

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

Van:

CC:

Datum: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M012

Re: Milieukwaliteitseisen voor Pentaan-2-on (CAS# 107-87-9)

Het afvalwater van Shell Raffinaderij Nederland (vestiging Moerdijk) kan pentaan-2-on (CAS# 107-87-9) 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 pentaan-2-on 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 pentaan-2-on 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: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M013

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}	1,1
iJG-MKE _{zoet, eco}	0,07377
iJG-MKE _{water, voedselketen}	n.v.t.

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor Pentane-2-one (CAS# 107-87-9) zijn:

iMAC-MKE	1100 µg/L
iJG-MKE	74 µg/L

Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 107-87-9, geraadpleegd op 17 februari 2022

Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 107-87-9, geraadpleegd op 4 maart 2022

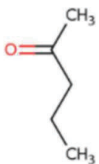
RIVM, 2015. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen"; L.R.M. de Poorter et al, RIVM-rapport 2015-0057.

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

Date: 18 Februari 2022

Ref: 58178003NL_M013

Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	pentaan-2-on
IUPAC-naam	Pentan-2-one
Synoniemen	
CAS-nummer	107-87-9
Stofgroep Epiwin	Neutral Organics
Geharmoniseerde classificatie	H302 Giftig bij inslikken H319 Veroorzaakt ernstige oogirritatie
Zelfclassificatie in REACH registratie	
Classificatie trigger voedselketen	
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	C ₅ H ₁₀ O
Smiles	CCCC(C)=O
Structuurformule	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	86,13		ECHA
Smeltpunt (°C)	-67,65		EpiWin
Kookpunt (°C)	102,7		ECHA
Oplosbaarheid in water (g/L)	72,6		ECHA
Log K _{OW}	0,857		ECHA
Dampspanning (kPa)	3,206		ECHA
Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol)	8,85		ECHA
Zuurconstante (pK _a)			

Milieugedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Afbreekbaarheid	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar		ECHA
DT ₅₀ hydrolyse			
DT ₅₀ water/sediment			
Log K _{OC} (L/kg)	8,219		ECHA
BCF	3,162		EpiWin

Memo

Date: 4 maart 2022

Ref: 58178003NL_M017

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor pentaan-2-on (CAS# 107-87-9)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	48 uur	IC50	3,27	Pentaan-2-on	Ecotox
Algen					
<i>Niet gespecificeerd</i>	72 uur	EC50	150	Pentaan-2-on	ECHA
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	48 uur	EC10	882	Pentaan-2-on	Ecotox
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	48 uur	EC10	1.890	Pentaan-2-on	Ecotox
Kreeftachtigen					
<i>Niet gespecificeerd</i>	48 uur	EC50	110	Pentaan-2-on	ECHA
Vissen					
<i>Niet gespecificeerd</i>	96 uur	LC50	1.240	Pentaan-2-on	ECHA
<i>Pimephales promelas</i>	96 uur	LC50	1.240	Pentaan-2-on	Ecotox

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

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

Memo

Date: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M013

Algen					
<i>Niet gespecificeerd</i>	72h	NOEC	73,77	Pentaaan-2-on	ECHA
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: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M013

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 Pentane-2-one (CAS# 107-87-9)

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	Nee		2
2	Nee		3
3	Nee		4
4	Ja		6
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50_{min}/AF =$ $110 / 1000 =$ $0,11 \text{ mg/L}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOEC_{min}/AF =$ $= 73,77 / 1000 =$ $0,07377 \text{ mg/L}$	7
7	Ja		8
8	Nee	Kies laagste aard uit stap 6	12
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,07377 / 10 =$ $0,007377 \text{ mg/L}$	13
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,07377 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,07377 \text{ mg/L}$		

Er zijn ecotoxiciteitsgegevens beschikbaar voor zowel de complete acute basisset als ook een chronisch eindpunt voor algen 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: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M013

Trigger	Criterium	Resultaat voor Pentane-2-one
(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.

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 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	150	2,176
Geleedpotige	110	2,041
Vis	1240	3,093
Berekende standaarddeviatie		0,572

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor Pentane-2-one (CAS# 107-87-9).

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 = 110 / 100 = 1,1 mg/L	
	De iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 1,1 mg/L De iMAC-MKE _{zout, eco} is afgeleid als 0,11 mg/L		