

Una propuesta de enfoque por categorías sobre los derivados del alcohol Exxal™ para su evaluación con el fin de cumplir los criterios de surfactante de liberación directa de Safer Choice.

Resumen ejecutivo

Los surfactantes de liberación directa de la opción mas segura cumplen criterios medioambientales mejorados para abordar el potencial de contacto inmediato con la vida acuática. Estos criterios son los establecidos por la EPA¹. ExxonMobil ha emprendido una amplia estrategia interna de pruebas medioambientales para los derivados etoxilados de nuestros alcoholes Exxal™ con el fin de proporcionar una caracterización detallada de sus perfiles medioambientales y apoyar a los clientes de estos productos en una amplia gama de aplicaciones. Cuando no existen datos de pruebas, nuestros toxicólogos ambientales han desarrollado modelos sofisticados y estrategias de ponderación de evidencias para predecir una serie de propiedades ambientales (incluida la biodegradabilidad y el peligro ecotoxicológico) de estas sustancias.

En base a sus propiedades medioambientales, los surfactantes etoxilados a base de alcohol Exxal™ cumplen los Criterios de Liberación Directa de Safer Choice de EPA dentro de rangos específicos de etoxilación.

Teniendo en cuenta el modelado, los datos de prueba existentes y las relaciones de actividad de estructura bien establecidas, ExxonMobil propone que los siguientes derivados etoxilados (EO) cumplan los criterios de la EPA. La aceptabilidad de las categorías propuestas está siendo revisada actualmente por el Programa Safer Choice:

Exxal™ 8 con 20EO a 4EO cumple los criterios y potencialmente baja hasta 1EO.

Exxal™ 9 con 20EO a 7EO cumple los criterios y potencialmente baja hasta 3EO.

Exxal™ 10 con 20EO a 9EO cumple los criterios y potencialmente baja hasta 5EO.

Exxal™ 11 con 20EO a 7EO cumple los criterios y potencialmente baja hasta 6EO.

Exxal™ 13 con 20EO a 12EO cumple los criterios y potencialmente baja hasta 11EO.

Resulta de interés, que un surfactante etoxilado que utiliza una convención de nomenclatura vinculada a Exxal™ 13 (Alcoholes, C11-14- iso-, ricos en C13, etoxilados CAS# 78330-21-9) ya figura en la Lista de Ingredientes Químicos Más Seguros (SCIL).

¹ <https://www.epa.gov/saferchoice/standard#directrelease>

Visión general de alto nivel de los datos que respaldan que los derivados etoxilados del alcohol Exxal™ cumplen los actuales criterios de liberación directa de Safer Choice²

Las variaciones en la longitud de las cadenas de carbono, el número de unidades de etoxilo (EO) y el grado de ramificación pueden tener un impacto en el desempeño y las propiedades medioambientales de los surfactantes de etoxilato de alcohol (AEO). Las moléculas ideales para la designación de la opción más segura deben ser altamente degradables con una baja toxicidad en el medio acuático. Aunque no se dispone de conjuntos de datos exhaustivos para todos los compuestos homólogos o mezclas de AEO, se han desarrollado anteriormente relaciones estructura-actividad (SAR) que pueden predecir con exactitud estas propiedades. (Tabla 1).

Tabla 1 - Relación estructura-actividad para atributos clave de los alcoholes etoxilados y propiedades medioambientales.

