

Memo

To: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

From:

CC:

Date: 14 maart 2022

Ref: 58178003 NL_M022

Re: Voorstel voor milieukwaliteitseisen voor Ethylhexaanzuur (CAS# 149-57-5)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof Ethylhexaanzuur (CAS# 149-57-5) 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 Ethylhexaanzuur 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 Ethylhexaanzuur 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].

Date: 14 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}	8,68
iJG-MKE _{zoet, eco}	0,312
iJG-MKE _{water, voedselketen}	0,268

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 0,268 mg/L

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor Ethylhexaanzuur (CAS# 149-57-5), afgerond op twee significante cijfers, zijn:

iMAC-MKE	8700 µg/L
iJG-MKE	270 µg/L

Referenties

Comptox database, <https://comptox.epa.gov/dashboard>, CAS# 149-57-5, geraadpleegd op 9 maart 2022

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 149-57-5, geraadpleegd op 7 maart 2022

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

PubChem (US National Institute of Health (NIH)). [Hazardous Substances Data Bank \(HSDB\) : 5649 - PubChem \(nih.gov\)](#), accessed 09 March 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.

Memo

Date: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

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

Identificatie en classificatie

Parameter	Value
Stofnaam	Ethylhexaanzuur
IUPAC-naam	2-Ethylhexanoic acid
Synoniemen	2-Ethylcaproic acid; Butylethylacetic acid; α -ethylhexanoic acid
CAS-nummer	149-57-5
Stofgroep Epiwin	Neutral organics
Geharmoniseerde classificatie	H361 Kan mogelijk de vruchtbaarheid of het ongeboren kind schaden
REACH / Substance of Very High Concern	Nee
Formula	$C_8H_{16}O_2$
Smiles	CCCCC(CC)C(=O)O
Structural formula	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molmassa (g/mol)			EpiSuite
Ethaanhexaanzuur	144,21		
Natriumzout van Ethaanhexaanzuur	166,22		
Smeltpunt (°C)	< -83°C	@ 1.013 hPa	ECHA
Kookpunt (°C)	228°C		ECHA
Oplosbaarheid in water (g/L)	1,4	@ 20°C	ECHA
Log K_{ow}	2,7	@ 25°C	ECHA
Dampdruk (kPa)	0,004	@ 20°C	ECHA
Henri coefficient (Pa.m ³ /mol)	0,412	@ 25°C	ECHA
Acid constant (pKa)	4,76		CompTox

Milieuedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Degradability	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar		ECHA
DT ₅₀ hydrolysis			
DT ₅₀ water/sediment			
Log Koc (L/kg)	1,616		EpiSuite
BCF	37,9		CompTox

Memo



Date: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor Ethylhexaanzuur en haar Natriumzout

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings- duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteria					
No Data					
Algae					
<i>Desmodesmus suspicatus</i>	72 hr	ErC50	49,3	Ethylhexaanzuur	ECHA
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	72 hr	EC50	471	Natriumzout ethylhexaanzuur	van ECHA
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	96 hr	EC50	44,39	Ethylhexaanzuur	CompTox (EPA OPPT)
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	96 hr	EC50	41	Ethylhexaanzuur	CompTox (EPA OPPT)
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	96 hr	EC50	60,5	Ethylhexaanzuur	CompTox (EPA OPPT)
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	96 hr	EC50	49,3	Ethylhexaanzuur	CompTox (EPA OPPT)
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	72 hr	ErC50	485,1	Ethylhexaanzuur	ECHA
Crustaceans					
<i>Daphnia magna</i>	48 hr	EC50	85,4	Ethylhexaanzuur	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 hr	EC50	913	Natriumzout Ethylhexaanzuur	van ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 hr	EC50	106	Ethylhexaanzuur	CompTox (EPA OPPT)
<i>Daphnia magna</i>	48 hr	EC50	85,4	Ethylhexaanzuur	CompTox (EPA OPPT)
<i>Daphnia magna</i>	48 hr	EC50	117	Ethylhexaanzuur	CompTox (EPA OPPT)
Fish					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 hr	LC50	180	Ethylhexaanzuur	ECHA

Memo

Date: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

<i>Lepomis gibbosus</i>	96 hr	LC50	270	Ethylhexaanzuur	ECHA
<i>Oryzias latipes</i>	96 hr	LC50	100	Natriumzout Ethylhexaanzuur	van ECHA
<i>Pimephales promelas</i>	96 hr	LC50	70	Ethylhexaanzuur	PubChem (EPA OPPT)

Chronische ecotoxiciteitsgegevens

Kind	Blootstellingsduur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteria					
No data					
Algae					
<i>Desmodesmus suspicatus</i>	72 hr	ErC10	31,9	Ethylhexaanzuur	ECHA
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	72 hr	NOEC	130	Natriumzout ethylhexaanzuur	van ECHA
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	96 hr	EC10	25		CompTox (EPA OPPT)
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	72 hr	EC10	33		CompTox (EPA OPPT)
Crustaceans					
<i>Daphnia magna</i>	21 days	NOEC	25	Natriumzout ethylhexaanzuur	van ECHA
<i>Daphnia magna</i>	21 days	NOEC	18	Natriumzout ethylhexaanzuur	van ECHA
<i>Daphnia magna</i>	21 days	EC10- reproduction	19,9	Ethylhexaanzuur	ECHA
Fish					
No data					

Memo

Date: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

Om mogelijke pH-effecten in de gerapporteerde eindpunten uit te sluiten is bij het afleiden van de indicatieve milieukwaliteitseisen voor Ethylhexaanzuur uitgegaan van het Natriumzout (CAS# 19766-89-3). Deze waarden zijn grijs gemarkeerd. Grijs gearceerde eindpunten zijn geselecteerd voor het afleiden van de indicatieve milieukwaliteitseisen.

