

5. oktober 2006

3-chlor-p-toluidin
CAS No. 95-74-9
Chlortoluidiner

Vandkvalitetskriterie_{ferskvand} = 0,62 µg/l

Vandkvalitetskriterie_{saltvand} = 0,062 µg/l

Korttidsvandkvalitetskriterie = 62 µg/l

Summary

A water quality standard for 3-chloro-p-toluidene was derived as described in the EU Water Framework Directive (EU, 2000A). Given the structural similarity 2-chloro-p-toluidin is, however, considered to have the same toxicological properties as 3-chloro-p-toluidin, and therefore the data for these two substances are combined. The lowest EC50 value is 0.62 mg/l (*Daphnia magna*). An assessment factor of 1000 and 10000 was used respectively in deriving PNEC for freshwater and saltwater. There is no information on potential endocrine disrupting properties. The substance is not considered readily biodegradable in the aquatic environment and it is not considered bioaccumulative. Therefore, no other considerations than the toxicity are relevant for deriving the water quality standard and it is set equal to the PNEC value. The maximum acceptable concentration is derived by using an assessment factor of 10, because there are 11 different species representing 7 different higher taxonomic groups. The water quality standards are thus:

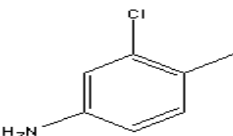
WQ_{freshwater} = 0.00062 mg/l = 0,62 µg/l

WQ_{saltwater} = 0.000062 mg/l = 0,062 µg/l

MAC = 62 µg/l

1 STRUKTUR, EGENSKABER OG FOREKOMST

Tabel 1.1 Fysisk-kemiske etc. egenskaber for 2-chlor-p-toluidin
Physico-chemical etc. properties of 2-chloro-p-toluidene

CAS-nr. / CAS No.	95-74-9
Struktur / Structure	
Synonymer / Synonyms	3-chlor-4-methylanilin, 3-Chloro-4-methylbenzenamine
Klassificering / Classification	Ingen klassificering ¹
Molekylær formel / Empirical formula	C ₇ H ₈ ClN ²
Molvægt / Molar weight	141,6 g/mol ²
Vandopløselighed / Water solubility (25°C)	953,9 mg/l ⁴ (estimat)
Octanol-vand fordelingskoefficient/ Log P _{ow}	2,27 ³ (estimat)

1 Miljøministeriet (2002)

2 Chemfinder (2002)

3 Syracuse (2002)

4 EPI (2000)

Der er ikke fundet oplysninger om naturlig forekomst eller anvendelse af 3-chlor-p-toluidin.

Der er ikke fundet oplysninger om målte koncentrationer af 3-chlor-p-toluidin i vandmiljøet.

2 GIFTIGHED

2.1 Giftighed over for mennesker

3-chlor-p-toluidin er ikke klassificeret (Miljøministeriet, 2002). 3-chlor-p-toluidin har ikke vist tegn på kræftfremkaldende egenskaber, skader på generne eller reproduktionsskader. Dog hæmmer stoffet testikel-DNA syntese hos mus ved 200 mg/kg legemsvægt (BUA 55).. Der foreligger ikke oplysninger om, hvorvidt stoffet har hormonforstyrrende egenskaber. 3-chlor-p-toluidin 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.

2.2 Giftighed over for vandorganismer

Der foreligger ikke data for fisk, men da 2-chlor-p-toluidin og 3-chlor-p-toluidin strukturelt er så ens, at de må antages at have ens toksikologiske egenskaber bruges også data fra 2-chlor-p-toluidin (tabel 2.1). Der foreligger ikke resultater fra længerevarende test for 3-chlor-p-toluidin.

I tabel 2.2 er vist de økotoksikologiske data for 3-chlor-p-toluidin.

Tabel 2.1 Økotoksikologiske data for 2-chlor-p-toluidin (615-65-6)
Ecotoxicity data for 2-chloro-p-toluidine (615-65-6)

Systematisk gruppe / Taxonomic group	Parameter, effekt mål / End point	Eksponeeringstid / Exposure time	Resultat / Result [mg/l]	Antal studier / Number of studies
Fisk / Fish (<i>Pimephales promelas</i>)	LC ₅₀	96 h	35,9 ¹	1
Fisk / Fish (<i>Pimephales promelas</i>)	LC ₅₀	96 h	36,3 ²	1

h: Hours (timer).

¹ Brooke et al. (1984) citeret i US EPA (2002)

² Broderius et al. (1995) citeret i US EPA (2002)

Tabel 2.2 Økotoksikologiske data for 3-chlor-p-toluidin (95-74-9)
Ecotoxicity data for 3-chloro-p-toluidine ()

Systematisk gruppe / Taxonomic group	Parameter, effekt mål / End point	Eksponeeringstid / Exposure time	Resultat / Result [mg/l]	Antal studier / Number of studies
<i>Corbicula manilensis</i> (musling)	LC ₅₀	96 h	62 ^a	1
<i>Elimia catenaria</i> (Snegl)	LC ₅₀	96 h	16 ^a	1
<i>Hydropsyche sp.</i> (Vårflue)	LC ₅₀	96 h	7,5 ^a	1
<i>Isonychia sp.</i> (Døgnflue)	LC ₅₀	96 h	3,8 ^a	1
<i>Daphnia magna</i>	EC ₅₀	48 h	0,62 ^b	1
<i>Palaemonetes kadiakensis</i> (Reje)	LC ₅₀	96 h	4,5 ^a	1
<i>Procambarus acutus acutus</i> (Krebs)	LC ₅₀	96 h	8,8 ^a	1
<i>Rana spinocephala</i> (Frø)	LC ₅₀	96 h	32 ^a	1
<i>Scenedesmus subspicatus</i> (Alge)	EC ₅₀	7 d	22,3 ^c	1
<i>Chlorella vulgaris</i>	EC ₅₀	6 – 9 h	17,8 – 25,2 ^c	1

^a US EPA (2005)

^b Kühn et al. (1989)

^c EUs Klassificeringsgruppe, 2000

2-chlor-p-toluidin og 3-chlor-p-toluidin er strukturelt så ens, at man må forvente, at de besidder de samme egenskaber toksikologisk set. De to målte værdier (LC50) for fisk for 2-chlor-p-toluidin er meget tæt på frø-LC50 for 3-chlor-p-toluidin.

