

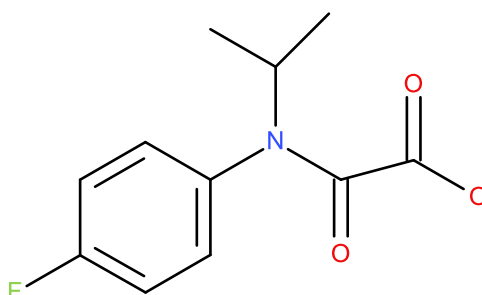


Miljøministeriet
Naturstyrelsen
Miljøstyrelsen

Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

FOE-oxalat

CAS 201668-31-7



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	4,75 mg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	0,475 mg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	47,5 mg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	4,75 mg/l

November 2015

Indhold

FORORD	4	
ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS	5	
1 INDLEDNING	6	
2 FYSISK KEMISKE EGENSKABER	7	
3 SKÆBNE I MILJØET	8	
3.1 NEDBRYDELIGHED	8	
3.2 BIOAKKUMULERING	8	
3.3 NATURLIG FOREKOMST	8	
4 GIFTIGHEDSDATA	9	
4.1 GIFTIGHED OVER FOR VANDLEVENDE ORGANISMER	9	
4.2 GIFTIGHED OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	9	
4.3 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	9	
4.4 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	9	
5 ANDRE EFFEKTER	10	
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	11	
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	11	
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	11	
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	11	
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	11	
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	11	11
7 KONKLUSION	12	
8 REFERENCER	13	

Forord

Et kvalitetskriterium i vandmiljøet er det højeste koncentrationsniveau, ved hvilket der skønnes, at der ikke vil forekomme uacceptable negative effekter på vandøkosystemer.

Miljøstyrelsen (MST) udarbejder på vegne af Naturstyrelsen kvalitetskriterier for kemikalier i vandsøjlen (vandkvalitetskriterium), i sediment og i dyr og planter (biota).

Naturstyrelsen bruger kvalitetskriterierne som det faglige grundlag til at kunne fastsætte miljøkvalitetskrav, hvorved der forstås den endelige koncentration af et bestemt forurenende stof i vand, sediment eller biota, som ikke må overskrides af hensyn til beskyttelsen af miljøet og menneskers sundhed.

Metodikken, der anvendes til udarbejdelse af miljøkvalitetskrav er harmoniseret i EU og baserer sig på vandrammedirektivet (EU 2000), EU's vejledning til risikovurdering ("TGD") (EU 2003), EU's vejledning til fastsættelse af kvalitetskriterier i vandmiljøet (EU 2011) og Miljøstyrelsens vejledning til fastsættelse af vandkvalitetskriterier (Miljøstyrelsen 2004).

Den sidste litteratursøgning er foretaget november 2015.

English Summary and conclusions

Environmental Quality Standards for FOE-oxalate

Available ecotoxicity data is EC₅₀ or LC₅₀ values for *Cyprinodon variegatus*, *Acartia tonsa* and *Skeletonema costatum*. For the alga there is as well a NOEC value.

There is no information on effects on humans, mammals and birds, and as log K_{ow} and the estimated K_{oc} are 0.8 and 2.1-10, respectively, no EQS for sediment, EQS for biota or EQS for human health have been derived.

For derivation of EQS_{freshwater} and EQS_{saltwater} an assessment factor of 1000 and 10000 respectively has been applied to the lowest E(L)C₅₀ value.

