



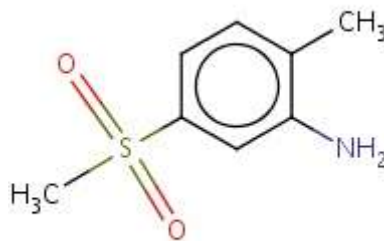
Miljøministeriet
Naturstyrelsen
Miljøstyrelsen

Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

2-methyl-5-(methylsulfonyl)anilin

AMST

1671-48-3



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	65 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	6,5 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	652 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	65 µg/l

Juli 2014

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	10
7 KONKLUSION	12	
8 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 2011) og Miljøstyrelsens vejledning til fastsættelse af vandkvalitetskriterier (Miljøstyrelsen 2004).

Stoffet er ikke registreret under REACH.

Den sidste litteratursøgning er foretaget juli-2014.

English Summary and conclusions

The available ecotoxicity data is EC₅₀ values for 3 species from 3 major taxonomic groups (algae, crustacea and fish), plus an EC₁₀ for algae.

The EC₁₀ for algae cannot be used to derive an environmental quality standard (EQS) without other EC₁₀ values, and so the EQSs are derived from the EC₅₀ values with an assessment factor of 1000 and 10000 for fresh- and saltwater respectively. Thus:

$$\text{EQS}_{\text{freshwater}} = 65,2 \text{ mg/l} : 1000 = 65 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$\text{EQS}_{\text{saltwater}} = 65,2 \text{ mg/l} : 10000 = 6,5 \text{ } \mu\text{g/l}$$

The maximum accepted concentration (MAC) is derived with assessment factor of 100 and 1000 for fresh- and saltwater respectively. Thus:

$$\text{MAC EQS}_{\text{freshwater}} = 65,2 \text{ mg/l} : 100 = 652 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$\text{MAC EQS}_{\text{freshwater}} = 65,2 \text{ mg/l} : 1000 = 65 \text{ } \mu\text{g/l}$$

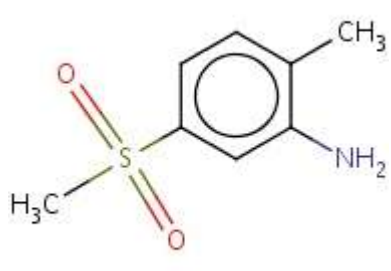
The Danish EPA has evaluated the ecotoxicity report (DHI) and given it a reliability score of 1 (Klimisch).

The criteria for deriving sediment and biota standards have not been fulfilled and those standards were not derived (K_{oc} and $\log K_{ow}$ are very low).

1 Indledning

Identiteten af AMST fremgår af tabel 1.1.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	
Strukturformel	 The image shows the chemical structure of 4-(methylsulfonyl)aniline. It consists of a benzene ring with a methylsulfonyl group (-SO ₂ CH ₃) at the para position and an amino group (-NH ₂) at the other para position. The sulfur atom is double-bonded to two oxygen atoms and single-bonded to a methyl group. The amino group is represented as -NH ₂ .
CAS nr.	1671-48-3
EINECS nr.	
Kemisk formel	C ₈ H ₁₁ NSO ₂
SMILES	<chem>Cc1ccc(N)cc1S(=O)=O</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 ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	185,24 ¹	
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	108,9 ¹	MPBPVP, EPIWIN
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	334 ¹	MPBPVP, EPIWIN
Damptryk, P_v (Pa)	0,0063 ¹	MPBPVP, EPIWIN
Henry's konstant, H ($\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)		MPBPVP, EPIWIN
Vandopløselighed, S_w ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	35500 ¹	MPBPVP, EPIWIN
Dissociationskonstant, pK_a		
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	0,19 ¹	KOWWIN, EPIWIN
K_{oc}	38 ¹ 11 ¹	MCI, KOCWIN Log K_{ow} , KOCWIN

¹Estimeret

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

USEPAs QSAR program BIOWIN forudsiger, at stoffet ikke er let nedbrydeligt.

3.2 Bioakkumulering

Da QSAR forudsiger en meget lav K_{ow} , skønnes det, at der er et meget lille potentiale for bioakkumulering.

