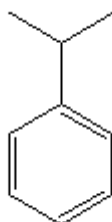


## **Isopropylbenzen (Cumen) (CAS No. 98-82-8).** Fastsættelse af kvalitetskriterier.

### **Strukturformel**



***Vandkvalitetskriterium, ferskvand: 22 µg/l***

***Vandkvalitetskriterium, saltvand: 2,2 µg/l***

***Korttidsvandkvalitetskriterium, ferskvand: 22 µg/l***

***Korttidsvandkvalitetskriterium, saltvand: 6 µg/l***

### **English Summary**

A water quality standard (WQS) for isopropylbenzene (cumene) was derived as described in the report from the Danish EPA: "Principper for fastsættelse af vandkvalitetskriterier for stoffer i overfladevand" (Miljøstyrelsen, 2004). Data were available from short-term studies with species from three trophic levels and long-term studies with crustaceans and algae, of which the lowest NOEC value was 0.22 mg/L (algae). (Q)SAR estimates and read across from the structural analogue methylstyrol showed that fish probably not is the most sensitive species. Therefore assessment factors of 10 (freshwater) and 100 (saltwater) was used to derive a PNEC. There was no other information on health or potential endocrine disrupting properties. The substance is not bioaccumulative and it is not considered readily biodegradable in the aquatic environment. On this basis, it was decided not to use further assessment factors for deriving the water quality standard, which was set equal to the PNEC value.

A Maximum Acceptable Concentration (MAC) was derived on the basis of the lowest E/LC50-value (0.6 mg/L) and an assessment factor of 100 (EU, 2003).

The calculated  $PNEC_{sec. pos.w}$  was higher than the PNECs and will therefore not have any influence on the derivation of the WQS.

**Freshwater: WQS isopropylbenzene = 22 µg/L**  
**Marine waters: WQS isopropylbenzene = 2.2 µg/L**  
**Freshwater: MAC isopropylbenzene = 22 µg/L**

### Saltwater: MAC isopropylbenzene = 6 µg/L

#### Brug af stoffet

Isopropylbenzen indgår bl.a. i fremstillingen af acetone, phenol og er en bestanddel af motorolie og benzin, asfalt etc. (Verschuere, 1997; EU RAR, 2001).

Der er målt koncentrationer af isopropylbenzen i overfladevand langs den engelske Vesterhavskyst i 1986 på <1 ng/l - 69 ng/l (EU RAR, 2001).

#### Opløselighed i vand

Vandopløselighed (25°C): 50 mg/l, (EU RAR 2001).

#### Giftighed overfor vandorganismer (EC<sub>50</sub>, NOEC, EC<sub>x</sub>, PNEC osv.)

Der foreligger en del data for isopropylbenzen, hvoraf mange ikke er fra standardiserede studier. I EU RAR (2001) er der citeret resultater fra en række korttidsstudier m. fisk, krebsdyr, alger, snegle og hjuldyr. Af disse er de studier, hvis datakvalitet i EU RAR (2001) er vurderet med betegnelserne "ok" eller "valid", sammenstillet i tabel 1. Der foreligger toksicitetsdata fra et eller flere studier på hvert af de tre trofiske niveauer. Der foreligger desuden NOEC-værdier fra længerevarende test med alger og krebsdyr.

Tabel 1 Økotoxikologiske data for isopropylbenzen (98-82-8)  
Ecotoxicity data for isopropylbenzene (98-82-8)

Systematisk gruppe / Taxonomic group	Parameter, effektmål / End point	Eksposeringstid / Exposure time	Resultat / Result [mg/l]	Antal studier / Number of studies
Alger / Algae ( <i>Selenastrum capricornutum</i> )	EC <sub>50</sub> (growth)	72 h	2,6 <sup>1</sup>	2
Alger / Algae ( <i>Scenedesmus subspicatus</i> )	NOEC (growth)	72 h	0,22 <sup>1</sup>	1
Krebsdyr / Crustacea ( <i>Daphnia magna</i> )	E/LC <sub>50</sub> (immobility)	48 h	0,6-4 <sup>1</sup>	2
Krebsdyr / Crustacea ( <i>Daphnia magna</i> )	NOEC (reproduction)	21 d	0,35 <sup>1</sup>	1
Krebsdyr / Crustacea ( <i>Mysidopsis bahia</i> )	LC <sub>50</sub>	96 h	1,3 <sup>1</sup>	1
Fisk / Fish ( <i>Cyprinodon variegatus</i> , <i>Oncorhynchus mykiss</i> , <i>Poecilia reticulata</i> , <i>Salmo gairdneri</i> )	LC <sub>50</sub>	96 h	2,7-5,1 <sup>1</sup>	4

h: Hours (timer)

