

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

Van:

CC:

Datum: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M032

Re: Milieukwaliteitseisen voor 1-butanol (CAS# 71-36-3)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof 1-Butanol (CAS# 71-36-3) 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 1-Butanol 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-Butanol 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: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M032

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}	10
iJG-MKE _{zoet, eco}	2,0
iJG-MKE _{water, voedselketen}	n.v.t.

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor 1-Butanol (CAS# 71-36-3), afgerond op twee significante cijfers, zijn:

iMAC-MKE 10 mg/L
iJG-MKE 0,2 mg/L

Referenties


- ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 71-36-3, geraadpleegd op 17 Maart 2022
- CompTox database [CompTox Chemicals Dashboard \(epa.gov\)](https://comptox.epa.gov), CAS# 71-36-3, geraadpleegd op 17 Maart 2022
- IUCLID, 2001. "SIDS Initial Assessment Report – n-Butyl Alcohol"; SIAM13, 6 – 9 November 2001
- PubChem database: [Crotonaldehyde | C4H6O - PubChem \(nih.gov\)](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov), geraadpleegd op 17 March 2022
- Ramio-Pujo, S; R. Ganigue, L. Bañeras, J Colprim, 2018. Effect of ethanol and butanol on autotrophic growth of model homoacetogens. FEMS Microbiology Letters 365(10). [Effect of ethanol and butanol on autotrophic growth of model homoacetogens | FEMS Microbiology Letters | Oxford Academic \(oup.com\)](https://doi.org/10.1093/femsle/fny100)
- WHO, 1987. Environmental Health Criteria 65. Butanols: Four Isomers: 1-Butanol; 2-Butanol; tert-Butanol; Isobutanol [http://www.inchem.org/documents/ehc/ehc/ehc65.htm \(who.int\)](http://www.inchem.org/documents/ehc/ehc/ehc65.htm)
- RIVM, 2005. Environmental Risk Limits for alcohols, glycols, and some other relatively soluble and/or volatile compounds – Ecotoxicological evaluation. RIVM report 6015016/2005 [RIVM rapport 601501016 Environmental Risk Limits for alcohols, glycols, and some other relatively soluble and/or volatile compounds \(openrepository.com\)](https://openrepository.com/rivm/6015016)
- 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: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M032

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

Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	1-butanol
IUPAC-naam	Butan-1-ol
Synoniemen	1-butyl alcohol Propylcarbinol
CAS-nummer	71-36-3
Stofgroep Epiwin	Neutral organics
Geharmoniseerde classificatie	H302 Schadelijk bij inslikken H335 Kan irritatie van de luchtwegen veroorzaken H315 Veroorzaakt huidirritatie H318 Veroorzaakt ernstig oogletsel H336 Kan slaperigheid / duizeligheid veroorzaken
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	C ₄ H ₁₀ O
Smiles	CCCCO
Structuurformule	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	74,123		CompTox
Smeltpunt (°C)	-90		ECHA
Kookpunt (°C)	119	@ 1013.hPa	ECHA
Oplosbaarheid in water (g/L)	66	@20°C	ECHA
Log K _{ow}	1,0	@25°C	ECHA
Dampspanning (kPa)	<10 hPa	@20°C	ECHA
Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol)	0,0539		ECHA
Zuurconstante (pK _a)	Niet van toepassing		ECHA

Milieuedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	gemakkelijk biologisch afbreekbaar conform OECD criteria		ECHA
DT ₅₀ hydrolyse			
DT ₅₀ water/sediment			
Log K _{oc} (L/kg)	1		ECHA
BCF	3,162		EpiSuite

