

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

Van:

CC:

Datum: 24 januari 2022

Ref: 58178003NL_M002

Re: Milieukwaliteitseisen voor 1,3,5-trimethylbenzeen (CAS# 108-67-8)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof 1,3,5-trimethylbenzeen (CAS# 108-67-8) 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 1,3,5-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 1,3,5-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: 24 Februari 2022

Ref: 58178003NL_M002

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} | 0,6 |
| iJG-MKE _{zoet, eco} | 0,008 |
| iJG-MKE _{water, voedselketen} | 0,000316 |

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 0,000316 mg/L

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor 1,3,5-trimethylbenzeen (CAS# 108-67-8) zijn:

| | |
|----------|-----------|
| iMAC-MKE | 600 µg/L |
| iJG-MKE | 0,32 µg/L |

Referenties

- ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 108-67-8, geraadpleegd op 17 Februari 2022
- Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 108-67-8, 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, 2018. "Risicobeoordeling 42 opkomende stoffen in oppervlaktewaterbronnen voor drinkwaterbereiding – Probleemstoffen op basis van Protocol monitoring toetsing drinkwaterbronnen KRW"; RIVM briefrapport 2018-0080, R.C. van Leerdam et al.
- RIVM, 2022. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen – Deel 1 t/m Deel 5"; versie 1.0, RIVM-rapport.

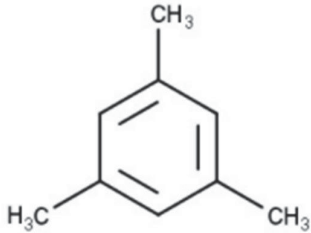
Memo

Date: 24 Februari 2022

Ref: 58178003NL_M002

Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieuedrag van 1,3,5-trimethylbenzeen

Identificatie en Classificatie

| | |
|--------------------------------|---|
| Parameter | Waarde |
| Stofnaam | 1,3,5-trimethylbenzeen |
| IUPAC-naam | Mesitylene |
| Synoniemen | Mesitylene |
| CAS-nummer | 108-67-8 |
| Stofgroep Epiwin | Neutral organics |
| Geharmoniseerde classificatie | H226 Licht ontvlambare vloeistof en damp H304 Kan dodelijk zijn als de stof bij inslikken in de luchtwegen terechtkomt H315 Veroorzaakt huidirritatie H319 Veroorzaakt ernstige oogirritatie H335 Kan irritatie van de luchtwegen veroorzaken H411 Giftig voor aquatische organismen met langdurige effecten |
| REACH / Zeer Zorgwekkende Stof | Nee |
| Molecuulformule | C9H12 |
| Smiles | CC1=CC(C)=CC(C)=C1 |
| Structuurformule |  |

Fysisch-Chemische eigenschappen

| Parameter | Waarde | Opmerking | Ref. |
|--|---------|-----------|------|
| Molecuulgewicht (g/mol) | 120,2 | | ECHA |
| Smeltpunt (°C) | -44,72 | | ECHA |
| Kookpunt (°C) | 164,74 | | ECHA |
| Oplosbaarheid in water (g/L) | 0,0482 | | ECHA |
| Log Kow | 3,42 | | ECHA |
| Dampspanning (kPa) | 0,32 | | ECHA |
| Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol) | 0,00877 | | ECHA |
| Zuurconstante (pK _a) | n.v.t. | | |

Memo

Date: 24 Februari 2022

Ref: 58178003NL_M002

Milieuedrag

| Parameter | Waarde | Opmerking | Ref |
|---------------------------------|---|-------------------------|--------|
| Afbreekbaarheid | Volledig afbreekbaar, maar niet binnen 10 dagen | | ECHA |
| DT ₅₀ hydrolyse | | Geen schatting mogelijk | EpiWin |
| DT ₅₀ water/sediment | | | |
| Log K _{oc} (L/kg) | 2,97 | | EpiWin |
| BCF | 1,924 | | EpiWin |

Memo

Date: 24 Februari 2022

Ref: 58178003NL_M002

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor 1,3,5-trimethylbenzeen (CAS# 108-67-8)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

