

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

Van: - -

CC:

Datum: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M034

Re: Milieukwaliteitseisen voor 2-Butanol (CAS# 78-92-2)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof 2-Butanol (CAS# 78-92-2) 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 2-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 2-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: 16 Maart 2022

Ref: 58178003NL_M002

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}	3,08
iJG-MKE _{zoet, eco}	0,308
iJG-MKE _{water, voedselketen}	n.v.t.

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor 2-Butanol (CAS# 78-92-2), afgerond op twee significante cijfers, zijn:

iMAC-MKE 3,1 mg/L
iJG-MKE 0,31 mg/L

Referenties

- ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 78-92-2, geraadpleegd op 17 Maart 2022
- CompTox database [CompTox Chemicals Dashboard \(epa.gov\)](https://comptox.epa.gov), CAS# 78-92-2, geraadpleegd op 17 Maart 2022
- IUCLID, 2002. "SIDS Initial Assessment Report – sec-Butyl Alcohol"; SIAM14, 26 – 28 March 2002
- 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.

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M034

Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieugedrag van 2-butanol

Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	2-butanol
IUPAC-naam	Butan-2-ol
Synoniemen	Sec-butanol 2-hydroxybutaan 1-methyl-1-propanol
CAS-nummer	78-92-2
Stofgroep Epiwin	Neutral organics
Geharmoniseerde classificatie	H319 Veroorzaakt ernstige oogirritatie H335 Kan irritatie van de luchtwegen veroorzaken H336 Kan slaperigheid of duizeligheid veroorzaken
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	C ₄ H ₁₀ O
Smiles	CCC(C)O
Structuurformule	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	74,12		PubChem
Smeltpunt (°C)	-114,7		ECHA
Kookpunt (°C)	99,5		ECHA
Oplosbaarheid in water (g/L)	181,000	@25°C	ECHA
Log K _{ow}	0,65	@25°C	ECHA
Dampspanning (kPa)	2,32	@25°C	ECHA
Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol)	0,92		CompTox
Zuurconstante (pK _a)	n.v.t.		ECHA

Milieugedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar		ECHA
DT ₅₀ hydrolyse			
DT ₅₀ water/sediment			
Log K _{oc} (L/kg)	0,54		EpiSuite
BCF	3,162		EpiSuite

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M034

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor 2-butanol (CAS# 78-92-2)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	48 h	EC50	3196	2-butanol	CompTox
Algen					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	96 h	EC50 groei	2029	2-butanol	ECHA
Microalgae	72 h	EC50 groei	1972	2-butanol	CompTox
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50 immobiliteit	308	2-butanol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	24 h	EC50 immobiliteit	2300	2-butanol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50 immobiliteit	3750	2-butanol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50	4227	2-butanol	OECD
<i>Daphnia magna</i>	24 h	EC50	345	2-butanol	CompTox
Vissen					
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	2993	2-butanol	ECHA
<i>Leuciscus idus melanotus</i>	48 h	LC50	3520	2-butanol	ECHA
<i>Carassius auratus</i>	24 h	TLm	4300	2-butanol	ECHA
Fish	96 h	LC50	3670	2-butanol	OECD

Memo

Date: 16 Maart 2022

Ref: 58178003NL_M002

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
<i>Pseudomonas putida</i>	16 h	NOEC groei	500	2-butanol	ECHA
<i>Entosiphon sulcatum</i>	72 h	TGK groei	1282	2-butanol	ECHA
<i>Uronema parduzci</i>	20 h	TGK groei h	1416	2-butanol	ECHA
<i>Chilomonas paramaecium</i>	48 h	TGK groei	745	2-butanol	ECHA
Algen					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	96 h	NOEC groei	1240	2-butanol	ECHA
Blue-green algae	196 h	NOEC	312	2-butanol	CompTox
<i>Scenedesmus quadricauda</i>	7 d	NOEC biomassa	95	2-butanol	ECHA
Kreeftachtigen					
No Data					
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 2-Butanol (CAS# 78-92-2)

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: 16 Maart 2022

Ref: 58178003NL_M002

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 2-Butanol (CAS# 78-92-2)

Step	Answer	Conclusion action	Go to	
1	Nee		2	
2	Nee		3	
3	Nee		4	
4	Ja		6	
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $308 / 1000 =$ $0,308 \text{ mg/l}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 312 / 1000 =$ $0,312 \text{ mg/l}$	7	
7	Ja		8	
8	Nee	Kies laagste waarde stap 6	12	
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,308 / 10 =$ $0,0308 \text{ mg/L}$	13	
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,308 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,0308 \text{ mg/L}$			

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].

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

Memo

Date: 16 Maart 2022

Ref: 58178003NL_M002

Trigger	Criterium	Resultaat voor 2-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: 16 Maart 2022

Ref: 58178003NL_M002

Bijlage 4 Uitwerking stappenschema afleiden iMAC-MKE voor 2-Butanol (CAS# 78-72-2)

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	2972	3,473
Geleedpotige	308	2,488
Vis	2992	3,476
Berekende standaarddeviatie		0,569

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor 2-Butanol (CAS# 78-92-2)

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 = 308 / 100 = = 3,08 mg/L	
	De iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 3,08 mg/L De iMAC-MKE _{zout, eco} is afgeleid als 0,308 /L		