



Advies 15049A00 – indicatieve waterkwaliteitsnormen voor zes stoffen

A. van Leeuwenhoeklaan 9
3721 MA Bilthoven
Postbus 1
3720 BA Bilthoven
www.rivm.nl

T 030 274 91 11
F 030 274 29 71
info@rivm.nl

Projectnummer RIVM	M/270103/19/AS
Datum aanvraag	28-04-2021
Datum rapportage	22-06-2021
Auteur(s)	Els Smit
Toetser(s) (datum)	René van Herwijnen (28-05-2021) Stan de Groot (28-05-2021) Charles Bodar (22-06-2021)
Status	DEFINITIEF Dit advies is getoetst volgens de RIVM procedures en besproken in de Wetenschappelijke Klankbordgroep normstelling water en lucht.

Inhoud

1	Inleiding.....	3
1.1	Gegevens aanvraag	3
1.2	Werkwijze	3
2	Ethaan-1,2-diol	6
2.1	Identiteit en stofeigenschappen	6
2.2	Afleiding indicatieve normen voor oppervlaktewater	7
2.3	Conclusies	8
3	Ethylacetaat	9
3.1	Identiteit en stofeigenschappen	9
3.2	Afleiding indicatieve normen voor oppervlaktewater	10
3.3	Conclusies	11
4	Vinylacetaat.....	12
4.1	Identiteit en stofeigenschappen	12
4.2	Afleiding indicatieve normen voor oppervlaktewater	13
4.3	Conclusies	14
5	Fenol	15
5.1	Identiteit en stofeigenschappen	15
5.2	Afleiding indicatieve normen voor oppervlaktewater	16
5.3	Conclusies	16
6	1-hepteen	17
6.1	Identiteit en stofeigenschappen	17
6.2	Afleiding indicatieve normen voor oppervlaktewater	18
6.3	Conclusies	19
7	Ethoxypropylacetaat	20
7.1	Identiteit en stofeigenschappen	20
7.2	Afleiding indicatieve normen voor oppervlaktewater	21
7.3	Conclusies	21
8	Discussie en conclusies.....	22

9	Status van dit advies/disclaimer	22
	Literatuur	23
	Bijlage 1. Rapportageformulier ethaan-1,2-diol	26
	Bijlage 2. Rapportageformulier ethylacetaat.....	33
	Bijlage 3. Rapportageformulier vinylacetaat	38
	Bijlage 4. Rapportageformulier fenol.....	42
	Bijlage 5. Rapportageformulier hepteen.....	47
	Bijlage 6. Ecotoxiciteitsgegevens alkenen	51
	Bijlage 7. Rapportageformulier ethoxypropylacetaat	53

1 Inleiding

1.1 Gegevens aanvraag

Het RIVM heeft een aanvraag gekregen voor indicatieve normen voor oppervlaktewater voor een aantal stoffen in het kader van een vergunningprocedure. In overleg met de aanvrager komen in dit advies de volgende stoffen aan de orde:

Stofnaam	CAS-nummer
ethaan-1,2-diol (ethyleenglycol)	107-21-1
ethylacetaat	141-78-6
vinylacetaat	108-05-4
fenol	108-95-2
1-hepteen	25339-56-4
ethoxypropylacetaat	98516-30-4

Voor deze stoffen is een indicatieve jaargemiddelde milieukwaliteitsnorm (i-JG-MKN_{zoet}) en een indicatieve maximaal aanvaardbare concentratie voor zoet oppervlaktewater (i-MAC-MKN_{zoet, eco}) aangevraagd. Met de gegevens die hiervoor nodig zijn, kunnen ook i-MKN's voor zout water worden afgeleid en deze zijn toegevoegd aan dit advies.

Voor vinylacetaat en fenol zijn indicatieve Maximaal Toelaatbare Risiconiveaus (MTR's) beschikbaar van respectievelijk 100 en 18 µg/L. Deze i-MTR's voor water zijn afkomstig uit het voormalige normenbestand van de Helpdesk Water. Omdat niet duidelijk is hoe de afleiding en/of toetsing heeft plaatsgevonden, zijn nieuwe i-MKN's afgeleid. Voor de overige stoffen zijn geen vastgestelde normen voor oppervlaktewater beschikbaar.

1.2 Werkwijze

1.2.1 Algemeen

De i-JG-MKN is de concentratie in het oppervlaktewater die bij langdurige blootstelling geen nadelige effecten op het ecosysteem en de voedselketen veroorzaakt. De i-MAC-MKN is de concentratie in het oppervlaktewater die bij kortdurende blootstelling geen ecotoxicologische effecten veroorzaakt. De afleiding van de i-JG-MKN en i-MAC-MKN is beschreven in RIVM Rapport 2015-0057 (De Poorter et al., 2015).

Er wordt opgemerkt dat op korte termijn een herziene handleiding zal worden gepubliceerd. De werkwijze voor de i-JG-MKN is grotendeels gelijk gebleven, maar de veiligheidsfactoren voor de i-MAC-MKN_{zoet, eco} zullen in lijn worden gebracht met de huidige Europese KRW-guidance. Volgens die guidance mag een veiligheidsfactor van 10 worden toegepast op de laagste acute waarde, mits de variatie tussen soorten beperkt is en/of de potentieel gevoeligste taxonomische groep is getest. In de huidige handleiding is de laagste veiligheidsfactor voor de i-MAC-MKN_{eco, zoet} nog een factor 100, wat geregeld leidt tot een i-MAC-MKN_{eco} die lager is dan de i-JG-MKN_{eco}. Omdat het niet

waarschijnlijk is dat acute effecten optreden bij lagere concentraties dan chronische, zijn in dit advies alvast de nieuwe veiligheidsfactoren toegepast.

1.2.2 Voedselketeneffecten

Afhankelijk van de stofeigenschappen, moeten effecten op de voedselketen worden meegenomen bij het afleiden van de i-JG-MKN. De $i\text{-JG-MKN}_{\text{water, voedselketen}}$ is de concentratie in water waarbij er geen gezondheidkundige effecten zijn te verwachten als gevolg van het eten van vis. De $i\text{-JG-MKN}_{\text{water, voedselketen}}$ wordt berekend met behulp van een gezondheidkundige risicogrens (indicatieve humane limietwaarde, i-HL) en een bioconcentratiefactor (BCF). De BCF is een maat voor de opname van de stof uit water door vissen. De i-HL geeft aan welke hoeveelheid van een stof mensen dagelijks mogen binnenkrijgen zonder dat ze schadelijke effecten op hun gezondheid ondervinden. In lijn met de herziene handleiding mag de voedselketenroute ten hoogste 20% bijdragen aan de totale inname (allocatiefactor 0,2). In formule:

$$i\text{-JG-MKN}_{\text{humaan, voedsel}} = \frac{0,2 \times i\text{-MTR}_{\text{oraal}} \times 70}{0,115} \quad (1)$$

$$i\text{-JG-MKN}_{\text{water, voedselketen}} = \frac{i\text{-MKN}_{\text{humaan, voedsel}}}{\text{BCF}} \quad (2)$$

Voor de i-HL is gebruik gemaakt van bestaande (inter)nationale evaluaties. Als deze niet voorhanden waren, is de 'Threshold of Toxicological Concern' (TTC) gebruikt als gezondheidkundige risicogrenswaarde. De TTC-benadering is een methode om op basis van chemische structuur een veilige dagelijkse inname voor mensen te schatten (EFSA & WHO, 2016).

1.2.3 Geraadpleegde bronnen

Voor ethaan-1,2-diol en ethylacetaat heeft het RIVM in 2005 gedegen ecotoxicologische MTR's afgeleid (Verbruggen et al., 2005). Deze zijn gebruikt om risicogrenzen voor water af te leiden met behulp van het programma HUMANEX (Bontje et al., 2005; Traas & Bontje, 2005). Dit programma werd gebruikt om de risicogrenzen voor de compartimenten lucht, (grond)water, sediment en bodem op elkaar af te stemmen door middel van evenwichtspartitie. De risicogrenzen uit 2005 zijn niet officieel vastgesteld. Inmiddels is de afleiding van indicatieve waterkwaliteitsnormen afgestemd op de Europese methodiek van de Kaderrichtlijn Water (EC, 2018). De combinatie van een oud (i-)MTR met een nieuw afgeleide $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ is niet wenselijk. Daarom zijn voor deze twee stoffen indicatieve MKN's afgeleid op basis van de datasets uit 2005. Daarbij zijn de kritische studies en veiligheidsfactoren gecontroleerd en is nagegaan of er aanvullende relevante gegevens zijn in de REACH-registratiedossiers en de US EPA Ecotox Knowledgebase (US EPA, 2021).

Voor vinylacetaat en fenol is gebruik gemaakt van de Europese risicobeoordelingen (EU-RAR) in het kader van het voormalige bestaande stoffenbeleid (BAuA, 2008; EC, 2006), de REACH-registratiedossiers en de US EPA Ecotox Knowledgebase (US EPA, 2021)

zijn gecontroleerd op aanvullende relevante gegevens die dateren van na de EU-RAR.

Voor 1-hepteen en ethoxypropylacetaat is bij gebrek aan gegevens in de gebruikelijke databases nog gezocht naar aanvullende gegevens uit andere bronnen.


Bij een indicatieve normafleiding hoort geen evaluatie van onderliggende gegevens. Om de gegevens te kunnen duiden in het licht van de stofeigenschappen, zijn in sommige gevallen wel enkele studies geraadpleegd. In de volgende hoofdstukken wordt per stof de normafleiding beschreven. Details zijn te vinden in de rapportageformulieren in de bijlagen.

2 Ethaan-1,2-diol

2.1 Identiteit en stoffeigenschappen

Ethaan-1,2-diol (CAS 107-21-1) staat ook bekend als ethyleenglycol. De stof kent vele toepassingen, bijvoorbeeld als intermediair bij de productie van polyester, als oplosmiddel in (consumenten)producten en als antivries (ECHA, 2021a; Verbruggen et al., 2005). In Tabel 1 en 2 staan de identiteit en stoffeigenschappen samengevat. Voor details zie Bijlage 1.

Tabel 1. Identiteit en classificatie ethaan-1,2-diol

Stofnaam	ethaan-1,2-diol
IUPAC-naam	ethylene glycol
Synoniemen	1,2-dihydroxyethane; 1,2-ethanediol; 1,2-ethylene glycol; 2-hydroxyethanol; ethylene alcohol; ethylene dihydrate
CAS-nummer	107-21-1
Classificatie (gezondheidskundig)	geharmoniseerde classificatie alleen voor ecotoxiciteit ¹ genotificeerde classificatie: H360 Repro 1B H340 Muta. 1B Afleiding i-JG-MKN _{water, voedselketen} niet getriggerd (zie 2.2.1)
REACH/ Zeer Zorgwekkende Stof	geregistreerd; niet op de lijst van (p)ZZS
Molecuulformule	C ₂ H ₆ O ₂
Smiles	OCCO
Structuurformule	

Tabel 2. Relevante fysisch-chemische eigenschappen van ethaan-1,2-diol en informatie over gedrag in het milieu.

Eigenschap	Waarde	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	62,07	
Versijningsvorm	vloeibaar bij 20 °C en 1013 hPa	ECHA (2021a)
Oplosbaarheid in water [g/L]	mengbaar	Verbruggen et al. (2005)
Dampspanning [Pa]	11,2	Verbruggen et al. (2005)
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	0,00608	Verbruggen et al. (2005)

¹ Dit betreft een zogenoemde 'minimum classification', omdat de indeling volgens Richtlijn 67/548/EEG (DSD-wetgeving; voorloper van de CLP-wetgeving) niet rechtstreeks overeenkomt met de indeling in een gevarenklasse en -categorie volgens de huidige CLP-verordening.

Eigenschap	Waarde	Referentie
Octanol/water partiticoëfficiënt [log K _{ow}]	-1,36	Biobyte (2006)
Afbreekbaarheid	readily biodegradable	ECHA (2021a), Verbruggen et al. (2005)
Log K _{oc} [L/kg]	-0,03	Verbruggen et al. (2005)

Het programma Epi Suite (US EPA, 2000-2012) voorspelt de massaverdeling over de milieucompartmenten in steady state. Bij 100% emissie naar water is die verdeling 99,8% in water en 0,2% in sediment.

2.2 Afleiding indicatieve normen voor oppervlaktewater

2.2.1 Voedselketenroute

Ethyleenglycol heeft onder REACH een dossier evaluatie ondergaan en er is een Risk Management Option Analysis (RMOA) uitgevoerd vanwege zorg over carcinogeniteit, mutageniteit, reproductietoxiciteit en hormoonverstoring. Volgens het RMOA conclusie-document wijzen de toxiciteitsgegevens in het dossier niet op een noodzaak voor verdere classificatie onder CLP en geeft het dossier geen reden tot zorg over reproductietoxiciteit (RIVM, 2020a). Het RIVM heeft eerder een advies uitgebracht voor een Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau (MTR) voor lucht (RIVM, 2020b). Deze evaluatie bevestigt dat er geen aanwijzingen zijn voor genotoxiciteit en carcinogeniteit. In combinatie met de log K_{ow} van -1,36 leidt dit tot de conclusie dat de voedselketenroute niet relevant is.

2.2.2 Ecotoxiciteit

Voor het afleiden van de i-MKN_{eco} is gebruik gemaakt van de dataset uit Verbruggen et al. (2005). Het REACH registratiedossier en de US EPA Ecotox Knowledgebase bevatten geen aanvullende relevante gegevens (ECHA, 2021a; US EPA, 2021).

De acute dataset bevat gegevens voor protozoën, algen en cyanobacteriën, schimmels, raderdiertjes, kreeftachtigen, insecten, vissen, amfibieën en waterplanten. De chronische dataset bestaat uit protozoën, algen, schimmels, raderdiertjes, kreeftachtigen, insecten en vissen (zie Bijlage 1).

De laagste chronische waarde in Verbruggen et al. (2005) is een 8-daagse NOEC van 112 mg/L voor het protozoön *Chilomonas paramecium*. Deze waarde is echter niet gebruikt als basis voor een chronische norm, omdat volgens de toenmalige en huidige guidance alleen acute gegevens voor protozoën worden meegenomen. Bovendien is er twijfel over de betrouwbaarheid van deze NOEC, omdat er een zeer groot verschil is met een andere betrouwbare NOEC van 40.000 mg/L voor sterfte. Die hogere waarde is afkomstig uit een Canadese normafleiding (Kent et al., 1999) en is in lijn met de NOEC's voor twee andere protozoën. Kent et al. (1999) keuren de waarde van 112 mg/L af. In 2005 is gebruik gemaakt van de NOEC van 2000 mg/L voor de blauwalg *Microcystis aeruginosa* en is een MTR_{eco} afgeleid van 200 mg/L (NOEC met veiligheidsfactor 10).

Voor de PNEC-afleiding onder REACH hanteert de registrant een groepsbenadering voor alle ethyleen-glycolen. Daarbij is uitgegaan van een worst-case NOEC van 100 mg/L voor algen, afkomstig uit een limiettest met penta ethyleenglycol (ECHA, 2021a).

