

Memo

To: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

From:

CC:

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003 NL_M033

Re: Voorstel voor milieukwaliteitseisen voor Propeenoxide (CAS# 75-56-9)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof Propeenoxide (CAS# 75-56-9) 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 Propeenoxide 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 Propeenoxide 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].

Memo

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M033

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}	5,2
iJG-MKE _{zoet, eco}	0,052
iJG-MKE _{water, voedselketen}	0,0248

De iJG-MKE in eerste instantie wordt bepaald door de laagste waarde van de parameters iJG-MKE_{zoet, eco} en iJG-MKE_{water, voedselketen}. De waarde bedraagt 0,0248 mg/L

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor Propeenoxide (CAS# 75-56-9), afgerond op twee significante cijfers, zijn:

iMAC-MKE	5200 µg/L
iJG-MKE	25 µg/L

Referenties

Comptox database, <https://comptox.epa.gov/dashboard>, CAS# 75-56-9, geraadpleegd op 14 maart 2022

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 75-56-9, geraadpleegd op 14 maart 2022

Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 75-56-9, geraadpleegd op 14 maart 2022

OECD, 2001. "SIDS Initial Assessment Profile – Methyl oxirane", SIAM 13, 6 – 9 November 2001

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

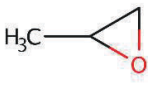
RIVM, 2022. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen – Deel 1 t/m Deel 5"; versie 1.0, RIVM-rapport.

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M033

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

Identificatie en Classificatie

Parameter	
Stonaam	Propeenoxide
IUPAC naam	2-Methyloxirane
Synoniemen	Epoxypropane Oxypropylene 1,2-epoxypropane
CAS nummer	75-56-9
Stofgroep Epiwin	Epoxides, mono
Geharmoniseerde classificatie	H224 H302 Schadelijk bij inslikken H311 Giftig bij contact met de huid H319 Veroorzaakt ernstige oogirritatie H335 Kan irritatie van de luchtwegen veroorzaken H340 Kan genetische schade veroorzaken H350 Kan kanker veroorzaken
REACH / Substance of Very High Concern	Ja
Formula	C ₃ H ₆ O
Smiles	CC1CO1
Structuurformule	

Physico-Chemical properties

Parameter	Value	Remark	Ref.
Molecular weight (g/mol)	58,08		CompTox
Smeltpunt (°C)	-112		CompTox
Kookpunt (°C)	34,6		CompTox
Oplosbaarheid in water (g/L)	5,22		CompTox
Log K _{ow}	0,03		CompTox
Dampdruk (kPa)	538		CompTox
Henri coefficient (Pa.m ³ /mol)	20,265	predicted	ECHA
Acid constant (pKa)	n.v.t.		

Milieuedrag

Parameter	Value	Remark	Ref
Degradability	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar conform MITI test		ECHA
DT50 hydrolysis			
DT50 water/sediment			
Log K _{oc} (L/kg)	0,03		EpiSuite
BCF (L/kg)	3,162		EpiSuite

Memo

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M033

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor Propeenoxide

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings- duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteria					
<i>No data</i>					ECHA
Algae					
<i>Selenastrum capricornutum</i>	96 h	EC50	240	Growth rate	ECHA / OECD
Crustacea					
<i>Acartia tonsa (SW)</i>	96 h	EC50	240	Growth rate	CompTox
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50	350	Mortality/mobility	CompTox/ECHA/OECD
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50	650	Mobility	CompTox
Fish					
<i>Gambusi affinis</i>	96 h	LC50	141	survival	CompTox
<i>Carassius auratus</i>	24 h	LC50	170	mortality	CompTox
<i>Leposmis macrochirus</i>	96 h	LC50	215	survival	CompTox
<i>Onchorhynchus mykiss</i>	96 h	LC50	52	mortality	ECHA/OECD
<i>Mugil cephalus (SW)</i>	96 h	LC50	89		ECHA

