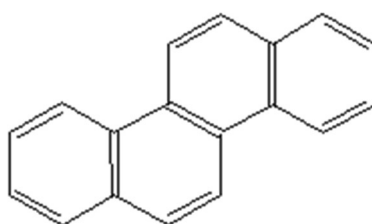




Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

Chrysen CAS nr. 218-01-9



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	2,8 ng/L
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	1,4 ng/L
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	7 ng/L
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	1,4 ng/L
Sedimentkvalitetskriterium	SKK _{ferskvand}	231 µg/kg tørvægt (5% OC)* 4620 µg/kg tørvægt x f _{oc}
Sedimentkvalitetskriterium	SKK _{saltvand}	23,1 µg/kg tørvægt (5% OC)* 462 µg/kg tørvægt x f _{oc}
Biota-kvalitetskriterium, sekundær forgiftning	BKK _{sek.forgiftn.}	Ikke muligt
Biota-kvalitetskriterium, human konsum	HKK	61,4 µg/kg fiskeriprodukt

* SKK-værdierne ovenfor er grundet beregningsmetoden behæftet med betydelig usikkerhed og bør derfor kun anvendes som indikative værdier.

September 2022

Indholdsfortegnelse

FORORD	3
ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS	4
1 INDLEDNING	8
2 FYSISK KEMISKE EGENSKABER	10
3 SKÆBNE I MILJØET	11
3.1 NEDBRYDELIGHED	11
3.2 BIOAKKUMULERING	12
3.3 NATURLIG FOREKOMST	13
4 TOKSICITETSDATA	14
4.1 TOKSICITET OVER FOR VANDLEVENDE ORGANISMER	14
4.2 TOKSICITET OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	15
4.3 TOKSICITET OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	15
4.4 TOKSICITET OVER FOR MENNESKER	15
5 ANDRE EFFEKTER	16
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	17
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	17
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	18
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	18
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA, SEKUNDÆR FORGIFTNING (BKK _{SEK. FORGIFTN.})	19
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	20
6.6 VANDKVALITETSKRITERIUM BASERET PÅ BKK _{SEK. FORGIFTN.} OG HKK	20
6.7 KONKLUSION PÅ VANDKVALITETSKRITERIER (VKK) OG KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIER (KVKK)	21
7 KONKLUSION	22
8 REFERENCER	23

Bilag A: Test data for Chrysen

Bilag B: Non-test data for Chrysen

Forord

Et kvalitetskriterium i vandmiljøet er det højeste koncentrationsniveau, ved hvilket der skønnes, ikke at forekomme uacceptable negative effekter på vandøkosystemer.

Miljøstyrelsen (MST) udarbejder kvalitetskriterier for kemikalier i vandsøjlen, i sediment, i dyr og planter (biota) og for human konsum.

Miljøstyrelsen 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 fastsættelse af kvalitetskriterier i vandmiljøet (EU 2018) og Miljøstyrelsens vejledning til fastsættelse af vandkvalitetskriterier (Miljøstyrelsen 2004). Metodikken er endvidere i overensstemmelse med EU's vejledning til risikovurdering under REACH forordningen (EU 2008).

Dette datablad med kriterier er oprindeligt udarbejdet i 2008, men er opdateret 2022 og, hvis data var tilgængelig, udvidet med kriterier for sediment, biota og human konsum af fiskeprodukter.

Den sidste litteratursøgning i forbindelse med udarbejdelse af nærværende datablad er foretaget i august 2022.

English summary and conclusions

Chrysene belongs to the group of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs). The substance occurs i.e. as a constituent in UVCB¹. Chrysene is derived from coal and petroleum (Germany, 2017).

Derivation of environmental quality standards (EQS) for the aquatic environment is following the EU Guidance Document No. 27. Technical Guidance Document (TGD) for Deriving Environmental Quality Standards (EU, 2018).

AA-EQS for water

Relevant ecotoxicity data are presented in EU's RAR for Coal-Tar Pitch (ECB, 2008) and in RIVMs report with environmental risk limits for PAHs (Verbruggen, 2012). Most of the same studies are presented in both reports, but only Verbruggen (2012) has given each study a Klimisch score. In the present dossier, only data with a Klimisch score of 1 or 2 given by Verbruggen (2012) or by the Danish EPA is used in the assessment. The complete dataset is listed in appendix A.

Chronic effect values are available for four freshwater species (*Pseudokirchneriella subcapitata*, *Ceriodaphnia dubia*, *Daphnia magna* and *Brachydanio rerio*), representing the taxonomic groups: green algae, crustacean and fish. All of the effect values are "higher than" values, since no significant effects were observed by "regular toxicity experiment" around or below the water solubility of chrysene. The effect values will only have a supportive role. No chronic data is available for marine species.

Taking the "higher than" effect values into consideration an assessment factor of 10 to the lowest NOEC or E(L)C₅₀ would normally be applied, since data covers three taxonomic groups. However, the lowest effect value found is the acute LC₅₀ for *Daphnia magna* of 0.7 µg/L from a test where UV light was applied. Further, QSAR predictions (table 4.1 and appendix B) are generally lower than the test data. Therefore, an assessment factor of 50 was applied to the *D. magna* LC₅₀ for derivation of the AA-EQS for chrysene in freshwater:

$$\text{AA-EQS}_{\text{freshwater}} = 0.7 \mu\text{g/L} / 50 = 0.014 \mu\text{g/L} = 14 \text{ ng/L}$$

No additional chronic toxicity data for typically marine species are available. Therefore, an assessment factor of 500 is applied to derive the AA-EQS for marine water:

$$\text{AA-EQS}_{\text{saltwater}} = 0.7 \mu\text{g/L} / 500 = 0.0014 \mu\text{g/L} = 1.4 \text{ ng/L}$$

MAC-EQS for water

Acute effect values are available for one freshwater species (*Daphnia magna*) representing the taxonomic group: crustacean. One of the studies results in a "higher than" value and the other study results in a LC₅₀ of 0.7 µg/L. For marine species, only one study for the bacteria *Vibrio fischeri* is available with an effect value above the water solubility for chrysene.

¹ Substance of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials

Thus, the base set is not fulfilled solely by the experimental data, however by including the estimated values from the Danish Q(S)AR database and EPI ECOSAR (table 4.1 and appendix B) with values similar to the experimental acute values it can be justified to derive MAC-EQS.

For derivation of the MAC-EQS for freshwater an assessment factor of 100 is applied to the LC₅₀ of 0.7 µg/L for *Daphnia magna*:

$$\text{MAC-EQS}_{\text{freshwater}} = 0.7 \mu\text{g/L} / 100 = 0.007 \mu\text{g/L} = 7 \text{ ng/L}$$

No additional acute toxicity data for typically marine species are available. Therefore, an assessment factor of 1000 is applied to the same toxicity value to derive the MAC-EQS for marine water:

$$\text{MAC-EQS}_{\text{saltwater}} = 0.7 \mu\text{g/L} / 1000 = 0.0007 \mu\text{g/L} = 0.7 \text{ ng/L}$$

Since MAC-EQS for fresh- and saltwater results in values lower than the AA-EQS for fresh- and saltwater, the MAC-EQS is set equal to AA-EQS:

$$\text{MAC-EQS}_{\text{freshwater}} = \text{AA-EQS}_{\text{freshwater}} = 14 \text{ ng/L}$$

$$\text{MAC-EQS}_{\text{saltwater}} = \text{AA-EQS}_{\text{saltwater}} = 1.4 \text{ ng/L}$$

QS for sediment

Chrysene has a log K_{ow} of 5.73 and hereby fulfils the criteria for determining a QS for sediment according to TGD27 (EU, 2018).

No studies with chrysene on sediment-dwelling organisms were identified and, hence, a QS for sediment is derived using the EqP method and the aquatic quality standards (TGD27, 2018, section 5.2). From the log K_{ow} of 5.73 the log K_{OC} can be determined to 5.52, corresponding to a K_{OC} of 331,131 based on the Karickhoff's equation (EU's RAR, section 3.1.4.2 (ECB, 2008)).