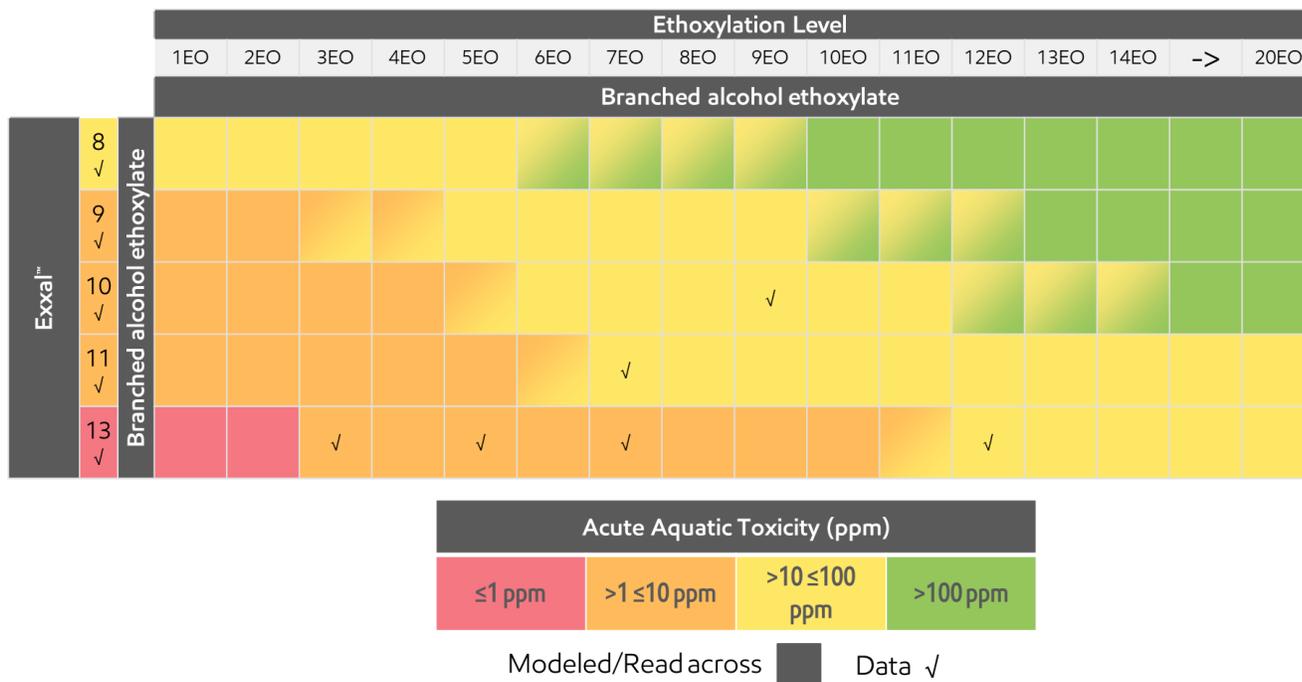
Propiedad	Modelo	Producción	Referencia
Biodegradabilidad	BioWIN v4.10 (BioWin 1-7, Predicción de RBD)	Biodegradabilidad lista (Categorical)	EPA DE EE.UU., 2020
	Catalogic v.5.11 (Modelo cinético 301F)	Biodegradabilidad lista (cuantitativa) Vida media primaria (agua)	Dimitrov et al., 2011
Toxicidad acuática	Modelo de Lípido Objetivo (TLM)	L/EC50 y ChV (peces, invertebrados, algas)	Di Toro et al. 2000a,b; Bragin et al., 2019*
	ECOSAR v2.0	L/EC50 y ChV (peces, invertebrados, algas)	EPA DE EE.UU., 2020
Bioaccumulation	BCFBAF (BCF/BAF de nivel trófico superior por Arnot-Gobas)	BCF y BAF (organismos acuáticos de bajo, medio y alto nivel trófico, incluido el metabolismo)	EPA DE EE.UU., 2020
	Regresión del BCF	BCF (peces; sin metabolismo)	

*Aplicación del TLM específicamente para los etoxilatos de alcohol.

Combinando las relaciones estructura-actividad conocidas con los datos existentes y el conocimiento de la estructura química, el mecanismo y los efectos, se puede desarrollar un enfoque de ponderación de las evidencias para el llenado de los vacíos de datos y tomar decisiones informadas en cuanto a las propiedades medioambientales de una amplia gama de productos OEA.

² La decisión final está sujeta a la aprobación de EPA

Tabla 2 - Perfil de toxicidad aguda de etoxilatos de alcoholes Exxal™ de 1EO a 20EO