For derivation of the maximal accepted concentrations, MAC_{freshwater} and MAC_{saltwater}, an assessment factor of 100 and 1000 respectively has been applied to the lowest E(L)C₅₀ value.

$$\text{EQS}_{\text{freshwater}} = 4750 \text{ mg/l} : 1000 = 4.75 \text{ mg/l}$$

$$\text{EQS}_{\text{saltwater}} = 4750 \text{ mg/l} : 10000 = 0.475 \text{ mg/l}$$

$$\text{MAC}_{\text{freshwater}} = 4750 \text{ mg/l} : 100 = 47.5 \text{ mg/l}$$

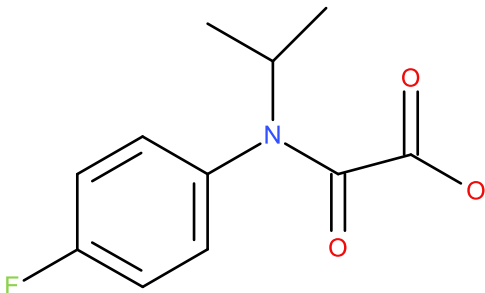
$$\text{MAC}_{\text{saltwater}} = 4750 \text{ mg/l} : 1000 = 4.75 \text{ mg/l}$$

1 Indledning

Identiteten af FOE-oxalat fremgår af tabel 1.1.

Stoffet er et mellemprodukt i produktion af andre stoffer.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	[(4-Fluorophenyl)(isopropyl)amino](oxo)acetic acid
Strukturformel	
CAS nr.	201668-31-7
EINECS nr.	
Kemisk formel	C ₁₁ H ₁₂ FN ₁ O ₃
SMILES	<chem>c1cc(N(C(=O)C(=O)O)C(C)C)ccc1F</chem>

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for FOE-oxalat fremgår af tabel 2.1.

De meget lave K_{oc} og $\log K_{ow}$ værdier og den meget store opløselighed i vand betyder at stoffet helt overvejende vil fordeles i vand og at bioakkumuleringspotentialet efter alt at dømme er lille.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for FOE-oxalat

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	225,22 ¹	EPIWIN QSAR program
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	240	MPBPWIN 1.43 i EPIWIN
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	361,4	MPBPWIN 1.43 i EPIWIN
Damptryk, P_v (Pa)		
Henry's konstant, H ($\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)	$1,16\cdot 10^{-6}$	HENRYWIN 3.20 i EPIWIN
Vandopløselighed, S_w ($\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	1000	OPUS 2014
Dissociationskonstant, $\text{p}K_a$		
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	0,8	KOWWIN 1.68 i EPIWIN
K_{oc} ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)	10	KOCWIN i EPIWIN: Udfra "Molecular Connectivity Index"
	2,1	Udfra $\log K_{ow}$

¹Estimeret

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

QSAR programmet BIOWIN 4.10 i EPIWIN pakken giver følgende forudsigelser:

```
Biowin1 (Linear Model Prediction)      : Does Not Biodegrade Fast
Biowin2 (Non-Linear Model Prediction): Does Not Biodegrade Fast
Biowin3 (Ultimate Biodegradation Timeframe): Weeks-Months
Biowin4 (Primary Biodegradation Timeframe): Days
Biowin5 (MITI Linear Model Prediction)  : Not Readily Degradable
Biowin6 (MITI Non-Linear Model Prediction): Not Readily Degradable
Biowin7 (Anaerobic Model Prediction): Does Not Biodegrade Fast
Ready Biodegradability Prediction: NO
```

Stoffet betragtes således som ikke let nedbrydeligt.

3.2 Bioakkumulering

Log $K_{ow} = 0,8$ og stoffet betragtes ikke som bioakkumulerende

3.3 Naturlig forekomst

Ingen oplysninger

4 Giftighedsdata

4.1 Giftighed over for vandlevende organismer

Effektkoncentrationer over for vandlevende organismer er sammenstillet i tabel 4.1.

Tabel 4.1. Giftighed over for vandlevende organismer.

Art	Varighed, timer	EC ₅₀ el. LC ₅₀ g/l	NOEC g/l	Reference
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96	>5		OPUS 2014a
<i>Acartia tonsa</i>	48	4,747		OPUS 2014b
<i>Skeletonema costatum</i>	72	6,285	1,82	OPUS 2014c

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Ingen oplysninger. Med den lave K_{oc} værdi og høje opløselighed forventes stoffet ikke at bindes i sediment.

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Ingen oplysninger. Med den lave log K_{ow} værdi forventes det ikke, at der vil ske en akkumulering i fødekæden.

