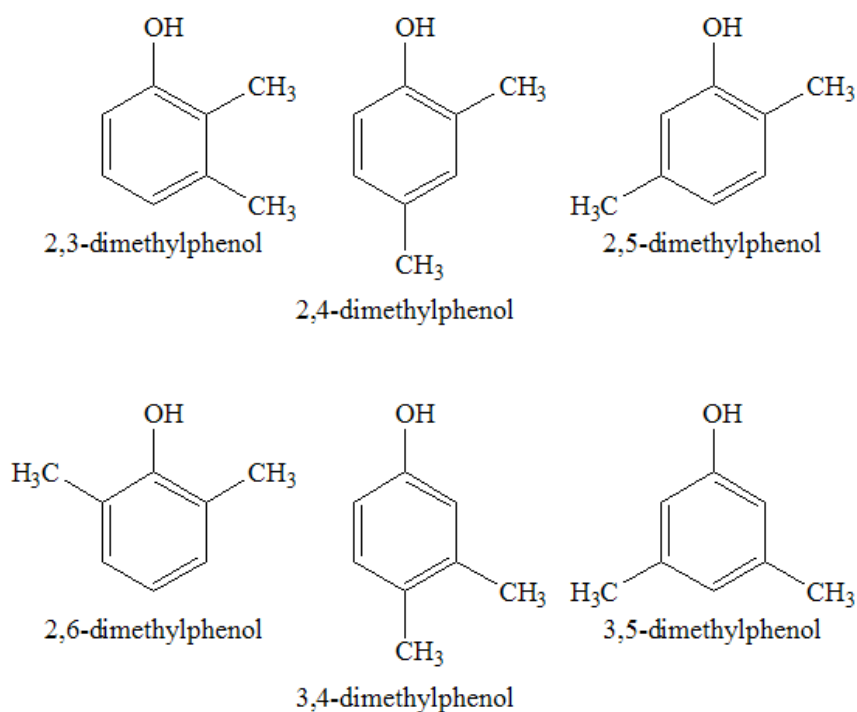


Dimethylphenol (Xylenol) (576-26-1, 105-67-9, 108-68-9, 95-65-8, 526-75-0, 95-87-4 og 1300-71-6). Fastsættelse af kvalitetskriterier

Strukturformler



Vandkvalitetskriterie, ferskvand: 13,1 µg/l

Vandkvalitetskriterie, saltvand: 1,31 µg/l

Korttidsvandkvalitetskriterie: 132 µg/l

English Summary

There are six isomers of dimethylphenol, which are expected to have additive toxicological effects. Since toxicity of these isomeric forms did not fluctuate significantly the datasets were pooled. The lowest chronic toxicity value for freshwater organisms was a 21-day NOEC of 270 µg/l for *Daphnia magna*. For marine organisms the lowest value was a 28-day NOEC for the inland silverside *Menidia beryllina*. Using assessment factors of 10 and 100 for freshwater and saltwater respectively PNECS of 13.1 µg/l and 1.31 µg/l were derived. A maximum acceptable concentration (MAC) was derived using acute toxicity data for inland silverside ($LC_{50} = 1.320 \mu\text{g/l}$) and an assessment factor of 10.

$$WQS_{\text{freshwater}} = 13.1 \mu\text{g/l}$$

$$WQS_{\text{saltwater}} = 1.31 \mu\text{g/l}$$

$$\text{MAC} = 132 \mu\text{g/l}$$

Brug af stoffet

De seks isomerer af dimethylphenol forhandles ofte under navnet xylenol både som blanding og enkeltvis. Stofferne anvendes bl.a. i pesticider men findes også i mange andre kemiske produkter.

Opløselighed i vand

6 g/l ved 25 °C for 2,6 dimethylphenol og varierer lidt for de øvrige 5 isomerer.

Giftighed overfor vandorganismer (EC₅₀, NOEC, EC_x, PNEC osv.)

