

## Memo

---

**Aan:** Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

**Van:**

**CC:**

**Datum:** 2 maart 2022

**Ref:** 58178003NL\_M025

**Re:** Milieukwaliteitseisen voor Crotonaldehyde (CAS# 4170-30-3)

---

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof crotonaldehyde (CAS# 4170-30-3) 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 crotonaldehyde 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 crotonaldehyde 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:** 20 maart 2022

**Ref:** 58178003NL\_M025

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 <sub>zoet</sub>	0,0646
iJG-MKE <sub>zoet, eco</sub>	0,00247
iJG-MKE <sub>water, voedselketen</sub>	0,0254

De waarde voor de iJG-MKE wordt bepaald door de laagste waarde van de parameters iJG-MKE<sub>zoet, eco</sub> en iJG-MKE<sub>water, voedselketen</sub>. Deze waarde bedraagt 0,00247 mg/L

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor Crotonaldehyde (CAS# 4170-30-3), afgerond op twee significante cijfers, zijn:

iMAC-MKE     65 µg/L  
iJG-MKE        2,5 µg/L

### Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 4170-30-3, geraadpleegd op 14 maart 2022

CompTox database [CompTox Chemicals Dashboard \(epa.gov\)](https://www.epa.gov/comp-tox-chemicals-dashboard), CAS# 4170-30-3, geraadpleegd op 14 maart 2022

PubChem database: [Crotonaldehyde | C4H6O - PubChem \(nih.gov\)](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Crotonaldehyde), geraadpleegd op 14 maart 2022


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

Date: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL\_M025

## Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieuedrag van Crotonaldehyde

### Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	Crotonaldehyde
IUPAC-naam	But-2-enal
Synoniemen	2-butenal 1-formylpropene Crotonal Crotonic aldehyde Methyl propenal
CAS-nummer	4170-30-3
Stofgroep Epiwin	Aldehyde
Geharmoniseerde classificatie	H301 Giftig bij inslikken H310+H330 Dodelijk bij contact met de huid en bij inademing H315 Veroorzaakt huidirritatie H318 Veroorzaakt ernstig oogletsel H335 Kan irritatie van de luchtwegen veroorzaken H341 Verdacht van het veroorzaken van genetische schade H373 Kan bij langdurige of herhaalde blootstelling schade aan organen veroorzaken H400 Zeer vergiftig voor in water levende organismen H410 Zeer vergiftig voor in water levende organismen, met langdurige gevolgen
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O
Smiles	CC=CC=O
Structuurformule	

### Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	70,091		CompTox
Smeltpunt (°C)	-76,3		CompTox
Kookpunt (°C)	103		CompTox
Oplosbaarheid in water (g/L)	2,09		Epiwin
Log K <sub>ow</sub>	0,6		ECHA
Dampspanning (kPa)	3,999	@ 0°C	Epiwin
Henri-coefficient (Pa.m <sup>3</sup> /mol)	1,47		CompTox
Zuurconstante (pK <sub>a</sub> )	Geen gegevens		

**Memo****Date:** 20 maart 2022**Ref:** 58178003NL\_M025

---

**Milieuedrag**

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar conform OECD301	Niet in alle testen is voldaan aan het 10-dagen criterium	ECHA
DT <sub>50</sub> hydrolyse			
DT <sub>50</sub> water/sediment			
Log K <sub>oc</sub> (L/kg)	1,03		Epiwin
BCF	2,99		Epiwin

## Memo

Date: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL\_M025

### Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor crotonaldehyde (CAS# 4170-30-3)

#### Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
<b>Bacteriën</b>					
<i>Pseudomonas putida</i>	15 min	EC50 - Groeiremming	39300	Crotonaldehyde	ECHA
<b>Algen</b>					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	96 h	EC50	0,881	Crotonaldehyde	ECHA
<b>Kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	72 h	LC50	3,2	Crotonaldehyde	CompTox
<i>Daphnia magna</i>	24 h	EC50-mobiliteit	2	Crotonaldehyde	ECHA
<i>Acartia tonsa</i>	96 h	EC50 - groei	0,646	Crotonaldehyde	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	24 h	EC50 - Evenwicht	3,9	Crotonaldehyde	PubChem
<b>Vissen</b>					
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 h	LC50	3,5	Crotonaldehyde	PubChem
<i>Menidia beryllina</i>	96 h	LC50	1,3	Crotonaldehyde	PubChem

## Memo

Date: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL\_M025

### Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings- duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
<b>Bacteriën</b>					
<i>Pseudomonas putida</i>	18 h	EC10 -groei	10,4	Crotonaldehyde	ECHA
<b>Algen</b>					
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	7 d	TT	0,78	Crotonaldehyde	ECHA
<i>Selenastrum capricornutum</i>	96 h	NOEC	0,385	Crotonaldehyde	ECHA
<b>Kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	21 d	NOEC-mobiliteit	0,61	Crotonaldehyde	Comptox
<b>Vissen</b>					
<i>Oryzias latipes</i>	41 d	NOEC	0,0247	Crotonaldehyde	ECHA