Volgens de herziene handleiding moet bij gebruik van een eerder afgeleide risicogrens worden bekeken of de dataset en gebruikte methodiek aansluiten bij de huidige werkwijze. De NOEC voor *M. aeruginosa* is afkomstig uit publicaties van Bringmann & Kühn, evenals de 8-daagse NOEC van >10000 mg/L voor de groenalg *Scenedesmus quadricauda*. Deze algentesten voldoen niet aan de huidige eisen voor ondermeer de testduur en eindpunten uit deze studies worden niet meer meegenomen bij de afleiding van (indicatieve) normen. Hierdoor zouden chronische gegevens voor algen ontbreken, terwijl die acuut wel het meest gevoelig zijn. Daarom is gekeken of uit de algenstudies uit Verbruggen et al. (2005) en het REACH registratiedossier alsnog een chronische waarde kon worden afgeleid. Vanwege de mogelijke gevoeligheid is ook de studie met de waterplant *Lemna gibba* opnieuw bekeken. Dit leverde voor in beide gevallen inderdaad chronische waarden op, voor details: zie Bijlage 1. De hier gevolgde werkwijze wijkt af van de gangbare indicatieve methodiek, maar past wel in de heroverweging van een eerder afgeleide risicogrens, zoals beschreven in de herziene handleiding.

De acute basisset van alg, kreeftachtige en vis is compleet en de variatie in de acute dataset is klein. Volgens de herziene handleiding, wordt de i-MAC-MKN_{zoet, eco} afgeleid met een veiligheidsfactor van 10 op de laagste acute EC₅₀ van 5409 mg/L voor de alg *Raphidocelis subcapitata* (voorheen *Pseudokirchneriella subcapitata*). Dit levert een i-MAC-MKN_{zoet, eco} van 540 mg/L (0,54 g/L afgerond op twee significante cijfers). De i-MAC-MKN_{zout, eco} wordt afgeleid met een extra factor 10 en is 54 mg/L.

Ook de chronische basisset van alg, kreeftachtige en vis is compleet. De i-JG-MKN_{zoet, eco} wordt afgeleid met een veiligheidsfactor van 10 op laagste chronische EC₁₀ van 1974 mg/L voor *R. subcapitata* en bedraagt afgerond 0,20 g/L (200 mg/L). Dit is gelijk aan het eerder afgeleide MTR, maar gebaseerd op een ander eindpunt. De i-JG-MKN_{zout, eco} wordt afgeleid met een extra factor 10 en is 20 mg/L.

2.3 Conclusies

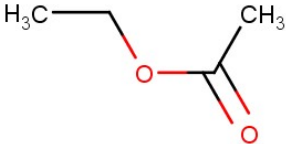
Directe ecotoxiciteit is de enige relevante route. De i-JG-MKN_{zoet} is 0,20 g/L, de i-JG-MKN_{zout} is 20 mg/L. De i-MAC-MKN_{zoet, eco} is 0,54 g/L, de i-MAC-MKN_{zout, eco} is 54 mg/L.

3 Ethylacetaat

3.1 Identiteit en stoffeigenschappen

Ethylacetaat (CAS 141-78-6) is een oplosmiddel dat wordt toegepast in verven, lijmen en (consumenten)producten (ECHA, 2021b; Verbruggen et al., 2005). In Tabel 3 en 4 staan de identiteit en stoffeigenschappen samengevat. Voor details: zie Bijlage 2.

Tabel 3. Identiteit en classificatie ethylacetaat.

Stofnaam	ethylacetaat
IUPAC-naam	ethyl acetate
Synoniemen	ethyl ethanoate
CAS-nummer	141-78-6
Geharmoniseerde classificatie (gezondheidskundig)	H336 STOT SE 3 H319 Eye Irrit. 2 Afleiding i-JG-MKN _{water, voedselketen} niet getriggerd
REACH/ Zeer Zorgwekkende Stof	geregistreerd; niet op de lijst van (p)ZZS
Molecuulformule	C ₄ H ₈ O ₂
Smiles	CCOC(C)=O
Structuurformule	

Tabel 4. Relevante fysisch-chemische eigenschappen van ethylacetaat en informatie over gedrag in het milieu.

Eigenschap	Waarde	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	88,11	
Verschijningsvorm	vloeibaar bij 20 °C en 1013 hPa	ECHA (2021b)
Oplosbaarheid in water [mg/L]	79710	Verbruggen et al. (2005)
Dampspanning [Pa]	8807	Verbruggen et al. (2005)
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	15,2	Verbruggen et al. (2005)
Octanol/water partiticoëfficiënt [log K _{ow}]	0,73	Biobyte (2006)
Afbreekbaarheid	readily biodegradable	(ECHA, 2021b)
Log K _{oc} [L/kg]	1,41	Verbruggen et al. (2005)

Het programma Epi Suite (US EPA, 2000-2012) voorspelt de massaverdeling over de milieuc compartimenten in steady state. Bij 100% emissie naar water is die verdeling 94% in water, 5,7% in lucht, 0,2% in sediment en 0,1% in bodem. Deze modelberekening lijkt echter niet in overeenstemming met de hoge dampdruk en Henry-coëfficiënt en heeft vooral te maken met de aanname in de modelberekening dat er continu geloosd wordt. Doordat de afbraak in water langzamer is dan in lucht, blijft het aandeel van de stof in water relatief groot. Bij een kortdurende lozing zal de stof waarschijnlijk snel uit het water verdampen.

3.2 Afleiding indicatieve normen voor oppervlaktewater

3.2.1 Voedselketenroute

Op basis van de geharmoniseerde classificatie en log K_{ow} is het niet nodig om de voedselketenroute mee te nemen.

3.2.2 Ecotoxiciteit

Voor het afleiden van de $i\text{-MKN}_{eco}$ is gebruik gemaakt van de dataset uit Verbruggen et al. (2005). Het REACH registratiedossier en de US EPA Ecotox Knowledgebase bevatten geen aanvullende relevante gegevens.

De acute dataset bevat gegevens voor bacteriën, protozoën, algen en cyanobacteriën, kreeftachtigen, insecten, vissen, amfibieën, ringwormen, platwormen, neteldieren en slakken. De chronische dataset bestaat uit bacteriën, protozoën, algen en kreeftachtigen (zie Bijlage 2).

Verbruggen et al. (2005) geven een MTR_{eco} van 0,11 mg/L, afgeleid op basis van een NOEC voor *Daphnia magna* van 5,4 mg/L en een veiligheidsfactor van 50. De NOEC voor *D. magna* is afkomstig uit een test bij een nominale concentratie van 12 mg/L. De laagste gemeten concentratie in de test was 2,4 mg/L, de 5,4 mg/L is het geometrisch gemiddelde van de nominale en gemeten waarde. Voor het huidige advies is gekozen voor de laagste waarde van 2,4 mg/L, zoals ook gebruikt in het REACH registratiedossier.

De PNEC in het REACH-dossier is 0,24 mg/L, gebaseerd op de laagste NOEC voor *D. magna* van 2,4 mg/L met een veiligheidsfactor van 10. Volgens de REACH- en KRW-guidance is echter een hogere veiligheidsfactor nodig omdat vissenstudies ontbreken.

De acute basisset van alg, kreeftachtige en vis is compleet en de variatie in de acute dataset is klein. Volgens de herziene handleiding, wordt de $i\text{-MAC-MKN}_{zoet, eco}$ afgeleid met een veiligheidsfactor van 10 op de laagste acute EC_{50} . Met de EC_{50} van 110 mg/L voor het protozoön *Tetrahymena thermophila* levert dit een $i\text{-MAC-MKN}_{zoet, eco}$ van 11 mg/L. De $i\text{-MAC-MKN}_{zout, eco}$ wordt afgeleid met een extra factor 10 en is 1,1 mg/L.

De chronische basisset van alg, kreeftachtige en vis is niet compleet. Omdat er geen chronische gegevens zijn voor vissen, wordt de $i\text{-JG-MKN}_{zoet, eco}$ afgeleid met een veiligheidsfactor van 50 op de laagste chronische NOEC. Met de NOEC van 2,4 mg/L voor *D. magna* levert dit een $i\text{-JG-MKN}_{zoet, eco}$ van 0,048 mg/L (48 µg/L). De $i\text{-JG-MKN}_{zout, eco}$ wordt afgeleid met een extra factor 10 en is 4,8 µg/L.

3.3

Conclusies

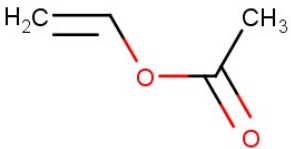
Directe ecotoxiciteit is de enige relevante route. De i-JG-MKN_{zoet} is 48 µg/L, de i-JG-MKN_{zout} is 4,8 µg/L. De i-MAC-MKN_{zoet, eco} is 11 mg/L, de i-MAC-MKN_{zout, eco} is 1,1 mg/L.

4 Vinylacetaat

4.1 Identiteit en stoffeigenschappen

Vinylacetaat (CAS 108-05-4) wordt vooral gebruikt als monomeer in de productie van (co)polymeren. In Tabel 5 en 6 staan de identiteit en stoffeigenschappen samengevat. Voor details zie Bijlage 3.

Tabel 5. Identiteit en classificatie vinylacetaat.

Stofnaam	vinylacetaat
IUPAC-naam	vinyl acetate
Synoniemen	1-Acetoxyethylene; acetic acid ethenyl ester acetic acid vinyl ester; ethenyl acetate
CAS-nummer	108-05-4
Geharmoniseerde classificatie (gezondheidskundig)	H332 Acute Tox. 4 H351 Carc. 2 H335 STOT SE 3 Afleiding i-JG-MKN _{water} , voedselketen getriggerd vanwege H351
REACH/ Zeer Zorgwekkende Stof	geregistreerd; niet op de lijst van (p)ZZS
Molecuulformule	C ₄ H ₆ O ₂
Smiles	CC(=O)OC=C
Structuurformule	

Tabel 6. Relevante fysisch-chemische eigenschappen van vinylacetaat en informatie over gedrag in het milieu.

Eigenschap	Waarde	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	86,08	
Verschijningsvorm	vloeibaar bij 20 °C en 1013 hPa	RAC (2011)
Oplosbaarheid in water [mg/L]	20000	RAC (2011)
Dampspanning [Pa]	12000	ECHA (2021c)
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	56,1	ECHA (2021c)
Octanol/water partitiecoëfficiënt [log K _{ow}]	0,7	RAC (2011)
Afbreekbaarheid	readily biodegradable	ECHA (2021c)
Log K _{oc} [L/kg]	1,4	ECHA (2021c)

Het programma Epi Suite (US EPA, 2000-2012) voorspelt de massaverdeling over de milieucompartmenten in steady state. Bij 100% emissie naar water is die verdeling 97,8% in water, 2,0% in lucht en 0,2% in sediment. Op basis van de hoge dampdruk en Henry-coëfficiënt,

wordt echter verwacht dat de stof na een kortdurende lozing snel uit het water zal verdampen.

4.2 Afleiding indicatieve normen voor oppervlaktewater

4.2.1 Voedselketenroute

Op basis van de geharmoniseerde classificatie als verdacht carcinogeen moet de voedselketenroute worden meegenomen. In de EU-RAR staat een verwijzing naar een Toelaatbare Dagelijkse Inname (TDI) van 0,2 mg/kg lichaamsgewicht per dag, afgeleid in het kader van de beoordeling van vinylacetaat in voedselcontactmaterialen (EC, 2005). Met deze TDI en een geschatte BCF van 3,2 L/kg is een $i\text{-JG-MKN}_{\text{water, voedselketen}}$ berekend van 7,6 mg/L (zie Bijlage 3).

4.2.2 Ecotoxiciteit

Voor het afleiden van de $i\text{-MKN}_{\text{eco}}$ is gebruik gemaakt van de EU-RAR (BAuA, 2008) en het REACH registratiedossier (ECHA, 2021c). De US EPA Ecotox Knowledgebase bevat geen aanvullende relevante gegevens, de studies die daarin zijn genoemd worden in de de EU-RAR afgekeurd omdat ze zijn uitgevoerd in open systemen en er niet is gemeten.

De acute dataset bevat gegevens voor algen en kreeftachtigen. De chronische dataset bestaat uit bacteriën, protozoën, algen en vissen (zie Bijlage 3).

De PNEC in het REACH registratiedossier is 0,016 mg/L, gebaseerd op de laagste NOEC voor de vis *Pimephales promelas* van 0,16 mg/L met een veiligheidsfactor van 10. In de EU-RAR wordt voor deze studie een NOEC van 0,55 mg/L gerapporteerd en is een veiligheidsfactor van 50 gebruikt omdat de chronische basisset niet compleet is. Volgens de REACH- en KRW-guidance is echter een hogere factor nodig omdat de acuut gevoeligste taxonomische groep niet chronisch is getest.

Doordat een acute studie met vissen ontbreekt, is de acute basisset van alg, kreeftachtige en vis niet compleet. In dit geval wordt de $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ afgeleid met een veiligheidsfactor van 300 op de laagste acute EC_{50} van 12,6 mg/L voor de watervlo *Daphnia magna*. Dit levert een $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ van 42 µg/L. De $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zout, eco}}$ wordt afgeleid met een extra factor 10 en is 4,2 µg/L.

Er is geen chronische studie met kreeftachtigen en de chronische basisset van alg, kreeftachtige en vis is niet compleet. De acuut gevoeligste soort (*D. magna*) is niet chronisch getest. Algen zijn acuut nagenoeg even gevoelig als watervlooien, maar bij algen worden de acute en chronische waarde bij dezelfde blootstellingsduur bepaald. Voor *D. magna* zou de langere blootstelling in een chronische studie een ander effect kunnen hebben. Als er een acute test met vissen was geweest, had de acuut-chronisch ratio mogelijk inzicht kunnen geven in het effect van blootstellingsduur. Omdat niet duidelijk is of de chronische vissenstudie de risico's voor kreeftachtigen voldoende afdekt, wordt een veiligheidsfactor van 500 gebruikt. Met de NOEC van 0,16 mg/L voor *P. promelas* levert dit een $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ van 0,32 µg/L. De $i\text{-JG-MKN}_{\text{zout, eco}}$ wordt afgeleid met een extra factor 10 en is 0,032 µg/L.

4.3

Conclusies

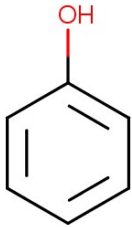
Directe ecotoxiciteit is de bepalende route. De i-JG-MKN_{zoet} is 0,32 µg/L, de i-JG-MKN_{zout} is 0,032 µg/L. De i-MAC-MKN_{zoet, eco} is 42 µg/L, de i-MAC-MKN_{zout, eco} is 4,2 µg/L.

