

## 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 <sub>zoet</sub>	3,08
iJG-MKE <sub>zoet, eco</sub>	0,308
iJG-MKE <sub>water, voedselketen</sub>	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 6015016](https://openrepository.com/rivm/6015016/2005)  
[Environmental Risk Limits for alcohols, glycols, and some other relatively soluble and/or volatile compounds \(openrepository.com\)](https://openrepository.com/rivm/6015016/2005)
- RIVM, 2015. "Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen"; 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 milieuedrag 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 <sub>4</sub> H <sub>10</sub> 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 <sub>ow</sub>	0,65	@25°C	ECHA
Dampspanning (kPa)	2,32	@25°C	ECHA
Henri-coefficient (Pa.m <sup>3</sup> /mol)	0,92		CompTox
Zuurconstante (pK <sub>a</sub> )	n.v.t.		ECHA

#### 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)	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
<b>Bacteriën</b>					
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	48 h	EC50	3196	2-butanol	CompTox
<b>Algen</b>					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	96 h	EC50 groei	2029	2-butanol	ECHA
Microalgae	72 h	EC50 groei	1972	2-butanol	CompTox
<b>Kreeftachtigen</b>					
<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
<b>Vissen</b>					
<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
<b>Bacteriën</b>					
<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
<b>Algen</b>					
<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
<b>Kreeftachtigen</b>					
No Data					
<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 2-Butanol (CAS# 78-92-2)

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: 16 Maart 2022

Ref: 58178003NL\_M002

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 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	<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: 16 Maart 2022

Ref: 58178003NL\_M002

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

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 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<sub>zoet, eco</sub> voor 2-Butanol (CAS# 78-92-2)

Step	Answer	Conclusion action	Go to
1	No		2
2	Yes		4
3	-		
4	Bereken iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub>	$\text{iMAC-MKE}_{\text{zoet, eco}} = \frac{\text{L(E)C50}_{\text{min}}}{\text{AF}} = \frac{308}{100} = 3,08 \text{ mg/L}$	
	De iMAC-MKE <sub>zoet, eco</sub> is afgeleid als 3,08 mg/L De iMAC-MKE <sub>zout, eco</sub> is afgeleid als 0,308 /L		