

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

Van:

CC:

Datum: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M001

Re: Milieukwaliteitseisen voor 1,2,4-trimethylbenzeen (CAS# 95-63-6)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof 1,2,4-trimethylbenzeen (CAS# 95-63-6) 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 1,2,4-trimethylbenzeen 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 1,2,4-trimethylbenzeen 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_M001

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}	0,36
iJG-MKE _{zoet, eco}	0,0036
iJG-MKE _{water, voedselketen}	0,0879

De iJG-MKE in eerste instantie wordt bepaald door de laagste waarde van de parameters iJG-MKE_{zoet, eco} en iJG-MKE_{water, voedselketen}. De waarde bedraagt 0,0036 mg/L

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor 1,2,4-trimethylbenzeen (CAS# 95-63-6) zijn:

iMAC-MKE 360 µg/L
iJG-MKE 3,6 µg/L

Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 95-63-6, geraadpleegd op 17 Februari 2022

Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 95-63-6, geraadpleegd op 15 Februari 2022

OECD, 2012. "SIDS initial assessment profile C9 Aromatic Hydrocarbon Solvents category";
17-19 April 2012

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

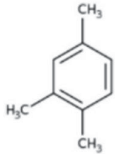
RIVM, 2022. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen – Deel 1 t/m Deel 5"; versie 1.0, RIVM-rapport.

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M001

Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieuedrag van 1,2,4-trimethylbenzeen

Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	1,2,4-trimethylbenzeen
IUPAC-naam	1,2,4 Trimethylbenzene
Synoniemen	Pseudodocumene Methyl-p-xylene
CAS-nummer	95-63-6
Stofgroep Epiwin	Neutral organics
Geharmoniseerde classificatie	H332 Schadelijk bij inademing H319 Veroorzaakt ernstige oogirritatie H335 Kan irritatie van de luchtwegen veroorzaken H315 Veroorzaakt huidirritatie H411 Schadelijk voor in water levende organismen, met langdurige gevolgen
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	C ₉ H ₁₂
Smiles	CC1=CC(C)=C(C)C=C1
Structuurformule	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	120,19		ECHA
Smeltpunt (°C)	-43,77		ECHA
Kookpunt (°C)	169,38		ECHA
Oplosbaarheid in water (g/L)	0,057		ECHA
Log K _{ow}	3,58-3,91		ECHA
Dampspanning (kPa)	0,3		ECHA
Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol)	0,007		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)	2,788		ECHA
BCF	115,4		EpiWin

Memo

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M001

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor 1,2,4-trimethylbenzeen (CAS# 95-63-6)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>No Data</i>					
Algen					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	48 h	EC50 groeisnelheid	21	1,2,4-trimethylbenzeen	Ecotox
<i>Agmenellum quadruplicatum (SW)</i>	5 - 8 d ¹	Niet gerapporteerd	1 - 10	Onbekende formulering ²	Ecotox
<i>Chlorella autotrophica</i>	5 - 8 d ¹	Niet gerapporteerd	1 - 2	Onbekende formulering ²	Ecotox
Kreeftachtigen					
<i>Niet gespecificeerd</i>	48 h	EC50	3,6	1,2,4-trimethylbenzeen	ECHA
<i>Balanus amphirrite (SW)</i>	1 h ¹	EC50	90000	Onbekende formulering ²	Ecotox
<i>Elasmopus pecteniscrus (SW)</i>	96 h	LC50	4,35	Onbekende formulering ²	Ecotox
<i>Cancer magister (SW)</i>	96 h	LC50	5,1	1,2,4-trimethylbenzeen	Ecotox
<i>Artemia salina (SW)</i>	24 h	LC50	12	1,2,4-trimethylbenzeen	Ecotox
<i>Daphnia magna</i>	48 h	LC50	3,6	1,2,4-trimethylbenzeen	Ecotox
<i>Palaemonetes pugio</i>	96 h	LC50	5,4	1,2,4-trimethylbenzeen	Ecotox
<i>Colpidium colpoa</i>	18 h	LC50	1,4	Onbekende formulering ²	Ecotox
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	24 h	LC50	11,5	Onbekende formulering ²	Ecotox

¹ Duur van de test wijkt significant af van het OECD-protocol voor dit organismen

