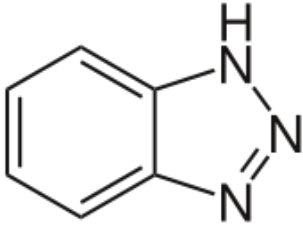


Rapportageformulier

SAMENVATTING		
Stofnaam	Benzotriazole	
CAS-nummer	95-14-7	
Voorgestelde indicatieve risicogrenzen	i-JG-MKN_{zoet}	19 µg/L
	i-JG-MKN_{zout}	1,9 µg/L
	i-MAC-MKN_{zoet, eco}	160 µg/L
	i-MAC-MKN_{zout, eco}	16 µg/L
	i-VR_{zoet}	0,19 µg/L
	i-VR_{zout}	0,019 µg/L
Datum dataverzameling	29-1-2014	
Datum afronding		

Het verzamelen van de gegevens is uitgevoerd volgens het concept van de nieuwe methodiek (de Poorter et al., in prep.). Dat houdt in dat zoveel mogelijk met de OECD toolbox (OECD, 2013) is gewerkt om daaruit experimentele data te verzamelen. Echter de gegevens voor Benzotriazole uit het openbare REACH dossier (ECHA, 2014) zaten nog niet in de gebruikte versie van de toolbox (3.1) en zijn uit het REACH dossier zelf gehaald. Voor de afleiding van de indicatieve milieukwaliteitsnorm (i-MKN) is zowel de interim handreiking (van Herwijnen et al., 2009) als het concept voor de nieuwe indicatieve methodiek gevolgd. Op deze manier is eveneens de nieuwe methodiek getest. Voor de voorgestelde risicogrenzen zijn uiteindelijk de uitkomsten van de concept methodiek geselecteerd. Voor aanvullende toelichting wordt verwezen naar de discussie/conclusie.

1. IDENTITEIT

Stofnaam	Benzotriazole
IUPAC naam	1H-benzotriazole
Synoniemen	-
CAS-nummer	95-14-7
Stofgroep volgens EPIWin	benzotriazoles
Bekend gebruik (beperkt)	geleermiddel, corrosie-inhibitor, antivriesmiddel, beschermmiddel voor zilverwerk in afwasmiddel
Toxiciteitsmechanisme	onbekend
Classificatie	H302, H319, H412
Molecuulformule	C ₆ H ₅ N ₃
Smiles (indien gebruikt)	c1ccc2n(H)nnc2c1
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Ref.
Molecuulgewicht (g/mol)	119,13		EPIWEB (US EPA, 2009)
Smeltpunt (°C)	100	gemeten	OECD toolbox 3.1 - EPI suite
Kookpunt (°C)	350	gemeten	OECD toolbox 3.1 - SRC/EPI suite
	204 ^a	gemeten	REACH dossier - CRC-handbook
Dampdruk (Pa)	0,00328	berekend, modified grain method op basis van een kookpunt van 350°C	OECD toolbox 3.1 - EPI suite
	6,89	berekend in EPI-WIN op basis van een kookpunt van 204°C	REACH dossier - EPI suite
Oplosbaarheid in water (mg/L)	1,98 x 10 ⁴	gemeten	OECD toolbox 3.1 - EPI suite
Log K _{ow}	1,44	MlogP	Bioloam (Biobyte, 2006)
Log K _{oc} (log [L/kg])	1,69	Koc 49 L/kg, gemeten	OECD toolbox 3.1 - EPI suite
Henry-coëfficiënt (Pa·m ³ /mol)	2,0 x 10 ⁻⁵	berekend op basis van een dampdruk van 0,00328 Pa	Volgens bestaande en concept methodiek
pKa	1,6		QECD toolbox - journal publicatie
	8,57		QECD toolbox - journal publicatie
	8,44		QECD toolbox - journal publicatie
	8,37		QECD toolbox - journal publicatie

^a Volgens de nieuwe methodiek hebben eindpunten van SRC de voorkeur. Bij nazoeken van dit eindpunt in de oorspronkelijke bron blijkt dit een kookpunt te zijn bij verlaagde druk.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	Ref.
BCF (L/kg)	3 (<i>Cyprinus carpio</i>)	OECD toolbox 3.1 - NITE database
	15 (<i>Cyprinus carpio</i>)	OECD toolbox 3.1 - NITE database