Ferskvandsorganismer

Akut giftighed

	Isomer	Målt	Varighed	Effekt	Effekttype	Værdi µg/l	Reference
Alger							
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	2,6	I.A.	72 t	Vækst	EC ₅₀	47.700	Ministry of the Environment, Japan
Karplanter							
<i>Lemna minor</i>	2,6	Nej	72 t	Dødelighed	LC ₅₀	460.000	Blackman <i>et al.</i> , 1955*
<i>Lemna minor</i>	2,4	Nej	72 t	Dødelighed	LC ₅₀	290.000	Blackman <i>et al.</i> , 1955*
<i>Lemna minor</i>	3,5	Nej	72 t	Dødelighed	LC ₅₀	230.000	Blackman <i>et al.</i> , 1955*
<i>Lemna minor</i>	2,5	Nej	72 t	Dødelighed	LC ₅₀	280.000	Blackman <i>et al.</i> , 1955*
Hjuldyr							
<i>Brachionus calyciflorus</i>	2,4	Nej	48 t	Dødelighed	LC ₅₀	8.600	Snell & Moffat, 1992*
Ledorme							
<i>Dinophilus gyrociliatus</i>	2,4	Nej	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	55.900	Thursby & Berry, 1987*
Krebsdyr							
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	2,4	Ja	48 t	Dødelighed	LC ₅₀	3.340	Spehar, 1987*
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	2,4	Nej	48 t	Dødelighed	LC ₅₀	3.100	Norberg-King, 1987*
<i>Daphnia magna</i>	2,6	Nej	48 t	Ubevægelighed	EC ₅₀	11.200	Kopperman & Caple, 1974*
<i>Daphnia magna</i>	2,4	Nej	48 t	Ubevægelighed	EC ₅₀	2.370	Randall & Knopp, 1980*
<i>Daphnia magna</i>	2,4	Nej	48 t	Ubevægelighed	EC ₅₀	4.800	Holcombe & Phipps, 1987*
<i>Daphnia magna</i>	2,4	Nej	48 t	Dødelighed	LC ₅₀	2.100	LeBlanc, 1980*
<i>Orconectes immunis</i>	2,4	Ja	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	36.300	Holcombe & Phipps, 1987*
<i>Palaemonetes kadiakensis</i>	2,4	Ja	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	16.000	Holcombe & Phipps, 1987*

	Isomer	Målt	Varighed	Effekt	Effekttype	Værdi µg/l	Reference
Insekter							
<i>Tanytarsus dissimilis</i>	2,4	Ja	48 t	Dødelighed	LC ₅₀	33.400	Holcombe & Phipps, 1987*
Fisk							
<i>Carassius auratus</i>	3,5	Ja	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	22.000	Bridie <i>et al.</i> , 1979*
<i>Cyprinodon variegatus</i>	2,4	Nej	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	11.800	Thursby & Berry, 1987*
<i>Lepomis macrochirus</i>	2,4	Nej	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	7.800	Buccafusco <i>et al.</i> , 1981*
<i>Lepomis macrochirus</i>	2,4	Ja	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	6.300	Holcombe & Phipps, 1987*
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	2,4	Ja	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	9.200	Holcombe & Phipps, 1987*
<i>Oryzias latipes</i>	2,4	Ja	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	12.600	Holcombe & Phipps, 1987*
<i>Oryzias latipes</i>	2,6	I.A.	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	15.400	Ministry of the Environment, Japan
<i>Pimephales promelas</i>	2,4	Ja	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	18.100	Holcombe & Phipps, 1987*
<i>Pimephales promelas</i>	2,4	Ja	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	15.400	Broderius <i>et al.</i> , 1995*
<i>Pimephales promelas</i>	3,4	Nej	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	14.000	Mattson <i>et al.</i> , 1976*

Kronisk giftighed

	Isomer	Målt	Varighed	Effekt	Effekttype	Værdi µg/l	Reference
Alger							
<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	2,6	Nej	72 t	Klorofyl	NOEC	50.000	Huang & Gloyna, 1968*
<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	2,4	Nej	72 t	Klorofyl	NOEC	50.000	Huang & Gloyna, 1968*
<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	3,5	Nej	72 t	Klorofyl	NOEC	50.000	Huang & Gloyna, 1968*
<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	3,4	Nej	72 t	Klorofyl	NOEC	50.000	Huang & Gloyna, 1968*
<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	2,5	Nej	72 t	Klorofyl	NOEC	50.000	Huang & Gloyna, 1968*
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	2,6	I.A.	72 t	Vækst	NOEC	3.940	Ministry of the Environment, Japan

	Isomer	Målt	Varighed	Effekt	Effekttype	Værdi µg/l	Reference
Hjuldyr							
<i>Brachionus calyciflorus</i>	2,4	Nej	48 t	Reproduktion	NOEC	2.000	Snell & Moffat, 1992*
Krebsdyr							
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	2,4	Ja	7 d	Reproduktion	NOEC	810	Spehar, 1987*
<i>Daphnia magna</i>	2,6	I.A.	21 d	Reproduktion	NOEC	538	Ministry of the Environment, Japan
<i>Daphnia magna</i>	2,4	I.A.	21 d	Reproduktion	NOEC	270	Ministry of the Environment, Japan
Fisk							
<i>Pimephales promelas</i>	2,4	Ja	32 d	Vækst	NOEC	398	Russom, 1993*