Beregningen af VKK baseres derfor på de kombinerede datasæt for 2-chlor-p-toluidin og 3-chlor-p-toluidin.

Den laveste LC₅₀-værdi er på 0,62 mg/l for krebsdyr fra et forsøg udført af Kühn et al. (1989). Forsøget er velbeskrevet og udført i henhold til den tyske standard DIN 38412, Part II.

3 BIOAKKUMULERING

Der er ikke fundet eksperimentelle data for bioakkumulering af 3-chlor-p-toluidin. 3-chlor-p-toluidin har en log P_{ow} på 2,27. På den baggrund vurderes 3-chlor-p-toluidin ikke at være bioakkumulerbart.

4 NEDBRYDELIGHED

3-chlor-p-toluidin er ikke let nedbrydeligt (0% efter 14 dage (EUs Klassificeringsgruppe, 2000) og 0% efter 20 dage (BUA55)) og 3-chlor-p-toluidin betragtes således som ikke let nedbrydeligt.

5 LUGT OG SMAG

Der er ikke fundet oplysninger om stoffets afgivelse af lugt og/eller smag til levende organismer i vandmiljøet.

6 FORSLAG TIL VANDKVALITETSKRITERIE

Som grundlag for vandkvalitetskriteriet beregnes først en PNEC-værdi som beskrevet i Vandrammedirektivet (EU, 2000A). Hertil anvendes den laveste EC₅₀-værdi på 0,62 mg/l og en faktor 1000 og 10000 for henholdsvis fersk- og saltvand. Herved bliver PNEC-værdien henholdsvis 0,00062 mg/l og 0,000062 mg/l.

3-chlor-p-toluidin er foreslået klassificeret N; R50-53. Der er ikke fundet oplysninger om hormonforstyrrende egenskaber. Stoffet anses ikke for at være bioakkumulerbart, og ikke for at være let nedbrydeligt i vandmiljø.

Der er dermed ikke andre forhold, der kommer i betragtning ved fastsættelsen af vandkvalitetskriteriet, der bliver lig med PNEC-værdien.

Der er EC50 værdier for mindst 11 arter fra 7 forskellige overordnede systematiske grupper. Derfor vælges at bruge faktor 10 på laveste EC50 ved beregning af korttidsvandkvalitetskriteriet, dvs. $0,62 \text{ mg/l} : 10 = 0,062 \text{ mg/l}$.

Vandkvalitetskriterierne bliver således:

$$\begin{aligned} \text{VKK}_{\text{ferskvand}} &= 0,00062 \text{ mg/l} = \mathbf{0,62 \mu\text{g/l}} \\ \text{VKK}_{\text{saltvand}} &= 0,000062 \text{ mg/l} = \mathbf{0,062 \mu\text{g/l}} \\ \text{KVKK} &= 0,062 \text{ mg/l} = \mathbf{62 \mu\text{g/l}} \end{aligned}$$

7 REFERENCER

Broderius, S.J., M.D. Kahl, and M.D. Hoglund (1995). Use of Joint Toxic Response to Define the Primary Mode of Toxic Action for Diverse Industrial Organic Chemicals. *Environ.Toxicol.Chem.* 14(9):1591-1605 (Author Communication Used).

Brooke, L.T., D.J. Call, D.L. Geiger, and C.E. Northcott (1984). Acute Toxicities of Organic Chemicals to Fathead Minnows (*Pimephales promelas*), Vol. 1. Center for Lake Superior Environmental Stud., Univ.of Wisconsin-Superior, Superior, WI :414.

BUA 55 (1990): Chlorotoluidines. Gesellschaft Deutscher Chemiker, GDCH-Advisory Committee on Existing Chemicals of Environmental Relevance (BUA), Report 55, December 1990.

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

EPI (2000). EPIwin version 3.10 US EPA (on-line) <http://www.epa.gov/oppt/exposure/docs/episuitedl.htm>.

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

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.

EUs Kalssificeringgruppe (2000): Arbejdsrapport, nummereret ECBI/08/00 Add.1.

IUCLID (2000): International Uniform Chemical Information Database. European Commission, Joint Research Centre, European Chemicals Bureau, EUR 19559 EN. CD-ROM.

Kühn, R., M. Pattard, K.-D. Pernak & A. Winter (1989): Results of the harmful effects of selected water pollutants (anilines, phenols, aliphatic compounds) to *Daphnia magna*. Wat. Res. vol. 23: 495-499.

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 (2005): QSAR-beregninger med Miljøstyrelsens modeller i Multicase programmet.

N-Class (2002): Den Nordiske klassificeringsdatabase. On-line på: www.kemi.se (okt./nov. 2002).

Syracuse (2002): Online database (okt./nov. 2002): <http://esc.syrres.com/>

US EPA (2005). Online database (okt./nov. 2002): www.epa.gov/ecotox/:

US (2002). The Carcinogenic Potency Database (CPDB).

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