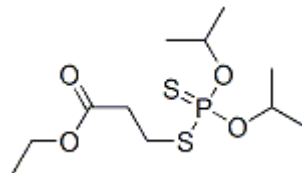


Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

Ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionat

CAS nr. 71735-74-5



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	1,7 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	0,17 µg/l

Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	17	µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	1,7	µg/l

August 2016

Indhold

FORORD	4
ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS	5
1 INDLEDNING	6
2 FYSISK KEMISKE EGENSKABER	7
3 SKÆBNE I MILJØET	8
3.1 NEDBRYDELIGHED	8
3.2 BIOAKKUMULERING	8
3.3 NATURLIG FOREKOMST	8
4 GIFTIGHEDSDATA	9
4.1 GIFTIGHED OVER FOR VANDLEVENDE ORGANISMER	9
4.2 GIFTIGHED OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	9
4.3 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	9
4.4 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	10
5 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM FOR ETHYL 3-[[BIS(1-METHYLETHOXY)PHOSPHINOTHIOYL]THIO]PROPIONAT	11
5.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	11
5.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	11
5.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	11
5.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	11
5.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	11
6 KONKLUSION	13
7 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 juli 2016.

English Summary and conclusions

Environmental quality standards for ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionate

Short-term EC₅₀ values are available for fish (*Danio rerio*), crustacea (*Daphnia magna*) and algae (*Pseudokirchneriella subcapitata*), and a chronic E_rC₁₀ value is available for the alga.

Assessment factors (AF) of 1000 and 10000, respectively, were applied to the lowest EC₅₀ to derive the EQS_{freshwater} and EQS_{saltwater}:

$$\begin{aligned} \text{EQS}_{\text{freshwater}} &= 1.7 \text{ mg/l} : 1000 = 0.0017 \text{ mg/l} = 1.7 \text{ } \mu\text{g/l} \\ \text{EQS}_{\text{saltwater}} &= 1.7 \text{ mg/l} : 10000 = 0.00017 \text{ mg/l} = 0.17 \text{ } \mu\text{g/l} \end{aligned}$$

The maximum acceptable concentration (MAC) was derived with an AF of respectively 100 and 1000 for fresh- and saltwater:

$$\begin{aligned} \text{MAC}_{\text{freshwater}} &= 1.7 \text{ mg/l} : 100 = 0.017 \text{ mg/l} = 17 \text{ } \mu\text{g/l} \\ \text{MAC}_{\text{saltwater}} &= 1.7 \text{ mg/l} : 1000 = 0.0017 \text{ mg/l} = 1.7 \text{ } \mu\text{g/l} \end{aligned}$$

No QS for sediment was derived as K_{oc} = 87, and the probability of binding to sediment thus is low.

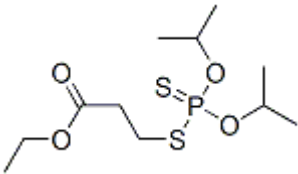
Biota QS for secondary poisoning and human health were not derived as the bioaccumulation potential is estimated to be low and the substance is not classified for CMR properties.

1 Indledning

Ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionat er et smøremiddel til smøring af køretøjer og maskiner (REACH registreringen).

Identiteten af ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionat fremgår af tabel 1.1.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	ethyl 3- [[diisopropoxyphosphorothioyl]sulfanyl]propanoat
Strukturformel	
CAS nr.	71735-74-5
EINECS nr.	275-965-6
Kemisk formel	C ₁₁ H ₂₃ O ₄ PS ₂
SMILES	O=C(OCC)CCSP(OC(C)C)(OC(C)C)=S

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionat fremgår af tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionat

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	314,40	Beregnet
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	-89	REACH
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	Kan ikke fastsættes. Stoffet nedbrydes ved højere temperaturer	REACH
Damptryk, P_v (Pa)	0,001 hPa ved 20°C	REACH
Henry's konstant, H ($\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)		
Vandopløselighed, S_w ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	16,7 mg/l	REACH
Dissociationskonstant, pK_a		
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	3,66	REACH
K_{oc} ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)	87, pH 7	Franco & Trapp 2008

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

REACH-registrering, ”Study report” 1988. OECD 301B.

20-33 % nedbrydning på 28 dage.

ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionat er ikke let nedbrydeligt.

3.2 Bioakkumulering

Log Kow = 3,66

Lombardo et al. 2010 modelberegning: BCF = 3, men stoffet er udenfor modellens domæne.

Dimitrov et al. 2005, modelberegning: BCF = 15,3.

EPIWIN: BCF = 78 (øvre trofiske niveau), BCF = 108 (nedre trofiske niveau) (REACH)

T.E.S.T. –QSAR program: BCF = 39 (REACH)

Ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionats potentiale for bioakkumulering betragtes derfor som værende lille.

3.3 Naturlig forekomst

Ingen oplysninger om naturlig forekomst.

4 Giftighedsdata

4.1 Giftighed over for vandlevende organismer

Effektkoncentrationer for ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionat over for vandlevende organismer er sammenstillet i tabel 4.1.

Art	EC ₅₀ , mg/l	Varighed, dage	RI*	Bemærkninger	Reference
FISK					
Danio rerio	1,7	4	1		Scheerbaum 2014a
Krebsdyr					
Daphnia magna	4,0	2	1		Noack 2014
Alger					
Pseudokirchneriella subcapitata	8,3	3	1	Vækstrate	Scheerbaum 2014b
Kroniske data	EC ₁₀ , mg/l				
ALGER					
Pseudokirchneriella subcapitata	3,9	3		Vækstrate	Scheerbaum 2014b

I REACH registreringen er de angivne effektværdier for ”analoge” stoffer (”read across”), og da det ikke er angivet hvilke (fortroligt) er det ikke muligt at vurdere relevansen af oplysningerne.