For an EU standard sediment with 5% organic carbon (OC) content, the partition coefficient between solid and water in sediment is, $K_{p_{\text{sed}}} = F_{\text{oc}_{\text{sed}}} \times K_{\text{oc}} = 0.05 \times 331,131 = 16,557$ and the partition coefficient between sediment and water $K_{\text{sed-water}}$ can be determined based on the equation below:

$$\begin{aligned} K_{\text{sed-water}} &= F_{\text{air}_{\text{sed}}} \times K_{\text{air-water}} + F_{\text{water}_{\text{sed}}} + F_{\text{solid}_{\text{sed}}} \times (K_{p_{\text{sed}}} / 1000) \times \text{RHO}_{\text{solid}} \\ &= 0 + 0.8 + 0.2 \times (16,557 / 1000) \times 2500 \\ &= 8,279 \end{aligned}$$

The QS for sediment can be determined based on the equation:

$$\text{QS}_{\text{sed}} = (K_{\text{sed-water}} / \text{RHO}_{\text{sed}}) \times \text{QS}_{\text{water}} \times 1000$$

This results in the following QS for sediment:

$$\text{QS}_{\text{freshwater}} = (8,279 / 1300) \times 0.014 \mu\text{g/L} \times 1000 = 89 \mu\text{g/kg ww (5\% OC)}$$

$$\text{QS}_{\text{saltwater}} = (8,279 / 1300) \times 0.0014 \mu\text{g/L} \times 1000 = 8.9 \mu\text{g/kg ww (5\% OC)}$$

According to TGD27 (EU, 2018) when $\log K_{ow} > 5$, an additional assessment factor of 10 must be used to derive the QS, because extra uncertainty due to uptake by ingestion of food should be covered. It is described in Verbruggen (2012), that studies shows a limited uptake for PAHs and thus applying an extra assessment factor will overestimate the environmental risk. Therefore, no additional assessment factor has been used.

The QS_{sed} in wet weight can be converted to dry weight by applying the conversion factor (COND_{sed}) of 2.6 (EU, 2018):

$$QS_{sed, freshwater} = 89 \mu\text{g/kg ww} \times 2.6 = \mathbf{231 \mu\text{g/kg dw (5\% OC)}}$$

$$231 \mu\text{g/kg dw} / 0.05 = \mathbf{4620 \mu\text{g/kg dw} \times f_{oc}}$$

$$QS_{sed, freshwater} = 8.9 \mu\text{g/kg ww} \times 2.6 = \mathbf{23.1 \mu\text{g/kg dw (5\% OC)}}$$

$$23.1 \mu\text{g/kg dw} / 0.05 = \mathbf{463 \mu\text{g/kg dw} \times f_{oc}}$$

It is recommended that the above QS_{sed} values are used only as indicative values as there is considerable uncertainty associated with the derivation.

QS for secondary poisoning

Chrysene has a $\log K_{ow}$ of 5.73 and BCF values > 100 (table 3.1) and hereby fulfils the criteria for determine a QS for secondary poisoning according to TGD27 (EU, 2018).

No toxicity data for effects of chrysene on birds and mammals are available, thus a QS cannot be determined. It is though, expected that the QS for human health will be more protective than the QS for secondary poisoning due to the QS for human health is determined based on a cancer risk of 10^{-6} per lifetime.

QS for human health

Chrysene have a harmonized classification of Carc. 1B; H350 (may cause cancer) and Muta. 2; H341 (suspected of causing genetic defects, which trigger the derivation of a QS for human health according to TGD27 (EU, 2018).

A QS for human health was calculated based on a risk limit for human health of $0.5 \mu\text{g/kg}_{bw}^{-1}/\text{day}$ (Verbruggen & van Herwijnen, 2011), using section 4.5.3. in the TGD:

$$QS_{human health} = (0.2 \times TL_{hh}) / 0.00163 \text{ kg fish product/kg bw/day} = (0.2 \times 0.5 \mu\text{g/kg}_{bw}^{-1}/\text{day}^{-1}) / 0.00163 \text{ kg fish product/ kg bw/day}$$

$$QS_{human health} = \mathbf{61.4 \mu\text{g/kg fish product, ww}}$$

QS_{water} based on QS_{sec.pois.} and QS_{human health}

The corresponding concentration in water, $QS_{human health, water}$, was calculated based on BAF values for molluscs (145,000 L/kg) and fish (BAF = 21,700 L/kg fish):

$$QS_{human health, water, molluscs}: \quad 61.4 \mu\text{g} \times \text{fish product}_{ww}^{-1} / 145,000 \text{ L/kg molluscs}^{-1} = 0.42 \text{ ng/L}$$

$$QS_{human health, water, fish}: \quad \mathbf{61.4 \mu\text{g} \times \text{fish product}_{ww}^{-1} / 21,700 \text{ L/kg fish}^{-1} = \mathbf{2.8 \text{ ng/L}}}$$

As it is considered that most people probably cover their consumption of fishery products solely by consuming fish instead of molluscs, the QS for human health based on fish is deemed most

relevant. This QS is below the AA-EQS for both fresh- and saltwater and should therefore be implemented as the overall AA-EQS for both fresh- and saltwater.

Conclusion on AA-EQS and MAC-EQS

AA-EQS for fresh- and saltwater are determined to 14 and 1.4 ng/L, respectively. The calculation of $QS_{\text{human health, water, fish}}$ at 2.8 ng/L is however a factor of five below the $AA-EQS_{\text{freshwater}}$, but a factor of two above the $AA-EQS_{\text{saltwater}}$. This results in the following AA-EQS values to ensure protection of human health:

$$AA-EQS_{\text{freshwater}} = QS_{\text{human health, water, fish}} = 2.8 \text{ ng/L}$$

$$AA-EQS_{\text{saltwater}} = 1.4 \text{ ng/L}$$

MAC-EQS for fresh- and saltwater are determined to 7 and 0.7 ng/L, respectively. Based on the above results for AA-EQS for fresh- and saltwater, $MAC-EQS_{\text{freshwater}}$ is calculated to 7 ng/L based on the direct acute toxicity for aquatic organisms. $MAC-EQS_{\text{saltwater}}$ is below the $AA-EQS_{\text{saltwater}}$ and should be set at an equal protection level (according to TGD27 page 36, EU 2018):

$$MAC-EQS_{\text{freshwater}} = 7 \text{ ng/L}$$

$$MAC-EQS_{\text{saltwater}} = 1.4 \text{ ng/L}$$

In conclusion, the following EQS for the aquatic environment have been derived for chrysene:

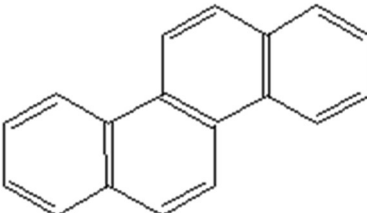
$AA-EQS_{\text{freshwater}}$	= 2.8 ng/L
$AA-EQS_{\text{saltwater}}$	= 1.4 ng/L
$MAC-EQS_{\text{freshwater}}$	= 7 ng/L
$MAC-EQS_{\text{saltwater}}$	= 1.4 ng/L
$QS_{\text{sed, freshwater}}$	= 231 $\mu\text{g/kg dw}$ (5% OC) = 4620 $\mu\text{g/kg dw} \times f_{\text{oc}}$
$QS_{\text{sed, saltwater}}$	= 23.1 $\mu\text{g/kg dw}$ (5% OC) = 462 $\mu\text{g/kg dw} \times f_{\text{oc}}$
$QS_{\text{sec.pois.}}$	= not possible
$QS_{\text{human health}}$	= 61.4 $\mu\text{g/kg}$ fish product, ww

1 Indledning

Chrysen tilhører stofgruppen af polycykliske aromatiske hydrocarboner (PAH). Stoffet har ingen kendte anvendelser af betydning og produceres derfor ikke kommercielt, men det forekommer bl.a. som en bestanddel i UVCB² afledt af kul og olie. Chrysen (o.a. PAH'er) dannes også utilsigtet ved ufuldstændig forbrænding af organisk materiale så som træ og andet plantemateriale, kul, olie mv., herunder ved naturligt forekommende hændelser som f.eks. skovbrande og vulkanudbrud (Germany, 2017).

