

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

Van:

CC:

Datum: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M021

Re: Milieukwaliteitseisen voor Heptaan (CAS# 142-82-5)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof Heptaan (CAS# 142-82-5) 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 heptane 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 Heptaan al normen beschikbaar zijn. Hierbij is gezocht op het CAS#. Vervolgens zijn de databases van ECHA en US-EPA (Ecotox en Comptox) 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: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

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}	0,001
iJG-MKE _{zoet, eco}	0,097
iJG-MKE _{water, voedselketen}	8,22

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 0,097 mg/L.

De waarde van de iMAC-MKE_{zoet} mag niet lager zijn dan die voor de iJG-MKE_{zoet}. In voorkomende gevallen krijgt iMAC-MKE_{zoet} de waarde van de iJG-MKE_{zoet} [RIVM, 2022]

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor Heptaan (CAS# 142-82-5), afgerond op twee significante cijfers, zijn:

iMAC-MKE	97 µg/L
iJG-MKE	97 µg/L

Referenties

Comptox database, <https://comptox.epa.gov/dashboard>, CAS# 142-82-5, geraadpleegd op 16 maart 2022

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 142-82-5, geraadpleegd op 16 maart 2022

Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 149-57-5, geraadpleegd op 9 maart 2022

OECD, 2010. "SIDS Initial Assessment Profile - C7-C9 Aliphatic Hydrocarbon Solvents Category"; SIAM30, 20 – 22 April 2010

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: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

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

Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	Heptaan
IUPAC-naam	Heptaan
Synoniemen	n-heptaan
CAS-nummer	142-82-5
Stofgroep Epiwin	Neutraal organics
Geharmoniseerde classificatie	H225 Ontvlambaar vloeistof 2 H304 Kan dodelijk zijn wanneer de stof bij inslikken in de luchtwegen terechtkomt H315 Veroorzaakt huidirritatie H336 Kan slaperigheid of duizeligheid veroorzaken H410 Zeer vergiftig voor in water levende organismen, met langdurige gevolgen
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	C ₇ H ₁₆
Smiles	CCCCCCC
Structuurformule	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	100,205		COMPTOX
Smeltpunt (°C)	Niet van toepassing	Onderstaand -20°C	ECHA
Kookpunt (°C)	93-100		ECHA
Oplosbaarheid in water (g/L)	2,4	@25°C	ECHA
Log K _{ow}	4,66		EPI Suite
Dampspanning (kPa)	6,09	@25°C	ECHA
Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol)	40,023		COMPTOX
Zuurconstante (pK _a)	Niet van toepassing		

Milieuedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar conform OECD301		ECHA
DT ₅₀ hydrolyse			
DT ₅₀ water/sediment			
Log K _{oc} (L/kg)	2,38		EPI Suite
BCF L/kg	551,7		EPI Suite

Memo

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor Heptaan (CAS# 142-82-5)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>Geen gegevens beschikbaar</i>					
Algen					
<i>Algae</i>	8 h	EC50- fotosynthese	1,5	heptaan	ECOTOX
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50- Mobiliteit	1,5	heptaan	ECHA
<i>Chaetogammarus marinus</i>	96 h	LC50- Sterfte	0,2	heptaan	ECHA
<i>Chaetogammarus marinus</i>	96 h	LC50- Sterfte	0,1	heptaan	ECHA
Vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 h	LL50- Sterfte	5,738	Heptaan (Petrotox v3.04)	ECHA

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	48 h	NOELR-groei	5,057	heptaan	ECHA
Algen					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	72 h	Biomassa	0,97	heptaan	ECHA

Memo

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	21 d	NOELR - Meerdere effecten	1	heptaan	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	96 h	EC50 - Mobiliteit	82,5	heptaan	ECOTOX
Vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	28 d	NOELR-groei	1,284	Heptaan (Petrotox v 3.04)	ECHA

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

Bijlage 3 Uitwerking stappenschema afleiden iJG-MKE voor Heptaan (CAS# 142-82-5)

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: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

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 Heptaan (CAS# 142-82-5)

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	Nee		2
2	Nee		3
3	Nee		4
4	Ja		6
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $0,1 / 1000 =$ $0,0001 \text{ mg/l}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 0,97 / 100 =$ $0,0097 \text{ mg/l}$	7
7	Ja		8
8	Ja	Kies $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	9
9	Ja (geen specifiek werkings-mechanisme verwacht)	$iJG-MKE_{zoet, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} * 10 =$ $0,0097 * 10 =$ $0,097 \text{ mg/L}$	12
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,097 / 10 =$ $0,0097 \text{ mg/L}$	13
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,097 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,0097 \text{ mg/L}$		

Er zijn ecotoxiciteitsgegevens beschikbaar voor zowel de complete acute basisset als ook voor de chronische 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: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

Trigger	Criterium	Resultaat voor Heptaan
(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

Hoewel er voor Heptaan geen studies beschikbaar zijn die relateren aan blootstelling via de orale route, wordt in de ECHA-database een DNEL van 149 mg/kg-kg/dag. Deze waarde refereert naar "general population".

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].

$$\begin{aligned}
 iMKE_{\text{humaan, voedsel}} &= 0,1 * DNEL * 70 / 0,115 && \text{(vergelijking 3)} \\
 &= 0,1 * 149 * 70 / 0,115 \\
 &= 9069 \text{ mg/kg voedsel}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 iMKE_{\text{water, voedselketen}} &= iMKE_{\text{humaan, voedsel}} / (BCF_{\text{voedselorganisme}} * BMF) && \text{(vergelijking 4)} \\
 &= 9069 / (551,7 * 2) \\
 &= 8,22 \text{ mg/L}
 \end{aligned}$$

De waarde voor de bio-concentratiefactor (BCF = 551,7) 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 _{zoet, 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	1,5	0,176
Geleedpotige	0,1	-1,0
Vis	5,738	0,759
Berekende standaarddeviatie		0,859

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor Natriumzout van Ethylhexaanuur (CAS# 19766-89-3).

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 = 0,1 / 100 = 0,001 mg/L	
	The iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 0,001 mg/L		