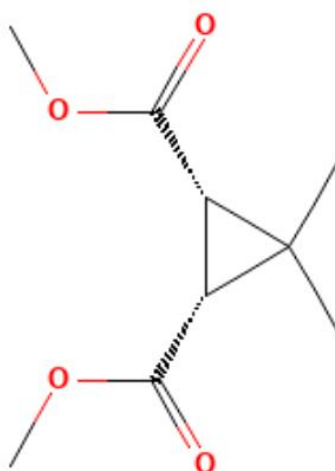


Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

Biocartoldisyredimethylester CAS nr. 20315-30-4



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	14,6 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	1,46 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	146 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	14,6 µg/l
Sedimentkvalitetskriterium	SKK _{ferskvand}	Ikke beregnet
Sedimentkvalitetskriterium	SKK _{saltvand}	Ikke beregnet
Biota-kvalitetskriterium, sekundær forgiftning	BKK _{sek.forgiftn.}	Ikke beregnet
Biota-kvalitetskriterium, humant konsum	HKK	Ikke beregnet

December 2023

Indholdsfortegnelse

FORORD	3
ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS	4
1 INDLEDNING	6
2 FYSISK KEMISKE EGENSKABER	8
3 SKÆBNE I MILJØET	9
3.1 NEDBRYDELIGHED	9
3.2 BIOAKKUMULERING	9
3.3 NATURLIG FOREKOMST	9
4 TOKSICITETSDATA	10
4.1 TOKSICITET OVER FOR VANDLEVENDE ORGANISMER	10
4.2 TOKSICITET OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	10
4.3 TOKSICITET OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	10
4.4 TOKSICITET OVER FOR MENNESKER	10
5 ANDRE EFFEKTER	11
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	12
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	12
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	12
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	13
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA, SEKUNDÆR FORGIFTNING (BKK _{SEK.FORGIFTN.})	13
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMANT KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	13
6.6 VANDKVALITETSKRITERIUM BASERET PÅ BKK _{SEK.FORGIFTN.} OG HKK	13
7 KONKLUSION	14
8 REFERENCER	15
BILAG A TOKSICITETSDATA	16
BILAG B OVERSIGT OVER CAS NR. OG STEREOISOMERE	18

Forord

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

Miljøstyrelsen (MST) udarbejder kvalitetskriterier for kemikalier i vandsøjlen, i sediment, i dyr og planter (biota) og for humant konsum.

Miljøstyrelsen 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 fastsættelse af kvalitetskriterier i vandmiljøet (EU, 2018) og Miljøstyrelsens vejledning til fastsættelse af vandkvalitetskriterier (Miljøstyrelsen, 2004). Metodikken er endvidere i overensstemmelse med EU's vejledning til risikovurdering under REACH forordningen (EU, 2008).

Den sidste litteratursøgning er foretaget den 3. juli 2023.

English Summary and conclusions

Derivation of environmental quality standards (EQS) for the aquatic environment is following the EU Guidance Document No. 27. Technical Guidance Document (TGD) for Deriving Environmental Quality Standards (EU, 2018).

Dimethyl (1R,2S)-3,3-dimethylcyclopropane-1,2-dicarboxylate (CAS no. 20315-30-4) has been used as an intermediate in chemical synthesis of enzymes. Overall, limited information is available about the substance. The substance displays two chiral centres and several CAS no. are available for the substance, some covering only a specific isomer, while others cover several isomers. All stereoisomers and CAS no. have been included in the literature search for this substance.

AA-EQS for water

Data for freshwater species have not been identified. Available data for marine species are used to derive the EQS for both fresh- and saltwater.

Chronic data were only available for algae, and therefore acute data were used for calculation of the AA-EQS.

Acute data were available for three species (*Skeletonema costatum*, *Acartia tonsa* and *Scophthaimus maximus*) representing three taxonomic groups (algae, crustacean, fish). The lowest EC₅₀ value was found for *S. costatum* at 14.6 mg/l for effects on growth.

