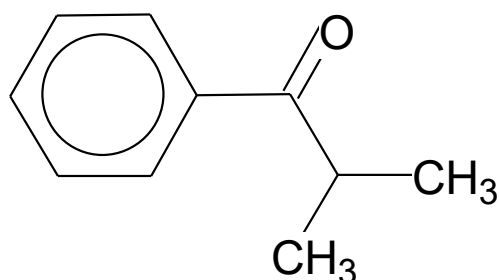


Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

Isobutyrophenon 611-70-1



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	13,2 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	1,32 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	132 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	13 µg/l

Indhold

FORORD	3
ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS	4
1 INDLEDNING	5
2 FYSISK KEMISKE EGENSKABER	6
3 SKÆBNE I MILJØET	7
3.1 NEDBRYDELIGHED	7
3.2 BIOAKKUMULERING	7
3.3 NATURLIG FOREKOMST	7
4 GIFTIGHEDSDATA	8
4.1 GIFTIGHED OVER FOR VANDLEVENDE ORGANISMER	8
4.2 GIFTIGHED OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	9
4.3 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	9
4.4 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	10
5 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	11
5.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	11
5.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	11
5.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	11
5.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	12
5.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	12
6 KONKLUSION	13
7 REFERENCER	14

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 2009) og Miljøstyrelsens vejledning til fastsættelse af vandkvalitetskriterier (Miljøstyrelsen 2004).

Den sidste litteratursøgning er foretaget januar 2011.

English Summary and conclusions

Environmental water quality standards (EQS) were derived for Isobutyrophenon (CAS No. 611-70-1) following guidelines from EU (2003; 2009) and the Danish EPA (Miljøstyrelsen 2004).

Isobutyrophenone was concluded to be borderline not readily biodegradable and have low to moderate potential for bioaccumulation.

The toxicity dataset for Isobutyrophenone is limited to acute studies for algae, crustaceans and fish from saltwater. (Q)SAR estimates and test data from analogous substances was in the same range as test results for Isobutyrophenone thus confirming the validity of these studies.

The lowest toxicity value was an acute LC₅₀ of 13.2 mg/l for *Scophthalmus maximus*. The dataset is limited but is precisely filling the minimum requirements for deriving an EQS. Hence large assessment factors of 1,000 for freshwater and 10,000 for saltwater are applied to the EC₅₀ for *S. costatum*. This yields a PNEC_{freshwater} of 13.2 µg/l and PNEC_{saltwater} of 1.31 µg/l.

A MAC was calculated from the LC₅₀ for *S. maximus* and an assessment factor of 100. Hence MAC is 132 µg/l.

The following water quality standards are derived for Isobutyrophenone:

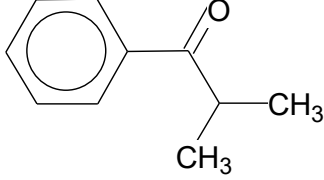
Water quality standard	EQS _{freshwater}	13.2 µg/l
Water quality standard	EQS _{saltwater}	1.32 µg/l
Maximum acceptable concentration	MAC _{freshwater}	132 µg/l
	MAC _{saltwater}	13 µg/l

1 Indledning

Identiteten af isobutyrophenon fremgår af tabel 1.1.

Der er ikke fundet informationer om anvendelse af stoffet.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	2-Methyl-1-phenylpropan-1-one
Strukturformel	 The image shows the chemical structure of 2-methyl-1-phenylpropan-1-one. It consists of a benzene ring attached to a carbonyl group (C=O). The carbonyl carbon is also bonded to a hydrogen atom and a CH(CH3)2 group. The two methyl groups are explicitly labeled as CH3.
CAS nr.	611-70-1
EINECS nr.	210-275-0
Kemisk formel	C ₁₀ H ₁₂ O
SMILES	<chem>c1(C(=O)C(C)C)ccccc1</chem>

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for Isobutyrophenon fremgår af tabel 2.1. Der er fundet eksperimentelle resultater for smeltepunkt, kogepunkt og log K_{ow}. De resterende data for fysisk kemiske egenskaber er modelleret med Epiweb 4.0.

Fordeling i miljøet er estimeret ved hjælp af McKay level III fugacitetsmodellering. Med udgangspunkt i ens og kontinuerlig udledning til vand, jord og luft angiver modellen følgende fordeling ved ligevægt:

Luft (6 %), vand (37 %), jord (57 %) og meget lidt i sediment.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for [stofnavn]

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M _w (g·mol ⁻¹)	148,21	
Smeltepunkt, T _m (°C)	-1,3	OECD (Q)SAR Application Toolbox
Kogepunkt, T _b (°C)	220	OECD (Q)SAR Application Toolbox
Damptryk, P _v (Pa)	17,5 ¹	Epiweb, 4.0
Henry's konstant, H (atm·m ³ ·mol ⁻¹)	1,73·10 ⁻⁵ ¹	Epiweb, 4.0
Vandopløselighed, S _w (mg·L ⁻¹)	360 ¹	Epiweb, 4.0
Dissociationskonstant, pK _a	-	
Octanol/vand fordelingskoefficient, log K _{ow}	2,73	OECD (Q)SAR Application Toolbox
Sediment/vand fordelingskoefficient, K _p (L·kg ⁻¹)	-	