Memo

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M033

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgevens

Kind	Duration of exposure	Endpoint	Value (mg/L)	Dust	Source
Bacteria					
<i>Activated sludge</i>	28 d	NOEC	3	Growth inhibition	CompTox
<i>Activated sludge</i>	28 d	NOEC	100	Growth inhibition	CompTox
Algae					
<i>Microalgae</i>	96 h	NOEC	100	Growth rate	CompTox
<i>Microalgae</i>	96 h	NOEC	240	Growth rate	CompTox
Crustaceans					
No data					
Fish					
No data					

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

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M033

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: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M033

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	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $52 / 1000 =$ $0,052 \text{ mg/l}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 100 / 1000 =$ $0,1 \text{ mg/l}$	7	
7	nee		8	
8	nee	Kies de laagste waarde uit stap 6	12	
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,052 / 10 =$ $0,0052 \text{ mg/L}$	13	
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,052 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,0052 \text{ mg/L}$			

Er zijn ecotoxiciteitsgegevens beschikbaar voor zowel de complete acute basisset 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].

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M033

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

Trigger	Criterium	Resultaat voor Ethylhexaan
(Potentiële) zeer zorgwekkende stof	https://rvs.rivm/zeer-zorgwekkende-stoffen	Ja
Bioaccumulerende	Log K _{ow} >3 of Gemeten BCF (BAF) > 100 L/kg	Nee
OF: bekend of verdacht carcinogeen	H350 of H351	Ja
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	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.

De toxische eigenschappen van Propeenoxide zijn in verschillende studies onderzocht. Gelet op de vluchtigheid van Propeenoxide richt het merendeel van deze studies zich op blootstelling via de lucht. Gelet op de lage waarde voor de log P (= 0,03) voor Propeenoxide lijkt dit verdedigbaar.

De SIDS voor Propeenoxide [OECD, 2001] als een review van toxicologische data door US-EPA [EPA, 1990] refereren naar een studie naar herhaalde orale blootstelling van ratten (testduur 1029 dagen). Uit deze studie volgde dat bij de laagste geteste dosering van 2,58 mg/kg-lg/dag er irritatie van maag optrad waarbij microscopische veranderingen van de maagwand zijn waargenomen.

Uit testen, in-vivo en in-vitro, is gebleken dat Propeenoxide als genotoxisch aangemerkt moet worden.

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 studie
AF4/5	Data lacunes	1	Niet gerapporteerd
AF6	Genotoxiciteit	10	Aangetoond
AF7	extrapolatie	10	Basis is LOAEL

Date: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M033

$$\begin{aligned} \text{iHL} &= \text{LOAEL} / (\text{AF1} * \text{AF2} * \text{AF3} * \text{AF4} * \text{AF5} * \text{AF6} * \text{AF7}) \\ &= 2,58 / (10 * 10 * 2 * 1 * 1 * 10 * 1) \\ &= 0,00129 \text{ mg/kg-Ig/dag} \end{aligned}$$

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].

$$\begin{aligned} \text{iMKE}_{\text{humaan, voedsel}} &= 0,1 * \text{iHL} * 70 / 0,115 && \text{(vergelijking 1)} \\ &= 0,1 * 0,00129 * 70 / 0,115 \\ &= 0,0785 \text{ mg/kg voedsel} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{iMKE}_{\text{water, voedselketen}} &= \text{iMKE}_{\text{humaan, voedsel}} / (\text{BCF}_{\text{voedselorganisame}} * \text{BMF}) && \text{(vergelijking 2)} \\ &= 0,0785 / (3,162 * 1) \\ &= 0,0248 \text{ mg/L} \end{aligned}$$

De waarde voor de bio-concentratiefactor (BCF = 3,162) 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: 17 maart 2022

Ref: 58178003NL_M033

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	240	2,380
Geleedpotige	240	2,380
Vis	52	1,716
Berekende standaarddeviatie		0,383

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 = 52 / 10 = = 5,2 mg/L	
	The iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 5,2 mg/L		