Oplysninger om identiteten af chrysen fremgår af tabel 1.1.

Tabel 1.1. Identitet og struktur af chrysen (ECHA, 2017).

IUPAC navn	Chrysene
Strukturformel	
CAS nr.	218-01-9
EINECS nr.	-
Kemisk formel	C ₁₈ H ₁₂
SMILES	c12cccc1ccc3c4cccc4ccc23 (Verbruggen, og van Herwijnen, 2011)
Harmoniseret klassificering	Carc. 1B; H350 (kan fremkalde kræft) Muta 2; H341 (mistænkt for at forårsage genetiske defekter) Aquatic Acute 1; H400 (meget giftig for vandlevende organismer) Aquatic Chronic 1; H410 (meget giftig med langvarige virkninger for vandlevende organismer)

Chrysen er blevet gransket regulatorisk under REACH-forordningen, både som enkeltstof og i gruppen af PAH'er. Som enkeltstof er chrysen opført på "Kandidatlisten" under REACH, da det er et særligt problematisk stof (SVHC³) grundet dets kræftfremkaldende egenskaber (artikel 57a), PBT- (artikel 57d) og vPvB-egenskaber (artikel 57e) (ECHA, 2018).

² "Substance of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological Materials"

³ "Substance of Very High Concern"

Flere reguleringstiltag under REACH er trådt i kraft for en gruppe med chrysen og syv andre PAH⁴. Disse stoffer er reguleret i forbrugerartikler og bildæk (REACH, indgang 50), og Holland har udarbejdet et forslag til begrænsning af samme otte PAH til materialer, der anvendes i kunstgræsbaner og underlag af gummidækningsmateriale, der trådte i kraft juli 2021 (EU, 2021).

⁴ Benz[a]pyren (CAS No 50-32-8), benz[e]pyren (CAS No 192-97-2), benz[a]anthracen (CAS No 56-55-3), benz[b]fluoranthren (CAS No 205-99-2), benz[j]fluoranthren (CAS No 205-82-3), benz[k]fluoranthren (CAS No 207-08-9), dibenz[a,h]anthracen (CAS No 53-70-3).

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk-kemiske egenskaber for chrysen fremgår af tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk-kemiske egenskaber for chrysen.

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	228,29	ECHA, 2017
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	255,5	ECHA, 2017
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	448	ECHA, 2017
Damptryk, P_v (Pa)	$8,4 \times 10^{-7}^*$ - $1,7 \times 10^{-4}^{**}$	ECHA, 2017
Henry's konstant, H ($\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)	0,247	Verbruggen & van Herwijnen, 2011
Vandopløselighed, S_w ($\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	1-3,3	Mackay, 2006
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	5,73 ¹ 5,81	ECHA, 2017 ECB, 2008; Verbruggen & Herwijnen, 2011

* ved 25 $^{\circ}\text{C}$

** ved 20 $^{\circ}\text{C}$

3 Skæbne i miljøet

SVHC-støttedokumentet for klassificering af chrysen som et SVHC-stof pga. dets kræftfremkaldende egenskaber, samt PBT- og vPvB-egenskaber (ECHA, 2017), inkluderer en gennemgang af tilgængelige data og relevante dokumenter for chrysens skæbne i miljøet, bl.a. SVHC-støttedokumentet for 'Coal-Tar Pitch, High Temperature' (CTPHT) og EU's Risikovurderingsrapport for CTPHT⁵ (EU RAR) (ECB, 2008).

Chrysen er klassificeret som et SVHC under REACH artikel 57(e) grundet stoffets høje persistens og meget bioakkumulerende egenskaber (vPvB) (ECHA, 2018).

3.1 Nedbrydelighed

Generelt bidrager hydrolyse ikke til nedbrydning af PAH i miljøet, grundet disse stoffers kemiske stabilitet, hvilket også vurderes at være gældende for chrysen. PAH kan nedbrydes abiotisk ved fotolyse, og processen beskrives nærmere i SVHC-støttedokumentet med EU's RAR for CTPHT som oprindelig kilde. Overordnet vurderes fotolyse af chrysen ikke at være en vigtig kilde til nedbrydning af stoffet, da fotolyse kun forventes at forekomme i de øverste lag af vandkolonnen (ECHA, 2017). En vigtig note vedrørende fotolyse af PAH er, at denne reaktion, i varierende grad, kan medføre en højere toksicitet, da fotolysen kan resultere i dannelse af meget reaktive oxygenmolekyler (såkaldt singlet oxygen; $^1\text{O}_2$), som kan være skadelige for biologisk materiale, og/eller danne nye, mere giftige komponenter ved fotomodifikation (ofte oxidation) (ECHA, 2009).

Hvorvidt der kan forekomme aerob bionedbrydning af PAH afhænger af antallet af aromatiske ringe i det enkelte stof. PAH med fire ringe eller mindre siges at kunne bionedbrydes aerobt, hvorimod aerob nedbrydning af PAH med mere end fire aromatiske ringe foregår meget langsomt. Chrysen, der har fire ringe, må derfor forventes at kunne nedbrydes under aerobe forhold i miljøet, men da stoffet har en lav vandopløselighed og en høj tendens til at binde sig til organisk materiale⁶, er tilgængeligheden af stoffet en begrænsende faktor for bionedbrydning.

Anaerob nedbrydning af PAH sker meget langsomt, og generelt betragtes PAH som værende persistente under anaerobe forhold.

Den beregnede halveringstid i vand for chrysen ligger i intervallet 42-125 dage og længere end 1250 dage i sediment (ECHA, 2017).

⁵ EU's endelige risikovurderingsrapport er inkluderet i 'Annex XV Transitional Report. Documentation of the work done under the Existing Substance Regulation (EEC) No 793/93 and submitted to the European Chemicals Agency according to Article 136(3) of Regulation (EC) No 1907/2006. 2009. Tilgængeligt via: https://echa.europa.eu/da/information-on-chemicals/transitional-measures/annex-xv-transitional-reports?diss=true&search_criteria_ecnumber=266-028-2&search_criteria_casnumber=65996-93-2&search_criteria_name=Pitch%2C+coal+tar%2C+high-temp.

⁶ For PAH er der et lineært forhold mellem K_{ow} og K_{oc} i jord og sediment, og PAH med $\text{Log } K_{ow}$ -værdier på 4,6-6,6 har derfor også et højt potentiale til at binde sig til jord og sediment. Da chrysen har en $\text{Log } K_{ow}$ på 5,73 vurderes stoffet at have et højt adsorptionspotentiale til partikler og organisk materiale i miljøet (ECHA, 2017).

3.2 Bioakkumulering

Overordnet for PAH beskriver EU's risikovurdering af 'Coal-Tar Pitch, High Temperature', at der er mange indikationer på, at biomagnifikation ikke forekommer i hverken akvatiske eller terrestriske organismer (ECB, 2008). Der er oftest tale om 'biominifikation', hvor der forekommer en faldende koncentration af PAH i akvatiske organismer i takt med stigende trofiske niveauer. Dette er forårsaget af organismernes forskellige evne til at metabolisere og derved biotransformere PAH.

Metaboliseringen af chrysen kan ligesom andre PAH (f.eks. benz(a)pyren) være via cytochrom P450-systemet i vertebrater. Det fremgår af SVHC-støttedokumentet, at metaboliseringen også kan forekomme ved andre mekanismer end via cytochrom P450 enzymer, og det nævnes, at bløddyr måske har evnen til at metabolisere PAH i nogen grad. Dog giver BCF-data anledning til bekymring for bioakkumulering i bløddyr (Tabel 3.1). Der foreligger ikke evidens for, at andre relevante taksonomiske grupper (alger og oligochaeta) kan biotransformere chrysen (ECHA, 2017).

Det Nationale Institut for befolkningssundhed og miljø i Holland (RIVM) publicerede i 2011 (Verbruggen & van Herwijnen) en rapport vedrørende miljøkvalitetskriterier for chrysen, som også fremhæves og omtales i SVHC-støttedokumentet (ECHA, 2017). Bilag I i RIVM-rapporten inkluderer detaljerede tabeller med tilgængelige bioakkumuleringsdata for chrysen. Tabel 3.1 nedenfor er fra samme rapport, og giver et overblik over pålidelige⁷ bioakkumuleringsdata for chrysen.

