	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Americamysis bahia (SW)</i>	96 h	LC50	28,6	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Americamysis bahia (SW)</i>	48 h	LC50	100	Acetaldehyde	Ecotox
Vissen					
<i>Carassius auratus</i>	48 h	LC0	125,9	Acetaldehyde	ECHA
<i>Leuciscus idus ssp. melanotus</i>	48 h	LC0	125	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Leuciscus idus ssp. melanotus</i>	48 h	LC0	117	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Leuciscus idus ssp. melanotus</i>	48 h	LC100	156	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Leuciscus idus ssp. melanotus</i>	48 h	LC100	156	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Leuciscus idus ssp. melanotus</i>	48 h	LC50	140	Acetaldehyde	CERI, Ecotox
<i>Leuciscus idus ssp. melanotus</i>	48 h	LC50	124	Acetaldehyde	CERI, Ecotox
<i>Pimephales promelas</i>	2 h	EC50	522	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Lagodon rhomboides (SW)</i>	24 h	LC50	70	Acetaldehyde	CERI, Ecotox
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	7,1	Acetaldehyde	CERI
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	7,8	Acetaldehyde	CERI
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	30,8	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 h	LC50	53	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	36,8	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 h	LC50	2,1	Acetaldehyde	CERI
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 h	LC50	53	Acetaldehyde	CERI, Ecotox

Memo

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M003

<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	43,1	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	37,2	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 h	LC50	2,2	Acetaldehyde	CERI
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	24 h	EC50	56,4	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	24 h	EC50	32,8	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	24 h	EC50	106,6	Onbekende formulering ¹	Ecotox

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
No data					
Algen					
<i>Chlorococcales</i>	24 h	EC10	70	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Anabaena cylindrica</i>	14 d	EC50	9700	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Nostoc sp.</i>	14 d	EC50	28700	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Anabaena variabilis</i>	14 d	EC50	12700	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Anabaena sp.</i>	14 d	EC50	8000	Acetaldehyde	Ecotox
<i>Anabaena inaequalis</i>	14 d	EC50	10200	Acetaldehyde	Ecotox
Kreeftachtigen					
Niet gespecificeerd					
Vissen					
<i>Poecilia reticulata</i>	14 dagen	LC50	35	Acetaldehyde	ECHA

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

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: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M003

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 Aceetaldehyde (CAS# 75-07-0)

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	Nee, de website vermeldt een iMTR		2
2	Nee		3
3	Nee		4
4	Ja		6
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50_{min}/AF =$ $2,1 / 1000 =$ $0,0021 \text{ mg/L}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOEC_{min} / AF =$ $8000 / 1000 =$ $8,0 \text{ mg/L}$	7
7	Ja		8
8	Nee	Kies de laagste waarde uit stap 6	
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,0021 / 10 =$ $0,00021 \text{ mg/L}$	13
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,0021 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,00021 \text{ mg/L}$		

Er zijn ecotoxiciteitsgegevens beschikbaar voor de complete acute 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.

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M003

Trigger	Criterium	Resultaat voor Prpoylbenzeen
(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	Ja
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 studie gevonden die als basis voor het afleiden van een indicatieve humane limietwaarde kan dienen [ECHA].

Test organisme	Protocol	Parameter	Blootstellings -duur	Waarde (mg/kg-Ig/dag)
Wistar ratten	Vergelijkbaar met OECD407	NOAEL	28 d	125
ratten	OECD414	NOAEL	20 d	>400

Testen met Aceetaldehyde laten in vivo genotoxische activiteit zien [ECHA].

Het werkingsmechanisme is duidelijk [EPA].

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

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M003

Assessment factor	Type	Waarde	Verklaring
AF1	Interspecies	10	Orale studie
AF2	Intraspecies	10	
AF3	Semi / sub(chronisch)	6	Acute studie
AF4/5	Data lancunes	1	Niet gerapporteerd
AF6	Genotoxiciteit	10	Niet te verwachten (ECHA)
AF7	extrapolatie	1	Basis is NOAEL

$$\begin{aligned}
 \text{iHL} &= \text{NOAEL} / (\text{AF1} * \text{AF2} * \text{AF3} * \text{AF4} * \text{AF5} * \text{AF6} * \text{AF7}) \\
 &= 125 / (10 * 10 * 2 * 1 * 1 * 10 * 1) \\
 &= 0,625 \text{ mg/kg-Ig/dag}
 \end{aligned}$$

De iJG-MKEwater, voedselketen kan vervolgens worden berekend aan de hand van vergelijking 1 en vergelijking 2 uit Deel 2 van de handleiding [RIVM, 2022].

$$\begin{aligned}
 \text{iMKE}_{\text{humaan, voedsel}} &= 0,1 * \text{iHL} * 70 / 0,115 && \text{(vergelijking 1)} \\
 &= 0,1 * 1,926 * 70 / 0,115 \\
 &= 3,804 \text{ mg/kg voedsel}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{iMKE}_{\text{water, voedselketen}} &= \text{iMKE}_{\text{humaan, voedsel}} / (\text{BCF}_{\text{voedselorganisame}} * \text{BMF}) && \text{(vergelijking 2)} \\
 &= 3,804 / (3,162 * 1) \\
 &= 1,203 \text{ mg/L}
 \end{aligned}$$

De waarde voor de bio-concentratiefactor (BCF = 3,162) 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} .

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	1,8	0,255
Geleedpotige	2	0,301
Vis	1,55	0,190
Berekende standaarddeviatie		0,056

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor MEG (CAS# 107-21-1).

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 = 1,55 / 10 = = 0,155 mg/L	
	De iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 0,155 mg/L De iMAC-MKE _{zout, eco} is afgeleid als 0,0155 mg/L		