

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

Van:

CC:

Datum: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL_M031

Re: Milieukwaliteitseisen voor 1-propanol (CAS# 71-23-8)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof 1-Propanol (CAS# 71-23-8) 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-Propanol 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-Propanol al normen beschikbaar zijn. Hierbij is gezocht op het CAS#. Vervolgens zijn de databases van ECHA en US-EPA (Ecotox, 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.¹

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_M031

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}	100
iJG-MKE _{zoet, eco}	11,5
iJG-MKE _{water, voedselketen}	n.v.t.

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor 1-Propanol (CAS#71-23-8), afgerond op twee significante cijfers, zijn:

iMAC-MKE 100 mg/L
iJG-MKE 12 mg/L

Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 71-23-8, geraadpleegd op 17 Maart 2022

CompTox database CompTox Chemicals Dashboard (epa.gov), CAS# 71-23-8, geraadpleegd op 17 Maart 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: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL_M031

Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieugedrag van 1-Propanol

Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	1-propanol
IUPAC-naam	Propan-1-ol
Synoniemen	N-propanol N-propyl alcohol Ethyl carbinol 1-hydroxypropane
CAS-nummer	71-23-8
Stofgroep Epiwin	Neutral organic
Geharmoniseerde classificatie	H318 Veroorzaakt ernstig oogletsel H336 Kan slaperigheid of duizeligheid veroorzaken
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	C ₃ H ₈ O
Smiles	CCCO
Structuurformule	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	60,096		CompTox
Smeltpunt (°C)	-127,5	@1013,25 Pa	ECHA
Kookpunt (°C)	97	@1013,25 Pa	ECHA
Oplosbaarheid in water (g/L)	Miscible	@20°C	ECHA
Log K _{ow}	0,2	@25°C	ECHA
Dampspanning (kPa)	2,82	@25°C	ECHA
Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol)	0,177		ECHA
Zuurconstante (pK _a)	Niet van toepassing		ECHA

Milieugedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar conform OECD criteria		ECHA
DT ₅₀ hydrolyse			
DT ₅₀ water/sediment			
Log K _{oc} (L/kg)	0,65		EpiSuite
BCF	3,162		EpiSuite

Memo

Date: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL_M031

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor 1-propanol (CAS# 71-23-8)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>Activated sludge</i>	3 h	IC50 - ademhalingsfrequentie	> 1000	1-propanol	ECHA
<i>Activated sludge</i>	12	EC50	9600	1-propanol	ECHA
Algen					
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	48 h	EC50 – groei	9170	1-propanol	ECHA
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 h	LC50	6980	1-propanol	CompTox
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50- mobiliteit	3644	1-propanol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50- mobiliteit	7820	1-propanol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50- mobiliteit	6300	1-propanol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 h	LC50	8150	1-propanol	CompTox
<i>Daphnia pulex</i>	48 h	LC50	3100	1-propanol	CompTox
<i>Daphnia magna</i>	48 h	LC50	6540	1-propanol	CompTox
<i>Gammarus pulex</i>	48 h	LC50	1000	1-propanol	CompTox
Vissen					
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	4650	1-propanol	ECHA
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	48 h	LC50	3200	1-propanol	ECHA/CompTox
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	4555	1-propanol	ECHA
<i>Pimephales promelas</i>	48 h	LC50	5000	1-propanol	CompTox
<i>Oryzias latipes</i>	24 h	LC50	1000	1-propanol	CompTox

Memo

Date: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL_M031

<i>Oryzias latipes</i>	48 h	LC50	5900	1-propanol	CompTox
<i>Oryzias latipes</i>	24 h	LC50	640	1-propanol	CompTox
<i>Alburnus alburnus (SW)</i>	96 h	LC50	3800	1-propanol	CompTox
<i>Carassius auratus</i>	48 h	LC50	4560	1-propanol	CompTox
<i>Carassius auratus</i>	48 h	LC50	4320	1-propanol	CompTox

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings- duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>Pseudomonas putida</i>	16 h	TGK-groeiremming	2700	1-propanol	ECHA
Activated sludge	16 h	IC50-groeiremming	>5000	1-propanol	ECHA
Algen					
<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	48 h	NOEC-groei	1150	1-propanol	ECHA
<i>Scenedesmus quadricauda</i>	8 d	EC03-biomassa	3100	1-propanol	CompTox
Kreeftachtigen					
No data					
Vissen					
No data					

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

Bijlage 3 Uitwerking stappenschema afleiden iJG-MKE voor 1-Propanol (CAS# 71-23-8)

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: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL_M031

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-Propanol (CAS# 71-23-8)

Step	Answer	Conclusion action	Go to	
1	Nee		2	
2	Nee		3	
3	Nee		4	
4	Ja		6	
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $1000 / 1000 =$ $1,0 \text{ mg/l}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 1150 / 1000 =$ $1,15 \text{ mg/l}$	7	
7	Ja		8	
8	Ja	Kies $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	9	
9	Ja (geen specifiek werkings-mechanisme verwacht)	$iJG-MKE_{zoet, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} * 10 =$ $1,15 * 10 =$ $11,5 \text{ mg/L}$	12	
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $11,5 / 10 =$ $1,15 \text{ mg/L}$	13	
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 11,5 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 1,15 \text{ mg/L}$			

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

Memo

Date: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL_M031

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-propanol
(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	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: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL_M031

Bijlage 4 Uitwerking stappenschema afleiden iMAC-MKE voor 1-Propanol (CAS# 71-23-8)

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 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	9170	3,962
Geleedpotige	1000	3,000
Vis	3800	3,579
Berekende standaarddeviatie		0,485

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor 1-Propanol (CAS# 71-23-8).

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 = 1000 / 10 = = 100 mg/L	
	De iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 100 mg/L De iMAC-MKE _{zout, eco} is afgeleid als 10,0 /L		

Memo

Date: 20 maart 2022

Ref: 58178003NL_M031
