

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

Van:

CC:

Datum: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M008

Re: Milieukwaliteitseisen voor Propylbenzeen (CAS# 103-65-1)

Het afvalwater van Shell Raffinaderij Nederland (vestiging Moerdijk) kan Propylbenzeen (CAS# 103-65-1) 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 Propylbenzeen 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 Propylbenzeen 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].

Memo

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M008

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}	0,00155
iJG-MKE _{water, voedselketen}	0,00482

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 0,0155 mg/L

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor Propylbenzeen (CAS# 107-21-1) zijn:

iMAC-MKE	160 µg/L
iJG-MKE	1,6 µg/L

Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 107-21-1, geraadpleegd op 17 februari 2022

Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 107-21-1, geraadpleegd op 4 maart 2022

EPA, 2009. "Provisional Peer-Reviewed Toxicity Values for n-Propylbenzene (CAS# 103-65-1), April 2009

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.

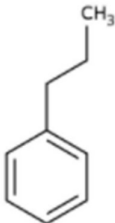
Memo

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M008

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

Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	Propylbenzeen
IUPAC-naam	
Synoniemen	1-Phenylpropane
CAS-nummer	103-65-1
Stofgroep Epiwin	Neutral Organics
Geharmoniseerde classificatie	H304 Kan dodelijk zijn als de stof bij inslikken in de luchtwegen terecht komt H335 Kan irritatie van de luchtwegen veroorzaken H411 Giftig voor in water levende organismen, met langdurige gevolgen
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	C9H12
Smiles	CCCC1=CC=CC=C1
Structuurformule	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	120.2		EpiWin
Smeltpunt (°C)	-34.98		EpiWin
Kookpunt (°C)	169.98		EpiWin
Oplosbaarheid in water (g/L)	70.73		EpiWin
Log K _{ow}	3,69		EpiWin
Dampspanning (kPa)	0.348		EpiWin
Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol)	591.3		ECHA
Zuurconstante (pK _a)	n.v.t.		

Milieuedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	Niet makkelijk afbreekbaar	Biowin3 = 2,881 Biowin5 = 0,390	EpiWin
DT ₅₀ hydrolyse			EpiWin
DT ₅₀ water/sediment			
Log K _{oc} (L/kg)	2,91		Epiwin
BCF	126,4		EpiWin

Memo

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M008

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor Propylbenzeen (CAS# 103-65-1)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>No Data</i>					
Algen					
<i>Chlamydomonas angulosa</i>	3 uur	EC50	18,02	Onbekende formulering ¹	Ecotox
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	72 uur	EC50	1,8	Propylbenzeen	Ecotox
<i>Chlorella vulgaris</i>	3 uur	EC50	16,22	Onbekende formulering ¹	Ecotox
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	24 uur	EC50	2	Propylbenzeen	Ecotox
<i>Colpidium colpoda</i>	3 uur	Not Reported	33,05	Propylbenzeen	Ecotox
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	24 uur	Not Reported	18,14	Propylbenzeen	Ecotox
Vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 uur	LC50	1,55	Propylbenzeen	Ecotox

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

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.

Memo

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M008

Soort	Blootstellings- duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
No data					
Algen					
No data					
Kreeftachtigen					
No data					
Vissen					
No data					

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

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_M008

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 Prpoylbenzeen (CAS# 103-65-1)

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	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50_{min}/AF =$ $1,55 / 1000 =$ $0,00155 \text{ mg/L}$	12
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,00155 / 10 =$ $0,000155 \text{ mg/L}$	13
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,00155 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,000155 \text{ mg/L}$		

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_M008

Trigger	Criterium	Resultaat voor Propylbenzeen
(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.

Propylbenzeen is een stof die niet in hoeveelheden groter dan 10 ton per jaar commercieel verhandeld wordt. Er is daarom (nog) geen registratiedossier op grond van Reach-regelgeving beschikbaar.

Er is een studie gevonden die als basis voor het afleiden van een indicatieve humane limietwaarde kan dienen.

Test organisme	Protocol	Parameter	Blootstellings -duur	Waarde (mg/kg-lg/dag)
Konijnen	-	NOAEL	6 maand	2,5
Sprague-Dwaley ratten		NOAEL	2 weken	1018

Er zijn geen aanwijzingen voor genotoxiciteit en 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_M008

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

$$\begin{aligned}
 \text{iHL} &= \text{NOAEL} / (\text{AF1} * \text{AF2} * \text{AF3} * \text{AF4} * \text{AF5} * \text{AF6} * \text{AF7}) \\
 &= 2 / (10 * 10 * 2 * 1 * 1 * 1 * 1) \\
 &= 0,01 \text{ mg/kg-Ig/dag}
 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
 \text{iMKE}_{\text{humaan, voedsel}} &= 0,1 * \text{iHL} * 70 / 0,115 && \text{(vergelijking 1)} \\
 &= 0,1 * 0,01 * 70 / 0,115 \\
 &= 0,609 \text{ mg/kg voedsel}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{iMKE}_{\text{water, voedselketen}} &= \text{iMKE}_{\text{humaan, voedsel}} / (\text{BCF}_{\text{voedselorganismen}} * \text{BMF}) && \text{(vergelijking 2)} \\
 &= 0,609 / (126,4 * 1) \\
 &= 0,00482 \text{ mg/L}
 \end{aligned}$$

De waarde voor de bio-concentratiefactor (BCF = 126,4) 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}.

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M008

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		