5 Fenol

5.1 Identiteit en stoffeigenschappen

Fenol (CAS 108-95-2) wordt vooral gebruikt als intermediair in de productie van organische stoffen. De stof zit ook in verf en poetsmiddelen, lijmen en inkt (EC, 2006; EFSA, 2013). In Tabel 7 en 8 staan de identiteit en stoffeigenschappen samengevat. Voor details: zie Bijlage 4.

Tabel 7. Identiteit en classificatie fenol.

Stofnaam	fenol
IUPAC-naam	phenol
Synoniemen	phenol; carbolic acid; monohydroxybenzene; phenylalcohol
CAS-nummer	108-95-2
Geharmoniseerde classificatie (gezondheidskundig)	H341 Muta. 2 Afleiding i-JG-MKN _{water} , voedselketen getriggerd
REACH/ Zeer Zorgwekkende Stof	geregistreerd; niet op de lijst van (p)ZZS
Molecuulformule	C ₆ H ₆ O
Smiles	OC1=CC=CC=C1
Structuurformule	

Tabel 8. Relevante fysisch-chemische eigenschappen van fenol en informatie over gedrag in het milieu.

Eigenschap	Waarde	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	86,08	
Verschijningsvorm	vaste stof	EC (2006) ECHA (2021d)
Oplosbaarheid in water [mg/L]	84000	EC (2006) ECHA (2021d)
Dampspanning [Pa]	200	EC (2006) ECHA (2021d)
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	0,022	EC (2006) ECHA (2021d)
Octanol/water partiticoëfficiënt [log K _{ow}]	1,47	EC (2006) Biobyte (2006)
Dissociatieconstante (pK _a)	9,89	EC (2006) ECHA (2021d)
Afbreekbaarheid	readily biodegradable	EC (2006) ECHA (2021d)
Log K _{oc} [L/kg]	1,9	EC (2006) ECHA (2021d)

Het programma Epi Suite (US EPA, 2000-2012) voorspelt de massaverdeling over de milieucompartimenten in steady state. Bij 100% emissie naar water is die verdeling 99,5% in water en 0,5% in sediment. Ook hier geldt dat de modelberekening niet in overeenstemming is met de hoge dampdruk en Henry-coëfficiënt. Bij een kortdurende lozing zal de stof waarschijnlijk snel uit het water verdampen.

5.2 Afleiding indicatieve normen voor oppervlaktewater

5.2.1 Voedselketenroute

Op basis van de geharmoniseerde classificatie als verdacht mutageen moet de voedselketenroute worden meegenomen. EFSA heeft in 2013 een Toelaatbare Dagelijkse Inname (TDI) afgeleid van 0,5 mg/kg lichaamsgewicht per dag (EFSA, 2013). Met deze waarde en de BCF van 17,5 L/kg is een $i\text{-JG-MKN}_{\text{water, voedselketen}}$ berekend van 3,5 mg/L (zie Bijlage 4).

5.2.2 Ecotoxiciteit

Voor het afleiden van de $i\text{-MKN}_{\text{eco}}$ is gebruik gemaakt van de EU-RAR (EC, 2006), het REACH registratiedossier (ECHA, 2021d) en de US EPA Ecotox Knowledgebase (US EPA, 2021).

De acute dataset bevat gegevens voor bacteriën, algen, waterplanten, raderdiertjes, kreeftachtigen, insecten en vissen. De chronische dataset bestaat uit bacteriën, algen, waterplanten, kreeftachtigen en vissen (zie Bijlage 4).

De PNEC in het REACH-dossier is 0,008 mg/L (8 µg/L), gebaseerd op de laagste NOEC voor de vis *Cirrhina mrigala* van 0,077 mg/L met een veiligheidsfactor van 10.

De acute basisset van alg, kreeftachtige en vis is compleet. Volgens de herziene handleiding, wordt de $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ afgeleid met een veiligheidsfactor van 10 op de laagste acute EC_{50} van 2,5 mg/L voor de watervlo *Ceriodaphnia dubia*. Dit levert een $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ van 0,25 mg/L. De $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zout, eco}}$ wordt afgeleid met een extra factor 10 en is 25 µg/L.

De chronische basisset van alg, kreeftachtige en vis is compleet en de acuut gevoeligste soort is ook chronisch getest. De laagste NOEC is 77 µg/L voor de vis *C. mrigala*. Met een veiligheidsfactor van 10 wordt $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ 7,7 µg/L. De $i\text{-JG-MKN}_{\text{zout, eco}}$ wordt afgeleid met een extra factor 10 en is 0,77 µg/L.

5.3 Conclusies


Directe ecotoxiciteit is de bepalende route. De $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet}}$ is 7,7 µg/L, de $i\text{-JG-MKN}_{\text{zout}}$ is 0,77 µg/L. De $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ is 0,25 mg/L, de $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zout, eco}}$ is 25 µg/L.

6 1-hepteen

6.1 Identiteit en stoffeigenschappen

1-hepteen (CAS 25339-56-4) wordt vooral gebruikt als intermediair in de productie van organische stoffen. In Tabel 9 en 10 staan de identiteit en stoffeigenschappen samengevat. Voor details zie Bijlage 5.

Tabel 9. Identiteit en classificatie 1-hepteen.

Stofnaam	1-hepteen
IUPAC-naam	heptene
Synoniemen	hept-1-ene
CAS-nummer	25339-56-4
Genotificeerde classificatie (gezondheidskundig)	H304 Asp Tox. 1 Afleiding i-JG-MKN _{water, voedselketen} niet getriggerd
REACH/ Zeer Zorgwekkende Stof	pre-registratie; niet op de lijst van (p)ZZS
Molecuulformule	C ₇ H ₁₄
Smiles	C=CCCCCC
Structuurformule	

Tabel 10. Relevante fysisch-chemische eigenschappen van 1-hepteen en informatie over gedrag in het milieu.

Eigenschap	Waarde	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	98,19	
Verschijningsvorm	kleurloze vloeistof	
Oplosbaarheid in water [mg/L]	18,2	
Dampspanning [Pa]	7910	US EPA (2000-2012)
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	4,3 x 10 ⁴	US EPA (2000-2012)
Octanol/water partiticoëfficiënt [log K _{ow}]	3,99	Biobyte (2006)
Dissociatieconstante (pK _a)	n.v.t.	
Afbreekbaarheid	niet persistent	US EPA (2000-2012)
Log K _{oc} [L/kg]	3,46	US EPA (2000-2012)

Het programma Epi Suite (US EPA, 2000-2012) voorspelt de massaverdeling over de milieucompartmenten in steady state. Bij 100% emissie naar water is die verdeling 93% in water, 1,4% in lucht en 6,6% in sediment. De hoge dampdruk en Henry-coëfficiënt zorgen er echter voor dat de stof na een kortdurende lozing waarschijnlijk snel uit het water zal verdampen. Sorptie speelt ook een rol bij het verdwijnen uit de waterfase.

6.2 Afleiding indicatieve normen voor oppervlaktewater

6.2.1 Voedselketenroute

Vanwege de $\log K_{ow} > 3$, moet de voedselketenroute worden meegenomen. Er is geen (inter)nationale afgeleide gezondheidkundige risicogrenswaarde. 1-Hepteen is beoordeeld in het kader van het OECD-programma voor 'high production volume chemicals' (HPV) in de stofgroep 'higher olefins', maar in het OECD SIDS evaluatierapport staan geen gegevens voor deze stof zelf. Er wordt geconcludeerd dat deze groep stoffen een relatief lage toxiciteit heeft in studies met herhaalde dosering. Er zijn geen aanwijzingen voor reproductie- of ontwikkelingseffecten en er zijn geen alerts voor carcinogeniteit (OECD, 2004).

Omdat er geen gegevens zijn voor 1-hepteen zelf, is gebruik gemaakt van de TTC-benadering. 1-Hepteen valt in de stofklasse 'low toxicity' met een i-HL van 30 $\mu\text{g}/\text{kg}$ lg per dag. Met deze i-HL en een geschatte BCF van 491 L/kg is een i-JG-MKN_{water, voedselketen} berekend van 7,4 $\mu\text{g}/\text{L}$ (zie Bijlage 5).

6.2.2 Ecotoxiciteit

Er is geen REACH registratiedossier en het OECD SIDS dossier bevat geen studies met 1-hepteen (OECD, 2004). De US EPA Ecotox Knowledgebase bevat één acute studie met *Daphnia magna* (US EPA, 2021). PubChem verwijst naar een studie met protozoën door Bringmann & Kühn (1980), deze is toegevoegd aan de dataset.

De dataset bestaat uit een acute EC₅₀ voor kreeftachtigen van >50 mg/L en een chronische NOEC voor protozoën van 1,8 mg/L.

Volgens de handleiding wordt een >-waarde als zodanig gebruikt. Omdat er maar een basisgroep is getest, wordt de i-MAC-MKN_{zoet, eco} dan afgeleid met een veiligheidsfactor van 1000 op de acute EC₅₀ van 50 mg/L en bedraagt 50 $\mu\text{g}/\text{L}$. De i-MAC-MKN_{zout, eco} wordt afgeleid met een extra factor 10 en is 5,0 $\mu\text{g}/\text{L}$.

Omdat de ene basisgroep alleen acuut is getest, wordt de i-JG-MKN_{zoet, eco} afgeleid met een veiligheidsfactor van 10.000 op de acute EC₅₀. De i-JG-MKN_{zoet, eco} wordt dan 5,0 $\mu\text{g}/\text{L}$. De i-JG-MKN_{zout, eco} wordt afgeleid met een extra factor 10 en is 0,50 $\mu\text{g}/\text{L}$.

Verbruggen et al. (2009) hebben ecotoxicologische risicogrenzen afgeleid voor minerale olie. Op basis van toxiciteitsexperimenten met lichte en zware oliemengsels, werd de interne concentratie berekend waarbij voor 95% van de soorten geen effect wordt verwacht. Deze HC₅ is berekend op basis van interne concentraties en is vervolgens teruggerekend naar milieurisicogrenzen in water voor de afzonderlijke fracties van het mengsel. Voor alifatische koolwaterstoffen met een ketenlengte van 6-8 C-atomen is op deze manier een MTR afgeleid van 3,9 $\mu\text{g}/\text{L}$. Het onderliggende RIVM-rapport (Verbruggen, 2004) is indertijd besproken in de toenmalige Wetenschappelijke Klankbordgroep INS.

Ter vergelijking is ook de QSAR-benadering gevolgd. Vooruitlopend op de nieuwe handleiding zijn daarbij alleen acute waarden geschat met het

programma ECOSAR 2.0 (US EPA, 2017). De laagste acute waarde voor zoetwaterorganismen is een 48-uurs LC₅₀ voor *Daphnia* van 1,784 mg/L. Dit is veel lager dan de hierboven vermelde EC₅₀ van >50 mg/L, maar wel in lijn met de ecotoxiciteitswaarden voor verwante stoffen uit het OECD-SIDS dossier (zie Tabel 11 en Bijlage 6).

Tabel 11. Ecotoxiciteitsgegevens voor alkenen zoals vermeld in OECD (2004). alle waarden in mg/L. Voor details: zie Bijlage 6.

Stof	LC ₅₀ vis	EC ₅₀ <i>Daphnia</i>	alg
alkenen, C6	6,6	4,4	E _r C ₅₀ >5,5 NOE _r C 1,8
1-hexeen	5,6 (gemeten)	32 (nominaal)	> oplosbaarheid
alkenen, C7-9, C8 rijk	0,87		
2-octeen	7,5 (nominaal)	>3,2 <10 geschat als ca. 6 (nominaal)	
1-octeen	>3,2 <10 ca. 6 (nominaal)	>3,2 <10 ca. 6 (nominaal)	
1-noneen	<3,2 (nominaal)	<3,2 ca. 2 (nominaal)	
alkenen C9-11, C10 rijk	0,12 (gemeten)		

Voor een complete QSAR-basisset geldt een veiligheidsfactor van 10.000 waarmee de i-JG-MKN_{zoet, eco} zou uitkomen op 0,18 µg/L. Bij een complete experimentele basisset zou een veiligheidsfactor van 1000 worden toegepast. Met de laagste waarde van 0,87 mg/L uit Tabel 11, zou de i-JG-MKN_{zoet, eco} dan uitkomen op 0,87 µg/L. Deze waarden zijn 4,5-20 keer lager dan het MTR van 3,9 µg/L van Verbruggen et al. (2009). Hierbij moet wel worden bedacht dat er bij de MTR-afleiding geen veiligheidsfactor is toegepast op de HC₅, terwijl dat tegenwoordig wel zou worden gedaan

Op basis van de laagste experimentele ecotoxiciteitswaarde voor verwante stoffen, wordt een i-JG-MKN_{eco, zoet} voorgesteld van 0,90 µg/L. Dit komt overeen met de HC₅ gedeeld door een veiligheidsfactor van ruim 4, wat redelijk is gezien het aantal van zes geteste soorten in Verbruggen et al. (2009). Als er voldoende acute gegevens zijn, is een volgens de indicatieve methodiek afgeleide i-MAC-MKN_{eco, zoet} een factor 10 hoger dan een i-JG-MKN_{eco, zoet}. Uitgaande van de i-JG-MKN_{eco, zoet} van 0,90 µg/L komt de i-MAC-MKN_{eco, zoet} dan uit op 9,0 µg/L. De i-JG-MKN_{eco, zout} en i-MAC-MKN_{zoet, eco} zijn respectievelijk 90 ng/L en 0,9 µg/L.

6.3 Conclusies

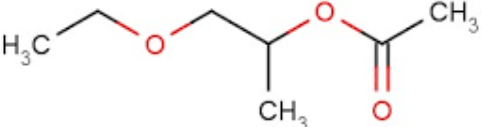
Directe ecotoxiciteit is de bepalende route. De i-JG-MKN_{zoet} is 0,90 µg/L, de i-JG-MKN_{zout} is 90 ng/L. De i-MAC-MKN_{zoet, eco} is 9,0 µg/L, de i-MAC-MKN_{zout, eco} is 0,90 µg/L.

7 Ethoxypropylacetaat

7.1 Identiteit en stoffeigenschappen

Er is geen informatie over het gebruik van ethoxypropylacetaat (CAS 98516-30-4). In Tabel 12 en 13 staan de identiteit en stoffeigenschappen samengevat. Voor details: zie Bijlage 7.

Tabel 12. Identiteit en classificatie ethoxypropylacetaat.

Stofnaam	ethoxypropylacetaat
IUPAC-naam	3-ethoxypropyl acetate
CAS-nummer	98516-30-4
Genotificeerde classificatie (gezondheidskundig)	H336 STOT SE 3 Afleiding i-JG-MKN _{water} , voedselketen niet getriggerd
REACH/ Zeer Zorgwekkende Stof	pre-registratie; niet op de lijst van (p)ZZS
Molecuulformule	C ₇ H ₁₄ O ₃
Smiles	CC(COC(=O)C)OCC
Structuurformule	

Tabel 13. Relevante fysisch-chemische eigenschappen van ethoxypropylacetaat en informatie over gedrag in het milieu.

