

## Memo

---

**Aan:** Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

**Van:**

**CC:**

**Datum:** 21 maart 2022

**Ref:** 58178003NL\_M036

**Re:** Milieukwaliteitseisen voor Methyl fenyl carbinol (CAS# 98-85-1)

---

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof Methyl fenyl carbinol (CAS# 98-85-1) 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 Methyl fenyl carbinol 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 Methyl fenyl carbinol 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\_M036

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 <sub>zoet</sub>	10
iJG-MKE <sub>zoet, eco</sub>	0,1
iJG-MKE <sub>water, voedselketen</sub>	n.v.t.

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor Methyl phenyl carbinol (CAS# 98-85-1), afgerond op twee significante cijfers, zijn:

iMAC-MKE     10 mg/L  
iJG-MKE        0,1 mg/L

### Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 98-85-1, geraadpleegd op 10 maart 2022

Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 98-85-1, geraadpleegd op 10 maart 2022

CompTox database [CompTox Chemicals Dashboard \(epa.gov\)](https://comptox.epa.gov/dashboard), CAS# 98-85-1, geraadpleegd op 10 maart 2022

Dou X, F. Meng, W. Duan, Q. Liu, H. Li, S. Du, X. Peng, 2019. Groeiremming en oxidatieve stress bij twee soorten mariene diatomeeën blootgesteld aan 1-fenylethanol. Tijdschrift voor Oceanologie en Limnologie 37: 1342-1352

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

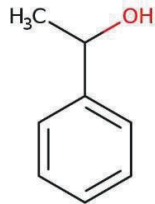
RIVM, 2022. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen – Deel 1 t/m Deel 5"; versie 1.0, RIVM-rapport.

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL\_M036

## Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieuedrag van Methyl fenyl carbinol

### Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	Methyl fenyl carbinol
IUPAC-naam	1-fenylethaan-1-ol
Synoniemen	1-fenylethanol Alfa-methyl benzyl alcohol Alfa-methyl benzenemethanol
CAS-nummer	98-85-1
Stofgroep Epiwin	Benzyl alcohols
Geharmoniseerde classificatie	H302 Schadelijk bij inslikken H319 Veroorzaakt ernstige oogirritatie
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O
Smiles	CC(O)C1=CC=CC=C1
Structuurformule	

### Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	122.16		ECHA
Smeltpunt (°C)	< -11,4	@ 965.3 hPa	ECHA
Kookpunt (°C)	202,6	@ 966.2 hPa	ECHA
Oplosbaarheid in water (g/L)	3717,5	@ 25°C	ECHA
Log K <sub>OW</sub>	1,636	@ 25°C	ECHA
Dampspanning (kPa)	0,0133	@ 20°C	ECHA
Henri-coefficient (Pa.m <sup>3</sup> /mol)	2,92E-02		EpiSuite
Zuurconstante (pK <sub>a</sub> )	n.v.t.		

### Milieuedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar		ECHA
DT <sub>50</sub> hydrolyse			
DT <sub>50</sub> water/sediment			
Log K <sub>OC</sub> (L/kg)	2,05		ECHA
BCF	2,23		EpiSuite

## Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL\_M036

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor methyl fenyl carbinol (CAS# 98-85-1)

### Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
<b>Bacteriën</b>					
<i>Staphylococcus aureus</i> / <i>Escherichia coli</i> / <i>Candida albicans</i>	3 h	EC50- Remming van de ademhaling	> 1000	methyl fenyl carbinol	ECHA
<b>Algen</b>					
<i>Chlorella vulgaris</i>	72 h	EC50 - groei	> 200	methyl fenyl carbinol	ECHA
<i>Green algae</i>	72 h	EC50 - mortaliteit	28,34	methyl fenyl carbinol	CompTox
<i>Phaeodactylum tricornutum</i>	96 h	EC50 - Chlorofylsynthese	257,14	methyl fenyl carbinol	Dou et al., 2019
<i>Skeletonema costatum</i>	96 h	EC50 - Chlorofylsynthese	126,46	methyl fenyl carbinol	Dou et al., 2019
<b>Kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50 -groei	100	methyl fenyl carbinol	ECHA
<b>Vissen</b>					
<i>Danio rerio</i>	96 h	LC50	> 100	methyl fenyl carbinol	ECHA

## Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL\_M036

### Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
<b>Bacteriën</b>					
No data					
<b>Algen</b>					
<b>Kreeftachtigen</b>					
General (ECOSAR)	21 d	NOEC	13,28	methyl fenyl carbinol	ECHA
<b>Vissen</b>					
General (ECOSAR)	28 d	NOEC	26,481	methyl fenyl carbinol	ECHA

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 MPC (CAS# 98-85-1)

Stappenschema 2 iJG-MKE<sub>zoet, eco</sub> (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 <sub>zoet</sub> beschikbaar?	Ja		3
		Nee		4
3	Voedselketenroute afgedekt door MTR <sub>zoet</sub> ?	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\_M036

Nr.	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie / actie	Ga naar
11	Data voor tenminste gehele chronische dataset <b>en</b> 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 MPC (CAS# 98-85-1)

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	Nee		2
2	Nee		3
3	Nee		4
4	Ja		6
6	Acuut	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $100 / 1000 =$ $0,1 \text{ mg/l}$	12
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,1 / 10 =$ $0,01 \text{ mg/L}$	13
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,1 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,01 \text{ mg/L}$		

Er zijn alleen ecotoxiciteitsgegevens beschikbaar voor de complete acute basisset 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\_M036

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

Trigger	Criterium	Resultaat voor MPC
(Potentiële) zeer zorgwekkende stof	<a href="https://rvs.rivm/zeer-zorgwekkende-stoffen">https://rvs.rivm/zeer-zorgwekkende-stoffen</a>	Nee
Bioaccumulerende	Log K <sub>ow</sub> >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\_M036

## Bijlage 4 Uitwerking stappenschema afleiden iMAC-MKE voor MPC (CAS# 98-58-1)

Stappenschema 3 iMAC-MKE<sub>zoet</sub>

Nr.	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie / actie	Ga naar
1	Is er een gedegen Nederlandse MAC-MKE of MAC <sub>eco</sub> 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 <sub>zoet, eco</sub>		iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub> = L(E)C50 <sub>min</sub> /AF	5
5	Bereken iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub>		iMAC-MKE <sub>zout, eco</sub> = iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub> / 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	200	2,301
Geleedpotige	100	2,000
Vis	100	2,000
Berekende standaarddeviatie		0,175

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE<sub>zoet, eco</sub> voor MPC (CAS# 98-85-1)

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	No		2
2	Yes		4
3	-		
4	Bereken iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub>	iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub> = L(E)C50 <sub>min</sub> /AF = 100 / 10 = = 10 mg/L	
	De iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub> is afgeleid als 10 mg/L De iMAC-MKE <sub>zout, eco</sub> is afgeleid als 1,0 /L		