An assessment factor (AF) of 1,000 and the acute EC₅₀ of 14.6 mg/l for *S. costatum* were chosen for the calculation of AA-EQS for freshwater:

$$\begin{aligned}\text{AA-EQS}_{\text{freshwater}} &= \text{EC}_{50} / \text{AF} \\ &= 14.6 \text{ mg/l} / 1,000 \\ &= \mathbf{14.6 \mu\text{g/l}}\end{aligned}$$

Correspondingly, an AF of 10,000 is applied for AA-EQS for saltwater:

$$\begin{aligned}\text{AA-EQS}_{\text{saltwater}} &= 14.6 \text{ mg/l} / 10,000 \\ &= \mathbf{1.46 \mu\text{g/l}}\end{aligned}$$

MAC-EQS for water

An AF of 100 and the acute EC₅₀ of 14.6 mg/l for *S. costatum* were chosen for the calculation of MAC-EQS for freshwater:

$$\begin{aligned}\text{MAC-EQS}_{\text{freshwater}} &= \text{EC}_{50} / \text{AF} \\ &= 14.6 \text{ mg/l} / 100 \\ &= \mathbf{146 \mu\text{g/l}}\end{aligned}$$

Correspondingly, an AF of 1,000 is applied for MAC-EQS for saltwater:

$$\begin{aligned}\text{MAC-EQS}_{\text{saltwater}} &= 14.6 \text{ mg/l} / 1,000 \\ &= \mathbf{14.6 \mu\text{g/l}}\end{aligned}$$

QS for sediment

The QSAR-estimated values are $K_{oc} < 1,000$ and $\log K_{ow} < 3$, and no sediment toxicity data were available. Therefore, no sediment QS was derived.

QS for secondary poisoning

The QSAR-estimated values are $\log K_{ow} < 3$ and $BCF < 100$. Data indicating high intrinsic toxicity were not available. Therefore, no QS for secondary poisoning was derived.

QS for human health

Due to lack of toxicity data and the estimated low potential for bioaccumulation, no QS for human health was derived.

In conclusion, the following EQS for the aquatic environment have been derived for dimethyl (1R,2S)-3,3-dimethylcyclopropane-1,2-dicarboxylate:

$$\begin{aligned}\text{AA-EQS}_{\text{freshwater}} &= 14.6 \mu\text{g/l} \\ \text{AA-EQS}_{\text{saltwater}} &= 1.46 \mu\text{g/l} \\ \text{MAC-EQS}_{\text{freshwater}} &= 146 \mu\text{g/l} \\ \text{MAC-EQS}_{\text{saltwater}} &= 14.6 \mu\text{g/l}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{QS}_{\text{sediment, freshwater}} &= \text{Not derived} \\ \text{QS}_{\text{sediment, saltwater}} &= \text{Not derived}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{QS}_{\text{sec. pois.}} &= \text{Not derived} \\ \text{QS}_{\text{human health}} &= \text{Not derived}\end{aligned}$$

1 Indledning

Identiteten af biocartoldisyredimethylester fremgår af Tabel 1.1.

Videnskabelig og grå litteratur om fysisk-kemiske egenskaber, økotoksikologiske og humantoksikologiske data blev søgt i forskellige databaser (herunder ECHA database, PubChem database, EuropePMC, GoogleScholar, US EPA Ecotox databasen, Danish QSAR database) og ved åben Google søgning under anvendelse af CAS nr. og navnene for stoffet.

Der er kun meget få oplysninger tilgængelige om stoffet.

Der er modtaget et økotoksikologisk studie (udarbejdet af DHI, 2004) og opfølgende information om stofidentifikation via Miljøstyrelsen.

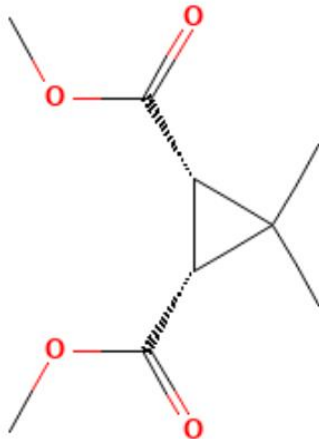
Derudover er der identificeret enkelte ældre publikationer om kemisk syntese af enzymer (f.eks. Sabbioni & Jones, 1987), hvori stoffet nævnes. Ellers er der ikke oplysninger om anvendelse eller mængder af stoffet.