Tabel 3.1. Overblik over bioakkumuleringsdata for chrysen. Fremgår af Verbruggen & van Herwijnen, 2011, tabel 4.

Parameter	Unit	Value	Remark
BCF (crustaceans)	L/kg	6088	Not normalised to 5% lipid
BCF (fish)	L/kg	13	Geometric mean of the BAF values for molluscs.
BAF (molluscs)	L/kg	145000	
BAF (crustaceans)	L/kg	30800	
BAF (fish)	L/kg	21700	
BMF	kg/kg	1	Default value since biomagnification has not been observed

RIVM-rapporten påpeger, at der kun foreligger BCF-værdier udledt fra laboratorieforsøg for krebsdyr og fisk, men at der for samme grupper foreligger feltbaserede BAF-værdier. Ved sammenligning af disse tyder det på, at BCF-værdierne udledt fra laboratorieforsøg underestimerer bioakkumuleringen i felten. Denne forskel fremgår tydeligt ved sammenligning af differencen på BCF-værdier og differencen for BAF-værdier mellem fisk og krebsdyr. Her er det tydeligt, at differencen mellem BAF-værdierne er mindre mellem de to taksonomiske grupper end mellem BCF-værdierne. Overordnet kan den lave BCF-værdi for fisk undervurdere BAF i felten, og det vurderes, at BAF-værdier er mere troværdige for feltsituationen.

⁷ Tildelt en validitetsscore på 1 eller 2 jf. Klimisch et al., 1997

3.3 Naturlig forekomst

Chrysen forekommer naturligt i miljøet, da det dannes ved ufuldstændig forbrænding af organisk materiale og derfor frigives til miljøet ved f.eks. skovbrande. I EU's RAR nævnes vulkansk aktivitet også som en naturlig kilde til PAH i miljøet (ECB, 2008).

4 Toksicitetsdata

4.1 Toksicitet over for vandlevende organismer

Der foreligger en begrænset mængde data om giftigheden af chrysen over for vandlevende organismer. Langt de fleste er opsummeret og vurderet i EU's RAR for Coal-Tar Pitch (ECB, 2008), og/eller i RIVM's fastlæggelse af miljörisikoniveauer for PAH'er (Verbruggen, 2012). Alle data er præsenteret i bilag A.

Der er i forbindelse med opdateringen af dette datablad foretaget søgninger efter eventuelle nyere data om økotoksikologiske effekter af chrysen i vandmiljøet, dels hos ECHA og i US EPA's ECOTOX database, dels i det omfattende review om PAH i vandmiljøet udført af RIVM (Verbruggen, 2012), og endelig ved en supplerende bibliografisk søgning med Google Scholar. Ved disse søgninger er der ikke identificeret yderligere valide studier af relevans for fastsættelse af VKK/KVKK, og dermed heller ingen lavere endpoints for chrysen på vandlevende organismer end de udslagsgivende endpoints, som allerede har indgået i Miljøstyrelsens vurderingsgrundlag i 2008.

For kroniske effekter på ferskvandslevende organismer er der kun fundet ”større end” effektværdier for fire arter: (*Pseudokirchneriella subcapitata*, *Ceriodaphnia dubia*, *Daphnia magna* og *Brachydanio rerio*), der repræsenterer tre taksonomiske grupper: alge, krebsdyr og fisk. Alle effektkoncentrationerne er angivet som ”større end” værdier, da ingen signifikante effekter blev observeret ved ”regular toxicity experiment” omkring eller under vandopløseligheden for chrysen. Værdierne kan derfor kun anvendes som supplerende data i udledningen af kvalitetskriterierne. Der er ikke fundet kroniske effektværdier for saltvandslevende organismer.

For akutte effekter på ferskvandslevende organismer er der fundet to studier på krebsdyret *Daphnia magna*. Studiet af Bisson et al. (2000) angiver en ”større end” effektværdi, som kan anvendes som supplerende data, mens studie af Newsted and Giesy (1987) angiver en LC₅₀ på 0,7 µg/L. For saltvandslevende arter er der kun fundet ét troværdigt studie for bakterien *Vibrio fischeri*, dog ligger effektkoncentrationen over vandopløseligheden for chrysen.

I studiet af Newsted and Giesy (1978) blev dafnierne eksponeret til en enkelt testkoncentration af chrysen i 24 timer, hvorefter de i yderligere 24 timer også blev eksponeret for UV-lys (med en UV-B (315-336 nm) intensitet på 25 ± 3 µW/cm² og UV-A (401-420 nm) intensitet på 120 ± 5 µW/cm², samt synligt lys (4000-700 nm) med en intensitet på 680 ± 10 µW/cm²). Tiden, hvorved 50 % dødelighed forekom (LT₅₀) efter eksponering til UV-lys, var 24 timer, dermed 48 timer efter eksponering til 0,7 µg/L chrysen.

I den danske (Q)SAR database er toksiciteten for ferskvandsorganismer estimeret vha. modellerne Leadscape og SciQSAR, samt EPI ECOSAR (Danish (Q)SAR, 2022). ECOSAR i US EPA's ”EPISUITE”-pakke estimerer chrysen til at tilhøre klassen af neutrale organiske stoffer (US EPA, 2022). Resultaterne fra ovenstående databaser og modeller fremgår af tabel 4.1 og bilag B.

Tabel 4.1 Estimerede akutte effekter af chrysen på ferskvandslevende arter. Værdierne fra den danske (Q)SAR database (2022) er en gennemsnitsværdi af modellerne Leadscope og SciQSAR (bilag A). Alle værdier er tildelt en CRED score på 3 jf. TGD (EU, 2018).

Art	Varighed (timer)	Effekt	Værdi mg/L	Reference
Alger				
<i>Pseudokirchneriella s.</i>	72 t	EC ₅₀	8,3	Danish (Q)SAR, 2022
<i>Grønalge</i>	96 t	EC ₅₀	0,29 ¹	EPI ECOSAR models ²
Krebsdyr				
<i>Daphnia magna</i>	48 t	EC ₅₀	0,4	Danish (Q)SAR, 2022
<i>Dafnie</i>	48 t	EC ₅₀	0,1 ¹	EPI ECOSAR models ³
Fisk				
<i>Fathead minnow</i>	96 t	LC ₅₀	0,1	Danish (Q)SAR, 2022
<i>Fisk</i>	96 t	LC ₅₀	0,1	EPI ECOSAR models ³
<i>Fisk (saltvand)</i>	96 t	LC ₅₀	0,16 ¹	EPI ECOSAR models

¹ EPI ECOSAR modeller angiver, at stoffet muligvis ikke er nok opløseligt til at måle den forudsagte effekt.

² For grønalger fungerer modellen bedst for stoffer, hvor $K_{ow} \leq 6,4$.

³ For fisk og krebsdyr fungerer modellen bedst for stoffer, hvor $K_{ow} \leq 5$.

4.2 Toksicitet over for sedimentlevende organismer

EU's RAR fra 2008 omfatter ikke studier med sedimentlevende organismer, kun vandlevende organismer i fersk- og saltvand. Ved RIVM's omfattende review og vurdering af PAH (Verbruggen, 2012) er der ikke identificeret studier med chrysen for sedimentlevende organismer og ved den opfølgende datasøgning, som beskrevet ovenfor (afsnit 4.1), er der heller ikke identificeret data om effekter på sedimentlevende organismer.

4.3 Toksicitet over for pattedyr og fugle

I EU's RAR (ECB, 2008) konkluderes det, at der hverken foreligger toksicitetsdata for fugle eller pattedyr, som er anvendelige til at kunne udlede en PNEC_{oral} for chrysen. RIVM fandt ved deres søgning for data til miljøkvalitetskriterier for chrysen heller ingen anvendelige data for giftighed over for pattedyr og fugle (Verbruggen & van Herwijnen, 2011). Ved datasøgningen i august 2022 blev der heller ikke fundet data, som kunne være anvendelige til at udlede PNEC_{oral} i pattedyr eller fugle.