Saltvandsorganismer

Akut giftighed

	Isomer	Målt	Varighed	Effekt	Effekttype	Værdi µg/l	Reference
Krebsdyr							
<i>Americamysis bahia</i>	2,4	Nej	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	1.600	Thursby & Berry, 1987*
<i>Artemia salina</i>	2,6	Nej	48 t	Dødelighed	LC ₅₀	2.200	Barahona & Sanchez-Fortun, 1996*
<i>Crangon septemspinosa</i>	2,6	Ja	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	16.500	McLeese & Peterson, 1979*
<i>Crangon septemspinosa</i>	3,5	Ja	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	14.500	McLeese & Peterson, 1979*
<i>Crangon septemspinosa</i>	3,4	Ja	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	13.700	McLeese & Peterson, 1979*
<i>Palaemonetes pugio</i>	2,4	Nej	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	4.800	Thursby & Berry, 1987*
Bløddyr							
<i>Crassostrea virginica</i>	2,4	Nej	48 t	Dødelighed	LC ₅₀	8.500	Thursby & Berry, 1987*

	Isomer	Målt	Varighed	Effekt	Effekttype	Værdi µg/l	Reference
Pighuder							
<i>Arbacia punctulata</i>	2,4	Nej	48 t	Dødelighed	LC ₅₀	21.400	Thursby & Berry, 1987*
<i>Strongylocentrotus droebachiensis</i>	2,6	Ja	96 t	Morfologi	EC ₅₀	1.500	Falk-Petersen <i>et al.</i> , 1985*
<i>Strongylocentrotus droebachiensis</i>	2,5	Ja	96 t	Morfologi	EC ₅₀	5.000	Falk-Petersen <i>et al.</i> , 1985*
<i>Strongylocentrotus droebachiensis</i>	2,4	Ja	96 t	Morfologi	EC ₅₀	5.100	Falk-Petersen <i>et al.</i> , 1985*
<i>Strongylocentrotus droebachiensis</i>	3,4	Ja	96 t	Morfologi	EC ₅₀	5.300	Falk-Petersen <i>et al.</i> , 1985*
<i>Strongylocentrotus droebachiensis</i>	2,3	Ja	96 t	Morfologi	EC ₅₀	11.500	Falk-Petersen <i>et al.</i> , 1985*
<i>Strongylocentrotus droebachiensis</i>	3,5	Ja	96 t	Morfologi	EC ₅₀	14.000	Falk-Petersen <i>et al.</i> , 1985*
Fisk							
<i>Gadus morhua</i>	2,4	Ja	96 t	Morfologi	EC ₅₀	3.700	Falk-Petersen <i>et al.</i> , 1985*
<i>Gadus morhua</i>	2,6	Ja	96 t	Morfologi	EC ₅₀	4.000	Falk-Petersen <i>et al.</i> , 1985*
<i>Gadus morhua</i>	2,6	Ja	96 t	Morfologi	EC ₅₀	13.000	Falk-Petersen <i>et al.</i> , 1985*
<i>Gadus morhua</i>	2,3	Ja	96 t	Morfologi	EC ₅₀	13.000	Falk-Petersen <i>et al.</i> , 1985*
<i>Gadus morhua</i>	2,5	Ja	96 t	Morfologi	EC ₅₀	13.000	Falk-Petersen <i>et al.</i> , 1985*
<i>Menidia beryllina</i>	2,4	Ja	96 t	Dødelighed	LC ₅₀	1.320	Thursby & Berry, 1987*

Kronisk giftighed

	Isomer	Målt	Varighed	Effekt	Effekttype	Værdi µg/l	Reference
Fisk							
<i>Menidia beryllina (juvenile)</i>	2,4	Ja	28 d	Overlevelse	NOEC	131	Thursby & Berry, 1987*

* Fra ECOTOX

Giftighed overfor pattedyr og fugle (NOEC, NOAEL, PNEC_{oral} (PNEC_{føde}), hormonforstyrrende effekter osv.)