Det bemærkes at stoffet har en række stereoisomere, fordi det besidder to asymmetriske kulstofatomer i cyclopropan strukturen, som hver især er bundet til fire forskellige grupper/atomer. Det betyder at biocartoldisyredimethylester kan forekomme i fire forskellige stereoisomer, som i princippet kan have forskellige egenskaber mht. biologisk aktivitet og toksiske effekter. Nogle stereoisomere har specifikke CAS numre, mens andre CAS numre dækker over flere stereoisomere. Strukturer og CAS numre for disse kan ses i Bilag B, som er downloadet fra CAS Scifinder¹ ved opslag med tegning af struktur uden specifik stereokemi (dvs. simpel stregtegning).

Tabel 1.1. Identitet af biocartoldisyredimethylester (oplysninger fra PubChem database, medmindre andet er angivet)

IUPAC navn	dimethyl (1R,2S)-3,3-dimethylcyclopropane-1,2-dicarboxylate
Andre navne	DTXSID60512679; (1R,cis)-Caronsyre, dimethylester; cis-Caronsyre, dimethylester; 1,2-Cyclopropanedicarboxylic acid, 3,3-dimethyl-, dimethyl ester, (1R,2S)-rel- (9CI); 1,2-Cyclopropanedicarboxylic acid, 3,3-dimethyl-, dimethyl ester, cis- (8CI); rel-1,2-Dimethyl (1R,2S)-3,3-dimethyl-1,2-cyclopropanedicarboxylate (ACI)

¹ <https://www.cas.org/solutions/cas-scifinder-discovery-platform/cas-scifinder-n>

Strukturformel	
CAS nr.	20315-30-4 Andre CAS nr. for stereoisomere (se også Bilag B): 16601-23-3 77406-65-6 86287-71-0 58383-34-9 2103114-39-0
EINECS nr.	Ikke tilgængelig på ECHAs database
Kemisk formel	$C_9H_{14}O_4$
SMILES	<chem>CC1(C(C1C(=O)OC)C(=O)OC)C</chem>
Harmoniseret klassificering	Ikke tilgængelig på ECHAs database
Selvklassificering	Ikke tilgængelig på ECHAs database

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for biocartoldisyredimethylester fremgår af Tabel 2.1. Der er ikke fundet eksperimentelle værdier. Data er estimerede vha. forskellige QSAR modeller som sammenfattet på CompTox Chemicals databasen.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for biocartoldisyredimethylester (CAS nr. 20315-30-4)

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	186,2	HSDB
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	6,9 (-35 – 48,8) ^a	CompTox Chemicals
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	220 (214 – 225) ^a	CompTox Chemicals
Damptryk, P_v (Pa)	8,9 (0,12 – 12,0) ^a	CompTox Chemicals
Henry's konstant, H ($\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)	0,467 ^a	CompTox Chemicals
Vandopløselighed, S_w ($\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	9,3 (1,5 – 26,8) ^a	CompTox Chemicals
Dissociationskonstant, pK_a	-	-
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	1,2 (0,9 – 1,7) ^a	CompTox Chemicals
Sediment/vand fordelingskoefficient, normaliseret til organisk karbon, K_{oc} ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)	45,7 ^a	CompTox Chemicals

^a Estimeret værdi

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

Eksperimentelle data om nedbrydning er ikke tilgængelige. Anvendelige QSAR-estimer om bionedbrydelighed eller abiotisk nedbrydning er ikke tilgængelige.

3.2 Bioakkumulering

Et QSAR estimat for biotransformation i fisk (K_m) på 0,105 dage er blevet beregnet (CompTox Chemicals, 2023).

Estimer fra to forskellige QSAR-modeller for biokoncentrationsfaktorer (BCF) er tilgængelige, hhv. BCF på 2,6 og 10,8 L/kg. Gennemsnitsværdien af disse to estimer er en BCF på 6,7.

En standard-biomagnificeringsfaktor på 1 kan anvendes for stoffer med $\log K_{ow} < 4,5$ jf. TGD (s. 168-169 i EU, 2018). EU-vejledningen (EU, 2018) angiver ikke en metode til at beregne BCF ud fra K_{ow} for stoffer med en $\log K_{ow} < 2$.

Overstående teoretisk beregnede værdier for BCF og $\log K_{ow}$ (Tabel 2.1) indikerer at stoffet ikke har potentiale for at bioakkumulere i vandlevende organismer ($BCF < 100$, $\log K_{ow} < 3$).

3.3 Naturlig forekomst

Der er ikke identificeret oplysninger om naturlig forekomst af biocartoldisyredimethylester.