Eigenschap	Waarde	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	146,19	
Verschijningsvorm	kleurloze vloeistof	
Oplosbaarheid in water [mg/L]	1,09 x 10 ⁴	US EPA (2000-2012)
Dampspanning [Pa]	369	US EPA (2000-2012)
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	0,48-5,0; afhankelijk van schattingsmethode	US EPA (2000-2012)
Octanol/water partiticoëfficiënt [log K _{ow}]	0,99	Biobyte (2006)
Dissociatieconstante (pK _a)	n.v.t.	
Afbreekbaarheid	niet persistent	US EPA (2000-2012)
Log K _{oc} [L/kg]	1,3	US EPA (2000-2012)

Het programma Epi Suite (US EPA, 2000-2012) voorspelt de massaverdeling over de milieucompartimenten in steady state. Bij 100% emissie naar water is die verdeling 99,7% in water en 0,3% in sediment. Alle fysisch-chemische parameters zijn geschat, de modelberekening is daarom onzeker.

7.2 Afleiding indicatieve normen voor oppervlaktewater

7.2.1 Voedselketenroute

Op basis van de genotificeerde classificatie en lage log K_{ow} is het niet nodig om de voedselketenroute mee te nemen.

7.2.2 Ecotoxiciteit

Er is geen REACH-registratiedossier en de US EPA Ecotox Knowledgebase bevat geen ecotoxiciteitsgegevens. Ook in andere bronnen zijn geen relevante gegevens gevonden. Daarom is gebruik gemaakt van het programma ECOSAR 2.0 (US EPA, 2017). Dit programma schat de ecotoxiciteit op basis van de chemische structuur van de stof. Conform de herziene handleiding zijn alleen de acute ecotoxiciteitswaarden geschat.

De laagste geschatte acute ecotoxiciteitswaarde is een LC_{50} van 74,2 mg/L voor vissen. De $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ wordt afgeleid met een veiligheidsfactor van 1000 op de laagste geschatte LC_{50} van 74,2 mg/L en bedraagt 74 $\mu\text{g/L}$. De $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zout, eco}}$ wordt afgeleid met een extra factor 10 en is 7,4 $\mu\text{g/L}$.

De $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ wordt afgeleid met een veiligheidsfactor van 10000 op de laagste LC_{50} en bedraagt 7,4 $\mu\text{g/L}$. De $i\text{-JG-MKN}_{\text{zout, eco}}$ wordt afgeleid met een extra factor 10 en is 0,74 $\mu\text{g/L}$.

7.3 Conclusies

Directe ecotoxiciteit is de enige relevante route. De $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet}}$ is 7,4 $\mu\text{g/L}$, de $i\text{-JG-MKN}_{\text{zout}}$ is 0,74 $\mu\text{g/L}$. De $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zoet, eco}}$ is 74 $\mu\text{g/L}$, de $i\text{-MAC-MKN}_{\text{zout, eco}}$ is 7,4 $\mu\text{g/L}$.

8 Discussie en conclusies

In dit advies zijn indicatieve waterkwaliteitsnormen afgeleid voor zes stoffen. Tabel 14 geeft een samenvatting van de voorgestelde waarden voor zoet- en zoutwater. Deze gelden voor zowel opgeloste concentraties als voor totaalconcentraties (zonder filtratie).

Voor de stoffen ethaan-1,2-diol, fenol en ethylacetaat waren voldoende gegevens beschikbaar en kon worden volstaan met relatief lage veiligheidsfactoren. Voor vinylacetaat ontbreken gegevens voor vissen en kreeftachtigen, terwijl voor ethoxypropylacetaat geen ecotoxiciteitsgegevens zijn gevonden. Voor deze twee stoffen zijn hoge veiligheidsfactoren gebruikt en zouden de normen beter onderbouwd kunnen worden als er aanvullende experimentele gegevens beschikbaar zouden komen. Voor 1-hepteen zijn ook vrijwel geen gegevens beschikbaar, maar is gebruik gemaakt van gegevens over verwante stoffen en een eerder afgeleide risicogrens voor minerale olie.

Tabel 14. Overzicht van voorgestelde indicatieve waterkwaliteitsnormen. Alle waarden gelden voor zowel de opgeloste concentratie als de totaalconcentratie. Alle waarden zijn afgerond op twee significante cijfers. LET OP: de eenheid verschilt per stof en per norm.

Stof	zoetwater		zoutwater	
	i-JG-MKN	i-MAC-MKN	i-JG-MKN	i-MAC-MKN
ethaan-1,2-diol	0,20 g/L	0,54 g/L	20 mg/L	54 mg/L
ethylacetaat	48 µg/L	11 mg/L	4,8 µg/L	1,1 mg/L
vinylacetaat	0,32 µg/L	42 µg/L	0,032 µg/L	4,2 µg/L
fenol	7,7 µg/L	0,25 mg/L	0,77 µg/L	25 µg/L
1-hepteen	0,90 µg/L	9,0 µg/L	90 ng/L	0,90 µg/L
ethoxypropylacetaat	7,4 µg/L	74 µg/L	0,74 µg/L	7,4 µg/L

9 Status van dit advies/disclaimer

Dit advies is opgesteld naar aanleiding van een vraag in de context van een vergunningverlening. Het advies is getoetst volgens de interne RIVM-kwaliteitsprocedures en besproken in de Wetenschappelijke Klankbordgroep normstelling water en lucht (WK-nwl). Het Ministerie van Infrastructuur en Waterstaat is verantwoordelijk voor het vaststellen van normen.

Literatuur

De referentielijst bevat ook de referenties uit de bijlagen.

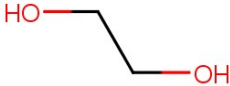
- Aéroports de Montréal et Analex I. 1994. Characterisation ecotoxicologique de liquides degivrants et antigivrants pour avions utilisés aux aéroports de Montréal. Biotest de toxicité avec le système Microtox (*Photobacterium phosphoreum*), une algue verte (*Selenastrum capricornutum*) et des boues actives micro-organismes mixtes. Project No. 7200-612.
- Barber JT, Thomas DA, Yatsu LY, Ensley HE. 1999. The physiological consequences of ethylene glycol-induced changes in the frond structure of *Lemna gibba*. *Aquat Toxicol* 45 (4): 253-264.
- BAuA. 2008. RISK ASSESSMENT. Vinyl acetate. CAS-No.: 108-05-4. EINECS-No.: 203-545-4. 19.08.2008. FINAL APPROVED VERSION. Dortmund, Duitsland: Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin. Beschikbaar via <https://echa.europa.eu/documents/10162/23433313-22b7-4e0a-a9d4-b469a451c1cf>.
- Biobyte. 2006. Bio-Loom for Windows (computer programma). Versie 1.5. Claremont, USA, Biobyte Corp.
- Bontje D, Traas TP, Mennes W. 2005. A human exposure model to calculate harmonized risk limits. Model description and analysis. RIVM report 601501022. Bilthoven: RIVM.
- Bringmann G, Kühn R. 1977. Befunde der schadwirkung wassergefährdender stoffe gegen *Daphnia magna*. *Zeitschrift für Wasser-Abwasser-Forschung* 10: 161-166.
- Bringmann G, Kühn R. 1980. Bestimmung der biologischen Schadwirkung wassergefährdender Stoffe gegen Protozoen II. Bakterienfressende Ciliaten. *Z Wasser Abwasser Forsch* 1: 26-31.
- Call DJ, Geiger DL. 1992. Subchronic toxicities of industrial and agricultural chemicals to fathead minnows (*Pimephales promelas*). Volume I. Superior, USA: University of Wisconsin-Superior, Lake Superior Research Institute.
- De Poorter LRM, Van Herwijnen R, Janssen PJCM, Smit CE. 2015. Handleiding voor de afleiding van indicatieve milieurisicogrenzen. Bilthoven, Nederland: Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu. Rapport nr. 2015-0057.
- EC. 2005. Synoptic Document (2005.07.25). "SYNOPTIC DOCUMENT" Provisional list of monomers and additives notified to European Commission as substances which may be used in the manufacture of plastics or coatings intended to come into contact with foodstuffs (updated to June 2005). Brussel, België: Europese Commissie, Health & Consumer Protection Directorate-General. Rapport nr. SANCO D3/AS D(2005).
- EC. 2006. European Union Risk Assessment Report. CAS: 108-95-2 EINECS: 203-632-7 phenol 1st Priority List Volume: 64. EUR 22522 EN/1. Revised Edition. Ispra, Italy. Joint Research Centre.
- EC. 2018. Technical guidance for deriving environmental quality standards. Guidance Document No. 27. Updated version 2018. Document endorsed by EU Water Directors at their meeting in Sofia on 11-12 June 2018. Brussel: Europese Commissie.
- ECHA. 2021a. Registratiedossier ethyleenglycol. Eerste publicatie 2 maart 2011, laatste wijziging 16 maart 2021.

- <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/15973>. Geraadpleegd: 7 mei, 2021.
- ECHA. 2021b. Registratiedossier ethylacetaat. Eerste publicatie 3 maart 2011, laatste wijziging 22 februari 2021.
<https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/15437>. Geraadpleegd: 9 mei, 2021.
- ECHA. 2021c. Registratiedossier vinylacetaat. Eerste publicatie 3 maart 2011, laatste wijziging 12 maart 2021.
<https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/15973>. Geraadpleegd: 10 mei, 2021.
- ECHA. 2021d. Registratiedossier fenol. Eerste publicatie 2 maart 2011, laatste wijziging 10 februari 2021.
<https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/15508>. Geraadpleegd: 12 mei, 2021.
- ECSC. 2000. Loi canadienne sur la protection de l'environnement (1999). LISTE DES SUBSTANCES D'INTÉRÊT PRIORITAIRE. ÉTAT DE LA SCIENCE. ÉTHYLÈNE GLYCOL. Environnement Canada/Santé Canada. Beschikbaar via
https://www.canada.ca/content/dam/hc-sc/migration/hc-sc/ewh-semt/alt_formats/hecs-sesc/pdf/pubs/contaminants/psl2-lsp2/ethylene_glycol/ethylene_glycol-fra.pdf.
- EFSA. 2013. Scientific Opinion on the toxicological evaluation of phenol. EFSA Panel on Food Contact Materials, Enzymes, Flavourings and Processing Aids (CEF). EFSA Journal 11 (4): 3189.
- EFSA, WHO. 2016. Review of the Threshold of Toxicological Concern (TTC) approach and development of new TTC decision tree. EFSA supporting publication 2016: EN-1006 Beschikbaar via
<https://efsa.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.2903/sp.efsa.2016.EN-1006>.
- Kent RA, Andersen D, Caux P-Y, Teed S. 1999. Canadian water quality guidelines for glycols. An ecotoxicological review of glycols and associated aircraft anti-icing and deicing fluids. Environ Toxicol 14: 481-522.
- OECD. 2004. OECD SIDS higher olephins. Initial assessment report for SIAM 19. Berlin, Germany, 19-21 October 2004.
- Pillard DA, DuFresne DL. 1999. Toxicity of formulated glycol deicers and ethylene and propylene glycol to *Lactuca sativa*, *Lolium perenne*, *Selenastrum capricornutum*, and *Lemna minor*. Arch Environ Contam Toxicol 37: 29-35.
- RAC. 2011. Committee for Risk Assessment RAC. Annex 1. Background document to the Opinion proposing harmonised classification and labelling at Community level of vinyl acetate. ECHA/RAC/ CLH-O-000001742-77-01/A1. Vinyl acetate EC number: 203-545-4. CAS number: 108-05-4. Adopted 10 June 2011. Helsinki, Finland, European Chemicals Agency.
- RIVM. 2020a. Risk Management Option Analysis Conclusion Document. Substance Name: Ethylene glycol. EC Number: 203-473-3. CAS Number: 107-21-1. Authority: NL-CA. Date: June 2020. Beschikbaar via
<https://echa.europa.eu/documents/10162/9571383c-0443-b3dc-f14c-aebc325b6bbd>.
- RIVM. 2020b. Advies 14898A01 - Indicatief MTR-lucht voor 1,2 ethaandiol. Bilthoven, Nederland: RIVM.
- Traas TP. 2001. Guidance document on deriving environmental risk limits. Bilthoven: National Institute for Public Health and the

- Environment (RIVM). Bilthoven, Nederland: RIVM. Rapport nr. 601501012.
- Traas TP, Bontje D. 2005. Environmental Risk Limits for alcohols, glycols, and some other relatively soluble and/or volatile compounds. 2. Integration of human and ecotoxicological risk limits. Bilthoven, Nederland: RIVM. Rapport nr. 601501027/2005.
- US EPA. 2000-2012. EPI Suite (computer programma). Versie 4.11. Washington, DC, US Environmental Protection Agency (EPA) Office of Pollution Prevention Toxics and Syracuse Research Company (SRC).
- US EPA. 2017. ECOSAR 2.0. ECOlogical Structure-Activity Relationship Model (ECOSAR) Class Program (computer programma). Versie Washington, USA, US EPA.
- US EPA. 2021. ECOTOX Knowledgebase.
http://cfpub.epa.gov/ecotox/quick_query.htm. Geraadpleegd: 8 mei, 2021.
- Verbruggen EMJ. 2004. Environmental Risk Limits for Mineral Oil (Total Petroleum Hydrocarbons). Bilthoven, Nederland: RIVM. Rapport nr. 601501021/2004.
- Verbruggen EMJ, Beek M, Pijnenburg J, Traas TP. 2009. Ecotoxicological environmental risk limits for total petroleum hydrocarbons on the basis of internal lipid concentrations. Environ Toxicol Chem 27 (12): 2436-2448.
- Verbruggen EMJ, Traas TP, Fleuren R, Ciarelli S, Posthumus R, Vos JH, Scheepmaker J, Van Vlaardingen PLA. 2005. Environmental Risk Limits for alcohols, glycols, and some other relatively soluble and/or volatile compounds 1. Ecotoxicological evaluation. Bilthoven, Nederland: RIVM. Rapport nr. 601501016.

Bijlage 1. Rapportageformulier ethaan-1,2-diol

1. IDENTITEIT EN CLASSIFICATIE

Stofnaam	ethaan-1,2-diol
IUPAC-naam	ethylene glycol
Synoniemen	1,2-dihydroxyethane; 1,2-ethanediol; 1,2-ethylene glycol; 2-hydroxyethanol; ethylene alcohol; ethylene dihydrate
CAS-nummer	107-21-1
Stofgroep volgens EPIWin	neutral organics
Bekend gebruik	oplosmiddel, intermediair
Classificatie/ trigger voedselketen	geharmoniseerde classificatie alleen voor ecotoxiciteit ² genotificeerde classificatie: H315 Skin Irrit. 2 H319 Eye Irrit. 2 H336 STOT SE 3 H370 STOT SE 1 H372 STOT RE 1 H373 STOT RE 2 H340 Muta. 1B H360 Repr. 1B Afleiding i-JG-MKN _{water, voedselketen} niet getriggerd (zie onder 4.1)
REACH/ Zeer Zorgwekkende Stof	geregistreerd; niet op de lijst van (p)ZZS
Molecuulformule	C ₂ H ₆ O ₂
Smiles	OCCO
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	62,07		
Versijningsvorm	vloeibaar	20 °C en 1013 hPa	ECHA (2021a)
Oplosbaarheid in water [g/L]	mengbaar		Verbruggen et al. (2005)
Log K _{ow}	-1,36	experimenteel	Biobyte (2006)

² Dit betreft een zogenoemde 'minimum classification', omdat de indeling volgens Richtlijn 67/548/EEG (DSD-wetgeving; voorloper van de CLP-wetgeving) niet rechtstreeks overeenkomt met de indeling in een gevarenklasse en -categorie volgens de huidige CLP-verordening.

