

## Memo

---

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

**Van:**

**CC:**

**Datum:** 21 maart 2022

**Ref:** 58178003NL\_M037

**Re:** Milieukwaliteitseisen voor Acetofenon (CAS# 98-86-2)

---

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan de stof Acetofenon (CAS# 98-86-2) 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 Acetofenon 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 Acetofenon 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\_M037

---

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>	8,64
iJG-MKE <sub>zoet, eco</sub>	0,0248
iJG-MKE <sub>water, voedselketen</sub>	n.v.t.

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor Acetofenon (CAS# 98-86-2), afgerond op twee significante cijfers, zijn:

iMAC-MKE    8,6 mg/L  
iJG-MKE     0,025 mg/L

### Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 98-86-2, geraadpleegd op 16 Maart 2022

Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 98-86-2, geraadpleegd op 16 Maart 2022

CompTox database [CompTox Chemicals Dashboard \(epa.gov\)](https://www.epa.gov/comp-tox-chemicals) CAS# 98-86-2, geraadpleegd op 16 Maart 2022

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

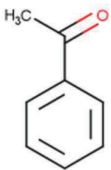
## Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL\_M037

## Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieuedrag van Acetofenon

## Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	acetofenon
IUPAC-naam	1-fenylethaan
Synoniemen	Methyl fenyl keton Fenylethaan acetylbenzeen
CAS-nummer	98-86-2
Stofgroep Epiwin	Neutral organic
Geharmoniseerde classificatie	H302 Schadelijk bij inslikken H319 Veroorzaakt ernstige oogirritatie
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O
Smiles	CC(=O)C1=CC=CC=C1
Structuurformule	

## Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	120,15		ECHA
Smeltpunt (°C)	20	@101,325 Pa	ECHA
Kookpunt (°C)	202	@101,325 Pa	ECHA
Oplosbaarheid in water (g/L)	6,200	@25°C	ECHA
Log K <sub>OW</sub>	1,65	@20°C	ECHA
Dampspanning (kPa)	0,045	@25°C	ECHA
Henri-coefficient (Pa.m <sup>3</sup> /mol)	0,766	@20°C	ECHA
Zuurconstante (pK <sub>a</sub> )	n.v.t.		

## Milieuedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar conform OECD301C		ECHA
DT <sub>50</sub> hydrolyse			
DT <sub>50</sub> water/sediment			
Log K <sub>OC</sub> (L/kg)	1,98	@20°C	ECHA
BCF	0,47		EpiSuite

## Memo

Date: 21 maart 2022

Ref: 58178003NL\_M037

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor acetofenon (CAS# 98-86-2)

### Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
<b>Bacteriën</b>					
Activated sludge	3 h	IC50 ademhaling	> 1000	acetofenon	ECHA
Activated sludge	3 h	IC50 ademhaling	1904	acetofenon	ECHA
<b>Algen</b>					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	72 h	EC50 groei	86,4	acetofenon	ECHA
<b>Kreeftachtigen</b>					
<i>Daphnia magna</i>	48 h	LC50	528	acetofenon	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	48 h	LC50	162	acetofenon	ECHA
<b>Vissen</b>					
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	EC50	162	acetofenon	ECHA
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	161.5	acetofenon	ECHA
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	236	acetofenon	ECHA
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC50	155	acetofenon	ECHA

### Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
<b>Bacteriën</b>					
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	40 h	IC50 groei	346	acetofenon	ECHA
<i>Spirostomum ambiguum</i>	24 h	EC50	278	acetofenon	ECHA

## Memo

**Date:** 21 maart 2022

**Ref:** 58178003NL\_M037

<i>Spirostomum ambiguum</i>	24 h	LC50	886	acetofenon	ECHA
Protozoa	1 d	EC50 ontwikkeling	279	acetofenon	CompTox
Protozoa	2 d	EC50 ontwikkeling	229	acetofenon	CompTox
<b>Algen</b>					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	72 h	NOEC groei	24,8	acetofenon	ECHA
<b>Kreeftachtigen</b>					
<i>No Data</i>					
<b>Vissen</b>					
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 Acetofenon (CAS# 98-86-2)

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\_M037

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 Acetofenon (CAS# 98-86-2)

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	Nee		2
2	Nee		3
3	Nee		4
4	Ja		6
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $86,4 / 1000 =$ $0,0864 \text{ mg/L}$  $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $= 24,8 / 1000 =$ $0,0248 \text{ mg/L}$	7
7	Ja		8
8	Nee	Kies laagste waarde uit stap 6	12
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,0248 / 10 =$ $0,00248 \text{ mg/L}$	13
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,0248 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,00248 \text{ mg/L}$		

Er zijn ecotoxiciteitsgegevens beschikbaar voor zowel de complete acute basisset als ook chronische eindpunten voor algen en bacterien 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\_M037

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

Trigger	Criterium	Resultaat voor Acetofenon
(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\_M037

## Bijlage 4 Uitwerking stappenschema afleiden iMAC-MKE voor Acetofenon (CAS# 98-86-2)

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	86,4	1,936
Geleedpotige	162	2,209
Vis	155	2,190
Berekende standaarddeviatie		0,152

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE<sub>zoet, eco</sub> voor Acetofenon (CAS# 98-86-2)

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 = 86,2 / 10 = = 8,62 mg/L	
	De iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub> is afgeleid als 8,62 mg/L De iMAC-MKE <sub>zout, eco</sub> is afgeleid als 0,862 mg/L		