4.4 Toksicitet over for mennesker

Chrysen er klassificeret under CLP-forordningen (Nr. 1272/2008) som Carc. 1B; H350 (kan fremkalde kræft) og Muta. 2; H341 (mistænkt for at forårsage genetiske defekter).

Der er ikke fundet oplysninger om ADI/TDI-værdier for chrysen. RIVM har tidligere anvendt en human toksikologisk grænseværdi på $0,50 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{lgv}}^{-1}/\text{day}^{-1}$ (Verbruggen & van Herwijnen, 2011). Denne værdi er udledt på basis af en kræftisiko på 10^{-6} per livstid for "non-threshold effect".

5 Andre effekter

Det vurderes, at chrysen ikke har andre relevante effekter.

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

Vandkvalitetskriterierne er fastsat i overensstemmelse med EU's Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards, nr. 27 (EU, 2018).

EU's RAR (ECB, 2008) og Verbruggen (2012) nævner en stor del af de samme toksicitetsstudier i deres udledning af et vandkvalitetskriterium for chrysen. Det er dog kun i Verbruggen (2012), at der angives Klimisch troværdighedsscorer. I udledningen af et dansk vandkvalitetskriterium er det kun studier med en Klimisch troværdighedsscore på 1 eller 2, som anvendes.

Ydermere anvendes studier, hvor effektkoncentrationen er angivet som en større eller mindre end værdi, ikke direkte i udledningen af hverken vandkvalitetskriteriet eller korttidsvandkvalitetskriteriet jf. TGD27 s. 144 (EU, 2018).

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Som beskrevet i afsnit 4.1 foreligger der kronisk effektdata for fire ferskvandsarter, der repræsenterer basissættet (alge, krebsdyr og fisk). Dog er alle effektkoncentrationer angivet som "større end" værdier, og der er ikke data for saltvandsarter. Chrysen er fototoksisk ligesom anthracen, og det kan således forventes, at den laveste E(L)C₅₀ vil ligge tæt på laveste EC₁₀/NOEC, lige som for anthracen, og at der induceres langtidseffekter efter kort tids eksponering for stoffet, når der er sollys tilstede.

Når "større end" værdierne i det samlede datasæt tages i betragtning, vil man som udgangspunkt for ferskvand anvende en usikkerhedsfaktor på 10 på laveste E(L)C₁₀ eller NOEC, da der er undersøgelser af den kroniske giftighed over for organismer, der repræsenterer tre trofiske niveauer. Disse forsøg synes dog ikke at have været udført med UV-lys, og (Q)SAR-modellerne forudsiger generelt lavere effektkoncentrationer. Dette taler for, at der bør anvendes en højere usikkerhedsfaktor. Da den laveste effektkoncentration er en LC₅₀ for *D. magna*, er det denne værdi, der bruges, og idet det forventes, at LC₁₀ og LC₅₀ for *D. magna* vil være tæt på hinanden, anvendes der ikke en ekstra usikkerhedsfaktor for at tage højde for, at LC₅₀ generelt er større end E(L)C₁₀/NOEC.

VKK for ferskvand bestemmes derfor på baggrund af LC₅₀-værdien på 0,7 µg/L for *D. magna* og en usikkerhedsfaktor på 50:

$$\mathbf{VKK_{ferskvand} = 0,7 \mu\text{g/L} / 50 = 0,014 \mu\text{g/L} = 14 \text{ ng/L}}$$

Da der ikke foreligger yderligere data for saltvandslevende arter anvendes en usikkerhedsfaktor på 500 på samme toksicitetsværdi:

$$\mathbf{VKK_{saltvand} = 0,7 \mu\text{g/L} / 500 = 0,0014 \mu\text{g/L} = 1,4 \text{ ng/L}}$$

Til sammenligning har både EU's RAR (ECB, 2008) og Verbruggen (2012) bestemt VKK for fersk- og saltvand til hhv. 0,07 µg/L og 0,007 µg/L baseret på den akutte effektkoncentration på 0,7 µg/L for *D. magna* fra studiet af Newsted & Giesy (1987) og en usikkerhedsfaktor på 10 for ferskvand og 100 for saltvand.

LANUV⁸ i Tyskland har ikke anvendt de eksisterende data, men fastsat en forsigtighedsgrænseværdi på 0,1 µg/L for overfladevand (information givet fra tyske kollegaer).

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Som beskrevet i afsnit 4.1 foreligger der to studier med effektdata for ferskvandskrebsdyret *D. magna*, hvor det ene angiver en ”større end” effektværdi og det andet studie af Newsted & Giesy (1987) angiver en LC₅₀ på 0,7 µg/L, som også blev anvendt til bestemmelse af VKK. Der foreligger ikke anvendelig data for saltvandslevende arter.

Da basissættet ikke er opfyldt ud fra tilgængelige eksperimentelle data, men ved inddragelse af de estimerede værdier fra den danske (Q)SAR database og EPI ECOSAR, som ligger på niveau med de akutte effektkoncentrationer fra den eksperimentelle data, kan der argumenteres for at bestemme KVKK.

KVKK for ferskvand bestemmes på baggrund af LC₅₀-værdien på 0,7 µg/L for *D. magna* og en usikkerhedsfaktor på 100:

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 0,7 \mu\text{g/L} / 100 = 0,007 \mu\text{g/L} = 7 \text{ ng/L}$$

Da der ikke foreligger yderligere data for saltvandslevende arter anvendes en usikkerhedsfaktor på 1000 på samme toksicitetsværdi:

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 0,7 \mu\text{g/L} / 1000 = 0,0007 \mu\text{g/L} = 0,7 \text{ ng/L}$$

Dette resulterer i værdier lavere end VKK for fersk- og saltvand, og KVKK sættes derfor lig VKK:

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = VKK_{\text{ferskvand}} = 14 \text{ ng/L}$$

$$KVKK_{\text{saltvand}} = VKK_{\text{saltvand}} = 1,4 \text{ ng/L}$$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

SKK skal jf. TGD27 (EU, 2018) beregnes for stoffer med en log K_{ow} ≥ 3. Chrysen har en log K_{ow} på 5,73 (tabel 2.1), og det er derfor relevant at beregne SKK.

Jf. afsnit 4.2 foreligger der ingen data vedr. effekter af chrysen på sedimentlevende organismer, og derfor må SKK udledes ved brug af EqP-metoden og de foreliggende toksicitetsdata (VKK-værdier) for vandlevende organismer jf. TGD27, afsnit 5.2 (EU, 2018):

Der benyttes en Log K_{ow} på 5,73 (25 °C), jf. tabel 2.1, hvorfra Log K_{oc} beregnes til 5,52 (K_{oc} = 331.131) ved brug af Karickhoffs formel jf. EU's RAR, afsnit 3.1.4.2 (ECB, 2008).

For et EU standard sediment med et indhold på 5% organisk karbon (OC) bliver fordelingskoefficienten mellem fast stof og vand, K_{p,sed} = F_{oc,sed} x K_{oc} = 0,05 x 331.131 = 16.557 og fordelingskoefficienten mellem sediment og vand, K_{sed-water} kan beregnes som:

$$K_{\text{sed-water}} = F_{\text{air,sed}} \times K_{\text{air-water}} + F_{\text{water-sed}} + F_{\text{solid-sed}} \times (K_{\text{p,sed}} / 1000) \times RHO_{\text{solid}}$$

⁸ Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen

$$= 0 + 0,8 + 0,2 \times (16.557 / 1000) \times 2500$$

$$= 8.279$$

Dernæst kan SKK bestemmes på baggrund af nedenstående formel:

$$SKK = (K_{\text{sed-water}} / \text{RHO}_{\text{sed}}) \times \text{VKK} \times 1000$$

hvilket for ferskvand giver:

$$SKK_{\text{ferskvand}} = (8.279 / 1300) \times 0,014 \text{ } \mu\text{g/L} \times 1000 = 89 \text{ } \mu\text{g/kg vådvægt (5\% OC)}$$

og for saltvand:

$$SKK_{\text{saltvand}} = (8.279 / 1300) \times 0,0014 \text{ } \mu\text{g/L} \times 1000 = 8,9 \text{ } \mu\text{g/kg vådvægt (5\% OC)}$$

Da Log K_{ow} for chrysen imidlertid er større end fem, skal der (jf. TGD27, side 104 øverst) benyttes en ekstra usikkerhedsfaktor på 10, for at tage højde for den ekstra usikkerhed, der er ved optagelse af stoffet via føde. Verbruggen (2012) beskriver, at undersøgelser har vist, at dette optag er mere begrænset for PAH'er og anvendelsen af en ekstra usikkerhedsfaktor vil være en overestimering af miljørisikoen. Derfor anvendes der i dette tilfælde ikke en ekstra usikkerhedsfaktor på 10.