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit

Afleiding van het Ad-hoc-MTR_{humanaan, voedsel, water} is niet getriggerd omdat de stof niet is geclassificeerd met een van de H-zinnen 340, 341, 350, 351, 360, 361 of 362 en de stof is ook niet potentieel bioaccumulerend. Daarom wordt aangenomen dat de stof niet gevaarlijk voor de mens of predators van waterorganismen en zijn geen verdere gegevens over humane toxiciteit verzameld.

4.2 Ecotoxiciteit

Acuut

Soort	Duur	Parameter	Waarde (mg/l)	Opmerking	Ref.
vissen					
<i>Danio rerio</i>	96 uur	LC50	180	sterfte	REACH dossier
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 uur	EC50	15,8	mobiliteit	REACH dossier
algen					
<i>Pseudokirchnerella subcapitata</i>	72 uur	EC50	75	groeisnelheid	REACH dossier
<i>Pseudokirchnerella subcapitata</i>	72 uur	EC50	29	biomassa	REACH dossier
overig					
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	48 uur	EC50	286		OECD toolbox 3.1 - Aquatic OASIS

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad-hoc-MTR-afleiding.

Chronisch

Soort	Duur	Parameter	Waarde (mg/l)	Opmerking	Ref.
kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	21 d	EC10	0,97	reproductie	REACH dossier
algen					
<i>Pseudokirchnerella subcapitata</i>	72 uur	EC10	10,5	groeisnelheid	REACH dossier
<i>Pseudokirchnerella subcapitata</i>	72 uur	EC10	6	biomassa	REACH dossier
<i>Pseudokirchnerella subcapitata</i>	72 uur	NOEC	10	groeisnelheid/ biomassa	REACH dossier
<i>Desmodesmus subspicatus</i>	72 uur	EC10	1,18	groeisnelheid	REACH dossier
overig					
<i>Lemna minor</i>	7 d	EC10	3,94	groeisnelheid	REACH dossier

Dikgedrukte gegevens zijn gebruikt in de ad-hoc-MTR-afleiding.

5a. Ad-hoc-MTR (VIA STAPPENSHEMA interim methodiek uit 2009)

Geschatte Humane Limietwaarde (GHL)

Afleiding van het Ad-hoc-MTR_{humaan, voedsel, water} is niet getriggerd. Aangezien alleen om een ad-hoc MTR voor water is gevraagd is afleiding van de GHL ook niet nodig.

Ad-hoc-MTR_{eco, water}

Afleiding volgens interim methodiek

Stap	Resultaat	Opmerking
1	nee	Er is wel een Zwitserse AA-EQS van 30 µg/L
2	ja	
3	-	
4	NOEC _{min} = 0,97 mg/L	basisset + 3 NOEC (alg, daphnia en lemna), NOEC _{min} voor zelfde groep als EC50 _{min} en NOEC < EC50 -> AF= 10
5	Het ad-hoc-MTR _{eco, water} is 97 µg/L	

Ad-hoc-MTR_{humaan, voedsel, water}

Afleiding van het Ad-hoc-MTR_{humaan, voedsel, water} is niet getriggerd.

Bepaling uiteindelijke ad-hoc-MTR (volgens interim methodiek)

	ad-hoc-MTR				
	opp. water (µg/L)	grondwater (µg/L)	sediment (µg/kg _{dwt})	bodem (µg/kg _{dwt})	lucht (µg/m ³)
eco	97
humaan	voedsel, water	dw, water	↓	voedsel, bodem	GHL _{inhal}
	n.t.	...	↓
	laagste ↓	laagste ↓	↓ ↓	laagste ↓	laagste ↓
ad-hoc-MTR	97	n.g.	n.g.	n.g.	n.g.