Date: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

Bijlage 3 Uitwerking stappenschema afleiden iJG-MKE voor het Natriumzout van Ethylhexaanzuur (CAS# 19766-89-3)

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_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 het Natriumzout van Ethylhexaanzuur (CAS# 19766-89-3)

Step	Answer	Conclusion action	Go to	
1	Nee		2	
2	Nee		3	
3	Nee		4	
4	Ja		6	
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $100 / 1000 =$ $0,1 \text{ mg/l}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 18 / 500 =$ $0,036 \text{ mg/l}$	7	
7	Ja		8	
8	Ja	Kies $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	9	
9	Ja (geen specifiek werkings-mechanisme verwacht)	$iJG-MKE_{zoet, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronic} * 10 =$ $0,036 * 10 =$ $0,36 \text{ mg/L}$	12	
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,36 / 10 =$ $0,036 \text{ mg/L}$	13	
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,36 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,036 \text{ mg/L}$			

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: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

De berekende iJG-MKE voor het Natriumzout van Ethylhexaanzuur kan op basis van de molmassa van het zout en het zuur worden omgerekend. Aldus wordt een $iJG-MKE_{zoet, eco}$ van $(144,21 / 166,22) * 0,36 = 0,312$ mg/L berekend.

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

Trigger	Criterium	Resultaat voor Ethylhexaanzuur
(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	Ja
OF: IARC-classificatie als (verdacht) carcinogeen	Ingedeeld als IARC groep 1, 2A of 2B	Ja

Op basis van de gegevens in bovenstaande tabel dient de humane route meegenomen te worden bij het afleiden van de iJG-MKE.

Er zijn een (sub)chronische studies voor Ethylhexaanzuur beschikbaar [ECHA], zie ook onderstaande tabel.

Test organisme	Protocol	Parameter	Blootstellings -duur	Waarde (mg/kg-lg/dag)
B6C3F1 muizen	EPA OTS 795.2600	NOAEL	91 - 93 d	200
Wistar ratten	OECD443	NOAEL		800
F344 ratten	OECD414	NOAEL		100
Konijnen	OECD414	NOAEL		250

Er zijn geen aanwijzingen voor genotoxiciteit en het werkingsmechanisme is duidelijk [ECHA], [IUCLID].

Op basis van het bovenstaande zijn de in onderstaande tabel weergegeven assessment factoren gehanteerd om de iHL te berekenen.

Date: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

Assessment factor	Type	Waarde	Verklaring
AF1	Interspecies	10	Orale studie
AF2	Intraspecies	10	
AF3	Semi / sub(chronisch)	6	Acute ontwikkelingsstudie
AF4/5	Data lacunes	1	Niet gerapporteerd
AF6	Genotoxiciteit	1	Niet te verwachten (ECHA)
AF7	extrapolatie	1	Basis is NOAEL

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

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].

$$\begin{aligned}
 \text{iMKE}_{\text{humaan, voedsel}} &= 0,1 * \text{iHL} * 70 / 0,115 && \text{(vergelijking 3)} \\
 &= 0,1 * 0,167 * 70 / 0,115 \\
 &= 10,14 \text{ mg/kg voedsel}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{iMKE}_{\text{water, voedselketen}} &= \text{iMKE}_{\text{humaan, voedsel}} / (\text{BCF}_{\text{voedselorganismen}} * \text{BMF}) && \text{(vergelijking 4)} \\
 &= 10,14 / (37,9 * 1) \\
 &= 0,268 \text{ mg/L}
 \end{aligned}$$

De waarde voor de bio-concentratiefactor (BCF = 37,9) 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: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

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 10 toegepast.

Basisgroep	Acute toxiciteit	Log getransformeerde acute toxiciteit
Alg	471	2,673
Geleedpotige	913	2,960
Vis	100	2,000
Berekende standaarddeviatie		0,49

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor Natriumzout van Ethylhexaanzuur (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 = 100 / 10 = = 10 mg/L	
	The iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 10 mg/L		

Memo

Date: 14 maart 2022

Ref: 58178003NL_M022

De berekende iMAC-MKE voor het Natriumzout van Ethylhexaanzuur kan op basis van de molmassa van het zout en het zuur worden omgerekend. Aldus wordt een $iMAC-MKE_{zoet, eco}$ van $(144,21 / 166,22) * 10 = 8,68$ mg/L berekend.