4 Toksicitetsdata

4.1 Toksicitet over for vandlevende organismer

Effektkoncentrationer over for vandlevende organismer kan ses i Bilag A.

Der er modtaget et økotoxikologisk studie (udarbejdet af DHI, 2004) via Miljøstyrelsen, som indeholder akutte effektverdier for tre marine organismer (*Skeletonema costatum*, *Acartia tonsa* og *Scophthalmus maximus*) repræsenterende tre taksonomiske grupper; alger, krebsdyr og fisk.

Effektverdien fra 72-timers testen med *S. costatum* kan jf. vejledningen (EU, 2018) også anvendes som kronisk effektkoncentration.

Derudover er der ikke identificeret øvrige toksicitetsdata for vandlevende organismer.

4.2 Toksicitet over for sedimentlevende organismer

Der er ikke identificeret toksicitetsdata for sedimentlevende organismer.

4.3 Toksicitet over for pattedyr og fugle

Der er ikke identificeret toksicitetsdata for pattedyr og fugle.

4.4 Toksicitet over for mennesker

Der er ikke identificeret toksicitetsdata over for mennesker.

5 Andre effekter

Der er ikke identificeret oplysninger om andre relevante effekter.

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

Kvalitetskriterierne er fastsat i overensstemmelse med EU's Guidance Document no. 27: Technical Guidance Document (TGD) for Deriving Environmental Quality Standards (EU, 2018).

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der er ikke identificeret data for ferskvandsarter, hvorfor data for marine arter anvendes til udledning af VKK for både fersk- og saltvand. Kriterierne beregnes deterministisk vha. en usikkerhedsfaktor.

Jf. vejledningen (EU, 2018) kræves der som minimum akutte toksicitetsdata fra tre taksonomiske grupper ('basissættet'; fisk, invertebrater, fortrinsvis dafnier, og alger) eller én kronisk effektkoncentration for fisk eller dafnier for at kunne bestemme usikkerhedsfaktoren til beregning af $VKK_{\text{ferskvand}}$ (Tabel 3, s. 40 i EU, 2018). Kronisk data foreligger kun for alger, og derfor anvendes de akutte data til udledning af $VKK_{\text{ferskvand}}$.

Der anvendes en usikkerhedsfaktor (UF) på 1.000 på den laveste akutte effektkoncentration, EC_{50} på 14,6 mg/l for algen *Skeletonema costatum*, til beregning af $VKK_{\text{ferskvand}}$:

$$VKK_{\text{ferskvand}} = EC_{50} / UF = 14,6 \text{ mg/l} / 1.000 = 0,0146 \text{ mg/l} = 14,6 \text{ }\mu\text{g/l}$$

Til beregning af VKK_{saltvand} kræves der ligeledes som minimum akutte toksicitetsdata fra tre taksonomiske grupper ('basissættet') eller ét kronisk reproduktions- eller vækststudie for fisk eller krebsdyr for at kunne bestemme usikkerhedsfaktoren (Tabel 4, s. 49 i EU, 2018). Da der kun haves kronisk data for alger, anvendes de akutte data ligeledes til beregning af VKK_{saltvand} . Der anvendes en UF på 10.000 på EC_{50} -værdien på 14,6 mg/l og VKK_{saltvand} bliver således:

$$VKK_{\text{saltvand}} = EC_{50} / UF = 14,6 \text{ mg/l} / 10.000 = 0,00146 \text{ mg/l} = 1,46 \text{ }\mu\text{g/l}$$

Kun få data er tilgængelige for beregning af VKK, hvilket resulterer i anvendelsen af høje UF og dermed forholdsvis usikre og konservative VKK. UF ville kunne reduceres, hvis der udføres kroniske tests med fisk og krebsdyr.