SKK'erne på vådvægtsbasis kan omsættes til tørvægtbasis ved hjælp af en omregningsfaktor (COND_{sed}) på 2,6 jf. TGD27, side 104. Herved fås følgende tørvægtsbaserede kriterieværdier for chrysen i sediment:

$$SKK_{\text{ferskvand}} = 89 \text{ } \mu\text{g/kg vådvægt} \times 2,6 = \mathbf{231 \text{ } \mu\text{g/kg tørvægt (5\% OC)}}$$

$$231 \text{ } \mu\text{g/kg tørvægt} / 0,05 = \mathbf{4620 \text{ } \mu\text{g/kg tørvægt} \times f_{oc}}$$

$$SKK_{\text{saltvand}} = 8,9 \text{ } \mu\text{g/kg vådvægt} \times 2,6 = \mathbf{23,1 \text{ } \mu\text{g/kg tørvægt (5\% OC)}}$$

$$23,1 \text{ } \mu\text{g/kg tørvægt} / 0,05 = \mathbf{462 \text{ } \mu\text{g/kg tørvægt} \times f_{oc}}$$

Anvendelse af EqP-metoden er behæftet med betydelig usikkerhed, og ovenstående SKK-værdier bør derfor anvendes som indikative eller foreløbige værdier, indtil de kan verificeres ud fra eksperimentelle endpoints baseret på test med sedimentlevende organismer.

6.4 Kvalitetskriterium for biota, sekundær forgiftning ($\text{BKK}_{\text{sek. forgiftn.}}$)

Chrysen har en $\log K_{ow} > 3$ (5,73 jf. afsnit 2) og BCF/BAF-værdier > 100 (jf. afsnit 3.2), og der er dermed, jf. TGD27 (EU, 2018), belæg for udledning af et biotakvalitetskriterium for sekundær forgiftning ($\text{BKK}_{\text{sek. forgiftn.}}$).

Der blev imidlertid ved litteratursøgningen i august 2022 ikke identificeret egnede data til at kunne udlede et sådant kriterium, og datagrundlaget er derfor utilstrækkeligt til videre udregninger.

Det forventes dog, at det nedenfor beregnede kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer sandsynligvis vil være mere beskyttende end et eventuelt $\text{BKK}_{\text{sek. forgiftn.}}$, da HKK beregnes med en grænseværdi udledt på basis af en kræftisiko på 10^{-6} per livstid.

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Kriterier for, hvorvidt der skal beregnes et kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK), fremgår af TGD27 (EU, 2018), afsnit 2.4.3.2. Af dette afsnit fremgår, at dette udelukkende baseres på de fareegenskaber, som stoffet besidder. Ydermere fremgår det, at stoffer som forårsager effekter på reproduktion, fertilitet og udvikling er af særlig vigtighed, da disse har langsigtede effekter, som kan have en indflydelse på populationer.

Chrysen har følgende harmoniserede klassificeringer under CLP-forordningen, som udløser krav om beregning af et kvalitetskriterium for human konsum: Carc. 1B; H350 (kan fremkalde kræft) og Muta. 2; H341 (mistænkt for at forårsage genetiske defekter).

Der er ikke fundet oplysninger om ADI/TDI for chrysen. Dog har RIVM tidligere anvendt en humantoksikologisk grænseværdi, udledt på basis af en "non-threshold effect" kræftisiko på 10^{-6} per livstid, på $0,50 \mu\text{g}/\text{kg}_{\text{lgv}}^{-1}/\text{dag}^{-1}$ til beregning af et kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (Verbruggen & van Herwijnen, 2011). Denne grænseværdi anvendes til de videre beregninger.

Da der ikke foreligger datagrundlag til en vurdering af koncentrationsindtaget af chrysen via fisk, anvendes standardværdien på 20 % som allokeringsfaktor (EU, 2018). Det antages at en gennemsnitsborger på 70 kg spiser 115 g fisk og skaldyr pr. dag svarende til et dagligt indtag på 0,00163 kg fisk/lgv. (EU, 2018) og HKK kan dermed beregnes som følgende:

$$\text{HKK} = (0,2 \times \text{TL}_{\text{hh}}) / 0,00163 = (0,2 \times 0,5 \mu\text{g}/\text{kg lgv}/\text{dag}) / 0,00163 \text{ kg fiskeriprodukt}/\text{kg lgv}/\text{dag}$$

$$\text{HKK} = 61,4 \mu\text{g}/\text{kg fiskeriprodukt, vådvægt}$$

6.6 Vandkvalitetskriterium baseret på $\text{BKK}_{\text{sek. forgiftn.}}$ og HKK

Jf. TGD27 (EU, 2018) skal der laves en tilbageregning fra biotakvalitetskriterierne ($\text{BKK}_{\text{sek. forgiftn.}}$ og HKK) til en vandkoncentration, for at se om vandkvalitetskriterierne fastsat for direkte effekter, også beskytter for sekundær forgiftning gennem fødekæden.

Det har kun været muligt at bestemme HKK, og derfor er det kun den ækvivalente koncentration i vand, HKK_{vand} , som beregnes ved anvendelse af BAF-værdierne, som fremgår af tabel 3.1. Her ses at BAF-værdien for bløddyr på 145.000 L/kg er højest.

$$\text{HKK}_{\text{vand, bløddyr}} = 61,4 \mu\text{g}/\text{kg fiskeriprodukt} / 145.000 \text{ L}/\text{kg} = 0,00042 \mu\text{g}/\text{L} = 0,42 \text{ ng}/\text{L}$$

Den ækvivalente koncentration i vand beregnet ud fra BAF-værdien i bløddyr vurderes dog ikke at være relevant for størstedelen af den danske befolkning, da det vurderes at de færreste får dækket deres konsum af fiskeriprodukter udelukkende ved indtagelse af muslinger og andre bløddyr. Derfor er den ækvivalente koncentration i vand også beregnet for BAF-værdien i fisk:

$$\text{HKK}_{\text{vand, fisk}} = 61,4 \mu\text{g}/\text{kg fiskeriprodukt} / 21700 \text{ L}/\text{kg} = 0,0028 \mu\text{g}/\text{L} = 2,8 \text{ ng}/\text{L}$$

Ovenstående vandkoncentration er lavere end det beregnede vandkvalitetskriterie for ferskvand på 14 ng/L. Det betyder, at vandkriteriet for ferskvand ikke sikrer beskyttelse af biota, og $\text{HKK}_{\text{vand, fisk}}$ på 2,8 ng/L bør derfor anvendes som $\text{VKK}_{\text{ferskvand}}$.

