

Pentachlorethan
(CAS No. 76-01-7)
Pentalin

Vandkvalitetskriterier:

VKK_{ferskvand} = 41 µg/l

VKK_{saltvand} = 4,1 µg/l

KVKK = 47 µg/l

Summary

Water quality standards (WQS) for pentachloroethane were derived as described in the report from the Danish EPA: "Principper for fastsættelse af vandkvalitetskriterier for stoffer i overfladevand" [Principles for establishment of Water Quality Standards for substances in surface waters] (Miljøstyrelsen, 2004). The available data included studies from short-term studies as well as long-term studies species from three trophic levels.

The lowest effect concentration was 0.41 mg/L (NOEC, crustaceans). Assessment factors of 10 (freshwater) and 100 (marine waters) are used resulting in PNEC (freshwater) of 41 µg/L and PNEC (marine waters) of 4.1 µg/L. Pentachloroethane was not readily biodegradable and not bioaccumulative. Therefore, no other considerations are relevant for derivation of the water quality standards, which are set to be equal to the PNEC values.

A Maximum Acceptable Concentration (MAC) was derived on the basis of the lowest E/LC₅₀-value (4.7 mg/L) and an assessment factor of 100 (EU, 2003).

Water Quality Standards for pentachloroethane:

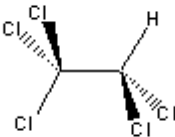
Freshwater: WQS = 41 µg/L

Marine waters: WQS = 4.1 µg/L

MAC: WQS = 47 µg/L

1 STRUKTUR, EGENSKABER OG FOREKOMST

Tabel 1.1 Fysisk-kemiske etc. egenskaber for pentachlorethan
Physico-chemical etc. properties of pentachloroethane

CAS-nr. / CAS No.	76-01-7
Struktur / Structure	
Synonymer / Synonyms	Pentalin; ethane pentachloride
Klassificering / Classification	Carc3;R40 T;R48/23 N;R51/53 ¹
Molekylær formel / Empirical formula	C ₂ HCl ₅ ²
Molvægt / Molar weight	202,3 g/mol ^{2,4}
Vandopløselighed / Water solubility (25°C)	480 mg/l ³
Damptryk / Vapour pressure (25°C)	467 Pa ³
Octanol-vand fordelingskoefficient/ Log K _{ow}	3,22 ^{3,4}

- 1 Miljøministeriet (2003)
- 2 Chemfinder (2003)
- 3 Syracuse (2000)
- 4 Verschuere (1997)
- 5 N-Class (2003)

Der er ikke fundet oplysninger om eventuel naturlig forekomst af pentachlorethan.

Pentachlorethan anvendes som opløsningsmiddel for olie og fedt i metalrensning og – affedtning (Verschuere, 1997).

Der er ikke fundet oplysninger om målte koncentrationer i vandmiljøet af pentachlorethan.

2 GIFTIGHED

2.1 Giftighed over for mennesker

Pentachlorethan er klassificeret med carc3;R40 (Miljøministeriet, 2003). Der foreligger ikke oplysninger om, hvorvidt stoffet har hormonforstyrrende egenskaber. Pentachlorethan er ikke opført på EU's liste over stoffer med registrerede hormonforstyrrende egenskaber (Miljøstyrelsen, 2003).

2.2 Giftighed over for pattedyr og fugle

Det er ikke muligt at beregne PNEC_{sec,pois.w} og PNEC_{hbw} for stoffet, idet der ikke er fundet ADI/TDI værdier eller oplysninger om kronisk giftighed over for pattedyr/fugle ved indtag via føde.

2.3 Giftighed over for vandorganismer

Der foreligger resultater af flere studier af pentachlorethan med fisk, krebsdyr og alger, hvoraf enkelte er fra standardiserede test.

Alle studier med pentachlorethan er publiceret i internationale tidsskrifter. Der foreligger toksicitetsdata fra test med organismer fra alle tre trofiske niveauer.