En general, existe una relación predecible entre la toxicidad acuática aguda y la toxicidad acuática crónica para los productos químicos orgánicos (es decir, los productos químicos que tienen una alta toxicidad acuática aguda también tienen una alta toxicidad acuática crónica). Dado que los datos sobre toxicidad acuática aguda son más fáciles de obtener, los Criterios de la Opción Más Segura utilizan estos datos para seleccionar las sustancias químicas que pueden ser tóxicas para la vida acuática (véanse las secciones 5.9 y 6.8 de los Criterios Básicos de [Safer Choice Master Criteria para Safer Ingredientes Más Seguros](#)). Según las orientaciones verbales del personal pertinente de EPA, los datos crónicos no son un requisito absoluto, y por lo general, la toxicidad crónica se estima como aguda/10. Mediante la aplicación de esta regla, se estima que las sustancias con >10 ppm (partes por millón) para la toxicidad acuática aguda superarán el umbral de >1 ppm (partes por millón) para la toxicidad crónica. Esta suposición es bastante conservadora, ya que se ha realizado un trabajo significativo para establecer las proporciones agudas a crónicas (ACR) para los productos químicos orgánicos neutros (ACR = 5,22), cuyo dominio incluye los alcoholes de origen AEO (Di Toro et al., 2000a,b; McGrath et al., 2009; Redman et al., 2012; Redman et al., 2017; McGrath et al., 2018). Recientemente se ha demostrado que esto predice de forma conservadora la toxicidad crónica de los etoxilatos de alcohol (AEO), específicamente (Bragin et al., 2019).

El perfil de biodegradabilidad de nuestros AEO ramificados está bien respaldado por una amplia gama de pruebas de biodegradación de sustancias específicas (Bragin et al., 2019).

Tabla 3 - Perfil de biodegradación de etoxilatos de alcoholes Exxa™ de 1EO a 20EO

		Ethoxylation Level															
		1EO	2EO	3EO	4EO	5EO	6EO	7EO	8EO	9EO	10EO	11EO	12EO	13EO	14EO	->	20EO
Exxa™	Branched alcohol ethoxylate	8 ✓				✓		✓		✓		✓					
		9 ✓	✓		✓		✓		✓	✓							✓
		10 ✓			✓		✓		✓		✓						
		11 ✓			✓		✓		✓	✓		✓					
		13 ✓							✓	✓	✓			✓			

Biodegradability (OECD 301F)	
Readily Biodegradable	Readily Biodegradable 10d Window

Modeled/Read across Data ✓

Se han generado datos BCF (Camenzuli et al., 2019) para varios alcoholes de origen iso-ramificados (C10, 12 y 13) así como datos BMF (Gobas et al., 2020) para alcoholes iso-ramificados C10 y C13 y un etoxilato ramificado C11-3EO. Los valores del BCF y del BMF para estas sustancias son muy bajos (BCF normalizado por lípidos al 5% oscila entre 12 - 77 L/kg-pc para los alcoholes de origen, los valores del BMF oscilan entre 0,001 - 0,003 para los alcoholes de origen y el etoxilato de C11-3EO) y respaldan trabajos anteriores que demuestran el bajo potencial de bioacumulación y el rápido metabolismo de los AEO en organismos acuáticos (Tolls et al., 2000 y Belanger et al., 2009). Además, los BCF QSARs están en buena concordancia para los etoxilatos de alcohol y sus alcoholes de origen, prediciendo un bajo potencial de bioacumulación (Arnot & Gobas, 2003; Arnot & Gobas 2006). Aunque los criterios de Safer Choice no consideran explícitamente los datos BMF, esta información debería considerarse una línea de evidencia adicional de nivel superior para apoyar el bajo potencial de bioacumulación/bioconcentración de compuestos escasamente solubles o altamente hidrofóbicos para los que la ruta dietética de exposición puede considerarse importante (Gobas et al., 2020). Estas líneas independientes de evidencia respaldan firmemente una conclusión basada en el peso de la evidencia sobre el bajo potencial de bioacumulación de OEA en el medio acuático.

Tabla 4 - Factor de bioconcentración (BCF)/factor de bioacumulación (BAF) para los etoxilatos de alcoholes Exxal™ de 1EO a 20EO

		Ethoxylation Level																		
		1EO	2EO	3EO	4EO	5EO	6EO	7EO	8EO	9EO	10EO	11EO	12EO	13EO	14EO	->	20EO			
Exxal™	Branched alcohol ethoxylate	8																		
		9																		
		10 ✓																		
		11			✓															
		13 ✓																		

BCF/BAF			
>2000	>1000 ≤ 2000	>100 ≤ 1000	≤ 100

Modeled/Read across Data ✓

La recopilación de estos datos proporciona las siguientes predicciones para cumplir con los criterios de liberación directa de opción más segura de EPA.