6.7 Konklusion på vandkvalitetskriterier (VKK) og kortidsvandkvalitetskriterier (KVKK)

VKK for fersk- og saltvand er beregnet til hhv. 14 og 1,4 ng/L (afsnit 6.1). Beregningen af $HKK_{\text{vand, fisk}}$ til 2,8 ng/L (afsnit 6.6) er en faktor fem lavere end $VKK_{\text{ferskvand}}$, men en faktor to højere end VKK_{saltvand} , hvilket resulterer i følgende endelige vandkvalitetskriterier, som sikrer beskyttelse af human konsum:

$$\mathbf{VKK_{ferskvand} = HKK_{\text{vand, fisk}} = 2,8 \text{ ng/L}}$$

$$\mathbf{VKK_{saltvand} = 1,4 \text{ ng/L}}$$

KVKK for fersk- og saltvand er beregnet til hhv. 7 og 0,7 ng/L (afsnit 6.2). På baggrund af ovenstående resultater for VKK for fersk- og saltvand, sættes $KVKK_{\text{ferskvand}}$ til 7 ng/L, der er beregnet på baggrund af den direkte akutte toksicitet over for vandlevende organismer. $KVKK_{\text{saltvand}}$ ses at være lavere end VKK_{saltvand} og bør derfor sættes til samme beskyttelsesniveau (jf. s. 36 i TGD27, EU 2018):

$$\mathbf{KVKK_{ferskvand} = 7 \text{ ng/L}}$$

$$\mathbf{KVKK_{saltvand} = 1,4 \text{ ng/L}}$$

7 Konklusion

Følgende miljøkvalitetskriterier er beregnet for chrysen:

VKK _{ferskvand}	= 2,8 ng/L
VKK _{saltvand}	= 1,4 ng/L
KVKK _{ferskvand}	= 7 ng/L
KVKK _{saltvand}	= 1,4 ng/L
SKK _{ferskvand}	= 231 µg/kg tørvægt (5% OC)* = 4620 µg/kg tørvægt x f _{oc}
SKK _{saltvand}	= 23,1 µg/kg tørvægt (5% OC)* = 462 µg/kg tørvægt x f _{oc}
BKK _{sek.forgiftn.}	= Ikke muligt
HKK	= 61,4 µg/kg fiskeriprodukt, vådvægt

* SKK-værdierne ovenfor er grundet beregningsmetoden behæftet med betydelig usikkerhed og bør derfor kun anvendes som indikative værdier.

8 Referencer

Arfsten, D.P., Davenport, R. & Schaeffer, D.J. (1994): UV-A coexposure enhances the toxicity of aromatic hydrocarbons, munitions, and metals to *Photobacterium phosphoreum*. *Biomed. Environ. Sci.*, 7: 101-108.

Bastian, M.V. & Toetz, D.W. (1982): Effect of eight polynuclear hydrocarbons on growth of *Anabaena flos-aquae*. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.*, 29: 531-538.

Bastian, M.V. & Toetz, D.W. (1985): Effect of polynuclear hydrocarbons on algal nitrogen fixation (acetylene reduction). *Bull. Environ. Contam. Toxicol.*, 35: 258-265.

Bisson, M., Dujardin, R., Flammarion, P., Garric, J., Babut, M., Lamy, M-H., Porcher, J-M., Thybaud, É. & Vindimian, É. (2000): Complément au SEQ-Eau: méthode de détermination des seuils de qualité pour les substances génotoxiques. Verneuil-Halatte, France: Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques (INERIS), Agence de l'eau Rhin-Meuse.

Boney, A.D. (1974): Aromatic hydrocarbons and the growth of marine algae. *Mar. Pollut. Bull.*, 5: 185-186.

Danish (Q)SAR Database (2022). <http://qsar.food.dtu.dk>

ECB (2008). European Union Risk Assessment Report. Coal-tar pitch, high temperature. Risk Assessment Environment. European Chemicals Bureau. Final version, May 2008. Rapporteur Member State: The Netherlands.

ECHA (2009). Member State Committee Support Document for Identification of Coal Tar Pitch, High Temperature as a Substance of Very High Concern because of its PBT and CMR Properties. Adopted on 2 December 2009.

ECHA (2017). Member State Committee Support Document of chrysen as a Substance of Very High Concern because of its carcinogenic (Article 57a, PBT (article 57d) and vPvB (Article 57e) Properties. Adopted on 30 November 2017.

ECHA (2018). Inclusion of substances of very high concerns in the Candidate List for eventual inclusion in Annex XIV. Doc ED/01/2018. Helsinki, 03.01.2018.

El-Alawi, Y.S., Huang, X-D., Dixon, D.G. & Greenberg, B.M. (2002): Quantitative structureactivity relationship for the photoinduced toxicity of polycyclic aromatic hydrocarbons to the luminescent bacteria *Vibrio fischeri*. *Environ. Toxicol. Chem.*, 21: 2225-2232.

US EPA (2022). Estimation Programs Interface Suite™ for Microsoft® Windows, v 4.11. United States Environmental Protection Agency, Washington, DC, USA.

EU (2000). Europa-Parlamentets og Rådets Direktiv 2000/60/EF om fastsættelse af en ramme for fællesskabets vandpolitiske foranstaltninger af 23. oktober 2000.

EU (2018). Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). Guidance Document No. 27. Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards.

EU (2021): Kommissionens forordning (EU) 2021/1199 af 20. juli 2021 om ændring af bilag XVII til Europa-Parlamentets og Rådets forordning (EF) nr. 1907/2006 for så vidt angår polycykliske aromatiske kulbrinter (PAH) i granulater eller flis, der anvendes som fyldmateriale i syntetiske kunstgræsbaner eller i løs form på legepladser eller til sportsbrug.

Germany (2017): Annex XV report. Proposal for identification of a substance of very high concern on the basis of the criteria set out in REACH article 57. Substance Name: Chrysene. EC Number: 205-923-4. CAS Number: 218-01-9. Submitted by: Germany. Date: August 2017.

Hooftman, R.N. (1991): Ecotoxicological testing of polycyclic aromatic hydrocarbons. Delft, the Netherlands: TNO Environmental and Energy Research, TNO Institute of Environmental Sciences. TNO-report IMW-P91-026.

Hooftman, R.N. & Evers-de Ruyter, A. (1992): Early life stage tests with *Brachydanio rerio* and several polycyclic aromatic hydrocarbons using an intermittent flowthrough system (draft OECD guideline). Delft, the Netherlands: TNO Environmental and Energy Research, TNO Institute of Environmental Sciences. TNO-report IMW-R 92/210.

Huang, X-D., Krylov, S.N., Ren, L., McConkey, B.J., Dixon, D.G. & Greenberg, B.M. (1997): Mechanistic quantitative structure-activity relationship model for the photoinduced toxicity of polycyclic aromatic hydrocarbons: II. An empirical model for the toxicity of 16 polycyclic aromatic hydrocarbons to the duckweed *Lemna gibba* L. G-3. Environ. Toxicol. Chem., 16: 2296-2303.

Jamroz, T., Ledakowicz, S., Miller, J.S. & Sencio, B. (2003): Microbiological evaluation of toxicity of three polycyclic aromatic hydrocarbons and their decomposition products formed by advanced oxidation processes. Environ Toxicol 18: 187-191.

Johnson, B.T. & Long, E.R. (1998): Rapid toxicity assessment of sediment from estuarine ecosystems: A new tandem *in vitro* testing approach. Environ. Toxicol. Chem., 17: 1099-1106.

Kagan, J., Kagan, E.D., Kagan, I.A. & Kagan, P.A. (1987): Do polycyclic aromatic hydrocarbons, acting as photosensitizers, participate in the toxic effects of acid rain? In: Zika RG, Cooper WJ, eds. Photochemistry of environmental aquatic systems. ACS Symposium Series 327. Washington, DC: American Chemical Society., 191-204.

Klimish, H.J., Andreae, M., Tillmann, U. (1997). A systemic Approach for Evaluating the Quality of Experimental Toxicological and Ecotoxicological Data. *Regulatory Toxicology and Pharmacology*. Vol 25 (1), pp 1-5.

Lampi, M.A., Gurska, J., McDonald, K.I.C., Xie, F., Huang, X-D., Dixon, D.G. & Greenberg, B.M. (2006): Effect of irradiance spectra on the photoinduced toxicity of three polycyclic aromatic hydrocarbons. Environ. Toxicol. Chem., 25: 1079-1087.

Mackay, D., Shiu, W.Y., Ma K-C & Lee, S.C. (2006): Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals [computer program]. Second edition. CD-ROM. Boca Raton, FL, USA: CRC Press Taylor & Francis Group.

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

Newsted, J.L. & Giesy, J.P. Jr. (1987): Predictive models for photoinduced acute toxicity of polycyclic aromatic hydrocarbons to *Daphnia magna*, *Strauss Cladocera*, *Crustacea*. *Toxicol. Chem.*, 6: 445-461.