Tabel 2.1 Økotoksikologiske data for pentachlorethan (76-01-7)
Ecotoxicity data for pentachloroethane (76-01-7)

Systematisk gruppe / <i>Taxonomic group</i>	Parameter, effektmål / <i>End point</i>	Eksponeringstid / <i>Exposure time</i>	Resultat / <i>Result</i> [mg/l]	Antal studier / <i>Number of studies</i>
Alger / Algae (<i>Selenastrum capricornutum</i>)	EC ₅₀ (vækst)	72 h	87,6 ¹	1 (Nominel)
Alger / Algae (<i>Selenastrum capricornutum</i>)	NOEC (vækst)	96 h	10 ¹	1 (Nominel)
Alger / Algae (<i>Champia parvula</i>)	MATC (reproduktion)	11-14 d	1,3 ⁹ (0,92)*	1 (Nominel)
Krebsdyr / Crustacea (<i>Daphnia magna</i>)	EC ₅₀ (immobilitet)	48 h	4,7-6,9 ²	2 (Målt)
Krebsdyr / Crustacea (<i>Daphnia magna</i>)	LC ₅₀	48 h	7,3-8,0 ²	2 (Målt)
Krebsdyr / Crustacea (<i>Mysidopsis bahia</i>)	MATC (livscyklus)	-	0,58¹⁰ (0,41)*	1
Fisk / Fish (<i>Cyprinodon variegatus</i>)	LC ₅₀	96 h	116 ^{3,7}	1 (Nominel)
Fisk / Fish (<i>Pimephales promelas</i>)	LC ₅₀	96 h	5,7-7,5 ^{4,5,6}	3 (Målt)
Fisk / Fish (<i>Oncorhynchus mykiss</i>)	MATC	32 d	0,9-1,4 ⁸ (0,64-0,99)*	1 (Målt)

h: Hours (timer)

*: MATC/ $\sqrt{2}$ = NOEC (EU, 2003). Tal i parentes = beregnet NOEC

1 US EPA (1978) citeret i US EPA (2003)

2 Richter et al. (1983) citeret i US EPA (2003)

3 Heitmuller et al. (1981) citeret i US EPA (2003)

4 Walbridge et al. (1983) citeret i US EPA (2003)

5 Geiger et al. (1985) citeret i US EPA (2003)

6 Brooke (1987) citeret i US EPA (2003)

7 RIVM (1999)

8 Ahmad et al. (1984) citeret i US EPA (2003)

9 Thursby et al. (1985) citeret i US EPA (2003)

10 Suter & Rosen (1988) - oprindelig et studie fra EPA 1980. Citeret i Verschueren (1997)

Der ser ikke ud til at være forskel i følsomheden hos krebsdyr og fisk, som er de mest følsomme grupper. Den laveste værdi er MATC-værdien på 0,58 mg/l, der stammer fra et livscyklusstudie med krebsdyr.

Der foreligger kun en NOEC-værdi (96 timer for alger på 10 mg/l), men desuden foreligger der 3 MATC-værdier fra studier med alger, krebsdyr og fisk. MATC kan omregnes til NOEC ved at dividere MATC-værdien med $\sqrt{2}$ (EU

, 2003). De omregnede NOEC-værdier er angivet i tabel 2.1 i parentes under MATC-værdien. De beregnede NOEC-værdier bevirker, at der er NOEC-værdier fra længerevarende test for tre trofiske niveauer. Der er resultater fra flere studier med såvel krebsdyr som fisk, der ligger på samme niveau og derfor anses for at kunne bekræfte hinanden. Krebsdyr er den mest følsomme organismegruppe og den laveste beregnede NOEC-værdi for krebsdyr på 0,41 mg/l er anvendt som grundlag for vandkvalitetskriteriet. Den udslagsgivende NOEC koncentrationen på 0,41 mg/l, som er refereret i Suter og Rosen (1988) stammer fra en MATC-værdi (0,58 mg/l). Værdien stammer fra et forsøg med det marine krebsdyr *Mysidopsis bahia*. Det har ikke været muligt at fremskaffe originalstudiet, idet den udsalgsgivende reference refererer til udtræk fra Aquire databasen fra 1980. Det pågældende studie findes i dag ikke i databasen. Studiet med regnbueørred (Ahmad, N., et al, 1984) er desuden gennemgået og vurderes at være et kvalitetsstudie. Der er således resultater fra flere studier, der ligger på samme niveau og derfor anses for at kunne bekræfte hinanden. Studiet med *Mysidopsis bahia* vurderes derfor at være et kvalitetsstudie og er derfor anvendeligt som grundlag for vandkvalitetskriteriet.