Dampspanning [Pa]	11,2	geometrisch gemiddelde	Verbruggen et al. (2005)
	12,3	25 °C; geëxtrapoleerde waarde	ECHA (2021a)
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	0,00608		Verbruggen et al. (2005)
pK _a	-	geen dissociatie	

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Ref.
Afbreekbaarheid	readily biodegradable		ECHA (2021a), Verbruggen et al. (2005)
Log K _{oc} [L/kg]	-0,03	geschat	Verbruggen et al. (2005)
Als MW < 700 g/mol:			
BCF [L/kg]		niet relevant (voedselketenroute niet getriggerd)	

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit: afleiding van i-HL_{oraal}

Ethyleenglycol heeft onder REACH een dossier evaluatie ondergaan en er is een Risk Management Option Analysis (RMOA) uitgevoerd vanwege zorg over carcinogeniteit, mutageniteit, reproductietoxiciteit en hormoonverstoring. Volgens RIVM (2020a) wijzen de toxiciteitsgegevens in het dossier niet op een noodzaak voor verdere classificatie onder CLP en geeft het dossier geen reden tot zorg over reproductietoxiciteit. Het RIVM heeft eerder een advies uitgebracht voor een Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau (MTR) voor lucht (RIVM, 2020b). Deze evaluatie bevestigt dat er geen aanwijzingen zijn voor genotoxiciteit en carcinogeniteit. In combinatie met de log K_{ow} van -1,36 leidt dit tot de conclusie dat de voedselketenroute niet relevant is.

4.2 Ecotoxiciteit

Voor dit advies zijn de acute en chronische ecotoxiciteitgegevens overgenomen uit de MTR-afleiding van Verbruggen et al. (2005). Voor een aantal soorten waarvoor meerdere studies beschikbaar waren, is destijds het geometrisch gemiddelde genomen conform de handleiding voor gedegen normen. Deze gemiddelde waarden zijn overgenomen voor het huidige advies.

Volgens de herziene handleiding moet bij gebruik van een eerder afgeleide risicogrens worden bekeken of de dataset en gebruikte methodiek aansluiten bij de huidige werkwijze. Vanwege de te lange testduur worden de 8-daagse NOEC's voor *Scenedesmus quadricauda* en *Microcystis aeruginosa* tegenwoordig niet meegenomen in normafleidingen. Daardoor ontbreken chronische gegevens voor algen,

terwijl die acuut wel het meest gevoelig zijn. De US EPA Ecotox Knowledgebase bevat ook geen relevante gegevens (US EPA, 2021). Daarom is gekeken of uit de algen- en *Lemna*-studies uit het REACH dossier en de MTR-afleiding van 2005 ook een chronische waarde kan worden afgeleid. De hier gevolgde werkwijze staat niet beschreven in de indicatieve methodiek, maar is gevolgd om te voorkomen dat er onnodige hoge veiligheidsfactoren worden toegepast vanwege het ontbreken van een chronische waarde voor algen. .

De EC₅₀ voor populatiegroei van *Raphidocelis subcapitata* (voorheen *Pseudokirchneriella subcapitata*) van 5409 mg/L die in 2005 is gebruikt, is afkomstig uit een Canadese normafleiding (Kent et al., 1999). De originele studie van Aéroports de Montréal et Analex (1994) is niet beschikbaar, maar Kent et al. (1999) geven wel een evaluatie-tabel. De test is uitgevoerd volgens een standaardprotocol van de US EPA en de testresultaten zijn gebaseerd op gemeten concentraties. Kent et al. (1999) rapporteren een LOEC van 1923 mg/L. De Canadese 'water quality guideline' van 192 mg/L is afgeleid door toepassen van een veiligheidsfactor van 10 op deze LOEC. In een evaluatie van Environment Canada wordt dezelfde studie aangehaald en wordt ook een EC₂₅ gerapporteerd van 3268 mg/L (ECSC, 2000). Uit de EC₂₅ en EC₅₀ is met een logistisch concentratie-respons model volgens Traas (2001) een EC₁₀ berekend van 1974 mg/L. In de tabel hieronder staan alle effectwaarden.

NOEC	LOEC	EC ₂₅	EC ₅₀	EC ₁₀
-	1923 ^a	3268 ^b	5409 ^a	1974 ^c

a: genoemd in Kent et al. (1999)

b: genoemd in ECSC (2000)

c: berekend volgens Traas (2001)

Beide Canadese evaluaties noemen ook de studie met *R. subcapitata* van Pillard & DuFresne (1999) die in het REACH-registratiedossier is gebruikt. De registrant rapporteert alleen de EC₅₀ van 10940 mg/L (ECHA, 2021a). In de publicatie zelf staat echter ook een NOEC van 10000 mg/L, een LOEC van 20000 mg/L en een EC₂₅ van 5340 mg/L. Kent et al. (1999) noemen een EC₂₅ van 5336 mg/L op basis van een poster van beide auteurs uit 1995. De NOEC en LOEC zijn hoger dan de EC₂₅ en zijn daarom niet gebruikt door Verbruggen et al. (2005). In de publicatie van Pillard & DuFresne (1999) staan de gemiddelde cel-aantallen en standaard errors gerapporteerd en er is sprake van een concentratie-effectrelatie. Uit de EC₂₅ en EC₅₀ is met een logistisch concentratie-respons model volgens Traas (2001) een EC₁₀ berekend van 2607 mg/L (zie onderstaande tabel). Ook zijn de gerapporteerde cel-aantallen gebruikt om de dosis-respons curve te fitten. De EC₅₀ kan worden bevestigd (zie tabel), wat ook duidelijk maakt dat het hier gaat om waarden voor 'yield'. De effectwaarden voor intrinsieke groeisnelheid over 72-uur zijn hoger (niet weergegeven), zoals uitgelegd in OECD richtlijn 201 komt dit door de berekeningsmethode. Omdat alleen de cel-aantallen aan het begin en einde van de studie zijn gegeven, kan niet worden beoordeeld of er sprake is van exponentiële groei.

NOEC	LOEC	EC ₂₅	EC ₅₀	EC ₁₀
10000	20000	5340 ^{a,b}	10940 ^{c,d} 10605	2607 ^e 3932 ^f

a: genoemd in Kent et al. (1999)

b: als 5336 in Kent et al. (1999) op basis van een poster uit 1995

c: genoemd in Verbruggen et al. (2005)

d: genoemd in ECHA (2021a)

e: berekend volgens Traas (2001)

f: fit met GraphPad op basis van cel-aantallen

Kent et al. (1999) vermelden dat het eindpunt uit de studie van Aéroports de Montréal et Analex (1994) betrekking heeft op populatiegroei. Het is mogelijk dat het hier ook gaat om 'yield' in plaats van populatiegroeisnelheid. Omdat dit niet kan worden achterhaald, is de lagere EC₁₀ uit deze studie toegevoegd aan de chronische dataset.

De 7-daagse EC₅₀ van 10920 mg/L voor *Lemna gibba* is afkomstig van een publicatie van Barber et al. (1999). Deze auteurs geven ook een EC₁₀ van 5740 mg/L voor 'frond reproduction' en deze waarde is toegevoegd aan de chronische dataset.

Onderstaande tabellen geven een samenvatting van de acute en chronische ecotoxiciteitsgegevens.

ACUUT				
Soort	Duur	Parameter	Waarde [mg/L]	Opmerking
Protozoën				
<i>Chilomonas paramecium</i>	48 h	EC ₅₀	53200	
<i>Colpidium campylum</i>	24 h	EC ₅₀	28090	
<i>Tetrahymena pyriformis</i>	9 h	EC ₅₀	10515	
Schimmels				
<i>Geotrichum</i>	4 h	EC ₅₀	74482	
Algen				
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	96 h	EC ₅₀	5409	
<i>Skeletonema costatum</i>	48 h	EC ₅₀	44200	zoutwater
Waterplanten				
<i>Lemna gibba</i>	7 d	EC ₅₀	10920	
Raderdiertjes				
<i>Brachionus calyciflorus</i>	24 h	EC ₅₀	26461	
<i>Brachionus plicatilis</i>	24 h	EC ₅₀	149584	zoutwater
Kreeftachtigen				
<i>Americamysis bahia</i>	96 h	LC ₅₀	34200	zoutwater
<i>Artemia salina</i>	24 h	LC ₅₀	180618	zoutwater
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	48 h	EC ₅₀	17921	geomean 7 studies
<i>Crangon crangon</i>	96 h	LC ₅₀	50000	
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC ₅₀	49224	geomean 9 studies
<i>Daphnia pulex</i>	24 h	LC ₅₀	60406	
<i>Procambarus sp.</i>	96 h	LC ₅₀	91430	
<i>Streptocephalus proboscideus</i>	24 h	LC ₅₀	54496	

ACUUT				
Soort	Duur	Para- meter	Waarde [mg/L]	Opmer- king
Insecten				
<i>Chironomus tentans</i>	10 d	LC ₅₀	15596	
Vissen				
<i>Carassius auratus</i>	24 h	LC ₅₀	>5000	
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96 h	LC ₅₀	27600	zoutwater
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 h	LC ₅₀	27540	
<i>Leuciscus idus melanotus</i>	48 h	LC ₅₀	>10000	
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 h	LC ₅₀	37122	geomean 9 studies
<i>Oryzias latipes</i>	48 h	LC ₅₀	>1000	
<i>Sciaenops ocellatus</i>	40 h	LC ₅₀	145000	zoutwater
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC ₅₀	59304	geomean 7 studies
<i>Poecilia reticulata</i>	168 h	LC ₅₀	49300	
Amfibiën				
<i>Xenopus laevis</i>	48 h	LC ₅₀	12978	geomean 3 studies

CHRONISCH				
Soort	Duur	Para- meter	Waarde [mg/L]	Opmer- king
Protozoën				
<i>Chilomonas paramecium</i>	48 h	NOEC	112	niet gebruikt door Verbruggen et al. (2005)
<i>Chilomonas paramecium</i>	48 h	NOEC	40000	
<i>Entosiphum sulcatum</i>	48 h	NOEC	>10000	
<i>Urenoma parduczi</i>	48 h	NOEC	>10000	
Algen/ cyanobacteriën				
<i>Microcystis aeruginosa</i>	8 d	NOEC	2000	testduur te lang
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	96 h	EC ₁₀	1974	zie tekst
<i>Scenedesmus quadricauda</i>	8 d	NOEC	>10000	testduur te lang
Waterplanten				
<i>Lemna gibba</i>	7 d	E _r C ₁₀	5740	zie tekst
Rotiferen				
<i>Brachionus calyciflorus</i>	48 h	NOEC	12800	
Kreeftachtigen				
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	7 d	NOEC	5459	geomean 2 studies
Insecten				
<i>Chironomus tentans</i>	10 d	NOEC	4567	
Vissen				
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	12-14 d	NOEC	14692	
<i>Pimephales promelas</i>	7 d	NOEC	12531	

5. Afleiding i-risicogrenzen

i-JG-MKN_{zoet}

i-JG-MKN_{water, voedselketen}

Stap	Resultaat	Opmerking
1	Afleiding van de i-JG-MKN _{water, voedselketen} wordt niet getriggerd	

i-JG-MKN_{zoet, eco}

Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	gedegen norm aanwezig?	Ja, MTR 200 mg/L NOEC <i>M. aeruginosa</i> met AF 10, maar testduur te lang
2	experimentele data voor water?	Ja → 4
3	niet van toepassing	
4	acute en chronische data	i-JG-MKN _{zoet, eco-acute} = $L(E)C_{50,min} / AF =$ $5409 \text{ mg/L} / 1000 =$ 5,4 mg/L i-JG-MKN _{zoet, eco-chronisch} = $NOEC_{min} / AF =$ $1974 \text{ mg/L} / 100 =$ 20 mg/L
5	data voor gehele acute en/of chronische basisset?	Ja → 6
6	NOEC voor tenminste kreeftachtige of vis en NOEC beschikbaar voor soort met $L(E)C_{50,min}$	Ja → i-JG-MKN _{zoet, eco} = i-JG-MKN _{zoet, eco-chronisch} X 10 → 8
7	niet van toepassing	
8	i-JG-MKN_{zoet, eco} = 200 mg/L	

selectie i-JG-MKN_{zoet}

	Opmerking
i-JG-MKN _{water, voedselketen} =	niet afgeleid
i-JG-MKN _{zoet, eco} = 0,20 g/L	
De laagste bepaalt de i-JG-MKN _{zoet} :	
i-JG-MKN_{zoet} = 0,20 g/L	

i-JG-MKN_{zout}

selectie i-JG-MKN_{zout}

	Opmerking
i-JG-MKN _{water, voedselketen} =	niet afgeleid
i-JG-MKN_{zout, eco} = 20 mg/L	i-JG-MKN _{zout, eco} = i-JG-MKN _{zoet, eco} /10 = 20 mg/L

i-MAC-MKN_{zoet, eco}

Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	gedegen norm aanwezig?	Nee → 2
2	experimentele data voor water?	Ja → 4
3	niet van toepassing	
4	i-MAC-MKN_{zoet, eco} = 0,54 g/L	i-MAC-MKN _{zoet, eco} = LC _{50,min} / AF = 5409 mg/L /10 ³

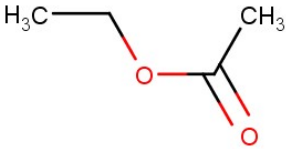
i-MAC-MKN_{zout, eco}

Stap	Resultaat	Opmerking
1	i-MAC-MKN_{zout, eco} = 54 mg/L	i-MAC-MKN _{zout, eco} = i-MAC-MKN _{zoet, eco} /10

³ Conform herziene handleiding: basisset aanwezig en variatie tussen soorten is gering. Voor narcotisch werkende stoffen is aan deze voorwaarde voldaan als geldt standaarddeviatie van de log-getransformeerde L(E)C50-waarden <0,5.