4.4 Giftighed over for mennesker

Ingen oplysninger. Med den lave log K_{ow} værdi forventes det ikke, at der vil ske en akkumulering i fødekæden, og at stoffet ikke vil bindes i fisk og skaldyr.

5 Andre effekter

Ingen oplysninger

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der haves EC_{50} eller LC_{50} værdier for en art fisk, krebsdyr og alge samt en NOEC for algen.

Jævnfør vejledningerne (Miljøstyrelsen 2004 og EU 2011) beregnes VKK ved at bruge en usikkerhedsfaktor på 1000 og 10000 på laveste E(L) C_{50} for henholdsvis fersk- og saltvand.

Laveste EC_{50} er 4747 mg/l for krebsdyret *A. tonsa*.

VKK bliver således $4747 \text{ mg/l} : 1000 = 4,75 \text{ mg/l}$ og $4747 \text{ mg/l} : 10000 = 0,475 \text{ mg/l}$ for henholdsvis fersk- og saltvand

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Jævnfør vejledningerne (Miljøstyrelsen 2004 og EU 2011) beregnes KVKK ved at bruge en usikkerhedsfaktor på 100 og 1000 på laveste E(L) C_{50} for henholdsvis fersk- og saltvand.

KVKK bliver således $4747 \text{ mg/l} : 100 = 47,5 \text{ mg/l}$ og $4747 \text{ mg/l} : 1000 = 4,75 \text{ mg/l}$ for henholdsvis fersk- og saltvand

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

De skønnede K_{oc} og $\log K_{ow}$ værdier er meget lave og væsentligt under tærskelværdien for at udarbejde et SKK ($K_{oc} \geq 1000$ eller $\log K_{ow} \geq 3$) og stoffet forventes ikke at bindes i sediment. Der beregnes ikke et SKK.

6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Den skønnede $\log K_{ow}$ værdi er meget lav og væsentligt under tærskelværdien for at udarbejde et BKK ($\log K_{ow} \geq 3$) og stoffet forventes ikke at bioakkumulere. Der beregnes ikke et BKK.

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Den skønnede $\log K_{ow}$ værdi er meget lav og stoffet forventes ikke at bioakkumulere i fisk og skaldyr. Der beregnes ikke et HKK.

7 Konklusion

$$\text{VKK}_{\text{ferskvand}} = 4,75 \text{ mg/l}$$

$$\text{VKK}_{\text{saltvand}} = 0,475 \text{ mg/l}$$

$$\text{KVKK}_{\text{ferskvand}} = 47,5 \text{ mg/l}$$

$$\text{VKK}_{\text{saltvand}} = 4,75 \text{ mg/l}$$

8 Referencer

EU 2000. Europa-Parlamentets og Rådets Direktiv 2000/60/EF om fastsættelse af en ramme for fællesskabets vandpolitiske foranstaltninger af 23. oktober 2000.

EU 2003. Technical Guidance Document on Risk Assessment in support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for new notified substances, Commission Regulation (EC) No 1488/94 on Risk Assessment for existing substances, and Directive 98/8/EC of the European Parliament and of the Council concerning the placing of biocidal products on the market.

EU 2011. Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). Guidance Document No. 27. Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards.

Miljøstyrelsen 2004. Principper for fastsættelse af vandkvalitetskriterier for stoffer i overfladevand. Vejledning fra Miljøstyrelsen nr. 4, 2004.

OPUS 2014 a: Assessment of the aquatic-phase toxicity of FOE-oxalate to the marine fish *Cyprinodon variegatus* (OSPAR Limit test). Opus Project No: P10867, Study No: 1949b-22

OPUS 2014 b: Assessment of the toxicity (48h LC50) of FOE-oxalate to the marine copepod *Acartia tonsa*. Opus Project No: P10867, Study No: 1949b-1

OPUS 2014 c: Assessment of the toxicity (72h EC50) of FOE-oxalate to the marine unicellular algae *Skeletonema costatum* Opus Study No: 1949b-3, Project No: P10867