Følgende NOEL værdier for oralt indtag er fundet i IRIS databasen:

NOEL for 2,6-dimethylphenol: 0,6 mg/kg/d

NOEL for 3,4-dimethylphenol: 1,4 mg/kg/d

Giftighed overfor mennesker (ADI, TDI, hormonforstyrrende effekter, klassificering for kræft, reproduktionsskader og mutagenicitet)

Ingen af de seks dimethylisomerer er klassificerede med R-sætninger, der dækker over kræftfremkaldende, reproduktionstoksiske eller mutagene egenskaber i EU.

Afsmag i fisk, skaldyr o.l.

2,4 dimethylphenol har en smagsgrænse på 0,5 mg/l (HSDB, 2009).

Nedbrydelighed

Der findes adskillige resultater af bionedbrydningsstudier i litteraturen. Udfaldet i de forskellige tests er dog ikke konsistent og dimethylphenol er rapporteret som både let nedbrydelig og svært nedbrydelig afhængig af hvilket studie der citeres. De fleste resultater peger dog på, at stoffet er let bionedbrydeligt (HSDB, 2009). BIOWIN forudsiger at alle seks isomerer er let bionedbrydelige (model 1 til 6), mens model 7 forudsiger at de er ikke let bionedbrydelige under anaerobe forhold. De konkluderes derfor at dimethylphenol er bionedbrydeligt under visse forhold.

Bioakkumulering (log K_{ow}, BCF, BMF)

Log K_{ow} for de seks isomerer er i intervallet mellem 2,23 og 2,61 (HSDB, 2009). Der er kun fundet eksperimentelt fastsatte BCF værdier for 2,4 dimethylphenol med en BCF på 150 for fisk (*Lepomis macrochirus*) efter 28 dages eksponering. Dette indikerer at potentialet for bioakkumulering i akvatiske organismer er moderat (HSDB, 2009).

Naturlig forekomst

Ingen oplysninger

Vandkvalitetskriterie, inkl. argumentation og kvalitetsvurdering af udslagsgivende undersøgelse:

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

De seks isomerer af dimethylphenol forventes at have additiv effekt og giftigheden for akvatiske organismer afviger ikke markant mellem dem. Derfor vurderes det som mest hensigtsmæssigt, at udarbejde et fælles vandkvalitetskriterium for disse stoffer.

Den mest datarige isomer er uden sammenligning 2,4-dimethylphenol efterfulgt af 2,6-dimethylphenol hvorimod de øvrige isomerer kun har begrænsede mængder data. For flere organismer synes giftigheden af de seks isomerer at være på samme niveau. Der er dog også undtagelser. Eksempelvis varierer den akutte giftighed over for søpindsvinet *S. droebachiensis* fra 1.500 µg/l for 2,6-dimethylphenol til 14.000 µg/l for 3,5-dimethylphenol. Sammenlignes de to mest datarige isomerer i de tilfælde, hvor der er data fra den samme art, fremgår det, at 2,4-dimethylphenol er marginalt mere giftigt end 2,6-dimethylphenol over for 4 arter mens det omvendte gør sig gældende for 2 arter. Der er dog ikke tilstrækkelige mængder af data til rådighed for at kunne vurdere, om der reelt er forskel i giftigheden mellem de seks isomerer, eller om der er tale om tilfældigheder og almindelige usikkerheder og variation i laboratoriedata.

Der er indhentet (Q)SAR data for at undersøge, om modelberegninger forudsiger en forskel i giftighed af de seks isomerer over for akvatiske organismer. Nedenstående tabel viser en sammenligning af estimerede værdier fra henholdsvis ECOSAR og den danske (Q)SAR database.

Forudsigelserne fra den danske (Q)SAR database var i alle tilfælde inden for modellens domæne. I ECOSAR er der anvendt modeller for "Phenols".

Fisk: $N = 78$; $R^2 = 0,86$ (2,4-dimethylphenol indgår i træningssættet)

Krebsdyr: $N = 48$; $R^2 = 0,6$ (2,4-dimethylphenol indgår i træningssættet)

Alger: Ingen angivelse af detaljer

Isomer	Alger		Krebsdyr		Fisk	
	ECOSAR	DK QSAR	ECOSAR	DK QSAR	ECOSAR	DK QSAR
2,6	17,5 mg/l	2,7 mg/l	3,7 mg/l	3,8 mg/l	7,5 mg/l	23,1 mg/l
2,4	17,5 mg/l	9,2 mg/l	3,7 mg/l	2,1 mg/l	7,5 mg/l	24,4 mg/l
3,5	17,5 mg/l	60,1 mg/l	3,7 mg/l	10,4 mg/l	7,5 mg/l	1000 mg/l
3,4	17,5 mg/l	2,2 mg/l	3,7 mg/l	3,5 mg/l	7,5 mg/l	24,2 mg/l
2,3	17,5 mg/l	15,5 mg/l	3,7 mg/l	3,7 mg/l	7,5 mg/l	22,6 mg/l
2,5	17,5 mg/l	2,2 mg/l	3,7 mg/l	23,9 mg/l	7,5 mg/l	23,9 mg/l