Bijlage 2. Rapportageformulier ethylacetaat

1. IDENTITEIT EN CLASSIFICATIE

Stofnaam	ethylacetaat
IUPAC-naam	ethyl acetate
Synoniemen	
CAS-nummer	141-78-6
Stofgroep volgens EPIWin	neutral organics
Bekend gebruik	oplosmiddel
Classificatie/ trigger voedselketen	H336 STOT SE 3 H319 Eye Irrit. 2 Geen relevante geharmoniseerde classificatie, afleiding i-JG-MKN _{water, voedselketen} niet getriggerd
REACH/ Zeer Zorgwekkende Stof	geregistreerd; niet op de lijst van (p)ZZS
Molecuulformule	C ₄ H ₈ O ₂
Smiles	CCOC(C)=O
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	88,11		
Versijningsvorm	vloeibaar	20 °C en 1013 hPa	ECHA (2021b)
Oplosbaarheid in water [mg/L]	79710	geometrisch gemiddelde	Verbruggen et al. (2005)
Log K _{ow}	0,73	experimenteel	Biobyte (2006)
Dampspanning [Pa]	8807	geometrisch gemiddelde	Verbruggen et al. (2005)
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	15,2	geometrisch gemiddelde	Verbruggen et al. (2005)
pK _a	-	geen dissociatie	

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Ref.
Afbreekbaarheid	readily biodegradable		ECHA (2021b)
Log K _{oc} [L/kg]	1,41	geschat	Verbruggen et al. (2005)
Als MW < 700 g/mol:			
BCF [L/kg]		log K _{ow} buiten bereik QSAR; BCF	

		niet relevant (voedselketenroute niet getriggerd)	
--	--	---	--

4. TOXICITEIT

4.1 Ecotoxiciteit

De acute en chronische ecotoxiciteitgegevens zijn overgenomen uit de MTR-afleiding van Verbruggen et al. (2005). Voor een aantal soorten waarvoor meerdere studies beschikbaar waren, is destijds het geometrisch gemiddelde genomen conform de handleiding voor gedegen normen. Deze gemiddelde waarden zijn overgenomen voor het huidige advies. Dit geldt niet voor de NOEC voor *Daphnia magna*, zie tekst in de tabel.

Verbruggen et al. (2005) geven geen chronische toxiciteitswaarden voor vissen. In het REACH-registratiedossier (ECHA, 2021b) en de US EPA Ecotox Knowledgebase (US EPA, 2021) staat een NOEC <9,65 mg/L voor effecten op lengte en gewicht van *Pimephales promelas* in een ELS test (Call & Geiger, 1992). De onderliggende studie is gecontroleerd. Voor gewicht en lengte is er bij de laagste twee concentraties een relatief groot verschil tussen de replica's. De auteurs vermelden dat de NOEC is gebaseerd op een William's test, met de Dunnett's test waren hogere concentraties niet significant verschillend van de controle (Call & Geiger, 1992). Zoals in de samenvatting in het REACH registratiedossier staat aangegeven, is er geen duidelijke concentratie-effectrelatie terwijl dit wel een vereiste is voor de William's test. In het REACH registratiedossier is een chronische QSAR-waarde van 6,9 mg/L gebruikt. De studie is niet meegenomen in het huidige advies.

Verbruggen et al. (2005) geven een MTR_{eco} van 0,11 mg/L, afgeleid op basis van de NOEC voor *Daphnia magna* en een veiligheidsfactor van 50.

ACUUT				
Soort	Duur	Parameter	Waarde [mg/L]	Opmerking
Bacteriën				
<i>Vibrio fischeri</i>	5 min	EC ₅₀	5188	zoutwater
Protozoën				
<i>Tetrahymena thermophila</i>	48 h	EC ₅₀	110	geomean
..Algen				
Chlorococcales	24 h	EC ₅₀	4300	
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	48 h	E _r C ₅₀	5600	
<i>Selenastrum sp.</i>	96h	EC ₅₀	2500	
Kreeftachtigen				
<i>Artemia salina</i>	24 h	EC ₅₀	708	zoutwater; geomean 3 studies
<i>Asellus aquaticus</i>	48 h	LC ₅₀	1600	
<i>Daphnia cucullata</i>	48 h	EC ₅₀	164	geomean 2 studies
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC ₅₀	711	geomean 6 studies

ACUUT				
Soort	Duur	Para- meter	Waarde [mg/L]	Opmerking
<i>Daphnia pulex</i>	48 h	EC ₅₀	260	geomean 2 studies
<i>Gammarus pulex</i>	48 h	LC ₅₀	750	
Insecten				
<i>Aedes aegypti</i>	48 h	LC ₅₀	350	
<i>Chironomus thummi</i>	48 h	LC ₅₀	750	
<i>Cloeon dipterum</i>	48 h	LC ₅₀	480	
<i>Corixa punctata</i>	48 h	LC ₅₀	600	
<i>Culex pipiens</i>	48 h	LC ₅₀	3950	
<i>Ischnura elegans</i>	48 h	LC ₅₀	600	
<i>Nemoura cinera</i>	48 h	LC ₅₀	130	
Vissen				
<i>Leuciscus idus melanotus</i>	48 h	LC ₅₀	300	geomean 2 studies
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	48-96 h	LC ₅₀	333	geomean 4 studies
<i>Oryzias latipes</i>	48 h	LC ₅₀	335	geomean 2 studies
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC ₅₀	243	
<i>Poecilia reticulata</i>	48 h	LC ₅₀	210	
Amfibiën				
<i>Ambystoma mexicanum</i>	48 h	LC ₅₀	150	
<i>Xenopus laevis</i>	48 h	LC ₅₀	180	
Ringwormen				
Tubificidae	48 h	LC ₅₀	760	
<i>Erpobdella octoculata</i>	48 h	LC ₅₀	1200	
.. Platwormen				
<i>Dugesia lugubris</i>	48 h	LC ₅₀	3020	
Neteldieren				
<i>Hydra ologactis</i>	48 h	LC ₅₀	1350	
..Slakken				
<i>Lymnea stagnalis</i>	48 h	LC ₅₀	1100	

CHRONISCH				
Soort	Duur	Para- meter	Waarde [mg/L]	Opmer- king
.. Bacteriën				
<i>Pseudomonas putida</i>	16 h	NOEC	650	
Protozoën				
<i>Chilomonas paramecium</i>	48 h	NOEC	3248	
<i>Entosiphon sulcatum</i>	72 h	NOEC	202	
<i>Tetrahymena thermophila</i>	48 h	NOEC	12	
<i>Uronema parduczi</i>	20 h	NOEC	1620	
Algen/ cyanobacteriën				

CHRONISCH				
Soort	Duur	Para- meter	Waarde [mg/L]	Opmer- king
<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	48 h	NOEC	≥1000	
Chlorococcales	24 h	NOEC	1000	
<i>Microcystis aeruginosa</i>	8 d	NOEC	550	testduur te lang
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	96 h	NOEC	2000	
<i>Scenedesmus pannonicus</i>	48 h	NOEC	>1000	
<i>Scenedesmus quadricauda</i>	8 d	NOEC	15	testduur te lang
Kreeftachtigen				
<i>Daphnia magna</i>		NOEC	2,4	waarde uit REACH-dossier; Verbruggen et al. (2005) gebruiken 5,4 mg/L; geomean van nominale testconcentratie 12 mg/L en laagste gemeten waarde 2,4 mg/L

5. Afleiding i-risicogrenzen

i-JG-MKN_{zoet}

i-JG-MKN_{water, voedselketen}

Stap	Resultaat	Opmerking
1	Afleiding van de i-JG-MKN _{water, voedselketen} wordt niet getriggerd	

i-JG-MKN_{zoet, eco}

Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	gedegen norm aanwezig?	Ja, MTR 0,11 mg/L NOEC <i>D. magna</i> met AF 50
2	experimentele data voor water?	Ja → 4
3	niet van toepassing	
4	acute en chronische data	$i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco-acute}} = L(E)C_{50,\text{min}} / AF = 110 \text{ mg/L} / 1000 = 0,11 \text{ mg/L}$ $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco-chronisch}} = NOEC_{\text{min}} / AF = 2,4 \text{ mg/L} / 500 = 4,8 \mu\text{g/L}$
5	data voor gehele acute en/of chronische basisset?	Ja → 6

Stap	Vraag/statement	Resultaat
6	NOEC voor tenminste kreeftachtige of vis en NOEC beschikbaar voor soort met $L(E)C_{50,min}$	Ja → $i\text{-JG-MKN}_{zoet, eco} = i\text{-JG-MKN}_{zoet, eco-chronisch} \times 10$ → 8
7	niet van toepassing	
8	$i\text{-JG-MKN}_{zoet, eco} = 48 \mu\text{g/L}$	

selectie $i\text{-JG-MKN}_{zoet}$

	Opmerking
$i\text{-JG-MKN}_{water, voedselketen} =$	niet afgeleid
$i\text{-JG-MKN}_{zoet, eco} = 48 \mu\text{g/L}$	
De laagste bepaalt de $i\text{-JG-MKN}_{zoet}$:	
$i\text{-JG-MKN}_{zoet} = 48 \mu\text{g/L}$	

$i\text{-JG-MKN}_{zout}$

selectie $i\text{-JG-MKN}_{zout}$

	Opmerking
$i\text{-JG-MKN}_{water, voedselketen} =$	niet afgeleid
$i\text{-JG-MKN}_{zout, eco} = 4,8 \mu\text{g/L}$	$i\text{-JG-MKN}_{zout, eco} = i\text{-JG-MKN}_{zoet, eco}/10 = 0,011 \text{ mg/L}$

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

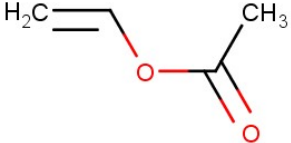
Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	gedegen norm aanwezig?	Nee → 2
2	experimentele data voor water?	Ja → 4
3	niet van toepassing	
4	$i\text{-MAC-MKN}_{zoet, eco} = 11 \text{ mg/L}$	$i\text{-MAC-MKN}_{zoet, eco} = LC_{50,min} / AF = 110 \text{ mg/L} / 10^3$

$i\text{-MAC-MKN}_{zout, eco}$

Stap	Resultaat	Opmerking
1	$i\text{-MAC-MKN}_{zout, eco} = 1,1 \text{ mg/L}$	$i\text{-MAC-MKN}_{zout, eco} = i\text{-MAC-MKN}_{zoet, eco}/10$

Bijlage 3. Rapportageformulier vinylacetaat

1. IDENTITEIT EN CLASSIFICATIE

Stofnaam	vinylacetaat
IUPAC-naam	vinyl acetate
Synoniemen	1-Acetoxyethylene; acetic acid ethenyl ester acetic acid vinyl ester; ethenyl acetate
CAS-nummer	108-05-4
Stofgroep volgens EPIWin	vinyl/allyl esters
Bekend gebruik	oplosmiddel
Classificatie/ trigger voedselketen	H332 Acute Tox. 4 H351 Carc. 2 H335 STOT SE 3 Afleiding i-JG-MKN _{water, voedselketen} getriggert vanwege geharmoniseerde classificatie H351
REACH/ Zeer Zorgwekkende Stof	geregistreerd; niet op de lijst van (p)ZZS
Molecuulformule	C ₄ H ₆ O ₂
Smiles	CC(=O)OC=C
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	86,08		
Versijningsvorm	vloeibaar	bij 20 °C en 1013 hPa	RAC (2011)
Oplosbaarheid in water [mg/L]	20000	20 °C	RAC (2011)
Log K _{ow}	0,73	experimenteel	Biobyte (2006)
Dampspanning [Pa]	12000	experimenteel	RAC (2011) US EPA (2000- 2012)
	11300	handboek	ECHA (2021c)
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	52	experimenteel	US EPA (2000- 2012)
	51,6 ⁴	berekend WS en VP	(BAuA, 2008)
pK _a	-	geen dissociatie	

⁴ Het REACH registratiedossier vermeldt een waarde van 56,1 onder verwijzing naar de EU-RAR. Dit is waarschijnlijk een overnamefout.

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Ref.
Afbreekbaarheid	readily biodegradable		ECHA (2021c)
Log K _{oc} [L/kg]	1,4		ECHA (2021c)
Als MW < 700 g/mol:			
BCF [L/kg]	3,2	maximum schatting	US EPA (2000-2012)

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit: afleiding van i-HL_{oraal}

Resultaten	Referentie
i-HL _{oraal} = 0,2 mg/kg lg per dag	EC (2005)

4.1 Ecotoxiciteit

De ecotoxiciteitsgegevens zijn afkomstig uit de EU-RAR (BAuA, 2008) en het REACH registratiedossier (ECHA, 2021c). De US EPA Ecotox Knowledgebase bevat geen aanvullende relevante gegevens van na de EU-RAR en de oudere studies die daarin zijn genoemd worden in de EU-RAR afgekeurd omdat ze zijn uitgevoerd in open systemen en er niet is gemeten.

ACUUT					
Soort	Duur	Parameter	Waarde [mg/L]	Opmerking	Ref.
..Algen					
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	72 h	EC ₅₀	12,7		BAuA (2008)
Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC ₅₀	12,6		BAuA (2008)

CHRONISCH					
Soort	Duur	Parameter	Waarde [mg/L]	Opmerking	Ref
.. Bacteriën					
<i>Pseudomonas putida</i>	16 h	NOEC	6		BAuA (2008)
Protozoën					
<i>Chilomonas paramecium</i>	48 h	NOEC	9,5		BAuA (2008)
Algen/ cyanobacteriën					
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	96 h	NOEC	6,0		BAuA (2008)
Vissen					
<i>Pimephales promelas</i>	34 d	NOEC	0,16	EU-RAR: 0,55; herberekend in REACH-dossier	ECHA (2021c)

5. Afleiding i-risicogrenzen

i-JG-MKN_{zoet}

i-JG-MKN_{water, voedselketen}

Stap	Resultaat	Opmerking
1	Afleiding van de i-JG-MKN _{water, voedselketen} wordt getriggerd	
2	$i\text{-JG-MKN}_{\text{humaan, voedsel}} =$	$0,2 \times 70 \times 0,2 / 0,115 = 24,3 \text{ mg/kg voedsel}$
3	$i\text{-JG-MKN}_{\text{water, voedselketen}} = 7,6 \text{ mg/L}$	$i\text{-JG-MKN}_{\text{humaan, voedsel}} / \text{BCF} = 24,3 / 3,2$
4	De i-JG-MKN _{water, voedselketen} wordt gebruikt voor de selectie van de i-JG-MKN _{zoet} en i-JG-MKN _{zout}	

i-JG-MKN_{zoet, eco}

Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	gedegen norm aanwezig?	Nee
2	experimentele data voor water?	Ja → 4
3	niet van toepassing	
4	acute en chronische data	$i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco-acuut}} = L(E)C_{50,\text{min}} / \text{AF} = 12,6 \text{ mg/L} / 5000 = 2,5 \text{ } \mu\text{g/L}$ $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco-chronisch}} = \text{NOEC}_{\text{min}} / \text{AF} = 0,16 \text{ mg/L} / 500 = 0,32 \text{ } \mu\text{g/L}$
5	data voor gehele acute en/of chronische basisset?	Nee → 6
6	NOEC voor tenminste kreeftachtige of vis en NOEC beschikbaar voor soort met $L(E)C_{50,\text{min}}$	Nee ⁵ → i-JG-MKN _{zoet, eco} = laagste van i-JG-MKN _{zoet, eco-acuut} en i-JG-MKN _{zoet, eco-chronisch} → 8
7	niet van toepassing	
8	i-JG-MKN_{zoet, eco} = 0,32 μg/L	

selectie i-JG-MKN_{zoet}

	Opmerking
$i\text{-JG-MKN}_{\text{water, voedselketen}} = 7,6 \text{ mg/L}$	
$i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco}} = 0,32 \text{ } \mu\text{g/L}$	
De laagste bepaalt de i-JG-MKN _{zoet} :	
i-JG-MKN_{zoet} = 0,32 μg/L	