g.g. = geen gegevens

n.t. = niet getriggerd

n.g. = niet gevraagd

5b. Afleiding volgens concept nieuwe methodiek

Rapportage

Stap	Resultaat	Opmerking
1	nee	Er is wel een Zwitserse AA-EQS van 30 µg/L
2	ja	
3	-	
4	er zijn acute en chronische data: $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco, acuut}} = 15,8 / 1000 = 0,0158 \text{ mg/L} = 15,8 \text{ µg/L}$ $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco, chronisch}} = 0,97 / 500 = 0,00194 \text{ mg/L} = 1,94 \text{ µg/L}$	
5	ja	
6	ja: $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco}} = 1,94 \times 10 = 19,4 \text{ µg/L}$	
7	-	
8	$i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco}} = 19 \text{ µg/L}$	(in 2 significante cijfers)

6. Discussie/Conclusie $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet}}$

De nieuwe methodiek geeft een $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ die een factor vijf lager is dan wanneer de oude (interim) methodiek wordt aangehouden. Dit komt omdat volgens de oude methodiek niet specifiek wordt gesteld dat de 3 beschikbare NOECs voor de drie soorten van de volledige basisset moet zijn. Bij het concept voor de nieuwe methodiek is dat wel het geval. Hierdoor telde de NOEC voor Lemna minor bij de oude methodiek mee bij de bepaling van de AF en bij de nieuwe methodiek niet. Bij de oude methodiek wordt daarom uitgegaan van "Basisset + 3 NOECs" en volgende de nieuwe methodiek van "NOECs voor 2 basisgroepen". De nieuwe methodiek sluit beter aan bij de WFD guidance.

De $i\text{-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ ligt dicht bij de gedegen AA-EQS van 30 µg/L die door Zwitserland is afgeleid op basis van ecotoxiciteit dan het ad-hoc- $\text{MTR}_{\text{eco, water}}$ volgens de interim methodiek. Bij deze afleiding is een AF van 100 toegepast terwijl er wel NOECs zijn voor twee basisgroepen (en daarom een AF van 50 toegepast mag worden). De hogere AF is toegepast omdat hogere planten mogelijk gevoelig zijn en er daarvoor geen gegevens (bijv. Lemna) in de Zwitserse dataset zitten. Gegevens voor Lemna zitten wel in de REACH dataset en geven aan dat deze niet gevoeliger zijn dan Daphnia. De Zwitserse AA-EQS zou daarom een factor 2 hoger mogen zijn en ligt daarmee midden tussen de indicatieve normen volgens oude en nieuwe methodiek. Verder berust het verschil tussen de indicatieve en Zwitserse norm op een verschil in de dataset. De laagste NOEC (0,97 mg/L) uit het REACH dossier is uit 2012, de Zwitserse afleiding op basis van een chronische NOEC van 3 mg/L voor *Daphnia magna* stamt uit 2010 (Anoniem, 2010).

De indicatieve MKN afgeleid volgens de nieuwe methodiek wordt voorgedragen als $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco}}$, omdat deze beter aansluit bij de WFD guidance en al voorsorteert op de toekomstige methodiek. Aangezien afleiding van de $i\text{-MKN}_{\text{voedselketen, water}}$ niet is getriggerd, wordt de $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ overgenomen als $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet}}$: **19 µg/L**.

In het concept voor de nieuwe methodiek staat dat een indicatieve MKN_{eco} voor zout water afgeleid kan worden door de $i\text{-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ door 10 te delen. Vooruitlopend op de nieuwe methodiek is de $i\text{-JG-MKN}_{\text{zout}}$: **1,9 µg/L**.

7. Extra

Het verzoek was een ad-hoc MTR voor zoet en zout water. Echter op basis van de verzamelde ecotoxiciteitsgegevens kunnen ook de volgende risicogrenzen berekend worden:

i-Verwaarloosbaar Risiconiveau (i-VR)

Volgens de nieuwe methodiek kan het i-VR berekend worden door de i-MKN door 100 te delen:

$$i\text{-VR}_{\text{zoet}} = 0,19 \mu\text{g/L}$$

$$i\text{-VR}_{\text{zout}} = 0,019 \mu\text{g/L}$$

i-Maximaal Aanvaardbare Concentratie - Milieukwaliteitsnorm (i-MAC-MKN)

Rapportage

Stap	Resultaat	Opmerking
1	nee	
2	ja	
3	-	
4	$i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco}} = 15,8 \text{ mg/L} / 100 = 0,158 \text{ mg/L} = 160 \mu\text{g/L}$	(in 2 significante cijfers)

De $i\text{-MAC}_{\text{zoet, eco}}$ is $160 \mu\text{g/L}$.