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M032

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor 1-butanol (CAS# 71-36-3)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
No data					
Algen					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	96 h	EC50-groei	225	1-butanol	ECHA
<i>Desmodesmus subspicatus</i>	96 h	EC50-groei	>500	1-butanol	ECHA
<i>Chlorococcales mixed culture</i>	24 h	EC50 – zuurstofproductie	>1000	1-butanol	RIVM, 2005
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50- mobiliteit	1328	1-butanol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50- mobiliteit	>580	1-butanol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50- mobiliteit	1983	1-butanol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50- mobiliteit	1760	1-butanol	ECHA
<i>Acartia tonsa</i>	96 h	EC50- groei	225	1-butanol	CompTox
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50- mobiliteit	1330	1-butanol	CompTox
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50- mobiliteit	1260	1-butanol	CompTox
<i>Nitocra spinipes (marine copepod)</i>	96 h	LC50-mortaliteit	2100	1-butanol	CompTox
Vissen					
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	1376	1-butanol	ECHA
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	1730	1-butanol	ECHA
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	1400	1-butanol	ECHA
<i>Pimephales promelas</i>	72 h	LC50	1940	1-butanol	CompTox

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M032

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
<i>Pimephales promelas</i>	48 h	LC50	1950	1-butanol	CompTox
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	1910	1-butanol	CompTox
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 h	LC50	100	1-butanol	CompTox
<i>Lepomis macrochirus</i>	24 h	LC50	> 500	1-butanol	CompTox
<i>Leuciscus idus</i>	48 h	LC50	1834	1-butanol	ECHA
<i>Oryzias latipes</i>	48 h	LC50	500	1-butanol	CompTox
<i>Oryzias latipes</i>	48 h	LC50	1000	1-butanol	CompTox
<i>Oryzias latipes</i>	24 h	LC50	700	1-butanol	CompTox
<i>Alburnus alburnus (marine)</i>	96 h	LC50	2300	1-butanol	CompTox
<i>Carassius auratus</i>	48 h	LC50	1200	1-butanol	CompTox
<i>Carassius auratus</i>	48 h	LC50	1770	1-butanol	CompTox
<i>Carassius auratus</i>	24 h	LC50	1900	1-butanol	CompTox

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>Pseudomonas putida</i>	17 h	EC50 - groeiremming	4390	1-butanol	ECHA
<i>Pseudomonas putida</i>	16 h	NOEC -biomassa	650	1-butanol	RIVM, 12005/WHO, 1987
Industrial sewage	16 h	NOEC- groeiremming	> 1000	1-butanol	ECHA
<i>Clostridium carboxidivorans (P7)</i>	21-500h	IC50 groeiremming	4120	n-butanol	Ramio-Pujol et al., 2018

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M032

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
<i>Clostridium ljingdahlii</i> (PETC)	21-500h	IC50 groeiremming	9750	n-butanol	Ramio-Pujol et al., 2018
<i>Butyribacterium methylotrophicum</i> (DSM)	21-500h	IC50 groeiremming	1790	n-butanol	Ramio-Pujol et al., 2018
Algen					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	96 h	NOAEC	129	1-butanol	ECHA
<i>Scenedesmus quadricauda</i>	8 d	NOEC- biomassa	875	1-butanol	WHO, 1987
<i>Microcystis aeruginosa</i>	8-d	NOAEL- biomassa	100	1-butanol	WHO, 1987
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	21 d	NOEC - reproductie	4,1	1-butanol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	21 d	EC50 - reproductie	18	1-butanol	ECHA
Vissen					
No data					

Grijs gearceerde eindpunten zijn geselecteerd voor het afleiden van de indicatieve milieukwaliteitseisen. Testen waarvan de testduur significant afwijkt van het OECD-protocol voor het onderliggende organisme zijn niet geselecteerd als basis voor het afleiden van de iMKE.

Bijlage 3 Uitwerking stappenschema afleiden iJG-MKE voor 1-Butanol (CAS# 71-36-3)

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: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M032

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-Butanol (CAS# 71-36-3)

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

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].

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M032

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-butanol
(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: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M032

Bijlage 4 Uitwerking stappenschema afleiden iMAC-MKE voor 1-Butanol (CAS# 71-36-3)

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

Basisgroep	Acute toxiciteit	Log getransformeerde acute toxiciteit
Alg	225	2,352
Geleedpotige	225	2,352
Vis	100	2,000
Berekende standaarddeviatie		0,203

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor 1-Butanol (CAS# 71-36-3)

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	
	De iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 10 mg/L De iMAC-MKE _{zout, eco} is afgeleid als 1,0 /L		