⁵ Algen en *D. magna* zijn acuut even gevoelig, maar voor *D. magna* zou de langere blootstelling in een chronische studie een ander effect kunnen hebben. Als er een acute test met vissen was geweest, had de acuut-chronisch ratio mogelijk inzicht kunnen geven in het effect van blootstellingsduur..

i-JG-MKN_{zout}selectie i-JG-MKN_{zout}

	Opmerking
i-JG-MKN _{water, voedselketen} = 7,6 mg/L	
i- JG-MKN _{zout, eco} = 0,032 µg/L	i-JG-MKN _{zout, eco} = i-JG-MKN _{zoet, eco} /10 = 3,2 µg/L/10
De laagste bepaalt de i-JG-MKN _{zout} :	
i-JG-MKN_{zout} = 0,032 µg/L	

i-MAC-MKN_{zoet, eco}

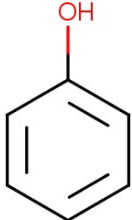
Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	gedegen norm aanwezig?	Nee → 2
2	experimentele data voor water?	Ja → 4
3	niet van toepassing	
4	i-MAC-MKN_{zoet, eco} = 42 µg/L	i-MAC-MKN _{zoet, eco} = LC _{50,min} / AF = 12,6 mg/L /300

i-MAC-MKN_{zout, eco}

Stap	Resultaat	Opmerking
1	i-MAC-MKN_{zout, eco} = 4,2 µg/L	i-MAC-MKN _{zout, eco} = i-MAC-MKN _{zoet, eco} /10

Bijlage 4. Rapportageformulier fenol

1. IDENTITEIT EN CLASSIFICATIE

Stofnaam	fenol
IUPAC-naam	phenol
Synoniemen	phenol; carbolic acid; monohydroxybenzene; phenylalcohol
CAS-nummer	108-95-2
Stofgroep volgens EPIWin	phenols
Bekend gebruik	intermediair in organische chemie
Classificatie/ trigger voedselketen	H341 Muta. 2 Afleiding i-JG-MKN _{water, voedselketen} getriggerd vanwege geharmoniseerde classificatie H341
REACH/ Zeer Zorgwekkende Stof	geregistreerd; niet op de lijst van (p)ZZS
Molecuulformule	C ₆ H ₆ O
Smiles	OC1=CC=CC=C1
Structuur- formule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	94,11		
Versijningsvorm	vast	bij 20 °C en 1013 hPa	EC (2006) ECHA (2021d)
Oplosbaarheid in water [mg/L]	84000	20 °C; handboek	EC (2006) ECHA (2021d)
Log K _{ow}	1,47	30 °C	EC (2006) Biobyte (2006)
Dampspanning [Pa]	20	experimenteel; 20 °C	EC (2006) ECHA (2021d)
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	0,022		EC (2006) ECHA (2021d)
pK _a	9,89	20 °C	EC (2006) ECHA (2021d)

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Ref.
Afbreekbaarheid	readily biodegradable		EC (2006) ECHA (2021d)
Log K _{oc} [L/kg]	1,9		EC (2006) ECHA (2021d)
Als MW < 700 g/mol:			
BCF [L/kg]	17,5	experimenteel	EC (2006) ECHA (2021d)

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit: afleiding van i-HL_{oraal}

Resultaten	Referentie
i-HL _{oraal} = 0,5 mg/kg lg per dag	EFSA (2013)

4.1 Ecotoxiciteit

De acute en chronische ecotoxiciteitgegevens zijn overgenomen uit de EU-RAR (EC, 2006). Naast de soorten die in de tabellen zijn genoemd, vermeldt de EU-RAR dat er ook gegevens zijn voor mollusken en slakken, maar deze zijn hoger dan de waarden voor kreeftachtigen. De US EPA Ecotox Knowledgebase bevat >2000 gegevens voor fenol, daarom is alleen gecontroleerd of er gegevens waren van na 1997 (datum literatuursearch EU-RAR) met lagere eindpunten en/of voor andere taxonomische groepen dan in de EU-RAR. Het REACH-registratiedossier (ECHA, 2021d) verwijst ook grotendeels naar de EU-RAR en is gecontroleerd op aanvullende relevante studies.

ACUUT					
Soort	Duur	Parameter	Waarde [mg/L]	Opmerking	Ref.
..Bacteriën					
<i>Nitrosomonas spec.</i>	24 h	IC ₅₀	21		EC (2006)
<i>Pseudomonas putida</i>	6 h	EC ₅₀	244		EC (2006)
..Algen					
<i>Raphidocelis subcapitata</i> ⁶	96 h	E _r C ₅₀	61,1		EC (2006)
<i>Chlorella vulgaris</i>	96 h	E _r C ₅₀	370		EC (2006)
<i>Dunaliella tertiolecta</i>	72 h	E _r C ₅₀	218	zoutwater	ECHA (2021d)
<i>Entomoneis cf punctulata</i>	72 h	E _r C ₅₀	76	zoutwater	ECHA (2021d)
<i>Skeletonema costatum</i>	120 h	E _r C ₅₀	49,6	zoutwater	EC (2006)
..Waterplanten					
<i>Lemna minor</i>	7 d	E _r C ₅₀	171		EC (2006)
..Raderdiertjes					
<i>Brachionus rubens</i>	24 h	LC ₅₀	600		EC (2006)
..Kreeftachtigen					

⁶ voorheen *Pseudokirchneriella subcapitata*

ACUUT					
Soort	Duur	Para- meter	Waarde [mg/L]	Opmer- king	Ref.
<i>Acartia sinjiensis</i>	48 h	EC ₅₀	20	zoutwater	ECHA (2021d)
<i>Artemia salina</i>	48 h	LC ₅₀	56	zoutwater	EC (2006)
<i>Asellus aquaticus</i>	96 h	LC ₅₀	180		EC (2006)
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	48 h	LC ₅₀	3,1		EC (2006)
<i>Cypris subglobosa</i>	48 h	EC ₅₀	6,6		US EPA (2021)
<i>Daphnia magna</i>	48 h	EC ₅₀	4,2 ⁷		EC (2006)
<i>Daphnia pulex</i>	48 h	EC ₅₀	25	-	US EPA (2021)
<i>Gammarus pulex</i>	96 h	LC ₅₀	69		EC (2006)
<i>Macrobrachium rosenbergii</i>	48 h	LC ₅₀	11,8		US EPA (2021)
<i>Nitocra spinipes</i>	96 h	LC ₅₀	37	zoutwater	US EPA (2021)
<i>Palaemonetes pugio</i>	96 h	LC ₅₀	5,8	zoutwater	EC (2006)
..Insecten					
<i>Baetis rhodani</i>	96 h	LC ₅₀	15,5		EC (2006)
..Vissen					
<i>Bidyanus bidyanus</i>	96 h	LC ₅₀	14		US EPA (2021)
<i>Carrassius auratus</i>	96 h	LC ₅₀	44,5		EC (2006)
<i>Danio rerio</i>	96 h	LC ₅₀	29		EC (2006)
<i>Jordanella floridae</i>	96 h	LC ₅₀	36,3		EC (2006)
<i>Leuciscus idus</i>	48 h	LC ₅₀	14		EC (2006)
<i>Lepomis macrochirus</i>	96 h	LC ₅₀	12		US EPA (2021)
<i>Nothobranchius guentheri</i>	24 h	LC ₅₀	57		US EPA (2021)
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 h	LC ₅₀	5,0		EC (2006)
<i>Oreochromis mossambicus</i>	96 h	LC ₅₀	28,5		US EPA (2021)
<i>Oryzias latipes</i>	48 h	LC ₅₀	24,1		US EPA (2021)
<i>Pimephales promelas</i>	96 h	LC ₅₀	24-36		EC (2006)
<i>Phoxinus phoxinus</i>	96 h	LC ₅₀	9,5		EC (2006)
<i>Poecilia reticulata</i>	96 h	LC ₅₀	15		US EPA (2021)
<i>Rutilus rutilus</i>	48 h	LC ₅₀	10		EC (2006)

CHRONISCH					
Soort	Duur	Para- meter	Waarde [mg/L]	Opmer- king	Ref
..Bacteriën					
<i>Chilomonas paramaecium</i>	48 h	NOEC	65		EC (2006)
<i>Entosiphon sulcatum</i>	72 h	NOEC	33		EC (2006)
<i>Pseudomonas putida</i>	6 h	NOEC	15,1		EC (2006)
<i>Uronema parduczi</i>	20 h	NOEC	144		EC (2006)
..Kreeftachtigen					
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	8 d	NOEC	0,84	overleving	EC (2006)
<i>Daphnia magna</i>	16 d	EC ₁₀	0,46	groei	EC (2006)

⁷ In de EU-RAR staat een range van 4,2 tot 10,7

CHRONISCH					
Soort	Duur	Para- meter	Waarde [mg/L]	Opmer- king	Ref
..Algen					
<i>Dunaliella tertiolecta</i>	72 h	NOE _r C	120	zoutwater	ECHA (2021d)
<i>Skeletonema costatum</i>	120 h	NOE _r C	13	zoutwater	EC (2006)
..Planten					
<i>Lemna minor</i>	7 d	NOE _r C	5		EC (2006)
..Vissen					
<i>Cirrhinus mrigala</i>	60 d	NOEC	0,077		EC (2006)
<i>Cyprinus carpio</i>	60 d	NOEC	0,110		EC (2006)
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	60 d	NOEC	0,1		EC (2006)
<i>Pimephales promelas</i>	32 d	NOEC	1,8		EC (2006)

5. Afleiding i-risicogrenzen

i-JG-MKN_{zoet}

i-JG-MKN_{water, voedselketen}

Stap	Resultaat	Opmerking
1	Afleiding van de i-JG-MKN _{water, voedselketen} wordt getriggerd	
2	i-JG-MKN _{humanaan, voedsel} =	$0,5 \times 70 \times 0,2 / 0,115 = 60,9 \text{ mg/kg voedsel}$
3	i-JG-MKN _{water, voedselketen} = 3,5 mg/L	i-JG-MKN _{humanaan, voedsel} / BCF = $60,9 / 17,5$
4	De i-JG-MKN _{water, voedselketen} wordt gebruikt voor de selectie van de i-JG-MKN _{zoet} en i-JG-MKN _{zout}	

i-JG-MKN_{zoet, eco}

Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	gedegen norm aanwezig?	Nee
2	experimentele data voor water?	Ja → 4
3	niet van toepassing	
4	acute en chronische data	$i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco-acute}} = L(E)C_{50,\text{min}} / AF = 2,5 \text{ mg/L} / 1000 = 25 \text{ }\mu\text{g/L}$ $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco-chronisch}} = NOEC_{\text{min}} / AF = 0,077 \text{ mg/L} / 100 = 0,77 \text{ }\mu\text{g/L}$
5	data voor gehele acute en/of chronische basisset?	Nee → 6
6	NOEC voor tenminste kreeftachtige of vis en NOEC beschikbaar voor soort met $L(E)C_{50,\text{min}}$	Ja → $i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco}} = i\text{-JG-MKN}_{\text{zoet, eco-chronisch}} \times 10 \rightarrow 8$
7	niet van toepassing	
8	i-JG-MKN_{zoet, eco} = 7,7 $\mu\text{g/L}$	

selectie i-JG-MKN_{zoet}

	Opmerking
i-JG-MKN _{water, voedselketen} = 3,5 mg/L	
i-JG-MKN _{zoet, eco} = 7,7 µg/L	
De laagste bepaalt de i-JG-MKN _{zoet} :	
i-JG-MKN_{zoet} = 7,7 µg/L	

i-JG-MKN_{zout}

selectie i-JG-MKN_{zout}

	Opmerking
i-JG-MKN _{water, voedselketen} = 3,5 mg/L	
i- JG-MKN _{zout, eco} = 0,77 µg/L	i- JG-MKN _{zout, eco} = i-JG-MKN _{zoet, eco} /10 = 7,7 µg/L/10
De laagste bepaalt de i-JG-MKN _{zout} :	
i-JG-MKN_{zout} = 0,77 µg/L	

i-MAC-MKN_{zoet, eco}

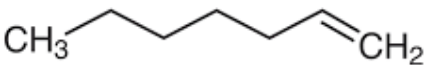
Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	gedegen norm aanwezig?	Nee → 2
2	experimentele data voor water?	Ja → 4
3	niet van toepassing	
4	i-MAC-MKN_{zoet, eco} = 0,25 mg/L	i-MAC-MKN _{zoet, eco} = LC _{50,min} / AF = 2,5 mg/L / 10 ³

i-MAC-MKN_{zout, eco}

Stap	Resultaat	Opmerking
1	i-MAC-MKN_{zout, eco} = 25 µg/L	i-MAC-MKN _{zout, eco} = i-MAC-MKN _{zoet, eco} /10

Bijlage 5. Rapportageformulier hepteen

1. IDENTITEIT EN CLASSIFICATIE

Stofnaam	1-hepteen
IUPAC-naam	heptene
Synoniemen	hept-1-ene
CAS-nummer	25339-56-4
Stofgroep volgens EPIWin	neutral organics
Bekend gebruik	grondstof voor de productie van organische stoffen
Genotificeerde classificatie	H304 Asp Tox. 1 Afleiding i-JG-MKN _{water, voedselketen} getriggerd vanwege log K _{ow} 3,99
REACH/ Zeer Zorgwekkende Stof	pre-registratie; niet op de lijst van (p)ZZS
Molecuulformule	C ₇ H ₁₄
Smiles	C=CCCCC
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	98,19		
Versijningsvorm	kleurloze vloeistof		PubChem ⁸
Oplosbaarheid in water [mg/L]	18,2	25 °C; experimenteel	US EPA (2000-2012) PubChem
	niet oplosbaar		PubChem
Log K _{ow}	3,99	experimenteel	Biobyte (2006)
Dampspanning [Pa]	7910	experimenteel	US EPA (2000-2012)
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	4,3 x 10 ⁴	experimenteel	US EPA (2000-2012)
pK _a	n.v.t.		