I alle tilfælde ligger de estimerede værdier inden for en faktor ti af de testede værdier, hvorved modellerne har fine forudsigelser i forhold til testdata. ECOSAR forudsiger, at giftigheden over for de tre organismer er identisk for de seks isomerer, hvilket ikke er overraskende da estimeret log Kow for isomererne er ens (ECOSAR er baseret på log Kow regression). Den danske (Q)SAR database forudsiger derimod, at der er mindre forskelle i giftigheden, uden at

der dog kan findes et mønster idet 2,5-dimethylphenol er giftigst over for alger, 2,4-dimethylphenol er giftigst over for krebsdyr mens 2,3-dimethylphenol er giftigst over for fisk.

Der er ingen informationer om, hvilke egenskaber ved isomererne der resulterer i, at modellen giver forskellige estimater for de seks isomerer. Det synes derfor mest hensigtsmæssigt, at data for de seks isomerer behandles som et samlet dataset idet den kvantitative forskel i effekt-koncentrationer mellem isomererne under alle omstændigheder synes at være lille.

De laveste værdier fra kroniske forsøg kommer alle fra studier, hvor det ikke har været muligt at fremskaffe originalartiklerne til kvalitetsvurdering. Dette gælder for NOEC værdierne på 131 µg/l for *M. beryllina*, 270 og 538 µg/l for *D. magna* og 398 µg/l for *P. promelas*. Disse studier er lavet af enten det japanske miljøministerium, hvor baggrundsmaterialet er på japansk, eller af den amerikanske miljøstyrelse, hvor baggrundsmaterialet ikke er offentligt tilgængeligt via nettet eller forskningsbiblioteker. Da de kroniske NOEC værdier fra forskellige studier ligger inden for samme område, øger de troværdigheden af hinanden. Den laveste NOEC for ferskvandsorganismer er 270 µg/l for reproduktion hos *D. magna*, mens den laveste NOEC for marine organismer er 131 µg/l for overlevelse for fisken *M. beryllina*. Da der ikke foreligger tilstrækkelige mængder af kronisk data til at kunne udlede, om marine organismer generelt er mere følsomme end ferskvandsorganismer over for dimethylphenol, anvendes NOEC for *M. beryllina* til beregning af kvalitetskriterier for både ferskvand og saltvand..

Der findes kroniske data for 7 arter fra 4 højere taksonomiske grupper og akut data for 24 arter fra 9 højere taksonomiske grupper. De udslagsgivende kroniske værdier kommer fra organismer, der også er de mest følsomme i korttidstest for henholdsvis ferskvand og saltvand. I henhold til EU Kommissionens vejledning (TGD'en) medfører disse usikkerhedsfaktorer på 10 for ferskvand og 100 for saltvand.

Herved bliver PNEC 13,1 µg/l for ferskvand og 1,31 µg/l for saltvand.

Korttidsvandkvalitetskriteriet (KVKK) udregnes på baggrund af data fra den marine fisk *M. beryllina* med en 96 timers LC₅₀ værdi på 1.320 µg/l. Studiet på søpindsvin *S. droebachiensis* giver en lavere akut værdi, men anvendes ikke da det toksikologiske endepunkt "morfologi" ikke umiddelbart kan anvendes til vurdering af hæmmende effekter på individet. Grundet mængden af tilgængelige data for akutte effekter vurderes det, at en usikkerhedsfaktor på 10 er tilstrækkelig. Herved bliver KVKK = 132 µg/l.

Vandkvalitetskriteriet gælder for summen af dimethylphenoler.

VKK, ferskvand: 13,1 µg/l

VKK, saltvand: 1,31 µg/l

$$KVKK = 132 \mu\text{g/l}$$

Referencer

ECOTOX. U.S. Environmental Protection Agency. ECOTOXicology Database System. Version 4.0. Available: <http://www.epa.gov/ecotox/> Online database.

HSDB (2009): Hazardous Substances Data Bank, online: <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/f?./temp/~89oTwC:1>

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

Ministry of the Environment, Japan. Initial risk assessments for 2,4 –Xylenol and 2,6-Xylenol: http://www.env.go.jp/en/chemi/chemicals/profile_erac/