Een $i\text{-MAC}_{\text{zout, eco}}$ kan volgens de nieuwe methodiek worden afgeleid door een extra AF van 10 toe te passen: $16 \mu\text{g/L}$.

i-Ernstig Risiconiveau (i-ER)

De nieuwe methodiek geeft ook de mogelijkheid om een i-ER af te leiden. Het ER wordt echter in het Nederlandse beleid oppervlaktewater niet gebruikt. Daarom wordt het in deze rapportage niet afgeleid en gerapporteerd. Het ER wordt wel gebruikt voor bodem en grondwaternormen maar hiervoor is geen verzoek ingediend.

8. Literatuur

Anoniem. 2010. Stoffdatenblattentwurf für Benzotriazol (Stand 12/03/2010, update 10/05/10).
 Biobyte. 2006. Bio-Loom for Windows (computer program). Version 1.5. Claremont, USA, Biobyte Corp.
 de Poorter LRM, van Herwijnen R, Smit CE, Janssen PJCM. in prep. Concept handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen. Bilthoven: RIVM.
 ECHA. 2014. REACH dossier for benzotriazole.
 OECD. 2013. QSAR Toolbox (computer program). Version 3.1. Paris, OECD.
 US EPA. 2009. EPI Suite (computer program). Version 4.0. Washington, DC, U.S. Environmental Protection Agency (EPA) Office of Pollution Prevention Toxics and Syracuse Research Company (SRC).
 van Herwijnen R, Janssen PJCM, T.H.A. Haverkamp THA, de Poorter LRM. 2009. Handreiking voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen (Interimversie 2009). Bilthoven: RIVM. Report no. 601782025.

9. Afkortingenlijst

AA-EQS	Annual Average - Environmental Quality Standard (Engels voor JG-MKN)
AF	Assessmentfactor
BCF	Bioconcentratiefactor
ER	Ernstig Risiconiveau
GHL	Geschatte Humane Limietwaarde
i-	Voorvoegsel om aan te geven dat een risicogrens is afgeleid volgende de methodiek voor indicatieve mileurisicogrenzen
JG-MKN	Jaargemiddelde - milieukwaliteitsnorm
Koc	Octanol - Carbon partitie coëfficiënt
Kow	Octanol - Water partitie coëfficiënt
MAC-MKN	Maximaal Aanvaardbare Concentratie - Milieukwaliteitsnorm
MlogC	Geschatte log Kow waarde volgens BioLoom
MlogP	Experimentel log Kow waarde volgens BioLoom
MTR	Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau (bij water is dit oude benaming voor de JG-MKN)
pKa	Dissociatie constante
VR	Verwaarloosbaar Risiconiveau