1 EU RAR (2001)

Der mangler kroniske data for fisk. Der er derfor inddraget non-test data i form af (Q)SAR estimater (tabel 2) og read-across fra strukturel analog (tabel 3) for at sandsynliggøre, at fisk ikke er den mest følsomme organisme over for isopropylbenzen, og dermed retfærdiggøre en lavere usikkerhedsfaktor.

Tabel 2 Økotoksikologiske data og (Q)SAR estimater fra tre forskellige modeller  
*Ecotoxicity data and (Q)SAR estimates from three different models*

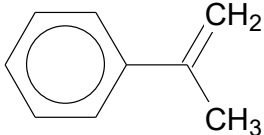
	Test data (µg/l)	ECOSAR <sup>1</sup> (µg/l)	DK QSAR <sup>2</sup> (µg/l)	EU RAR est. <sup>3</sup> (µg/l)
<b>Kronisk</b>				
<i>Alge</i>	220	719	-	-
<i>Krebsdyr</i>	350	-	-	320
<i>Fisk</i>	-	629	-	380
<b>Akut</b>				
<i>Alge</i>	2.600	3.109	6.485	-
<i>Krebsdyr</i>	600	4.575	480	-
<i>Fisk</i>	2.700	3.863	2.640	-

<sup>1</sup>ECOSAR v. 0.99 (2001)

<sup>2</sup>Danish QSAR database (2009)

<sup>3</sup>Estimater fra EU-RAR (2001)

Tabel 3 Økotoksikologiske data for strukturen analogen methylstyrol (98-83-9)  
*Ecotoxicity data for the structural analogue methylstyrol (98-83-9)*

CAS nr. 98-83-9 Methylstyrol		Fisk: <i>Oryzias latipes</i> , NOEC, 14 dage (OECD TG 204) = 1.020 µg/l  Krebsdyr: <i>Daphnia magna</i> , NOEC, 21 dage (OECD TG 211) = 400 µg/l  Alger: <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> , NOEC, 72 timer (OECD TG 201) = 170 µg/l	Kilde: Ministry of the Environment Japan citeret fra OECD QSAR Application Toolbox v. 1.1.
---------------------------------	---	---	---

Den toksikologiske virkningsmekanisme af isopropylbenzen vurderes at være polær narkose (EU RAR, 2001). Der er ikke observeret stor forskel i giftighed overfor de testede organismer, men kvalitetsdata for strukturen analogen methylstyrol peger på, at alger er den mest følsomme organisme i kroniske forsøg. Relevansen af at inddrage data fra methylstyrol underbygges ved, at kroniske testresultater fra de to kemikalier stemmer godt overens for alger og krebsdyr. Endvidere stemmer (Q)SAR estimaterne for kronisk giftighed godt overens med testdata, og to modeller estimerer, at NOEC for fisk er højere end 220 µg/l (det skal tilføjes at meget få (Q)SAR modeller for kronisk giftighed er validerede og disse estimater derfor kun anvendes

som støttende data). De angivne non-test data sandsynliggør at fisk *ikke* er den mest følsomme organisme i kroniske tests.