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Jf. vejledningen (EU, 2018) kræves der som minimum akutte toksicitetsdata fra tre taksonomiske grupper ('basissættet') for at kunne bestemme usikkerhedsfaktoren til beregning af $KVKK_{\text{ferskvand}}$ (Tabel 5, s. 53 i EU, 2018). Der anvendes en UF på 100, og $KVKK_{\text{ferskvand}}$ beregnes således:

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = EC_{50} / UF = 14,6 \text{ mg/l} / 100 = 0,146 \text{ mg/l} = 146 \text{ }\mu\text{g/l}$$

På tilsvarende vis beregnes $KVKK_{\text{saltvand}}$ med en UF på 1.000 (jf. Tabel 6, s. 55 i EU, 2018):

$$\mathbf{KVKK_{saltvand} = EC_{50} / UF = 14,6 \text{ mg/l} / 1.000 = 0,0146 \text{ mg/l} = 14,6 \text{ }\mu\text{g/l}}$$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

De estimerede værdier for K_{oc} er < 1000 og $\log K_{ow} < 3$ (Tabel 2.1), og der foreligger ingen data for sedimenttoksicitet. Jf. vejledningen (EU, 2018, s. 19) er det derfor ikke relevant at udlede SKK.

6.4 Kvalitetskriterium for biota, sekundær forgiftning ($BKK_{sek.forgiftn.}$)

De estimerede værdier for $\log K_{ow}$ er < 3 og $BCF < 100$. Der foreligger ingen data, som indikerer høj toksicitet over for pattedyr og fugle. Jf. vejledningen (EU, 2018, s. 20) er det derfor ikke relevant at udlede $BKK_{sek.forgiftn.}$.

6.5 Kvalitetskriterium for humant konsum af vandlevende organismer (HKK)

Kvalitetskriterier for humant konsum skal jf. vejledningen (EU, 2018) beregnes, hvis forekomsten af stoffet medfører en sundhedsrisiko for mennesker igennem konsum af vandlevende organismer.

Der findes ingen harmoniseret eller anmeldt klassificering af biocartoldisyredimethylester. Det ringe estimerede bioakkumuleringspotentiale indikerer at stoffet ikke medfører en sundhedsrisiko for mennesker igennem konsum af vandlevende organismer. HKK udledes derfor ikke.

6.6 Vandkvalitetskriterium baseret på $BKK_{sek.forgiftn.}$ og HKK

Jævnfør TGD (EU, 2018) skal der laves en tilbageregning fra biotakvalitetskriterierne ($BKK_{sek.forgiftn.}$ og HKK) til en vandkoncentration, for at se om vandkvalitetskriteriet fastsat for direkte effekter, også beskytter for sekundær forgiftning gennem fødekæden, samt beskytter mod forgiftning ved humant konsum af fiskeriprodukter.

Beregning af et vandkvalitetskriterium baseret på $BKK_{sek.forgiftn.}$ og HKK er ikke relevant for biocartoldisyredimethylester.

7 Konklusion

Følgende kvalitetskriterier for vandmiljøet er udregnet for biocartoldisyredimethylester:

Vandkvalitetskriterium

VKK_{ferskvand} 14,6 µg/l

VKK_{saltvand} 1,46 µg/l

Korttidsvandkvalitetskriterium

KVKK_{ferskvand} 146 µg/l

KVKK_{saltvand} 14,6 µg/l

Sedimentkvalitetskriterium

SKK_{ferskvand} Ikke beregnet

SKK_{saltvand} Ikke beregnet

Biotakvalitetskriterium, sekundær forgiftning

BKK_{sek.forgiftn.} Ikke beregnet

Biotakvalitetskriterium, humant konsum

HKK Ikke beregnet

8 Referencer

CompTox Chemicals Dashboard Version 2.2.1 – May 2023. <https://comptox.epa.gov/dashboard/>. United States Environmental Protection Agency (03. juli 2023).

DHI (2004). Økotoksikologisk undersøgelse af biocartoldisyre dimethylester og fluorolacton. Projekt nr.: 52326-3.. Ikke publiceret.

ECHA database. Opslag på CAS nr. 20315-30-4. <https://echa.europa.eu/da/information-on-chemicals> (8. maj 2023).

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

EU (2008). ECHA: Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.10: Characterisation of dose [concentration]-response for environment (https://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r10_en.pdf/bb902be7-a503-4ab7-9036-d866b8ddce69)

EU (2018). Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). Guidance Document No. 27. Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards. (<https://circabc.europa.eu/sd/a/ba6810cd-e611-4f72-9902-f0d8867a2a6b/Guidance%20No%2027%20-%20Deriving%20Environmental%20Quality%20Standards%20-%20version%202018.pdf>)

HSDB, Hazardous Substances Data Bank (HSDB) (2023). Opslag på CAS nr. 20315-30-4. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/12907927#section=InChIKey> US National Library of Medicine (26. april 2023).