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Ref.
Afbreekbaarheid	niet persistent	BIOWIN 2, 3 en 6	US EPA (2000-2012)
Log K _{oc} [L/kg]	3,46	geschat met log K _{ow}	US EPA (2000-2012)
Als MW < 700 g/mol:			
BCF [L/kg]	491	geschat met log K _{ow}	De Poorter et al. (2015)

⁸ <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1-heptene>

4. TOXICITEIT

4.1 Humane toxiciteit: afleiding van i-HL_{oraal}

Er zijn geen gegevens voor 1-hepteen, daarom is de TTC-benadering toegepast. 1-Hepteen valt in Cramer klasse I met een TTC van 30 µg/kg lichaamsgewicht per dag⁹. In de beoordeling van de groep 'higher olefins' door OECD (2004) staan wel gegevens voor 1-hexeen en 1-octeen. Voor 1-hexeen zijn de volgende gegevens beschikbaar: 28-daagse NOEL voor de rat van 101 mg/kg lg per dag; 44-daagse NOEL voor de rat van <100 mg/kg lg/dag (mannetjes) en 1000 mg/kg lg per dag (vrouwtjes). Voor 1-octeen is er een 90-daagse NOEL voor de rat van 50 mg/kg lg per dag, waarbij wordt aangetekend dat de eerstvolgende dosis van 500 mg/kg lg per dag slechts lichte effecten laat zien. Rekening houdend met de benodigde veiligheidsfactoren bevestigen deze studies de TTC.

4.1 Ecotoxiciteit

Er is geen REACH registratiedossier. De US EPA Ecotox Knowledgebase (US EPA, 2021) bevat 1 acute studie met de watervlo *Daphnia magna*, het eindpunt is een >-waarde afkomstig uit een studie van (Bringmann & Kühn, 1977). PubChem verwijst naar een studie met protozoën door Bringmann & Kühn (1980), deze is toegevoegd aan de dataset.

ACUUT					
Soort	Duur	Parameter	Waarde [mg/L]	Opmerking	Ref.
..Kreeftachtigen					
<i>Daphnia magna</i>	24 h	EC ₅₀	50	>-waarde	US EPA (2021)

CHRONISCH					
Soort	Duur	Parameter	Waarde [mg/L]	Opmerking	Ref.
.. Protozoën					
<i>Uronema parduczi</i>	20 h	NOEC	1,8		Bringmann & Kühn (1980)

5. Afleiding i-risicogrenzen

i-JG-MKN_{zoet}

i-JG-MKN_{water, voedselketen}

Stap	Resultaat	Opmerking
1	Afleiding van de i-JG-MKN _{water, voedselketen} wordt getriggerd	
2	i-JG-MKN _{humanaan, voedsel} =	$30 \times 70 \times 0,2 / 0,115 = 3,7 \mu\text{g/kg voedsel}$
3	i-JG-MKN _{water, voedselketen} = 7,4 µg/L	$i\text{-JG-MKN}_{\text{humanaan, voedsel}} / \text{BCF} = 3,7 / 491$

⁹ conform herziene handleiding; in de huidige handleiding staat 26 µg/kg lg per dag, dit heeft te maken met een terugrekening op basis van een afwijkend lichaamsgewicht

4	De i-JG-MKN _{water, voedselketen} wordt gebruikt voor de selectie van de i-JG-MKN _{zoet} en i-JG-MKN _{zout}	
---	--	--

i-JG-MKN_{zoet, eco}

Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	gedegen norm aanwezig?	Nee
2	experimentele data voor water?	Ja → 4
3	niet van toepassing	
4	alleen acuut ¹⁰	i-JG-MKN _{zoet, eco-acuut} = L(E)C _{50,min} / AF = 50 mg/L / 10000 = 5,0 µg/L
5	niet van toepassing	
6	niet van toepassing	
7	niet van toepassing	
8	i-JG-MKN_{zoet, eco} = 5,0 µg/L	

selectie i-JG-MKN_{zoet}

	Opmerking
i-JG-MKN _{water, voedselketen} = 7,4 µg/L	
i-JG-MKN _{zoet, eco} = 5,0 µg/L	
De laagste bepaalt de i-JG-MKN _{zoet} :	
i-JG-MKN_{zoet} = 5,0 µg/L	

i-JG-MKN_{zout}

selectie i-JG-MKN_{zout}

	Opmerking
i-JG-MKN _{water, voedselketen} = 7,4 µg/L	
i-JG-MKN _{zout, eco} = 0,50 µg/L	i-JG-MKN _{zout, eco} = i-JG-MKN _{zoet, eco} /10 = 0,50 µg/L/10
De laagste bepaalt de i-JG-MKN _{zout} :	
i-JG-MKN_{zout} = 0,50 µg/L	

i-MAC-MKN_{zoet, eco}

Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	gedegen norm aanwezig?	Nee → 2
2	experimentele data voor water?	Ja → 4
3	niet van toepassing	
4	i-MAC-MKN_{zoet, eco} = 50 µg/L	i-MAC-MKN _{zoet, eco} = LC _{50,min} / AF = 50 mg/L / 1000

¹⁰ Er is wel een chronische waarde, maar niet voor een basisgroep

i-MAC-MKN_{zout, eco}

Stap	Resultaat	Opmerking
1	i-MAC-MKN_{zout, eco} = 5,0 µg/L	i-MAC-MKN _{zout, eco} = i-MAC-MKN _{zoet, eco} /10

zie hoofdtekst voor uiteindelijke keuze i-MKN

Bijlage 6. Ecotoxiciteitsgegevens alkenen

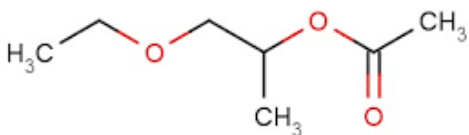
Onderstaande tabel is gekopieerd uit OECD (2004) en bevat een overzicht van experimentele ecotoxiciteitsgegevens voor alkenen.

Chemical ^b	Acute Toxicity to Fish (Rainbow trout unless otherwise specified) (mg/L)	Acute Toxicity to Invertebrates (Daphnia) (mg/L)	Acute Toxicity to Plants (Algae) (mg/L)
Hexene (CAS # 25264-93-1)	NDA	NDA	NDA
Alkenes, C6 (internal branched stream) (CAS# 68526-52-3)	96-hr LC50 = 6.6 (measured) 96-hr LL50 = 12.8 (nominal) 96-hr NOEC = 2.9 (measured) Mortality, semi-static; no headspace; WAF ^d	48-hr EC50 = 4.4 (measured) 48-hr EL50 = 20 (nominal) Static, sealed vessel conditions with minimal headspace	96-hr EC50 (cell density) = 4.6 96-hr NOEC (cell density) = 1.8 96-hr E ₀ C50 (biomass) = 4.5 96-hr NOEC (biomass) = 0.23 96-hr E ₀ C50 (growth rate) >5.5 96-hr NOEC (growth rate) = 1.8 (measured) Static; WAF; sealed vessel conditions with no headspace
1-hexene (CAS# 592-41-6)	24, 48, 72, 96-hr LC50 = 9.7, 5.6, 5.6 and 5.6 (measured) Semi-static, minimal headspace to prevent losses through evaporation	48-hr EL50 = 32 (estimated); NOEC = 10 (nominal) Static, stoppered flask	96-hr EC50 > solubility 96-hr EL0>22 (22 mg/L was the highest nominal concentration tested that was below the water solubility) Static; endpoint was biomass; no attempt to prevent evaporation; no reduction in cell numbers at 1000 mg/L (nominal)
Heptene (CAS# 25339-56-4)	NDA	NDA	NDA
Octene (CAS# 25377-83-7)	NDA	NDA	NDA
Alkenes, C7-9, C8 rich (internal stream) (CAS# 68526-54-5)	96-hr LC50 = 0.87 (measured) 96-hr LL50 = 8.9 (nominal) 96-hr NOEC = 0.4 (measured) Mortality, semi-static; no headspace; WAF	NDA	NDA
2-Octene (trans) (CAS# 111-67-1)	Zebra fish (<i>Brachiodanio rerio</i>) 96-hr LL50 = 7.5 (nominal) 96-hr NOEC = 3.2 (nominal) Semi-static, stirred 4 hr before adding fish, glass- stoppered flask	48-hr EL50>3.2<10 (nominal) (est. to be about 6) 48-hr NOEC = 3.2 (nominal) Static, stirred 4 hr before adding test animals; tested in glass-stoppered flask	NDA
1-Octene (CAS# 111-66-0)	Zebra fish (<i>Brachiodanio rerio</i>) 24-96-hr LL50>3.2 <10 (nominal) (est. to be about 6)	48-hr EL50>3.2<10 (nominal) (est. to be about 6) 48-hr NOEC = 3.2 (nominal)	NDA

	96-hr NOEC = 3.2 (nominal) Semi-static, stirred 4 hr before adding fish, glass-stoppered flask	Static, stirred 4 hr before adding test animals; tested in glass-stoppered flask	
Nonene (CAS# 27215-95-8)	NDA	NDA	NDA
1-Nonene (CAS# 124-11-8)	Zebra fish (<i>Brachiodanio rerio</i>) 48-hr LL50 > 3.2 < 10 (nominal) (est. to be about 6) 96-hr LL50 < 3.2 (nominal) Semi-static, stirred 4 hr before adding fish, glass-stoppered flask	48-hr EL50 < 3.2 (nominal) (est. to be about 2) Static, stirred 4 hr before adding test animals; tested in glass-stoppered flask	NDA
Decene (CAS# 25339-53-1)	NDA	NDA	NDA
Alkenes, C9-11, C10 rich (internal stream) (CAS# 68526-56-7)	96-hr LC50 = 0.12 (measured) 96-hr NOEC = 0.06 (measured) 96-hr LL50 = 4.8 (nominal) Mortality, semi-static; no headspace; WAF; mortality at ≥ 0.08 mg/L	NDA	NDA
Dodecene (CAS# 25378-22-7)	NDA	NDA	NDA

Bijlage 7. Rapportageformulier ethoxypropylacetaat

1. IDENTITEIT EN CLASSIFICATIE

Stofnaam	ethoxypropylacetaat
IUPAC-naam	3-ethoxypropyl acetate
CAS-nummer	98516-30-4
Stofgroep volgens EPIWin	esters
Bekend gebruik	oplosmiddel, additief voor verf en coatings, bestanddeel van inkt, toner en kleurstoffen (PubChem ¹¹)
Genotificeerde classificatie	H336 STOT SE 3 Afleiding i-JG-MKN _{water, voedselketen} niet getriggerd
REACH/ Zeer Zorgwekkende Stof	pre-registratie; niet op de lijst van (p)ZZS
Molecuulformule	C ₇ H ₁₄ O ₃
Smiles	CCOC(C)COC(=O)C
Structuurformule	

2. FYSISCH-CHEMISCHE EIGENSCHAPPEN

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Referentie
Molecuulgewicht [g/mol]	146,19		
Verschijningsvorm	kleurloze vloeistof		PubChem ¹¹
Oplosbaarheid in water [mg/L]	1,09 x 10 ⁴	geschat	US EPA (2000-2012)
Log K _{ow}	0,99	geschat	Biobyte (2006)
Dampspanning [Pa]	369	geschat	US EPA (2000-2012)
Henry-coëfficiënt [Pa m ³ /mol]	0,49	geschat, 'bond'	US EPA (2000-2012)
	0,08	geschat, 'group'	
	5,0	berekend met VP en WS	
pK _a	n.v.t.		

3. GEDRAG EN LOTGEVALLEN IN HET MILIEU

Eigenschap	Waarde	Opmerking	Ref.
Afbreekbaarheid	niet persistent	BIOWIN 2, 3 en 6	US EPA (2000-2012)
Log K _{oc} [L/kg]	1,3	geschat met log K _{ow}	US EPA (2000-2012)
Als MW < 700 g/mol:			
BCF [L/kg]		log K _{ow} buiten bereik QSAR; BCF niet relevant (voedselketenroute niet getriggerd)	De Poorter et al. (2015)

¹¹ <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Ethoxypropyl-acetate>

4. TOXICITEIT

4.1 Ecotoxiciteit

Er is geen REACH-registratiedossier en de US EPA Ecotox Knowledgebase bevat geen ecotoxiciteitsgegevens. Ook in andere bronnen zijn geen relevante gegevens gevonden. Daarom is gebruik gemaakt van het programma ECOSAR 2.0 (US EPA, 2017). De ECOSAR voorspelling staat in onderstaande tabel

Stofgroep	Taxonomische groep	Parameter	Waarde
Esters	Vis	96-uurs LC50	74,2 mg/L
	Daphnia	48-uurs LC50	172 mg/L
	groenalgen	96-uurs EC50	85,5 mg/L

5. Afleiding i-risicogrenzen

i-JG-MKN_{zoet}

i-JG-MKN_{water, voedselketen}

Stap	Resultaat	Opmerking
1	Afleiding van de i-JG-MKN _{water, voedselketen} wordt niet getriggerd	

i-JG-MKN_{zoet, eco}

Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	gedegen norm aanwezig?	Nee
2	experimentele data voor water?	Nee → 3
3	Is het gebruik van QSAR's mogelijk	Ja → 4
4	alleen acuut ¹²	i-JG-MKN _{zoet, eco-acuut} = L(E)C _{50,min} / AF = 74,2 mg/L / 10000 = 7,4 µg/L → 8
5	niet van toepassing	
6	niet van toepassing	
7	niet van toepassing	
8	i-JG-MKN_{zoet, eco} = 7,4 µg/L	

selectie i-JG-MKN_{zoet}

	Opmerking
i-JG-MKN _{water, voedselketen} =	niet afgeleid
i-JG-MKN _{zoet, eco} = 7,4 µg/L	
De laagste bepaalt de i-JG-MKN _{zoet} :	
i-JG-MKN_{zoet} = 7,4 µg/L	

¹² Volgens de herziene handleiding worden QSAR's alleen gebruikt voor het schatten van acute ecotoxiciteitswaarden.

i-JG-MKN_{zout}selectie i-JG-MKN_{zout}

	Opmerking
i-JG-MKN _{water, voedselketen} =	niet afgeleid
i- JG-MKN _{zout, eco} = 0,74 µg/L	i- JG-MKN _{zout, eco} = i-JG-MKN _{zoet, eco} /10 = 7,4 µg/L / 10
De laagste bepaalt de i-JG-MKN _{zout} :	
i-JG-MKN_{zout} = 0,74 µg/L	

i-MAC-MKN_{zoet, eco}

Stap	Vraag/statement	Resultaat
1	gedegen norm aanwezig?	Nee → 2
2	experimentele data voor water?	Nee → 4
3	niet van toepassing	
4	i-MAC-MKN_{zoet, eco} = 74 µg/L	i-MAC-MKN _{zoet, eco} = LC _{50,min} / AF = 74,2 mg/L / 1000 ¹³

i-MAC-MKN_{zout, eco}

Stap	Resultaat	Opmerking
1	i-MAC-MKN_{zout, eco} = 7,4 µg/L	i-MAC-MKN _{zout, eco} = i-MAC-MKN _{zoet, eco} /10

¹³ Volgens de herziene handleiding wordt een AF van 1000 toegepast bij een volledige basisset op basis van QSAR's. Deze factor mag worden verlaagd naar 100 als duidelijk is dat de potentieel gevoelige taxonomische groep is vertegenwoordigd in de dataset die op basis van QSAR's is gegenereerd. Voor de stofgroep esters is dit niet eenduidig vast te stellen, daarom is de AF van 1000 gebruikt.