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

## Bijlage 3 Uitwerking stappenschema afleiden iJG-MKE voor Crotonaldehyde

Stappenschema 2 iJG-MKE<sub>zoet, eco</sub> (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 <sub>zoet</sub> beschikbaar?	Ja		3
		Nee		4
3	Voedselketenroute afgedekt door MTR <sub>zoet</sub> ?	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: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL\_M025

Nr.	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie / actie	Ga naar
11	Data voor tenminste gehele chronische dataset <b>en</b> 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 Crotonaldehyde (CAS#4170-30-3)

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	Nee		2
2	Nee		3
3	Nee		4
4	Ja		6
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $0,646 / 1000 =$ $0,00646 \text{ mg/L}$  $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 0,0247 / 100 =$ $0,000247 \text{ mg/L}$	7
7	Ja		8
8	Ja	Kies $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	9
9	Ja (geen specifiek werkings-mechanisme verwacht)	$iJG-MKE_{zoet, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} * 10 =$ $0,000247 * 10 =$ $0,00247 \text{ mg/L}$	12
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,00247 / 10 =$ $0,000247 \text{ mg/L}$	13
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,00247 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,000247 \text{ mg/L}$		

Er zijn ecotoxiciteitsgegevens beschikbaar voor zowel de complete acute basisset als ook de complete chronische basisset beschikbaar, zie ook bijlage 1. De gehanteerde assessment factoren zijn overgenomen van tabel 1 van Deel 5 van de handleiding [RIVM, 2022].



Date: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL\_M025

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

Trigger	Criterium	Resultaat voor Crotonaldehyde
(Potentiële) zeer zorgwekkende stof	<a href="https://rvs.rivm/zeer-zorgwekkende-stoffen">https://rvs.rivm/zeer-zorgwekkende-stoffen</a>	Nee
Bioaccumulerende	Log K <sub>ow</sub> > 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	Ja
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 chronische studie voor Crotonaldehyde beschikbaar [ECHA], zie ook onderstaande tabel.

Test organisme	Protocol	Parameter	Blootstellings-duur	Waarde (mg/kg-Ig/dag)
F344 ratten	OECD408	NOAEL	90 dagen	2,5

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

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)	2	Chronische ontwikkelingsstudie
AF4/5	Data lancunes	1	Niet gerapporteerd
AF6	Genotoxiciteit	10	Verdacht genotoxisch
AF7	extrapolatie	1	Basis is NOAEL

## Memo

Date: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL\_M025

$$\begin{aligned}
 \text{iHL} &= \text{NOAEL} / (\text{AF1} * \text{AF2} * \text{AF3} * \text{AF4} * \text{AF5} * \text{AF6} * \text{AF7}) \\
 &= 2,5 / (10 * 10 * 2 * 1 * 1 * 10 * 1) \\
 &= 0,00125 \text{ mg/kg-lg/dag}
 \end{aligned}$$

De iJG-MKE<sub>water, voedselketen</sub> kan vervolgens worden berekend aan de hand van vergelijking 1 en vergelijking 2 uit Deel 2 van de handleiding [RIVM, 2022].

$$\begin{aligned}
 \text{iMKE}_{\text{humaan, voedsel}} &= 0,1 * \text{iHL} * 70 / 0,115 && \text{(vergelijking 1)} \\
 &= 0,1 * 0,00125 * 70 / 0,115 \\
 &= 0,0761 \text{ mg/kg voedsel}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{iMKE}_{\text{water, voedselketen}} &= \text{iMKE}_{\text{humaan, voedsel}} / (\text{BCF}_{\text{voedselorganisame}} * \text{BMF}) && \text{(vergelijking 2)} \\
 &= 0,0761 / (2,99 * 1) \\
 &= 0,0254 \text{ mg/L}
 \end{aligned}$$

De waarde voor de bio-concentratiefactor (BCF = 2,99) 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<sub>ow</sub>.

Date: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL\_M025

## Bijlage 4 Uitwerking stappenschema afleiden iMAC-MKE voor Crotonaldehyde

Stappenschema 3 iMAC-MKE<sub>zoet</sub>

Nr.	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie / actie	Ga naar
1	Is er een gedegen Nederlandse MAC-MKE of MAC <sub>eco</sub> 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 <sub>zoet, eco</sub>		iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub> = L(E)C50 <sub>min</sub> /AF	5
5	Bereken iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub>		iMAC-MKE <sub>zout, eco</sub> = iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub> / 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	0,881	- 0,055
Geleedpotige	0,646	- 0,190
Vis	1,3	0,114
Berekende standaarddeviatie		0,152

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE<sub>zoet, eco</sub> voor Crotonaldehyde (CAS# 4171-30-3).

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	No		2
2	Yes		4
3	-		
4	Bereken iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub>	iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub> = L(E)C50 <sub>min</sub> /AF = 0,646 / 10 = = 0,0646 mg/L	
	De iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub> is afgeleid als 0,0646 mg/L De iMAC-MKE <sub>zout, eco</sub> is afgeleid als 0,00646 mg/L		