

Memo

Aan: Secretaris Wetenschappelijke Klankbordgroep normen water en lucht

Van:

CC:

Datum: - - - - -

Ref: 58178003NL_M039

Re: Milieukwaliteitseisen voor Natriumzouten van geetoxyleerde alcohol sulfonaten (CAS# 68891-38-3)

Het afvalwater van afkomstig van Shell Raffinaderij Nederland, vestiging Moerdijk, kan Natriumzouten van geetoxyleerde alcohol sulfonaten (CAS# 68891-38-3) 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 deze stof 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 Natriumzouten van geetoxyleerde alcohol sulfonaten 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: 31 maart 2022

Ref: 58178003NL_M039

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}	0,71
iJG-MKE _{zoet, eco}	0,018
iJG-MKE _{water, voedselketen}	n.v.t.

De voorgestelde indicatieve milieukwaliteitseisen voor Natriumzouten van geetoxyleerde alcohol sulfonaten (CAS# 68891-38-3) zijn:

iMAC-MKE 710 µg/L
iJG-MKE 18 µg/L

Referenties

ECHA database, <https://www.echa.europa.eu>, CAS# 68891-38-3, geraadpleegd op 31 maart 2022

Ecotox database, <https://cppub.epa.gov/ecotox>, CAS# 68891-38-3, geraadpleegd op 31 maart 2022

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

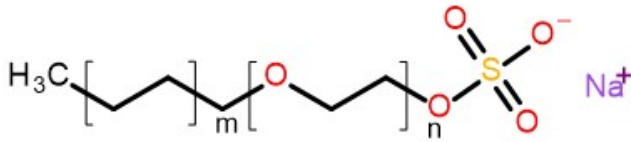
RIVM, 2022. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen – Deel 1 t/m Deel 5"; versie 1.0, RIVM-rapport.

Date: 31 maart 2022

Ref: 58178003NL_M039

Bijlage 1 Identificatie, classificatie, fysische chemische eigenschappen en milieuedrag van Natriumzouten van geetoxylerde alcohol sulfonaten

Identificatie en Classificatie

Parameter	Waarde
Stofnaam	Natriumzouten van geetoxylerde alcohol sulfonaten
IUPAC-naam	Alcohols, C12-14, ethoxylated, sulfates, sodium salts
Synoniemen	-
CAS-nummer	68891-38-3
Stofgroep Epiwin	Neutral organics
Geharmoniseerde classificatie	H315 Veroorzaakt huidirritatie H318 Veroorzaakt ernstig oogletsel H412 Schadelijk voor in water levende organismen, met langdurige gevolgen
REACH / Zeer Zorgwekkende Stof	Nee
Molecuulformule	UVCB
Smiles	-
Structuurformule	

Fysisch-Chemische eigenschappen

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	variabel		ECHA
Smeltpunt (°C)	>300		ECHA
Kookpunt (°C)	>400		ECHA
Oplosbaarheid in water (mg/L)	280000		ECHA
Log K _{ow}	0,3		ECHA
Dampspanning (kPa)	n.v.t.		ECHA
Henri-coefficient (Pa.m ³ /mol)	n.v.t.		ECHA
Zuurconstante (pK _a)	n.v.t.		

Milieuedrag

Parameter	Waarde	Opmerking	Ref
Afbreekbaarheid	Gemakkelijk biologisch afbreekbaar conform OECD301C		ECHA
DT ₅₀ hydrolyse			
DT ₅₀ water/sediment			
Log K _{oc} (L/kg)	2,2		ECHA
BCF	No data		

Memo

Date: 31 maart 2022

Ref: 58178003NL_M039

Bijlage 2 Overzicht ecotoxiciteitsgegevens voor Natriumzouten van geetoxyleerde alcohol sulfonaten (CAS# 68891-38-3)

Overzicht acute ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
No data					
Algen					
<i>Desmodesmus subspicatus</i>	72h	EC50 growth	27,7	68891-38-3	ECHA
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC50	7,4	68891-38-3	ECHA
Vissen					
<i>Danio rerio</i>	96 h	LC50	7,1	68891-38-3	ECHA

Overzicht chronische ecotoxiciteitsgegevens

Soort	Blootstellings-duur	Eindpunt	Waarde (mg/L)	Stof	Bron
Bacteriën					
No data					
Algen					
<i>Desmodesmus subspicatus</i>	3 dagen	NOEC growth	0,95	68891-38-3	ECHA
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	21 dagen	NOEC reprod.	0,27	68891-38-3	ECHA

Memo**Date:** 31 maart 2022**Ref:** 58178003NL_M039

Vissen					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	28 dagen	NOEC	0,18	68891-38-3	ECHA
<i>Pimephales promelas</i>	45 dagen	NOEC	1	68891-38-3	ECHA

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

Bijlage 3 Uitwerking stappenschema afleiden iJG-MKE

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: 31 maart 2022

Ref: 58178003NL_M039

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 Natriumzouten van geetoxyeerde alcohol sulfonaten (CAS# 68891-38-3)

Step	Answer	Conclusion action	Go to	
1	Nee		2	
2	Nee		4	
4	Ja		6	
6	Acuut en chronisch	$iJG-MKE_{zoet, eco-acuut} =$ $L(E)C50min/AF =$ $7,1 / 1000 =$ $0,0071 \text{ mg/L}$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch} =$ $NOECmin/AF =$ $0,18 / 100 =$ $0,0018 \text{ mg/L}$	7	
7	Ja		8	
8	Ja	Kies $iJG-MKE_{zoet, eco-chronisch}$	9	
9	Ja (geen specifiek werkings-mechanisme verwacht)	$iJG-MKE_{zoet, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco-chronic} * 10 =$ $0,0018 * 10 =$ $0,018 \text{ mg/L}$	12	
12		$iJG-MKE_{zout, eco} =$ $iJG-MKE_{zoet, eco} / 10 =$ $0,018 / 10 =$ $0,0018 \text{ mg/L}$	13	
13	Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zoet, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zoet} = 0,018 \text{ mg/L}$ Gebruik resultaat $iJG-MKE_{zout, eco}$ de selectie van de $iJG-MKE_{zout} = 0,0018 \text{ mg/L}$			

Er zijn ecotoxiciteitsgegevens beschikbaar voor zowel de complete acute basisset als ook chronische 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: 31 maart 2022

Ref: 58178003NL_M039

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

Trigger	Criterium	Resultaat Natriumzouten geetoxyleerde sulfonaten	voor van alcohol
(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: 31 maart 2022

Ref: 58178003NL_M039

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 _{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 voldoet aan het criterium voor een niet-specifiek werkingsmechanisme is een assessment-factor van 10 toegepast.

Basisgroep	Acute toxiciteit	Log getransformeerde acute toxiciteit
Alg	27,7	1,442
Geleedpotige	7,4	0,869
Vis	7,1	0,851
Berekende standaarddeviatie		0,365

Resultaat voor afleiding iMAC-MKE_{zoet, eco} voor Natriumzouten van geetoxylerde alcohol sulfonaten (CAS# 68891-38-3)

Stap	Antwoord	Conclusie actie	Ga naar
1	Nee		2
2	Ja		4
3	-		
4	Bereken iMAC-MKE _{zoet, eco}	iMAC-MKE _{zoet, eco} = L(E)C50 _{min} / AF = 7,1 / 10 = 0,71 mg/l	
	De iMAC-MKE _{zoet, eco} is afgeleid als 0,71 mg/L De iMAC-MKE _{zout, eco} is afgeleid als 0,071 mg/L		