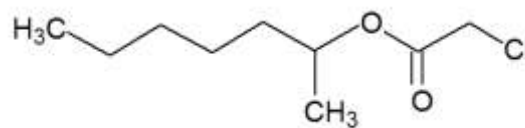




Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

Eddikesyre, chloro-, 1-methylhexyl ester (ACM-ester) CAS nr. 383412-05-3



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	0,036 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	0,0036 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	0,36 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	0,036 µg/l

Da der kun er få data og kun for akut giftighed er der anvendt meget store usikkerhedsfaktorer (1000 for VKK_{ferskvand}, og 10000 for VKK_{saltvand}).

Ved fremskaffelse af flere og bedre data ville usikkerhedsfaktorerne kunne reduceres væsentligt, hvilket efter al sandsynlighed ville forhøje VKK.

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	8
4.3 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	8
4.4 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	8
5 ANDRE EFFEKTER	9
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	10
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	10
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	10
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	10
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	10
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	10
7 KONKLUSION	11
8 REFERENCER	12

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 februar 2012.

English Summary and conclusions

1-methylhexyl chloroacetate

The only ecotoxicity data available is one LC50 for fish, one EC50 for crustacean, and one EC50 for algae. Therefore high assessment factors have been applied (1000 for freshwater EQS, and 10000 for saltwater EQS).

The log Kow = 3.7. US-EPA's QSAR program BCFBAF estimates the BCF to be 128, assuming no transformation (metabolisation). However, when transformation estimates are included in the calculations, the BCF is estimated at ≤ 71 . So overall the substance is regarded as having low potential for bio accumulation. For this reason no biota quality have been considered.

The two programs in the US-EPA QSAR package KOCWIN estimate the Koc at 2.3 and 2.9 respectively. The substance therefore is not regarded as having high affinity to sediment, and a sediment EQS has not been considered.

The lowest EC50 = 36 μ /l.

Thus

$$\text{EQS}_{\text{freshwater}} = 0.036 \mu\text{g/l} (36 \mu\text{g/l}:1000)$$

$$\text{EQS}_{\text{saltwater}} = 0.0036 \mu\text{g/l} (36 \mu\text{g/l}:10000)$$

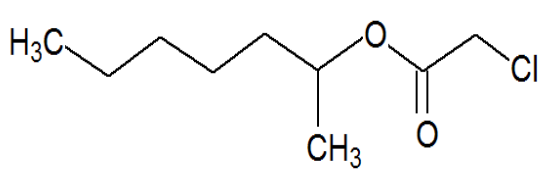
$$\text{MAC}_{\text{freshwater}} = 0.36 \mu\text{g/l} (36 \mu\text{g/l}:100)$$

$$\text{MAC}_{\text{saltwater}} = 0.036 \mu\text{g/l} (36 \mu\text{g/l}:1000)$$

1 Indledning

Identiteten af ACM-ester fremgår af tabel 1.1.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	1-methylhexyl chloroacetate
Strukturformel	
CAS nr.	383412-05-3
EINECS nr.	
Kemisk formel	$C_9H_{17}ClO_2$
SMILES	<chem>CCCCCC(C)OC(=O)CCl</chem>

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for [stofnavn] fremgår af tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for [stofnavn]

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	192,69	ECOSAR (QSAR)
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	?	
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	?	
Damptryk, P_v (Pa)	?	
Henry's konstant, H ($\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)	?	
Vandopløselighed, S_w ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	48,9	WSKOWWIN (QSAR)
Dissociationskonstant, pK_a	?	
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	3,7	Cheminova 2005
Sediment/vand fordelingskoefficient, K_p ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)	?	

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

Alle BIOWIN QSAR modellerne forudsiger let nedbrydelighed med et højt scoringstal (0,68 – 0,98).

Stoffet betragtes derfor som let nedbrydeligt.

3.2 Bioakkumulering

Log K_{ow} = 3,7.

QSAR programmet BCFBAF forudsiger en BCF på 128 uden omdannelse i organismen.

Hvis estimer af omdannelsesrater (biotransformering) inddrages i vurderingen fås værdier på 55 (øverste trofiske niveau) – 71 (laveste trofiske niveau).

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. Opsummering af giftighed over for vandlevende organismer.

Systematisk gruppe	Antal testede arter (antal studier)	Effektmål	Giftighed (mg·L ⁻¹)
Alger	<i>Skeletonema costatum</i>	EC50, 72 t	0,036
Krebsdyr	<i>Acartia tonsa</i>	EC50, 48 t	0,17
Fisk	<i>Scophthalmus maximus (Pigvar)</i>	LC50, 96 t	0,36

Alle giftighedsdata er fra DHI 2005.

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Ingen oplysninger

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Ingen oplysninger

4.4 Giftighed over for mennesker

Firmaets selvklassificering: T; R25, Xi; R37/38-41

5 Andre effekter

Ingen oplysninger.

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der er kun oplysninger om EC50 for en art fisk, en art krebsdyr og en art alge.

For ferskvand bruges derfor en usikkerhedsfaktor på 1000 og for saltvand bruges en faktor på 10000.

Laveste EC50 = 0,036 mg/l = 36 µg/l.

VKK_{ferskvand} bliver således $36 \mu\text{g/l} : 1000 = 0,036 \mu\text{g/l}$.

VKK_{saltvand} = $36 \mu\text{g/l} : 10000 = 0,0036 \mu\text{g/l}$

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Til beregning af KVKK_{ferskvand} bruges en usikkerhedsfaktor på 100 og til beregning af KVKK_{saltvand} bruges en faktor på 1000.

Herved fås KVKK_{ferskvand} = $36 \mu\text{g/l} : 100 = 0,36 \mu\text{g/l}$ og

KVKK_{saltvand} = $36 \mu\text{g/l} : 1000 = 0,036 \mu\text{g/l}$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

QSAR pakken KOCWINs to modeller forudsiger K_{oc} værdier på 2,3 og 2,9, og selvom log K_{ow} = 3,7 vurderes det derfor at kriterierne for at udarbejde SKK ikke er nået.

Der udarbejdes derfor intet SKK.

6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Log K_{ow} = 3,7, men QSAR forudsigelser, der antager, der ingen omdannelse sker i organismen, giver en BCF på 128, mens inddragelse af biotransformeringsestimater giver $BCF \leq 71$. Det antages derfor, at potentialet for biokoncentrering er lille.

Der er derfor ikke behov for et BKK.

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Da potentialet for biokoncentrering antages at være lille (se 6.4) er der ikke et behov for et HKK.

7 Konklusion

Da der kun er få data og kun for akut giftighed er der anvendt meget store usikkerhedsfaktorer (1000 for $VKK_{\text{ferskvand}}$, og 10000 for VKK_{saltvand}).

Ved fremskaffelse af flere og bedre data ville usikkerhedsfaktorerne kunne reduceres væsentligt, hvilket efter al sandsynlighed ville forhøje VKK.

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 0,036 \mu\text{g/l}$$

$$VKK_{\text{saltvand}} = 0,0036 \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 0,36 \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 0,036 \mu\text{g/l}$$

8 Referencer

Cheminova 2005: Bestemmelse af n-Octanol/vand fordelingskoefficient for CLOQ-syre, CHQ og ACM-ester. Rapport fra Cheminova 2005.

DHI 2005: Økotoksikologisk undersøgelse af CHG, CLOQ-syre og ACM-ester. Rapport fra Dansk Hydraulisk Institut (DHI), september 2005.

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