Tabla 5 - Gama de etoxilatos de alcoholes Exxal™ que se prevé cumplan los criterios de Safer Choice Direct y el nivel de confianza.

epa.gov/saferchoice

		Ethoxylation Level																		
		1EO	2EO	3EO	4EO	5EO	6EO	7EO	8EO	9EO	10EO	11EO	12EO	13EO	14EO	->	20EO			
Exxal™	Branched alcohol ethoxylate	8																		
		9																		
		10																		
		11																		
		13																		

Meets EPA Safer Choice Direct Release Criteria		
Potential	Confident	High Confidence

1. No degradation products of concern are compounds with high acute or chronic aquatic toxicity (L/E/IC50 ≤ 10ppm or LOEC ≤ 1 ppm) and a slow rate of biodegradation (greater than 28 days).

Referencias:

- Arnot, Jon A. y Frank APC Gobas. "Un QSAR genérico para evaluar el potencial de bioacumulación de sustancias químicas orgánicas en las redes alimentarias acuáticas". *QSAR & Combinatorial Science* 22.3 (2003): 337-345.
- Arnot, Jon A. y Frank APC Gobas. "Una revisión de las evaluaciones del factor de bioconcentración (BCF) y del factor de bioacumulación (BAF) de sustancias químicas orgánicas en organismos acuáticos". *Revisiones medioambientales* 14.4 (2006): 257-297.
- Bragin, Gail E., et al. "Biodegradación y ecotoxicidad de los etoxilatos de alcoholes ramificados: Aplicación del modelo de lípido objetivo e implicaciones para la clasificación ambiental". *Revista de surfactantes y detergentes* 23.2 (2020): 383-403.
- Camenzuli, L., et al. "Factores de bioconcentración de hidrocarburos y productos petroquímicos: Comprendiendo los procesos, incertidumbre y desempeño del modelo predictivo". *Chemosphere* 226 (2019): 472-482.
- Dimitrov, S., et al. "Simulación del metabolismo químico para la evaluación del destino y el peligro. II Simulación CATALÓGICA de la degradación abiótica y microbiana". *SAR y QSAR en la investigación medioambiental* 22.7-8 (2011): 719-755.
- Di Toro, Dominic M., Joy A. McGrath y David J. Hansen. "Base técnica para los criterios relativos a los productos químicos narcóticos y los hidrocarburos aromáticos policíclicos. I. Agua y tejido". *Toxicología y Química Medioambientales: Una revista internacional* 19.8 (2000): 1951-1970.
- Di Toro, Dominic M. y Joy A. McGrath. "Base técnica para los criterios relativos a los productos químicos narcóticos y los hidrocarburos aromáticos policíclicos. II. Mezclas y sedimentos". *Toxicología y Química Medioambientales: Una revista internacional* 19.8 (2000): 1971-1982.
- Gobas, Frank APC, et al. "Un Marco Toxicocinético y una Herramienta de Análisis para la Interpretación de las Pruebas de Bioacumulación Dietética de la Directriz 305 de la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico". *Toxicología y Química Medioambientales* 39.1 (2020): 171-188.
- Maurer, Laura L. y Ming H. Kung. "Pruebas de Toxicidad en Mamíferos de Etoxilatos de Alcohol Semilineales y Ramificados". *Revista de surfactantes y detergentes* 23.5 (2020): 921-935.
- McGrath, Joy A. y Dominic M. Di Toro. "Validación del modelo de lípido objetivo para la evaluación de la toxicidad de los componentes residuales del petróleo: hidrocarburos aromáticos monocíclicos y policíclicos". *Toxicología y Química Medioambientales: Una revista internacional* 28.6 (2009): 1130-1148.
- McGrath, Joy A., et al. "Reevaluación de las predicciones de HC5 derivadas de modelo de lípido objetivo para hidrocarburos". *Toxicología y química medioambientales* 37,6 (2018): 1579-1593.
- Redman, Aaron D., et al. "PETROTOX: Un modelo de toxicidad acuática para sustancias derivadas del petróleo". *Toxicología y Química Medioambientales* 31.11 (2012): 2498-2506.
- Redman, Aaron D., et al. "Una reevaluación de PETROTOX para predecir la toxicidad aguda y crónica de las sustancias derivadas del petróleo". *Toxicología y química medioambientales* 36.8 (2017): 2245-2252.
- EPA DE EE.UU. 2020. Interfaz de programas de Estimación Suite™ para Microsoft® Windows, v 4.11. Agencia de Protección del Medio Ambiente de los Estados Unidos, Washington, DC, EE.UU.