* RI = ”Reliability Index”: 1 fuldt troværdigt og relevant, 2 relevant og troværdigt med enkelte forbehold, 3 ikke troværdigt og kan ikke bruges, 4 kan ikke vurderes og bruges derfor ikke.

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Ingen oplysninger.

Da Koc er lav forventes ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionat ikke at bindes i sedimentet og kriterierne for fastsættelse af sedimentkvalitetskriterier er ikke opfyldt.

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Da bioakkumuleringspotentialet for ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionat er lavt tages sekundær forgiftning via fødekæden ikke i betragtning.

4.4 Giftighed over for mennesker

Sundhed tages ikke i betragtning, da bioakkumuleringspotentialet er lavt og ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothiyl]thio]propionat ikke er klassificeret for kræftfremkaldende, mutagene eller reproduktionsskadelige effekter (CMR).

5 Udledning af vandkvalitetskriterium for ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionat

5.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Effektverdierne fra REACH registreringen anvendes ikke, da værdierne ikke er for herværende stof men for ”analoge” stoffer (”read across”). Endvidere vides det ikke hvilke stoffer disse ”analoge” er, da det er fortrolige oplysninger.

Der haves EC₅₀ værdier for en art fisk, en art krebsdyr og en art grønalge samt EC₁₀ for grønalgen. Jævnfør vejledningerne (EU 2011, Miljøstyrelsen 2004) bruges en faktor 1000 og 10000 på laveste EC₅₀ for henholdsvis fersk- og saltvand:

$$\begin{aligned} \text{VKK}_{\text{ferskvand}} &= 1,7 \text{ mg/l} : 1000 = 0,0017 \text{ mg/l} = 1,7 \text{ } \mu\text{g/l} \\ \text{VKK}_{\text{saltvand}} &= 1,7 \text{ mg/l} : 10000 = 0,00017 \text{ mg/l} = 0,17 \text{ } \mu\text{g/l} \end{aligned}$$

5.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

KVKK beregnes med en faktor på henholdsvis 100 og 1000 på laveste EC₅₀ for fersk- og saltvand:

$$\begin{aligned} \text{KVKK}_{\text{ferskvand}} &= 1,7 \text{ mg/l} : 100 = 0,017 \text{ mg/l} = 17 \text{ } \mu\text{g/l} \\ \text{KVKK}_{\text{saltvand}} &= 1,7 \text{ mg/l} : 1000 = 0,0017 \text{ mg/l} = 1,7 \text{ } \mu\text{g/l} \end{aligned}$$

5.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Der beregnes ikke et SKK, da kriterierne for udarbejdelse af SKK ikke er opfyldt (K_{oc} er lav)

5.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Der beregnes ikke et BKK, da bioakkumuleringspotentialet er lavt.

5.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Der beregnes ikke et HKK da bioakkumuleringspotentialet og stoffet er lavt, og stoffet ikke har CMR egenskaber.

6 Konklusion

Vandkvalitetskriterierne for ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothioyl]thio]propionat er:

$$\begin{aligned} \text{VKK}_{\text{ferskvand}} &= 1,7 \mu\text{g/l} \\ \text{VKK}_{\text{saltvand}} &= 0,17 \mu\text{g/l} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{KVKK}_{\text{ferskvand}} &= 17 \mu\text{g/l} \\ \text{KVKK}_{\text{saltvand}} &= 1,7 \mu\text{g/l} \end{aligned}$$

Det er sandsynligt, at VKK værdien vil kunne forøges, hvis der blev fremskaffet oplysninger om EC₁₀ (eller NOEC) fra længerevarende forsøg med fisk og daphnier

7 Referencer

Dimitrov S, Dimitrova N, Parkerton T, Comver M, Bonnell M, Mekenyan O. 2005: Base-line model for identifying the bioaccumulation potential of chemicals. SAR and QSAR in Environmental Research 16(6), 1-24

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.

Franco, A. & S. Trapp 2008: Estimation of the soil-water partition coefficient normalized to organic carbon for ionisable organic chemicals. Environmental Toxicology and Chemistry 27 (10): 1995-2004.

Lombardo A, Roncaglioni A, Boriani E, Milan C, Benfenati E. 2010: Assessment and validation of the CAESAR predictive model for bioconcentration factor (BCF) in fish. Chemistry Central Journal 4 (Suppl 1).

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

Noack, M. 2014: Ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothiyl]thio]propionate, Acute Immobilisation Test to *Daphnia magna*, Semi-static, 48 h. Project No 140324BF study No DAI15913 fra Dr. U. Noack-Laboratorien, Käthe-Paulus-Str.1, 31157 Sarstedt, Tyskland

REACH: REACH registrering: <http://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/13230>

Scheerbaum, D. 2014a: Ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothiyl]thio]propionate, Fish (Zebrafish), Acute Toxicity Test, Semi Static 96 hours. Project No 140324BF, Study No FAZ15913 fra Dr. U. Noack-Laboratorien, Käthe-Paulus-Str.1, 31157 Sarstedt, Tyskland

Scheerbaum, D. 2014b: Ethyl 3-[[bis(1-methylethoxy)phosphinothiyl]thio]propionate, Alga, Growth Inhibition Test with *Pseudokirchneriella subcapitata*, 72 hours. Project No 140324BF study No SPO15913 fra Dr. U. Noack-Laboratorien, Käthe-Paulus-Str.1, 31157 Sarstedt, Tyskland