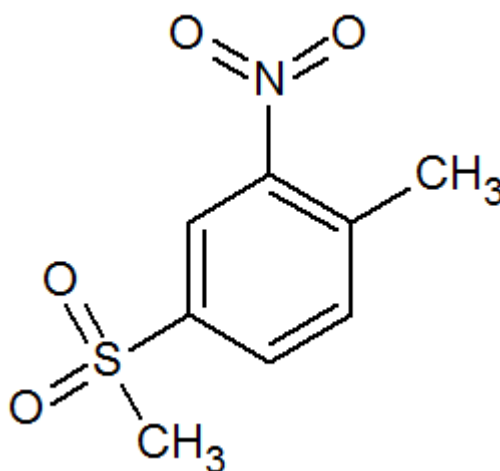




Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

1-methyl-4-(methylsulfonyl)-2-nitrobenzen (NMST) 1671-49-4



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	1,0 mg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	0,1 mg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	5,9 mg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	0,59 mg/l

August 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	10	
4.3 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	10	
4.4 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	10	
5 ANDRE EFFEKTER	11	
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	12	
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	12	
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	12	
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	12	
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	12	
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	12	12
7 KONKLUSION	13	
8 REFERENCER	15	

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 august 2014..

English Summary and conclusions

EC₁₀ or NOEC values are available for 4 species representing 3 major taxonomic groups, and an assessment factor (AF) of 10 and 100 is applied to derive the EQS for fresh- and saltwater, respectively. The lowest value is 10 mg/l for *Ciprinodon variegatus*, which was also the most sensitive of the tested species in the acute tests.

$$EQS_{\text{freshwater}} = 10 \text{ mg/l} : 10 = 1.0 \text{ mg/l}$$

$$EQS_{\text{saltwater}} = 10 \text{ mg/l} : 100 = 0.1 \text{ mg/l}$$

EC₅₀ values are available for 6 species representing 3 major taxonomic groups, and an AF of 10 and 100 is applied to derive the maximum accepted concentration (MAC) for fresh- and saltwater, respectively, as the standard deviation of the log₁₀ transformed EC₅₀ values is below 0.5.

$$MAC_{\text{freshwater}} = 59 \text{ mg/l} : 10 = 5.9 \text{ mg/l}$$

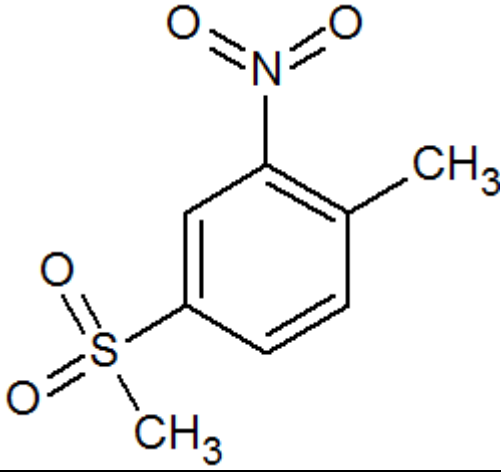
$$MAC_{\text{saltwater}} = 59 \text{ mg/l} : 100 = 0.59 \text{ mg/l}$$

Log K_{oc} and log K_{ow} are low, and the substance is not expected to bind significantly to sediment or to bioaccumulate. Thus standards for sediment, biota and human health are not derived

1 Indledning

Identiteten af NMST fremgår af tabel 1.1.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	1-methyl-4-(methylsufonyl)-2-nitrobenzen
Strukturformel	
CAS nr.	1671-49-4
EINECS nr.	
Kemisk formel	C ₁₄ H ₁₃ NO ₅ S
SMILES	

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for [stofnavn] fremgår af tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for [stofnavn]

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	307	Beregnet
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	115,25	REACH registreringen, "Study report" 1999
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	Nedbrydes ved 260	REACH registreringen, "Study report" 1999
Damptryk, P_v (Pa)	$3\cdot 10^{-4}$	REACH registreringen, "Study report" 1999
Henry's konstant, H ($\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)		
Vandopløselighed, S_w ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	370 mg/l	REACH registreringen, "Study report" 1999
Dissociationskonstant, pK_a		
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	0,93	REACH registreringen, "Study report" 1999
Log K_{oc}	2,3	REACH registreringen, "Study report" 1999

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

To 28 dages tests for let nedbrydelighed gav 0 % nedbrydning i løbet af 28 dage. Stoffet er ikke let nedbrydeligt (REACH registreringen, "Study report" 1999 og 2005)

3.2 Bioakkumulering

Log $K_{ow} = 0,93$ og stoffet betragtes som havende meget lille potentiale for bioakkumulering.