¹Estimeret

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

Der er ikke fundet bionedbrydelighedsstudier for isobutyrophenon. De overordnede (Q)SAR forudsigelser er tvetydige idet BIOWIN (v.4.10) forudsiger, at stoffet er *ikke-let bionedbrydeligt*, mens modellerne i den danske (Q)SAR database forudsiger, at stoffet er *let bionedbrydeligt*. De underliggende modeller samt estimerede nedbrydningshastigheder i både BIOWIN og den danske (Q)SAR database peger dog på, at stoffet er borderline *let-ikke-let bionedbrydeligt*. Et chemostatforsøg viser, at isobutyrophenon nedbrydes >99 % i spildevand (Rapport 2010).

Der er fundet et bionedbrydningsstudie for strukturanalogen acetophenon (se tabel 4.3). Dette stof viste 64,7 % nedbrydning (målt som BOD) på 14 dage (OECD (Q)SAR Application Toolbox, v.2).

Den overordnede konklusion for isobutyrophenon er, at stoffet er borderline *ikke-let bionedbrydeligt*.

3.2 Bioakkumulering

Der er ikke fundet testdata for bioakkumulering af isobutyrophenon. Bioakkumuleringsestimater med BCFBAF (v3.0) angiver en BCF på 7,6 (regressionbaseret model) og 34 (Arnot-Gobas model med biotransformering). Sammenholdt med log Kow på 2,73 kan det konkluderes, at isobutyrophenon har et lavt til moderat potentiale for bioakkumulering.

3.3 Naturlig forekomst

Der er ikke fundet oplysninger om, at isobutyrophenon forekommer naturligt i miljøet.

4 Giftighedsdata

4.1 Giftighed over for vandlevende organismer

Der er fundet begrænsede informationer om giftigheden af isobutyrophenon over for vandlevende organismer. Datasættet, som fremgår af tabel 4.1, omfatter akutte forsøg med tre saltvandslevende arter fra tre forskellige højere taksonomiske grupper (alger, krebsdyr og fisk). Der er ingen kroniske studier, der kan belyse langtidseffekten af isobutyrophenon i vandmiljøet. Alle tre akutte tests er beskrevet i en upubliceret testprotokol fra DHI (2010). Testene er udført efter internationale retningslinjer/guidelines og der er foretaget analytiske målinger af testkoncentrationerne. De udførte forsøg vurderes at være troværdige uden restriktioner (Klimisch code 1) og egnede til fastsættelse af vandkvalitetskriterier.

Grundet det begrænsede datasæt er der indsamlet forudsigelser fra (Q)SAR modeller (Tabel 4.2). Forudsigelserne fra både danske (Q)SAR database og fra ECOSAR stemmer fint overens med testresultaterne for saltvandsorganismer.

Tabel 4.1. Akut giftighed af isobutyrophenon over for saltvandsorganismer

	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Reference
Alger					
<i>Skeletonema costatum</i>	Ja	72 t	EC ₅₀ , vækstrate	13,4	DHI 2010
<i>Skeletonema costatum</i>	Ja	72 t	EC ₁₀ , vækstrate	7,0	DHI 2010
Krebsdyr					
<i>Acartia tonsa</i>	Ja	48 t	EC ₅₀ , ubevægelighed	44,5	DHI 2010
Fisk					
<i>Scophthalmus maximus</i>	Ja	96 t	LC ₅₀ , dødelighed	13,2	DHI 2010

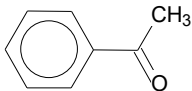
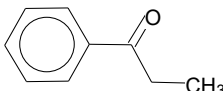
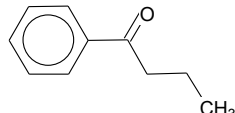
Tabel 4.2 (Q)SAR forudsigelser for isobutyrophenon

	Effekt	Værdi mg/l	Model
Alger	96 t, EC ₅₀	13,2	ECOSAR, neutral organics
Alger	72 t, EC ₅₀	6,97	Danish (Q)SAR database
Krebsdyr	48 t, EC ₅₀	21,6	ECOSAR, neutral organics
Krebsdyr	48 t, EC ₅₀	25,1	Danish (Q)SAR database
Fisk	96 t, LC ₅₀	35,1	ECOSAR, neutral organics
Fisk	96 t, LC ₅₀	31,2	Danish (Q)SAR database

Det er endvidere forsøgt at fremskaffe informationer om giftighed for strukturelt beslægtede stoffer (Tabel 4.3). Der er ikke fundet kroniske effektstudier for nogen af de nærmeste strukturanaloger. Der er dog korttidsstudier for ferskvandsorganismer (fisk og protozoer). Ud fra disse informationer

ser der ikke ud til at være forskel i følsomheden mellem eksempelvis ferskvandfisk og saltvandsfisk. Der er desuden meget god overensstemmelse mellem (Q)SAR estimater og testdata, samt en klar sammenhæng mellem log Kow og giftigheden, hvilket peger på en non-specifik virkningsmekanisme for akutte effekter.