Bijlage - stappenschema's nieuwe methodiek

Concept Stappenschema i-JG-MKN_{zoet, eco}

Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie/actie	Ga naar
1	Is er een gedegen JG-MKN of MTR beschikbaar voor landoppervlaktewater? (zie o.a. www.stoffen-risico.nl)	ja	Er wordt geen i-JG-MKN _{zoet} afgeleid	STOP
		nee		2
2	Zijn er experimentele ecotoxiciteitsdata voor water voor deze stof? (zie sectie 5.1)	ja		4
		nee		3
3	Overleg met een expert over het gebruik van QSARs en read-across voor het genereren ecotoxiciteitsdata. Is het gebruik van QSARs of read-across mogelijk? Zie ook sectie 5.1.3.	ja		4
		nee	Een i-JG-MKN _{zoet, eco} kan niet worden afgeleid	STOP
4	Data voor:	alleen acuut	i-JG-MKN _{zoet, eco} = EC50 _{min} /AF (Tabel 8)	8
		alleen chronisch	i-JG-MKN _{zoet, eco} = NOEC _{min} /AF (Tabel 8)	8
		acuut en chronisch	Leidt beide hierboven genoemde waarden af	5
5	Data voor acute eindpunten voor gehele basisset?	ja		6
		nee		7
6	NOEC voor tenminste <i>Daphnia</i> of vis en NOEC _{min} voor dezelfde groep als EC50 _{min} ?	ja	i-JG-MKN _{zoet, eco} is i-JG-MKN _{zoet, eco-chronisch} x 10 ^a	8
		nee	De laagste van de i-JG-MKN _{zoet, eco-acuut} en de i-JG-MKN _{zoet, eco-chronisch} bepaalt het i-JG-MKN _{zoet, eco} ^a	8
7	Is NOEC _{min} voor dezelfde groep als EC50 _{min} ?	ja	i-JG-MKN _{zoet, eco} is i-JG-MKN _{zoet, eco-chronisch} ^a	8
		nee	De laagste van de i-JG-MKN _{zoet, eco-acuut} en de i-JG-MKN _{zoet, eco-chronisch} bepaalt het i-JG-MKN _{zoet, eco} ^a	8
8	Gebruik het resultaat voor de selectie van het i-JG-MKN _{zoet}			

^a Als er aanwijzingen zijn dat gegevens voor de meest gevoelige groep ontbreken in de dataset (bijvoorbeeld gegevens voor een insect bij een insecticide), dan kan worden overwogen om een extra AF van 10 toe te passen.

Tabel 8 Afleiding i-JG-MKN_{zoet, eco} gebaseerd op toxiciteitsgegevens^a

Minimale vereiste	Aanvullende criteria/ opmerking	AF
Acute eindpunten		
EC50(s) voor 1 basisgroep		10000
EC50s voor 2 basisgroepen		5000
EC50s voor basisset		1000
Chronische eindpunten		
NOEC(s) voor 1 basisgroep		1000
NOECs voor 2 basisgroepen		500
NOECs voor basisset		100

^a Als de bepaling is gebaseerd op QSAR en/of read-across gegenereerde ecotoxiciteitsdata moet een extra AF van 10 worden toegepast.

Concept stappenschema $i\text{-MAC}_{\text{zoet, eco}}$

Nr	Vraag / Statement	Antw.	Conclusie/actie	Ga naar
1	Is er een gedegen MAC-MKN of MAC_{eco} beschikbaar voor landoppervlaktewater? (zie www.stoffen-risico.nl)	ja	Er wordt geen $i\text{-MAC}_{\text{zoet, eco}}$ afgeleid	STOP
		nee		2
2	Zijn er experimentele ecotox-data voor water voor deze stof? (zie sectie 5.1)	ja		4
		nee		3
3	Overleg met een expert over het gebruik van QSARs en read-across voor het genereren ecotoxiciteitsdata. Is het gebruik van QSARs of read-across mogelijk? Zie ook sectie 5.1.3.	ja		4
		nee	Een $i\text{-MAC}_{\text{zoet, eco}}$ kan niet worden afgeleid	STOP
4	Bereken $i\text{-MAC}_{\text{zoet, eco}}$		$i\text{-MAC}_{\text{zoet, eco}} = \text{EC50}_{\text{min}}/\text{AF}$ (Tabel 9) ^a	

^a Als er aanwijzingen zijn dat gegevens voor de meest gevoelige groep ontbreken in de dataset (bijvoorbeeld gegevens voor een insect bij een insecticide), dan kan worden overwogen om een extra AF van 10 toe te passen.

Tabel 9 Afleiding $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ gebaseerd op toxiciteitsgegevens^{a, b}

Minimale vereiste	Aanvullende criteria	AF
EC50 voor 1 basisgroep		1000
EC50s voor 2 basisgroepen		300
EC50s voor gehele basisset		100

^a Indien in de dataset alleen chronische gegevens beschikbaar zijn, wordt het laagste chronische eindpunt als worst-case EC50 gebruikt.

^b Als de bepaling is gebaseerd op QSAR en/of read-across gegenereerde ecotoxiciteitsdata moet een extra AF van 10 worden toegepast.