3 BIOAKKUMULERING

Der er kun fundet enkelte eksperimentelle data for bioakkumulering af pentachlorethan. I forsøg fra 1980 og 1982 med fisk er der fundet BCF-værdier på 60 og 67 (Verschueren, 1997 & US EPA, 2003). Pentachlorethan har en log K_{ow} på 3,2. På den baggrund vurderes pentachlorethan at have et mindre potentiale for bioakkumulering.

4 NEDBRYDELIGHED

Der er ikke fundet data for nedbrydelighed af pentachlorethan. Estimatet af stoffets nedbrydelighed fra Syracuse (2000) viser, at pentachlorethan sandsynligvis ikke er let nedbrydeligt. Pentachlorethan er desuden klassificeret med N;R51/53. Det formodes på den baggrund, at stoffet ikke er let nedbrydeligt i vandmiljøet.

5 LUGT OG SMAG

Der er ikke fundet oplysninger om stoffets afgivelse af lugt og/eller smag til levende organismer i vandmiljøet.

6 FORSLAG TIL VANDKVALITETSKRITERIE

Vandkvalitetskriterierne er fastsat i overensstemmelse med Miljøstyrelsens vejledning (Miljøstyrelsen 2004).

Som grundlag for vandkvalitetskriteriet beregnes først en PNEC-værdi som beskrevet i "Principper for fastsættelse af vandkvalitetskriterier for stoffer i overfladevand" (Miljøstyrelsen, 2004). Datagrundlaget herfor er NOEC-værdier og omregnede MATC-værdier fra længerevarende test med alge, krebsdyr og fisk, hvor 0,41 mg/l for krebsdyr er

laveste værdi. Med anvendelse af en usikkerhedsfaktor på henholdsvis 10 og 100 for fersk- og saltvand bliver PNEC-værdien 0,041 mg/l for ferskvand og 0,0041 mg/l for saltvand.

Pentachlorethan er klassificeret med carcinogene egenskaber, men der foreligger ikke oplysninger om stoffets eventuelle hormonforstyrrende egenskaber. Pentachlorethan anses ikke for at være let nedbrydeligt, men det anses ikke for at være meget bioakkumulerbart i vandmiljøet. Det vurderes ikke nødvendigt at anvende yderligere usikkerhedsfaktorer på den baggrund.

Til beregning af korttidsvandkvalitetskriteriet bruges usikkerhedsfaktor 100 på laveste EC50 (4,7 mg/l).

På den baggrund foreslås følgende vandkvalitetskriterier for pentachlorethan.

$$\text{VKK, ferskvand} = 410 \mu\text{g/l} : 10 = 41 \mu\text{g/l}$$

$$\text{VKK, saltvand} = 410 \mu\text{g/l} : 100 = 4,1 \mu\text{g/l}$$

$$\text{KVKK} = 4700 \mu\text{g/l} : 100 = 47 \mu\text{g/l}$$

7 REFERENCER

Ahmad, N., D. Benoit, L. Brooke, D. Call, A. Carlson, D. Defoe, J. Huot, A. Moriarity, J. Richter & P. Shubat. (1984). Aquatic Toxicity Tests to Characterize the Hazard of Volatile Organic Chemicals in Water: A Toxicity Data Summary--Parts I and II. EPA 600/3-84-009, U.S.EPA, MN :103 p. (Author Communication Used) (Publ in Part As 11227, 15981, 10448, 12124, 12123, 15301). Citeret i US EPA (2003).

