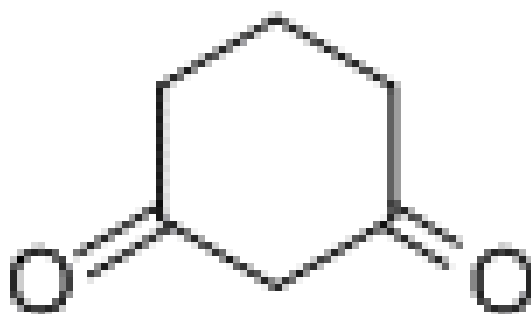




Miljøministeriet
Naturstyrelsen
Miljøstyrelsen

Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

1,3-cyclohexandion (1,3-CHD) 504-02-9



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	24 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	24 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand.}	240 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	240 µg/l

Juni 2014

Indhold

FORORD	3	
ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS	4	
1 INDLEDNING	5	
2 FYSISK KEMISKE EGENSKABER	6	
3 SKÆBNE I MILJØET	7	
3.1 NEDBRYDELIGHED	7	
3.2 BIOAKKUMULERING	7	
3.3 NATURLIG FOREKOMST	7	
4 GIFTIGHEDSDATA	8	
4.1 GIFTIGHED OVER FOR VANDLEVENDE ORGANISMER	8	
4.2 GIFTIGHED OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	8	
4.3 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	8	
4.4 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	9	
5 ANDRE EFFEKTER	10	
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	11	
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	11	
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	11	
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	11	
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	11	
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	11	11
7 KONKLUSION	13	
8 REFERENCER	14	

Forord

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

Miljøstyrelsen (MST) udarbejder på vegne af Naturstyrelsen kvalitetskriterier for kemikalier i vandsøjlen (vandkvalitetskriterium), i sediment og i dyr og planter (biota).

Naturstyrelsen bruger kvalitetskriterierne som det faglige grundlag til at kunne fastsætte miljøkvalitetskrav, hvorved der forstås den endelige koncentration af et bestemt forurenende stof i vand, sediment eller biota, som ikke må overskrides af hensyn til beskyttelsen af miljøet og menneskers sundhed.

Metodikken, der anvendes til udarbejdelse af miljøkvalitetskrav er harmoniseret i EU og baserer sig på vandrammedirektivet (EU 2000), EU's vejledning til risikovurdering ("TGD") (EU 2003), EU's vejledning til fastsættelse af kvalitetskriterier i vandmiljøet (EU 2011) og Miljøstyrelsens vejledning til fastsættelse af vandkvalitetskriterier (Miljøstyrelsen 2004).

Den sidste litteratursøgning er foretaget den 30/6 2014.

English Summary and conclusions

Available data are EC₅₀ values for algae, crustacean and fish, and an EC₁₀ and a NOEC for algae.

Thus an assessment factor of 1000 was applied to derive the Environmental Quality Standard for freshwater (EQS_{freshwater, eco}). There are too few data to make statistical comparison between freshwater and saltwater data, so the data for the two compartments were pooled.

There are no representatives of higher taxonomic groups specific to the marine environment, but the marine data are an order of magnitude greater, and is not likely that marine species will be significantly more sensitive than freshwater species. Therefore an extra assessment factor is not applied in the derivation of the , and EQS_{saltwater, eco} is set = EQS_{freshwater, eco}.

$$\text{EQS}_{\text{saltwater, eco}} = \text{EQS}_{\text{freshwater, eco}} = 24000\mu\text{g/l}:1000 = 24 \mu\text{g/l}$$

The Maximum Acceptable Concentration (MAC) for both fresh- and salt water was derived by applying an assessment factor of 100 to the lowest EC₅₀.

$$\text{Thus MAC} = 24000\mu\text{g/l}:100 = 240 \mu\text{g/l}.$$

Log Kow is very low, and the substance is not regarded as bioaccumulating nor as adsorbing to sediment. Therefore sediment, secondary poisoning and human health are not taken into consideration.

The decisive value (24 mg/l) has been taken from the REACH registration, and the Danish EPA does not have the actual report. However, the test conditions are well described and the value is rated with a Klimisch reliability score of 2 by the Danish EPA.

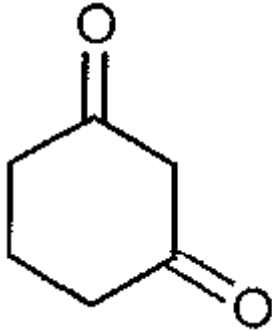
$$\text{EQS}_{\text{saltwater, eco}} = \text{EQS}_{\text{freshwater, eco}} = \mathbf{24 \mu\text{g/l}}$$

$$\text{MAC} = \mathbf{240 \mu\text{g/l}}$$

1 Indledning

Identiteten af 1,3-cyclohexandion (1,3-CHD) fremgår af tabel 1.1.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	1,3-cyclohexandion
Strukturformel	
CAS nr.	504-02-9
EINECS nr.	
Kemisk formel	$C_6H_8O_2$

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for 1,3-cyclohexandion fremgår af tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for 1,3-cyclohexandion

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	112	
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	99,4	REACH registrering
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	-	
Damptryk, P_v (Pa)	0,018	REACH registrering
Henry's konstant, H ($\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)		
Vandopløselighed, S_w ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	>10000	REACH registrering
Dissociationskonstant, pK_a		
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	0,29 -1,3 0,5	Cheminova REACH(ekstrapoleret til pH 7) QSAR
Sediment/vand fordelingskoefficient, K_p ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)		

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

Ikke let nedbrydeligt (REACH registrering)

3.2 Bioakkumulering

Log K_{ow} : 0,29 (Cheminova), -1,3 (REACH, ekstrapoleret til pH 7, ved pH 3,2 var log K_{ow} = 0,46), 0,5 (QSAR, KOWWIN). Regnes ikke for bioakkumulerende.

