

Memo

To: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

From:

CC:

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003 NL_M027

Re: Voorstel voor milieukwaliteitseisen voor Propaandiol (CAS# 57-55-6)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof 1,2-Propaandiol (CAS# 57-55-6) 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 Propaandiol 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-Propaandiol 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: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M027

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}	1834
iJG-MKE _{zoet, eco}	13,2
iJG-MKE _{water, voedselketen}	Niet getriggerd

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor 1,2-Propaandiol (CAS# 57-55-6), afgerond op twee significante cijfers, zijn:

iMAC-MKE 1800 mg/L
iJG-MKE 13 mg/L

Referenties

Comptox database, <https://comptox.epa.gov/dashboard>, CAS# 57-55-6, geraadpleegd op 15 maart 2022

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 57-55-6, geraadpleegd op 15 maart 2022

Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 57-55-6, geraadpleegd op 15 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.

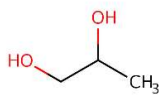
RIVM, 2022. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen – Deel 1 t/m Deel 5"; versie 1.0, RIVM-rapport.

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M027

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

Identificatie en Classificatie

Parameter	
Stonaam	Propaandiol
IUPAC naam	Propane-1,2-diol
Synoniemen	2-hydroxypropanol Propylenglycol
CAS nummer	57-55-6
Stofgroep Epiwin	Neutral organics
Geharmoniseerde classificatie	Not classified
REACH / Substance of Very High Concern	Nee
Formula	C3H8O2
Smiles	CC(O)CO
Structuurformule	

Physico-Chemical properties

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molmassa (g/mol)	76,095		CompTox
Smeltpunt (°C)	-60		CompTox
Kookpunt (°C)	187		CompTox
Oplosbaarheid in water (g/L)	13200		CompTox
Log K _{ow}	-0,92		CompTox
Dampdruk (kPa)	0,02	@ 25°C	ECHA
Henri coefficient (Pa.m ³ /mol)	0,00131		EpiSuite
Zuur constante (pKa)	Not applicable	No ionic structure	ECHA

Milieuedrag

Parameter	Value	Remark	Ref
Afbreekbaarheid	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar conform OECD301	predicted	CompTox
DT ₅₀ hydrolyse			
DT ₅₀ water/sediment			
Log K _{oc} (L/kg)	2,29		CompTox
BCF	0,33		CompTox

Memo

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M027

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor 1,2-propaandiol

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Kind	Duration of exposure	Endpoint	Value (mg/L)	Stof	Source
Bacteria					
<i>Pseudomonas putida</i>	18 h	NOEC	>20000	1,2-Propaandiol	ECHA
Algae					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	96	LC50	19000	1,2-Propaandiol	ECHA
Geleedpotigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50	43500	1,2-Propaandiol	CompTox
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	48 h	LC50	18340	1,2-Propaandiol	ECHA
Vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 h	LC50	40613	1,2-Propaandiol	ECHA
<i>Scophthalmus maximus (SW)</i>	96 h	LC50	>10000	1,2-Propaandiol	ECHA

Memo

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M027

Chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings- duur	Criterium	Waarde (mg/L)	Stof	Referentie
Bacteria					
No data					
Algae					
<i>Microalgae</i>	14 d	NOEC	15000	Growth rate	
Geleedpotigen					
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	3 broods	NOEC	660	Mortality	CompTox
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	3 broods	NOEC	13000	Reproduction	CompTox
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	3 broods	NOEC	29000	mortality	CompTox
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	7 d	NOEC	13020	mortality	ECHA
<i>Acartia tonsa</i>	14 d	NOEC	15000	Growth rate	CompTox
Vissen					
<i>Paralichthys olivaceus</i>	Not provided	NOEL	15000	Survival	CompTox
<i>Onchorynchus mykiss</i>	48 h	NOEC	42000	mortality	CompTox

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

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M027

Bijlage 3 Uitwerking stappenschema afleiden iJG-MKE voor 1,2-propaandiol
(CAS# 57-55-6)

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_M027

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-Propaandiol (CAS# 57-55-6)

Step	Answer	Conclusion action	Go to	
1	Nee		2	
2	Nee		3	
3	Nee		4	
4	Ja		6	
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $18340 / 1000 =$ $18,34 \text{ mg/l}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 660 / 500 =$ $1,32 \text{ mg/l}$	7	
7	Ja		8	
8	Ja	Kies $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	9	
9	Ja (geen specifiek werkings-mechanisme verwacht)	$iJG-MKE_{zoet, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronic} * 10 =$ $1,32 * 10 =$ $13,2 \text{ mg/L}$	12	
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $13,2 / 10 =$ $1,32 \text{ mg/L}$	13	
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 13,2 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 1,32 \text{ mg/L}$			

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: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M027

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

Trigger	Criterium	Resultaat voor 1,2-Propaandiol
(Potentiële) zeer zorgwekkende stof	https://rvs.rivm/zeer-zorgwekkende-stoffen	Nee
Bioaccumulerend	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	Nee
OF: IARC-classificatie als (verdacht) carcinogeen	Ingedeeld als IARC groep 1, 2A of 2B	Nee

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

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M027

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 voldoet aan het criterium voor een niet-specifiek werkingsmechanisme is een assessment-factor van 10 toegepast.

Basisgroep	Acute toxiciteit	Log getransformeerde acute toxiciteit
Alg	19000	4,278
Geleedpotige	18340	4,263
Vis	40613	4,609
Berekende standaarddeviatie		0,195

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor 1,2-Propaandiol (CAS# 57-55-6).

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 = 18340 / 10 = 1834 mg/L	
	The iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 1834 mg/L		