Brooke, L. (1987). Report of the Flow-Through and Static Acute Test Comparisons with Fathead Minnows and Acute Tests with an Amphipod and a Cladoceran. Center for Lake Superior Environ.Stud., Univ.of Wisconsin-Superior, Superior, WI :24. Citeret i US EPA (2003).

Chemfinder (2003) On-line database (okt.-dec. 2003):
<http://www.chemfinder.com/cgi-win/cfserver.exe/>

EU (2003). Technical Guidance Document on Risk Assessment (TGD). EC Joint Research Centre, European Chemicals Bureau. EUR 20418 EN/2.

Geiger, D.L., C.E. Northcott, D.J. Call & L.T. Brooke (1985). Acute Toxicities of Organic Chemicals to Fathead Minnows (*Pimephales promelas*), Vol. 2. Center for Lake Superior Environmental Stud., Univ. of Wisconsin-Superior, Superior, WI I:326. Citeret i US EPA (2003).

Heitmuller, P.T., T.A. Hollister & P.R. Parrish (1981). Acute Toxicity of 54 Industrial Chemicals to Sheepshead Minnows (*Cyprinodon variegatus*). Bull.Environ. Contam.Toxicol. 27(5):596-604 (OECDG Data File). Citeret i US EPA (2003).

Miljøministeriet (2003). Online opdatering af Bekendtgørelse nr. 439 af 3. juni 2002. Listen over farlige stoffer 2003. Miljøministeriet, Miljøstyrelsen. www.mst.dk

Miljøstyrelsen (2004). Principper for fastsættelse af vandkvalitetskriterier for stoffer i overfladevand, Vejledning fra Miljøstyrelsen Nr. 4 2004.

Miljøstyrelsen (2003). EU's liste over 118 stoffer, der anses for at være hormonforstyrrende eller potentielt hormonforstyrrende. Online. www.mst.dk.

N-Class (2003). Den Nordiske klassificeringsdatabase. On-line på: www.kemi.se (okt.-dec. 2003).

Richter, J.E., S.F. Peterson & C.F. Kleiner (1983). Acute and Chronic Toxicity of Some Chlorinated Benzenes, Chlorinated Ethanes, and Tetrachloroethylene to *Daphnia magna*. Arch.Environ.Contam.Toxicol. 12(6):679-684 (OECDG Data File). Citeret i US EPA (2003).

RIVM (1999). Environmental risk limits in the Netherlands. National Institute of Public Health and the environment.

Suter, G. W. & A.E. Rosen (1988). Comparative toxicity for risk assessment of marine fishes and crustaceans. Environ. Sci. Technol., 22(5), 1988. Citeret i Verschueren (1997).

Syracuse (2000). EPIwin version 3.10 US EPA (on-line) <http://www.epa.gov/oppt/exposure/docs/episuitedl.htm>.

Thursby, G.B., R.L. Steele & M.E. Kane (1985). Effect of Organic Chemicals on Growth and Reproduction in the Marine Red Alga *Champia parvula*. Environ.Toxicol.Chem. 4(6):797-805. Citeret i US EPA (2003).

US EPA (2003). Online database (okt.-dec. 2003): <http://www.epa.gov/ecotox/>

US EPA (1978). U.S.Environmental Protection Agency (1978). In-Depth Studies on Health and Environmental Impact of Selected Water Pollutants. Contract No.68-01-4646, US EPA: 9 p. Citeret i US EPA (2003).

Verschueren, K. (1997). Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals. 3. ed. Van Nostrand Reinhold Company.

Walbridge, C.T., J.T. Fiandt, G.L. Phipps & G.W. Holcombe (1983). Acute Toxicity of Ten Chlorinated Aliphatic Hydrocarbons to the Fathead Minnow (*Pimephales promelas*). Arch.Environ.Contam.Toxicol. 12(6):661-666 (OECDG Data File). Citeret i US EPA (2003).