3.3 Naturlig forekomst

Ingen oplysninger

4 Giftighedsdata

4.1 Giftighed over for vandlevende organismer

Tabel 4.1. Giftighed af 1,3-cyclohexandion overfor vandlevende organismer

Overordnet systematisk gruppe	Art	Tid	Effekt mål	Værdi (mg/l)	Reference
Alger	Skeletonema costatum	72 timer	EC ₁₀ , vækstrate	408	DHI 2009
	S. costatum	72 timer	EC ₃₅ , vækstrate	925	DHI 2009
	S. costatum	72 timer	EC ₅₀ , vækstrate	>925	DHI 2009
	Desmodesmus subspicatus	72 timer	EC ₅₀ , vækstrate	35	REACH
	D. subspicatus	72 timer	NOEC, vækstrate	12,5	REACH
Krebsdyr	Acartia tonsa	48 timer	EC ₅₀	126	DHI 2009
	Daphnia magna	48 timer	EC ₅₀	24	REACH
Fisk	Scophthalmus maximus	96 timer	LC ₅₀	>1000	DHI 2009

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

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

Forsøgene fra REACH registreringen er velbeskrevne og indeholder rådata. Tildeles et ”reliability index” på 1 (Klimisch RI).

The tests from the REACH registration are well described and include raw data. They are assigned an R.I. score of 1.

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Ingen oplysninger.

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Da stoffet ikke regnes for bioakkumulerende og lod Kow er meget lav tages giftighed overfor pattedyr og fugle ikke i betragtning.

4.4 Giftighed over for mennesker

Da stoffet ikke regnes for bioakkumulerende og lod K_{ow} er meget lav tages giftighed overfor mennesker ikke i betragtning.

5 Andre effekter

Ingen oplysninger

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der haves EC₅₀ værdier for alger, krebsdyr og fisk, mens der kun haves EC₁₀ eller NOEC værdier for alger. Derfor baseres VKK på EC₅₀ værdierne. Der er ikke data nok til at foretage en statistisk sammenligning ferskvands- og saltvandsdata, så ferskvands- og saltvandsdata slås sammen.

Særlige marine overordnede systematiske grupper er ikke repræsenterede, men de testede marine arter er en faktor 10 mindre følsomme end de testede ferskvandsarter, og det er næppe sandsynligt, at marine arter skulle være væsentligt mere følsomme end ferskvandsarterne.

Der bruges derfor ikke en ekstra usikkerhedsfaktor for det marine miljø.

$$VKK_{\text{ferskvand}} = VKK_{\text{saltvand}} = \text{laveste EC}_{50}/1000 = 24000 \mu\text{g/l}:1000 = 24 \mu\text{g/l}$$

Originalrapporten med den udslagsgivende værdi (EC₅₀ = 24 mg/l) er ikke umiddelbart tilgængelig, men forsøget er i REACH registreringen velbeskrevet og værdien tildeles en score på 2 i "Klimisch Reliability Index".

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

$$KVKK = \text{laveste EC}_{50}/100 = 24000 \mu\text{g/l}:100 = 240 \mu\text{g/l}.$$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Log K_{ow} er meget lav og stoffet betragtes ikke som adsorberende til sediment. Sediment tages derfor ikke i betragtning.

6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Log K_{ow} er meget lav og stoffet betragtes ikke som bioakkumulerende. Biota tages derfor ikke i betragtning.

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Log K_{ow} er meget lav og stoffet betragtes ikke som bioakkumulerende. Menneskers sundhed tages derfor ikke i betragtning.

7 Konklusion

Vandkvalitetskriteriet for fersk- og saltvand = 24 µg/l

Kortidskvalitetskriteriet for fersk- og saltvand = 240 µg/l

8 Referencer

Cheminova 2010: Rapport fra Cheminova 2010 om bestemmelse af n-octanol/vand forhold.

DHI 2009: Rapport fra DHI 2009: Økotoksikologisk karakterisering af 1,3-cyclohexanedione.

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

EU 2003. Technical Guidance Document on Risk Assessment in support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for new notified substances, Commission Regulation (EC) No 1488/94 on Risk Assessment for existing substances, and Directive 98/8/EC of the European Parliament and of the Council concerning the placing of biocidal products on the market.

EU 2011. Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). Guidance Document No. 27. Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards.

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

REACH: REACH registreringsdata på hjemmesiden for EU's Kemikalieagentur (ECHA), http://apps.echa.europa.eu/registered/data/dossiers/DISS-9d89f925-4318-5dba-e044-00144f67d249/AGGR-5df06aca-e894-4e45-81bb-4e8d9c5f72c9_DISS-9d89f925-4318-5dba-e044-00144f67d249.html#AGGR-5df06aca-e894-4e45-81bb-4e8d9c5f72c9