² 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_M001

Vissen					
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	7,72	1,2,4-trimethylbenzeen	ECHA, Ecotox
<i>Tilapia zillii</i>	96 h	LC50	22,4	Onbekende formulering ²	Ecotox
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	24 h	EC50	5	Onbekende formulering ²	Ecotox
<i>Petromyzon marinus (larva)</i>	24 h	EC50	5	Onbekende formulering ²	Ecotox

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
No data					
Algen					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	48 h	EC10	14	1,2,4-trimethylbenzeen	Ecotox
Kreeftachtigen					
Daphnia	16 d	QSAR	0,259	1,2,4-trimethylbenzeen	ECHA
Vissen					
<i>Tilapia zillii</i>	30 d	Niet gerapporteerd	7,84	Onbekende formulering ²	Ecotox

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_{zoet, eco}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_M001

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 1,2,4-trimethylbenzeen (CAS# 95-63-6)

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	Nee		2
2	Nee		3
4	Ja		6
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $3,6 / 1000 =$ $0,0036 \text{ mg/L}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 7,84 / 500 =$ $0,0157 \text{ mg/L}$	7
7	Ja		8
8	Nee	Kies laagste waarde stap 6	12
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,0036 / 10 =$ $0,00036 \text{ mg/L}$	13
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,0036 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,00036 \text{ mg/L}$		

Er zijn acute ecotoxiciteitsgegevens beschikbaar voor de hele basisset als ook chronische eindpunten voor algen en vissen, zie ook bijlage 1. De gehanteerde assessment factoren zijn overgenomen van tabel 12 van het RIVM-rapport 2015-0057.

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_M001

Trigger	Criterium	Resultaat voor 1,2,4-trimethylbenzeen
(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 acute studie en een subchronische studie voor 1,2,4-trimethylbenzeen beschikbaar [ECHA], zie ook onderstaande tabel.

Test organisme	Protocol	Parameter	Blootstellings -duur	Waarde (mg/kg-Ig/dag)
Rat	Not reported	NOAEL	28 d	100
Sprague Dawly rats	OECD408	NOAEL	90 d	600 ³

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)	6	Acute studie
AF4/5	Data lacunes	1	Niet gerapporteerd
AF6	Genotoxiciteit	1	Niet te verwachten
AF7	extrapolatie	1	Basis is NOAEL

³ Read-across op basis van 1,3,5-trimethylbenzeen

Memo

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M001

$$\begin{aligned}
 iHL &= \text{NOAEL} / (\text{AF1} * \text{AF2} * \text{AF3} * \text{AF4} * \text{AF5} * \text{AF6} * \text{AF7}) \\
 &= 100 / (10 * 10 * 6 * 1 * 1 * 1 * 1) \\
 &= 0,167 \text{ mg/kg-lg/dag}
 \end{aligned}$$

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].

$$\begin{aligned}
 iMKE_{\text{humaan, voedsel}} &= 0,1 * iHL * 70 / 0,115 && \text{(vergelijking 1)} \\
 &= 0,1 * 0,167 * 70 / 0,115 \\
 &= 10,14 \text{ mg/kg voedsel}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 iMKE_{\text{water, voedselketen}} &= iMKE_{\text{humaan, voedsel}} / (\text{BCF}_{\text{voedselorganisame}} * \text{BMF}) && \text{(vergelijking 2)} \\
 &= 10,14 / (115,4 * 1) \\
 &= 0,0879 \text{ mg/L}
 \end{aligned}$$

De waarde voor de bio-concentratiefactor is (BCF = 115,4) 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}.

Bijlage 4 Uitwerking stappenschema afleiden iMAC-MKE_{zoet, eco}Stappenschema 3 iMAC-MKE_{zoet, eco}

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	21	1,322
Geleedpotige	3,6	0,556
Vis	7,72	0,888
Berekende standaarddeviatie		0,384

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor 1,2,4-trimethylbenzeen (CAS# 95-63-6).

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 = 3,6 / 10 = = 0,36 mg/L	
	De iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 0,36 mg/L De iMAC-MKE _{zout, eco} is afgeleid als 0,036 mg/L		

Memo

Date: 23 maart 2022

Ref: 58178003NL_M001
