

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

Van:

CC:

Datum: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M035

Re: Milieukwaliteitseisen voor 4-tert-butylcatechol (CAS# 98-29-3)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof 4-tert-butylcatechole (CAS# 98-29-3) 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 4-tert-butylcatechole 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 4-tert-butylcatechole 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_M035

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}	0,0012
iJG-MKE _{zoet, eco}	0,00012
iJG-MKE _{water, voedselketen}	n.v.t.

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor 4-tert-Butylcatechol (CAS# 98-29-3), afgerond op twee significante cijfers, zijn:

iMAC-MKE 1,2 µg/L
iJG-MKE 0,12 µg/L

Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 98-29-3, geraadpleegd op 10 Maart 2022

CompTox database [CompTox Chemicals Dashboard \(epa.gov\)](https://www.epa.gov/comp-tox-chemicals-dashboard), CAS# 98-29-3, geraadpleegd op 16 Maart

RIVM, 2015. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen"; L.R.M. de Poorter et al, RIVM-rapport 2015-0057.

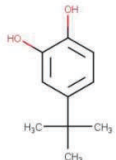
RIVM, 2022. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen – Deel 1 t/m Deel 5"; versie 1.0, RIVM-rapport.

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M035

Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieuedrag van 4-tert-butylcatechol

Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	4-tert-butylcatechol
IUPAC-naam	4-tert butylbenzeen-1,2-diol
Synoniemen	4-tert-butylpyrocatechol 4-tert-Butyl-1,2-dihydroxybenzeen
CAS-nummer	98-29-3
Stofgroep Epiwin	Fenolen, poly
Geharmoniseerde classificatie	H302+H312 Schadelijk bij inslikken en contact met de huid H314 Veroorzaakt ernstige brandwonden en oogletsels H317 Kan allergische huidreactie veroorzaken H400 Zeer giftig voor in water levende organismen H411 Giftig voor in water levende organismen, met langdurige gevolgen
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	C ₁₀ H ₁₄ O ₂
Smiles	CC(C)(C)C1=CC=C(O)C(O)=C1
Structuurformule	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	166,22		ECHA
Smeltpunt (°C)	54,95		ECHA
Kookpunt (°C)	290,5		ECHA
Oplosbaarheid in water (g/L)	4,2		ECHA
Log K _{ow}	2,81		Epiwin
Dampspanning (kPa)	2,004 31,187	@ 165,4°C @243,1 °C	ECHA
Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol)	1,87E-05		Epiwin
Zuurconstante (pK _a)	9,53	@20°C	ECHA

Milieuedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar		ECHA
DT ₅₀ hydrolyse			
DT ₅₀ water/sediment			
Log K _{oc} (L/kg)	1,37		ECHA
BCF	40,57		EpiSuite

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M035

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor 4-tert-butylcatechol (CAS# 98-29-3)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
Activated sludge	3 h	EC50- Ademhalingssnelheid	16	4-tert-butylcatechol	CompTox
Activated sludge	3 h	EC50	16	Respiration rate	ECHA
Activated sludge	3 h	NOEC	0,6	Respiration rate	ECHA
Algen					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	72 h	EC50-groei	10,17	4-tert-butylcatechol	ECHA
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	24 h	EC50	0,94	4-tert-butylcatechol	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50	0,48	4-tert-butylcatechol	ECHA
<i>Clausocalanus furcatus</i>	72 h	EC50	10,17	4-tert-butylcatechol	CompTox
Vissen					
<i>Brachydanio rerio</i>	96 h	LC50	0,12	4-tert-butylcatechol	ECHA

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M035

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
Activated sludge	3 h	EC50-respiration rate	16	4-tert-butylcatechol	ECHA
Activated sludge	3 h	NOEC-respiration rate	0,6	4-tert-butylcatechol	ECHA
Algen					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	72 h	EC10-groei	2,29	4-tert-butylcatechol	ECHA
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	72 h	NOEC-groei	0,2	4-tert-butylcatechol	CompTox
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	21 d	NOEC-reproductie	0,135	4-tert-butylcatechol	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 4-tert butylcatechol

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_M035

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 4-tert-butylcatechol (CAS# 98-29-3)

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	Nee		2
2	Nee		3
3	Nee		4
4	Ja		6
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $0,12 / 1000 =$ $0,00012 \text{ mg/L}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 0,135 / 500 =$ $0,00027 \text{ mg/L}$	7
7	Ja		8
8	Nee	Kies laagste waarde stap 6	12
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,00012 / 10 =$ $0,000012 \text{ mg/L}$	13
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,00012 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,000012 \text{ mg/L}$		

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].

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

Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL_M035

Trigger	Criterium	Resultaat voor 4-tert-butylcatechol
(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_M035

Bijlage 4 Uitwerking stappenschema afleiden iMAC-MKE voor 4-tert-butylcatechol (CAS# 98-29-3)

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 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	10,1	1,007
Geleedpotige	0,48	-0,319
Vis	0,12	-0,921
Berekende standaarddeviatie		0,986

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor 4-tert-butylcatechol (CAS# 98-29-3)

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 = 0,12 / 100 = 0,0012 mg/L	
	De iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 0,0012 mg/L De iMAC-MKE _{zout, eco} is afgeleid als 0,00012 mg/L		