### **Giftighed overfor pattedyr og fugle (NOEC, NOAEL, PNEC<sub>oral</sub> (PNEC<sub>føde</sub>), hormonforstyrrende effekter osv.)**

I INCHEM (CICAD 19, 1999) er der beskrevet et 194 dages kronisk studie med rotter, som eksponeres for isopropylbenzen via sonde. NOAEL er bestemt til 154 mg/kg/dag. NOAEL-værdien omregnes til en NOEC-værdi ved at anvende en omregningsfaktor på 20 for forsøg med rotter >6 uger i flg. EU's TGD (tabel 22). Ved beregning af PNEC<sub>føde</sub> anvendes en UF på 30, da der er tale om et kronisk forsøg med pattedyr (MST, 2004).

$$\text{NOEC}_{\text{mammal, food\_chr}} = \text{NOAEL}_{\text{mammal, oral\_chr}} * \text{CONV}_{\text{mammal}} \\ = 154 \text{ mg/kg lgmsv./dag} * 20 = 3080 \text{ mg/kg}$$

$$\text{PNEC}_{\text{føde}} = \text{NOEC} / \text{UF} = 3080 \text{ mg/kg} / 30 = 103 \text{ mg/kg}$$

Bioakkumulerbarheden af isopropylbenzen belyses i risikovurderingsrapporten (EU RAR, 2001), der konkluderer, at isopropylbenzen er bioakkumulerbart på baggrund af log  $K_{ow}$  på 3,66 og BCF-værdier for fisk på 208-224.

For ferskvand:

$$\text{PNEC}_{\text{sec.pois.w}} = \text{PNEC}_{\text{føde}} / \text{BCF} * \text{BMF} = 103 \text{ mg/kg} / 224 * 1 = 0,46 \text{ mg/l} = 460 \text{ } \mu\text{g/l}$$

For saltvand:

$$\text{PNEC}_{\text{sec.pois.w}} = \text{PNEC}_{\text{føde}} / \text{BCF} * \text{BMF1} * \text{BMF2} = 103 \text{ mg/kg} / 224 * 1 * 1 = 0,46 \text{ mg/l} = 460 \text{ } \mu\text{g/l}$$

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

Isopropylbenzen er ikke klassificeret for kræftfremkaldende, mutagene eller reproduktionsskadende egenskaber (Miljøministeriet, 2002; N-Class, 2002). Der er ikke søgt data for disse egenskaber i andre kilder.

Der foreligger ikke oplysninger om, hvorvidt stoffet har hormonforstyrrende egenskaber. Isopropylbenzen er ikke opført på EUs liste over stoffer med registrerede hormonforstyrrende egenskaber (EU, 2000B), og der er ikke fundet eksperimentelle data vedrørende sådanne egenskaber for stoffet.

Miljøstyrelsen har fastsat et drikkevandskvalitetskriterium for beskyttelse af menneskelig sundhed ved indtagelse af drikkevand på 1  $\mu\text{g/l}$  (for sum af aromaterne).

### **Afsmag i fisk, skaldyr o.l.**

Isopropylbenzen giver afsmag i fisk i koncentrationer på ca. 0,25 mg/l (Verschueren, 1997). Lugtgrænsen (Threshold odor concentration - T.O.C.) for isopropylbenzen er 0,1 mg/l.

### **Nedbrydelighed**

Nedbrydeligheden af isopropylbenzen belyses i risikovurderingsrapporten (EU RAR, 2001), hvor der ikke foreligger egentlige test, der dokumenterer at kravet for let nedbrydelighed er overholdt – og det konkluderes at isopropylbenzen ikke er let bionedbrydeligt. Isopropylbenzen er endvidere klassificeret med R53 og anses på den baggrund for ikke at være let nedbrydeligt i vandmiljø.

### **Bioakkumulering (log K<sub>ow</sub>, BCF, BMF)**

Bioakkumulerbarheden af isopropylbenzen belyses i risikovurderingsrapporten (EU RAR, 2001), der konkluderer at isopropylbenzen er potentielt bioakkumulerbart på baggrund af log K<sub>ow</sub> på 3,66 og BCF-værdier for fisk på 208-224.

### **Naturlig forekomst**

Isopropylbenzen er naturligt forekommende i petroleumbaseret råolie og kultjære (Verschueren, 1997; EU RAR, 2001).