Okay, O.S. & Karacik, B. (2007): Photoinduced toxicity of selected PAHs to the marine microalga *Phaeodactylum tricornutum*. *J. Environ. Sci. Health., Part A* 42: 707-714.

Okay, O.S. & Karacik, B. (2008): Bioconcentration and phototoxicity of selected PAHs to marine mussel *Mytilus galloprovincialis*. *J. Environ. Sci. Health., Part A* 43: 1234-1242.

Rossi, S.S. & Neff, J.M. (1978): Toxicity of polynuclear aromatic hydrocarbons to the polychaete *Neanthes arenaceodentata*. *Mar. Pollut. Bull.*, 9: 220-223.

US EPA. ECOTOX databasen: <http://cfpub.epa.gov/ecotox/>. (tilgået september 2020)

Verbruggen, E. M. J., van Herwijnen, R. (2011). Environmental risk limits for chrysen. RIVM Letter Report 601357008/2011. National Institute for Public Health and the Environment. Ministry of Health, Welfare and Sport.

Wernersson, A-S. (2003): Predicting petroleum phototoxicity. *Ecotoxicol. Environ. Saf.*, 54: 355-365.



Bilag A

Toksicitet over for vandorganismer (EC_x, LC_x, NOEC osv.)

Ferskvandsorganismer

Akut toksicitet

	Målt	Varighed	Effekt	Værdi µg/l	Reference	Troværdighed (1-4) af Verbruggen. 2012 Bemærkninger
Cyanobakterie <i>Anabaena flos-aqua</i>	Ja	2 timer	EC ₁₀ , nitrogen fiksering	5	Bastian & Toetz, 1985	3
Insekt <i>Aedes aegypti</i>	Nej	< 24 timer	LC ₅₀ , dødelighed	1700	Kagan et al., 1987	3
Krebsdyr <i>Daphnia magna</i>	Ja	48 timer	EC ₅₀ , immobilitet	>1,3	Bisson et al., 2000	2
<i>Daphnia magna</i>	Nej	2 timer	LC ₅₀ , dødelighed	1900	Kagan et al., 1987	3
<i>Daphnia magna</i>	Nej	24 timer	EC ₅₀ , immobilitet	>1024	Wernersson 2003	3
<i>Daphnia magna</i>	Nej	24 timer	LC ₅₀ , dødelighed	0,7	Newsted and Giesy, 1987	2
<i>Daphnia magna</i>	Nej	48 timer	EC ₅₀ , immobilitet	3,97	Lampi et al., 2006	3

Ferskvandsorganismer

Kronisk toksicitet

	Målt	Varighed	Effekt	Værdi µg/l	Reference	Troværdighed (1-4) af Verbruggen. 2012 Bemærkninger
Alger <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	Ja	72 timer	EC ₁₀ , vækst	>1	Bisson et al., 2000	2
Blågrønalger <i>Anabaena flos-aquae</i>	Ja	2 uger	NOEC, vækst	640	Bastian & Toetz, 1982	3
<i>Anabaena flos-aquae</i>	Ja	2 uger	EC ₁₀ , vækst	440	Bastian & Toetz, 1982	3

						EC ₁₀ -værdien er bestemt fra data i studiet og log-logistisk dosis-respons forhold (Verbruggen, 2012)
Makrofytter						
<i>Lemna gibba</i>	Nej	8 dage	EC ₅ , vækst	2000	Huang et al., 1997	3
<i>Lemna gibba</i>	Nej	8 dage	EC ₇₄ , vækst	2000	Huang et al., 1997	3
Krebsdyr						
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Ja	7 dage	EC ₁₀ , reproduktion	>0,09	Bisson et al., 2000	2
<i>Daphnia magna</i>	Ja	21 dage	NOEC, reproduktion	≥1,4	Hoofman, 1991	2
<i>Daphnia magna</i>	Ja	21 dage	NOEC, dødelighed	≥1,4	Hoofman, 1991	2
Fisk						
<i>Brachydanio rerio</i>	Ja	28 dage	NOEC, dødelighed	>0,91	Hoofman & Evers-de-Ruiter, 1992	2 Kun en test koncentration

Saltvandsorganismer

Akut toksicitet

	Målt	Varighed	Effekt	Værdi µg/l	Reference	Troværdighed (1-4) af Verbruggen. 2012 Bemærkninger
Alger						
<i>Antithamnion plumula</i>	Nej	-	EC ₅₈ , vækst simulering	300	Boney, 1974	3
<i>Phaeodactylum tricorutum</i>	Nej	96 timer	EC ₅₀ , vækst	0,63	Okay and Karacik, 2007	3
Bakterier						
<i>Vibrio fischeri</i>	Nej	15 minutter	EC ₅₀ , bioluminiscens	>100000	Arfsten et al., 1994	3
<i>Vibrio fischeri</i>	Nej	30 minutter	EC ₅₀ , bioluminiscens	>100000	Arfsten et al., 1994	3
<i>Vibrio fischeri</i>	Nej	15 minutter	EC ₅₀ , bioluminiscens	1370	El-Alawi et al., 2002	3
<i>Vibrio fischeri</i>	Nej	5 minutter	EC ₅₀ , bioluminiscens	920	Johnson & Long, 1998	3
<i>Vibrio fischeri</i>	Nej	15 minutter	EC ₇ , bioluminiscens	0,96	Jamroz et al., 2003	3
<i>Vibrio fischeri</i>	Ja	30 minutter	EC ₁₀ , bioluminiscens	>vandopløseligheden	Loibner et al., 2004	2

Ledorme <i>Neanthes arenaceodentata</i>	Ja	96 timer	LC ₅₀ , dødelighed	>1000	Rossi & Neff, 1978	3
Krebsdyr <i>Artemia salina</i>	Nej	3 timer	LC ₅₀ , dødelighed	3000	Kagan et al., 1987	3
Bløddyr <i>Mytilus galloprovincialis</i>	Nej	7 dage	NOEC, filtrerings rate	≥ 1,8	Okay and Karacik, 2008	3

Saltvandsorganismer

Kronisk toksicitet

	Målt	Varighed	Effekt	Værdi µg/l	Reference	Troværdighed (1-4) af Verbruggen. 2012 Bemærkninger
Alger <i>Phaeodactylum tricornutum</i>	Nej	96 timer	EC ₁₀ , vækst	> 1,8	Okay and Karacik, 2008	3
Bakterier <i>Vibrio fischeri</i>	Nej	18 timer	EC ₅₀ , bioluminescens	84750	El-Alawi et al., 2002	3
<i>Vibrio fischeri</i>	Nej	18 timer	EC ₅₀ , vækst	84940	El-Alawi et al., 2002	3



Bilag B

Non-test data for Chrysen hentet fra den Danske Q(S)AR database, der også inkluderer resultater fra EPI ECOSAR modellen.

Aquatic toxicity

	Exp	Battery	Leadscope	SciQSAR
Fathead minnow 96h LC50 (mg/L)		0.1047031	0.1811498	0.02825634
Domain		IN	IN	IN
Daphnia magna 48h EC50 (mg/L)		0.3753381	0.6204388	0.1302375
Domain		IN	IN	IN
Pseudokirchneriella s. 72h EC50 (mg/L)		8.278944	16.40121	0.1566772
Domain		IN	IN	IN
<i>DTU-developed models</i>				

	Fish 96h	Daphnid 48h	Green Algae 96h
LC50 (Fish) or EC50 (Daphnid and Algae) for Most Toxic Class (mg/L)	0.129	0.101	0.29
Max. Log Kow for Most Toxic Class	5	5	6.4
Most Toxic Class	Neutral Organics	Neutral Organics	Neutral Organics
Note	Chemical may not be soluble enough. Log Kow for this chemical exceeds the maximum Log Kow for Most Toxic Class.	Chemical may not be soluble enough. Log Kow for this chemical exceeds the maximum Log Kow for Most Toxic Class.	Chemical may not be soluble enough
<i>EPI ECOSAR models</i>			
<i>ECOSAR Classes: Neutral Organics</i>			