3.3 Naturlig forekomst

Ingen oplysninger.

4 Giftighedsdata

4.1 Giftighed over for vandlevende organismer

Tabel 4.1. Giftighed over for vandlevende organismer.

Overordnet systematisk gruppe	Art	Effektmål	Værdi (mg/l)	Reference
Alger	<i>Skeletonema costatum</i>	72 timer EC ₅₀	65,2	DHI
		72 timer EC ₁₀	24,9	DHI
Krebsdyr	<i>Acartia tonsa</i>	48 timer LC ₅₀	183	DHI
Fisk	<i>Cyprinodon variegatus</i>	96 timer LC ₅₀	>200	DHI

Miljøstyrelsen har gennemgået rapporten med beskrivelse af forsøgene, som vurderes at være af høj kvalitet og tildeles et ”reliability index” på 1 (Klimisch RI).

The DHI tests are well described and raw data are available. They are assigned an R.I. score of 1.

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Der er ikke fundet giftighedsdata for sedimentlevende organismer.

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Ingen oplysninger

4.4 Giftighed over for mennesker

Ingen oplysninger

5 Andre effekter

Ingen oplysninger

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der er EC_{50} værdier for 3 arter repræsenterende 3 overordnede systematiske grupper og én EC_{10} for alger. En EC_{10} for alger kan ikke bruges alene til beregning af VKK, og beregningen baseres derfor på EC_{50} værdierne, og der bruges en usikkerhedsfaktor på 1000 og 10000 for henholdsvis fersk- og saltvand.

$VKK_{\text{ferskvand}}$ bliver således $65,2 \text{ mg/l} : 1000 = 0,0652 \text{ mg/l} = 65,2 \text{ } \mu\text{g/l}$ og

VKK_{saltvand} bliver $65,2 \text{ mg/l} : 10000 = 0,00652 \text{ mg/l} = 6,52 \text{ } \mu\text{g/l}$

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Da der er EC_{50} værdier for 3 arter repræsenterende 3 overordnede systematiske grupper bruges en usikkerhedsfaktor på 100 og 1000 for henholdsvis fersk- og saltvand.

$KVKK_{\text{ferskvand}} = 65,2 \text{ mg/l} : 100 = 0,652 \text{ mg/l} = 652 \text{ } \mu\text{g/l}$

$KVKK_{\text{saltvand}} = 65,2 \text{ mg/l} : 1000 = 0,0652 \text{ mg/l} = 65,2 \text{ } \mu\text{g/l}$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Da K_{oc} og K_{ow} er forudsagt at være lave, skønnes der at være et lavt potentiale for binding til sediment og der udarbejdes derfor ikke et SKK.

6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Da K_{ow} er forudsagt at være lav, skønnes der at være et lavt potentiale for bioakkumulering og der udarbejdes derfor ikke et BKK.

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Da K_{ow} er forudsagt at være lav, skønnes der at være et lavt potentiale for bioakkumulering og der udarbejdes derfor ikke et HKK.

7 Konklusion

$$\text{VKK}_{\text{ferskvand}} = 65,2 \text{ } \mu\text{g/l} \approx 65 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$\text{VKK}_{\text{saltvand}} = 6,52 \text{ } \mu\text{g/l} \approx 6,5 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$\text{KVKK}_{\text{ferskvand}} = 652 \text{ } \mu\text{g/l} \approx 652 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$\text{KVKK}_{\text{saltvand}} = 65,2 \text{ } \mu\text{g/l} \approx 65 \text{ } \mu\text{g/l}$$

UF ville kunne sænkes med en factor 100, hvis der var EC10 eller NOEC værdier for mindst 3 overordnede systematiske grupper.

For saltvand gælder, at UF ville kunne sænkes med en faktor 10, hvis der udover basissættet var data for mindst to overordnede systematiske grupper, der er specifikke for saltvand, f.eks. pighuder og havbørsteorme.

8 Referencer

DHI 2013: Økotoxikologisk karakterisering af AMST. Rapport fra DHI.

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.