### **Vandkvalitetskriterie, inkl. argumentation og kvalitetsvurdering af udslagsgivende undersøgelse**

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

Som grundlag for vandkvalitetskriteriet beregnes først en PNEC-værdi som beskrevet i "Principper for fastsættelse af vandkvalitetskriterier for stoffer i overfladevand" (Miljøstyrelsen, 2004). Datagrundlaget herfor består af resultater af korttidstest (alger, krebsdyr, fisk) og længerevarende test med NOEC-værdier for organismer fra to grupper (alger og krebsdyr).

Den laveste NOEC-værdi er på 220 µg/l for alger og da datakvaliteten er vurderet i EU RAR (2001) anses den for at være valid og anvendes som grundlag for vandkvalitetskriteriet.

Der er kroniske data for alger og krebsdyr, og det er sandsynliggjort, at fisk ikke er den mest følsomme gruppe (med inddragelse af non-test data for akut og kronisk giftighed for fisk), hvilket medfører, at der kan anvendes en usikkerhedsfaktor på 10 for ferskvand og 100 for saltvand. Dette giver en PNEC på 22 µg/l for ferskvand og 2,2 µg/l for saltvand.

Der skal desuden udledes et korttidsvandkvalitetskriterium KVKK, hvor den laveste L/EC<sub>50</sub>-værdi på 600 µg/l for dafnier anvendes. Der haves EC<sub>50</sub> værdier for 3 trofiske niveauer og der anvendes en usikkerhedsfaktor på 100 (European Commission, 2003; Miljøstyrelsen, 2004)

hvilket giver et KVKK på 6 µg/l. Da KVKK ikke kan være lavere end VKK, anvendes VKK for ferskvand også som KVKK for ferskvand

Isopropylbenzen anses ikke for at være let nedbrydeligt i vandmiljø, og ikke for at være bioakkumulerbart.

Det foreslås på den baggrund ikke at anvende en ekstra usikkerhedsfaktor til fastlæggelse af vandkvalitetskriterierne ud fra den beregnede PNEC-værdi.

De beregnede værdier for  $PNEC_{sec.pois.w}$  og  $PNEC_{hhw}$  er højere end PNEC-værdien og får derfor ikke betydning for vandkvalitetskriteriet.

Der foreslås på den baggrund følgende vandkvalitetskriterier for isopropylbenzen:

$$\begin{aligned}VKK_{ferskvand} &= 22 \mu\text{g/l} \\VKK_{saltvand} &= 2,2 \mu\text{g/l} \\KVKK_{ferskvand} &= 22 \mu\text{g/l} \\KVKK_{saltvand} &= 6 \mu\text{g/l}\end{aligned}$$

## Referencer

Chemfinder (2002): On-line database (okt./nov. 2002):  
<http://www.chemfinder.com/cgi-win/cfserver.exe/>

Danish QSAR Database (2009). Online version: <http://130.226.165.14/index.html>

ECOSAR (2001). U.S. Environmental Protection Agency. V. 0.99. Computer program.

EU (2000A): The European Parliament and the Council. Directive 2000/60/EC of the European Parliament and of the Council of 23 October 2000 establishing a framework for Community action in the field of water policy.  
[www.europa.eu.int/eur-lex/pri/en/oj/dat/2000/l\\_327/l\\_32720001222en00010072.pdf](http://www.europa.eu.int/eur-lex/pri/en/oj/dat/2000/l_327/l_32720001222en00010072.pdf)

EU (2000B): European Commission DG ENV. June 2000. Towards establishment of priority list of substances for further evaluation of their role in endocrine disruption – preparation of a candidate list of substances as a basis for priority setting.

EU RAR (2001): Risk Assessment Report, Cumene. Final report, November 2001. Spain.

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.

Miljø- og Energiministeriet (1996): Miljø- og Energiministeriets bekendtgørelse nr. 921 om kvalitetskrav for vandområder og krav til udledning af visse farlige stoffer til vandløb, søer eller havet.

Miljøministeriet (2002). Bekendtgørelse nr. 439 af 3. juni 2002. Listen over farlige stoffer 2002. Miljøministeriet, Miljøstyrelsen.

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

OECD (Q)SAR Application Toolbox. Computer program V. 1.1.

Verschueren, K. (1997). Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals. 3. ed. Van Nostrand Reinhold Company