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

Sabbioni, G. & Jones, J. B. (1987). Enzymes in organic synthesis. 39. Preparations of chiral cyclic acid-esters and bicyclic lactones via stereoselective pig liver esterase catalyzed hydrolyses of cyclic meso diesters. <https://doi.org/10.1021/jo00229a024>. J. Org. Chem. 1987, 52, 20, 4565–4570.

US EPA (United States Environmental Protection Agency, 2023). ECOTOXicology knowledgebase. Opslag på Cas nr. 20315-30-4. <https://cfpub.epa.gov/ecotox/search.cfm> (26. april 2023).

Bilag A Toksicitetsdata

Toksicitet over for vandorganismer (EC_x, LC_x, NOEC, osv.)

Ferskvandsorganismer - ingen data

Saltvandsorganismer

Akut toksicitet

Organisme	Renhed	Testbetingelser	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Reference	Troværdighed (1-4)
Alger <i>Skeletonema costatum</i>	99,5%	28‰ salinitet, pH ~8, 18,5-19,5°C	Nej	72 timer	EC ₅₀ , væksthæmning	14,6	DHI, 2004	2
Krebsdyr <i>Acartia tonsa</i>	99,5%	33‰ salinitet, pH ~8, 20 ± 0,5°C, lys/mørke periode på 16:8 timer	Nej	48 timer	LC ₅₀ , dødelighed	205	DHI, 2004	2
<i>Acartia tonsa</i>	99,5%	33‰ salinitet, pH ~8, 20 ± 0,5°C, lys/mørke periode på 16:8 timer	Nej	24 timer	LC ₅₀ , dødelighed	470	DHI, 2004	2
Fisk <i>Scophthalmus maximus</i>	99,5%	33‰ salinitet, pH ~8, 13-14,5°C, lys/mørke periode på 12:12 timer	Nej	96 timer	LC ₅₀ , dødelighed	>100	DHI, 2004	2
<i>Scophthalmus maximus</i>	99,5%	33‰ salinitet, pH ~8, 13-14,5°C, lys/mørke periode på 12:12 timer	Nej	96 timer	LC ₁₀ , dødelighed	50-100	DHI, 2004	2

Saltvandsorganismer


Kronisk toksicitet

	Renhed	Testbetingelser	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Reference	Troværdighed (1-4)
Alger								
<i>Skeletonema costatum</i>	99,5%	28‰ salinitet, pH ~8, 18,5- 19,5°C	Nej	72 timer	EC ₁₀ , væksthæmning	6,7	DHI, 2004	2
<i>Skeletonema costatum</i>	99,5%	28‰ salinitet, pH ~8, 18,5- 19,5°C	Nej	72 timer	NOEC, væksthæmning	5,0	DHI, 2004	2

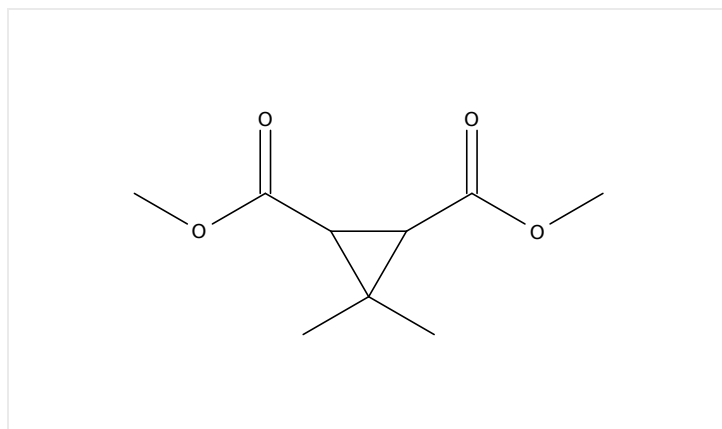
Bilag B Oversigt over CAS nr. og stereoisomere

Initiating Search

May 2, 2023, 11:36AM


 Substances:

Filtered By:



Structure Match: As Drawn

Search Tasks

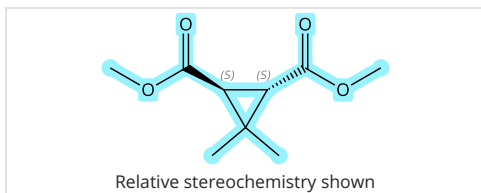
Task	Search Type	View
Exported: Returned Substance Results + Filters (6)	 Substances	View Results

Copyright © 2023 American Chemical Society (ACS). All Rights Reserved.