| Soort | Blootstellings-duur | Eindpunt | Waarde (mg/L) | Stof | Bron |
|---------------------------------------|----------------------|--------------------|---------------|------------------------------------|--------------|
| Bacteriën | | | | | |
| <i>No Data</i> | | | | | |
| Algen | | | | | |
| <i>Scenedesmus subspicatus</i> | 48 h | EC50 growth | 53 | 1,3,5-trimethylbenzeen | ECHA |
| <i>Agmenelium quadruplicatum (SW)</i> | 5 - 8 d ¹ | Niet gerapporteerd | 0,5 – 10 | Onbekende formulering ² | Ecotox |
| <i>Chlorella autotrophica (SW)</i> | 5 - 8 d ¹ | Niet gerapporteerd | 2 – 5 | Onbekende formulering ² | Ecotox |
| <i>Desmedesmus subspicatus</i> | 48 h | EC50 growth | 53 | Onbekende formulering ² | Ecotox |
| Kreeftachtigen | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 48 h | EC50 | 6 | 1,3,5-trimethylbenzeen | ECHA, Ecotox |
| <i>Belanus amphitrite</i> | 1 h ¹ | EC50 | 130000 | Onbekende formulering ² | Ecotox |
| <i>Cancer magister</i> | 96 h | LC50 | 4,3 | Onbekende formulering ² | Ecotox |
| <i>Cancer magister</i> | 48 h | LC50 | 13 | Onbekende formulering ² | Ecotox |
| <i>Artemia salina</i> | 24 h | LC50 | 14,2 | 1,3,5-trimethylbenzeen | Ecotox |
| <i>Daphnia magna</i> | 24 h | ECO | 40 | Onbekende formulering ² | Ecotox |
| Vissen | | | | | |
| <i>Carassius auratus</i> | 96 h | LC50 | 12,52 | 1,3,5-trimethylbenzeen | ECHA |

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: 24 Februari 2022

Ref: 58178003NL_M002

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

| Soort | Blootstellings-duur | Eindpunt | Waarde (mg/L) | Stof | Bron |
|--------------------------------|---------------------|-------------|---------------|------------------------|--------------|
| Bacteriën | | | | | |
| No data | | | | | |
| Algen | | | | | |
| <i>Desmedesmus subspicatus</i> | 48 h | EC10 growth | 16 | 1,3,5-trimethylbenzeen | ECHA, Ecotox |
| Kreeftachtigen | | | | | |
| <i>Daphnia magna</i> | 21 d | NOEC -repro | 0,4 | 1,3,5-trimethylbenzeen | Ecotox, ECHA |
| <i>Daphnia magna</i> | 21 d | NOEC-gedrag | 2 | 1,3,5-trimethylbenzeen | Ecotox, 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.

Bijlage 3 Uitwerking stappenschema afleiden iJG-MKE_{zoet, eco}Stappenschema 2 iJG-MKE_{zoet, eco}

| 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: 24 Februari 2022

Ref: 58178003NL_M002

| 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 het 1,35-trimethylbenzeen (CAS# 108-67-8)

| Step | Answer | Conclusion action | Go to |
|------|---|---|-------|
| 1 | Nee | | 2 |
| 2 | Nee | | 4 |
| 4 | Ja | | 6 |
| 6 | Acuut en chronisch | $iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $6 / 1000 =$ $0,006 \text{ mg/L}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 0,4 / 500 =$ $0,0008 \text{ mg/L}$ | 7 |
| 7 | Ja | | 8 |
| 8 | Ja | Kies $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$ | 9 |
| 9 | Ja (geen specifiek werkings-mechanisme verwacht) | $iJG-MKE_{zoet, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronic} * 10 =$ $0,0008 * 10 =$ $0,008 \text{ mg/L}$ | 12 |
| 12 | | $iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,008 / 10 =$ $0,0008 \text{ mg/L}$ | 13 |
| 13 | Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,008 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,0008 \text{ mg/L}$ | | |

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].

Date: 24 Februari 2022

Ref: 58178003NL_M002

In onderstaande tabel zijn de triggers weergegeven om te bepalen of er mogelijk sprake is van doorvergiftiging in de voedselketen.

| Trigger | Criterium | Resultaat voor 1,3,5-trimethylbenzenen |
|--|---|--|
| (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.

Het RIVM heeft een indicatieve TDI voor 1,3,5-trimethylbenzeen afgeleid [RIVM, 2018]. Deze waarde (0,01 mg/kg-Ig/dag) is gebruikt bij het herleiden van de iJG-MKE_{water, voedselketen}. Deze parameter kan worden berekend aan de hand van vergelijking 1 en vergelijking 2 uit Deel 2 van de handleiding [RIVM, 2022].

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

$$\begin{aligned}
 iMKE_{\text{water, voedselketen}} &= iMKE_{\text{humaan, voedsel}} / (BCF_{\text{voedselorganisme}} * BMF) && \text{(vergelijking 2)} \\
 &= 0,609 / (1924 * 1) \\
 &= 0,000316 \text{ mg/L}
 \end{aligned}$$

De waarde voor de bio-concentratiefactor is (BCF = 1924) 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 | 53 | 1,724 |
| Geleedpotige | 6 | 0,778 |
| Vis | 12,52 | 1,098 |
| Berekende standaarddeviatie | | 0,481 |

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor 1,3,5-trimethylbenzeen (CAS# 108-67-8).

| 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 = 6 / 10 = = 0,6 mg/L | |
| | De iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 0,6 mg/L De iMAC-MKE _{zout, eco} is afgeleid als 0,06 mg/L | | |