Tabel 4.3. Strukturanaloger til isobutyrophenon samt testdata og estimeret data for effekter på vandlevende organismer

Struktur analog navn	Acetophenon	Propiophenon	Butyrophenon
CAS nr.	98-86-2	93-55-0	495-40-9
Log Kow	1,58	2,19	2,77
Struktur			
<i>Pimephales promelas</i> , 96 t LC ₅₀	162 mg/l	-	-
Fisk 96 t LC ₅₀ , (Q)SAR forudsigelse ECOSAR	179 mg/l	74 mg/l	30 mg/l
<i>Tetrahymena</i> <i>pyriformis</i> , 48 t IC ₅₀	346 mg/l	158 mg/l	91,4 mg/l
<i>Tetrahymena</i> <i>pyriformis</i> , 48 t IG ₅₀ (Q)SAR forudsigelse Danish (Q)SAR database	73,4 mg/l ¹	51,8 mg/l ¹	33,2 mg/l ¹

¹ Forudsigelserne i den danske (Q)SAR database for *Tetrahymena pyriformis* er uden for modellens domæne for alle tre stoffer. Disse resultater vurderes derfor at have lav troværdighed.

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Der er ikke fundet giftighedsdata for sedimentlevende organismer.

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Der er ikke fundet giftighedsdata for pattedyr og fugle.

4.4 Giftighed over for mennesker

Isobutyrophenon har ingen harmoniseret klassificering. Ifølge den vejledende liste til selvklassificering, som er baseret på (Q)SAR estimer, kan isobutyrophenon klassificeres som XN, R22 (farlig ved indtagelse).

Der er ikke fundet ADI eller TDI værdier.

5 Udledning af vandkvalitetskriterium

5.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der er fundet meget få informationer om giftigheden af isobutyrophenon. Datasættet er begrænset til akutte forsøg med alger, krebsdyr og fisk fra saltvand, hvor den laveste effektværdi er LC₅₀ på 13,2 mg/l for pighvar (*Scophthalmus maximus*).

Disse oplysninger er suppleret med (Q)SAR estimater og akutte testdata fra strukturanaloger, der ikke viser nogen forskel i følsomhed mellem saltvands- og ferskvandsorganismer for de testede højere systematiske grupper. Der er dog ingen informationer om kroniske effekter, hverken for isobutyrophenon eller nogen af strukturanalogerne.

Der anvendes derfor høje usikkerhedsfaktor på 1.000 for ferskvand og 10.000 for saltvand (jævnfør EU 2003; 2009 samt Miljøstyrelsen 2004).

$$\text{PNEC}_{\text{ferskvand}} = \frac{13,2 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}}{1.000} = 13,2 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$\text{PNEC}_{\text{saltvand}} = \frac{13,2 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}}{10.000} = 1,32 \text{ } \mu\text{g/l}$$

5.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Ved fastsættelse af KVKK anvendes LC₅₀ fra studiet med pighvar samt en usikkerhedsfaktor på 100 og 1000 for fersk- og saltvand.

$$\text{KVKK}_{\text{ferskvand}} = \frac{13,2 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}}{100} = 132 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$\text{KVKK}_{\text{saltvand}} = \frac{13,2 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}}{1000} = 13,2 \text{ } \mu\text{g/l}$$

5.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Log Kow er < 3, og der er ikke oplysninger om, at isobutyrophenon akkumulerer i sediment. Derved er kriterierne ikke opfyldt for at beregne kvalitetskriterium for sediment (EU 2009).

5.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Log K_{ow} er < 3, og der er ikke oplysninger om, at isobutyrophenon bioakkumulerer. Derved er kriterierne ikke opfyldt for at beregne kvalitetskriterium for biota (EU 2009).

5.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Isobutyrophenon er ikke klassificeret med R-sætninger, som udløser beregning af HKK.

6 Konklusion

Følgende kvalitetskriterier er fastsat for isobutyrophenon:

Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	13,2 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	1,32 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK	132 µg/l

Der gøres opmærksom på, at kvalitetskriterierne er fastsat på baggrund af et spinkelt datagrundlag, som dog præcist opfylder minimumskravene til at kunne fastsætte kvalitetskriterier. Derfor er der også anvendt forholdsvis høje usikkerhedsfaktorer.

7 Referencer

Danish (Q)SAR Database. Offentlig tilgængelig udgave: <http://130.226.165.14/index.html>

DHI 2010. Økotoksikologisk karakterisering af isobutyrophenon. Upubliceret testprotokol.

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 2009. Chemicals and the Water Framework Directive: Technical Guidance for Deriving Environmental Quality Standards.

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

OECD (Q)SAR Application Toolbox, v.2. Downloades fra følgende link:
http://www.oecd.org/document/54/0,3746,en_2649_34379_42923638_1_1_1_1,00.html

Rapport 2010. Status rapport over chemostatforsøg med Pethoxamid. Upubliceret rapport.