Internal use only. Redistribution is subject to the terms of your SciFinder[®] License Agreement and CAS information Use Policies.

Substances (6)[View in SciFinder[®]](#)

1

16601-23-3**C₉H₁₄O₄***re*-1,2-Dimethyl (1*R*,2*R*)-3,3-dimethyl-1,2-cyclopropanedicarboxylate 20

References

 25

Reactions

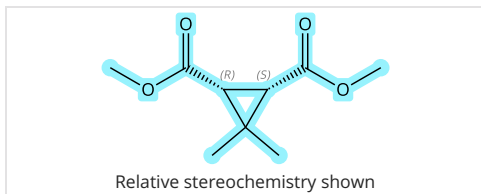
 5

Suppliers

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	186.21	-
Boiling Point (Experimental)	48-49 °C	Press: 10.05 Torr
Density (Predicted)	1.115±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr

[Experimental Properties | Spectra](#)

2

20315-30-4**C₉H₁₄O₄***re*-1,2-Dimethyl (1*R*,2*S*)-3,3-dimethyl-1,2-cyclopropanedicarboxylate 12

References

 12

Reactions

 1

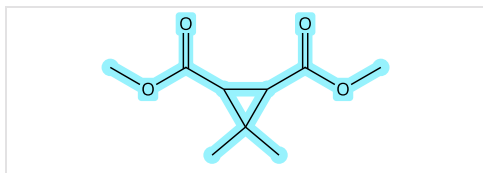
Supplier

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	186.21	-
Boiling Point (Predicted)	224.7±15.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.115±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr

[Spectra](#)

3

77406-65-6

 $C_9H_{14}O_4$

1,2-Dimethyl 3,3-dimethyl-1,2-cyclopropanedicarboxylate

 11
References

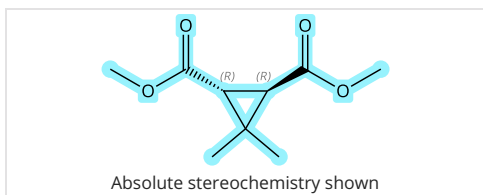
 20
Reactions

 6
Suppliers

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	186.21	-
Boiling Point (Experimental)	103-105 °C	Press: 13 Torr
Density (Predicted)	1.115±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
Experimental Properties		

4

86287-71-0

 $C_9H_{14}O_4$ 1,2-Dimethyl (1*R*,2*R*)-3,3-dimethyl-1,2-cyclopropanedicarboxylate
 4
References

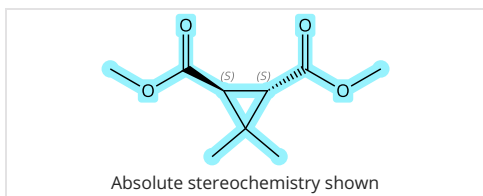
 4
Reactions

 1
Supplier

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	186.21	-
Boiling Point (Predicted)	224.7±15.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.115±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr

5

58383-34-9

 $C_9H_{14}O_4$ 1,2-Dimethyl (1*S*,2*S*)-3,3-dimethyl-1,2-cyclopropanedicarboxylate
 3
References

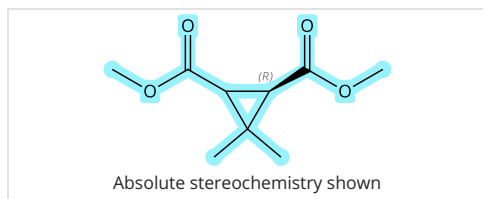
 2
Reactions

 0
Suppliers

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	186.21	-
Boiling Point (Predicted)	224.7±15.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.115±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
Spectra		

6

2103114-39-0

**C₉H₁₄O₄**1,2-Dimethyl (1*R*)-3,3-dimethyl-1,2-cycloprop
anedicarboxylate

0

References

0

Reactions

5

Suppliers

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	186.21	-
Boiling Point (Predicted)	224.7±15.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.115±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr

Copyright © 2023 American Chemical Society (ACS). All Rights Reserved.

Internal use only. Redistribution is subject to the terms of your SciFinder[®] License Agreement and CAS information Use Policies.