3.3 Naturlig forekomst

Ingen oplysninger

4 Giftighedsdata

4.1 Giftighed over for vandlevende organismer

Effektkoncentrationer over for vandlevende organismer er sammenstillet i tabel 4.1.

Tabel 4.1. Giftighed over for vandlevende organismer.

OVERORDNET SYSTEMATISK GRUPPE	ART	EFFEKT MÅL	VÆRDI (MG/L)	REFERENCE	BEMÆRKNINGER
Alger	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	72 timer EC ₅₀	66	REACH registrering, "Study report" 1999	R.I. 1
	<i>P. subcapitata</i>	72 timer EC ₁₀	11,5	REACH registrering, "Study report" 1999	Beregnet udfra rådata. NOEC = 2,1 mg/l R.I. 1
	<i>Skeletonema costatum</i>	72 timer EC ₅₀	80,7	DHI 2013	R.I. 1
		72 timer EC ₁₀	49,4	DHI 2013	R.I. 1
Krebsdyr	<i>Daphnia magna</i>	48 timer EC ₅₀	120	REACH registrering, "Study report" 1999	R.I. 1
	<i>D. magna</i>	21 dage NOEC	16	REACH registrering, "Study report" 2005	R.I. 1
	<i>Acartia tonsa</i>	48 timer EC ₅₀	135	DHI 2013	R.I. 1
Fisk	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 timer LC ₅₀	59	REACH registrering, "Study report" 1999	R.I. 1
	<i>O. mykiss</i>	28 dage EC ₁₀	10 mg/l	REACH registrering, "Study report" 2005	Beregnet udfra rådata. NOEC =

					19 mg/l
					R.I. 1
	<i>Cyprinodon variegatus</i>	96 timer LC ₅₀	>100	DHI 2013	Ingen dødelighed i forsøget
					R.I. 1

Forsøgene i DHI 2013 er velbeskrevne og opfylder kvalitetskravene, og rådata er tilgængelige. De tildeles alle et ”troværdigheds indeks” på R.I. = 1 (Klimisch indeks).

The studies in the DHI 2013 report are all assigned an R.I. score of 1 as they have been performed in accordance with the guidelines, are well documented, fulfill the requirements, and raw data are available.

4 dages forsøget med regnbueørred (*O. mykiss*) fra REACH registreringen er velbeskrevet og udført i henhold til retningslinjerne og er i registreringsskemaet blevet rapporteret med rådata, så det er muligt at efterprøve beregningerne. Tildeles et ”troværdigheds indeks” på R.I. = 1.

The acute test with O. mykiss is assigned an R.I. score of 1 as it has been performed in accordance with the guidelines, is well documented, fulfill the requirements, and raw data are available.

28 dages forsøget med regnbueørred (*O. mykiss*) fra REACH registreringen er i skemaet blevet rapporteret med rådata, så det er muligt at efterprøve beregningerne. De har angivet EC₂₀ = 18 mg/l, NOEC = 19 mg/l og LOEC = 36 mg/l. NOEC er med andre ord på størrelse med EC₂₀.

De skriver i beskrivelsen, at de har udeladt værdierne for to af de mellemste koncentrationer fordi dødeligheden var større end 10%. Når man regner efter viser det sig dog at en EC₂₀ = 18 kun fås for længdevæksten med inddragelse af netop de to koncentrationer. Endvidere passer tallene for de to koncentrationer fint ind i datamaterialet, idet korrelationen med disse data inkluderet er $r = -0,9995$, så det synes fornuftigt at inkludere dem. For længdevæksten kan beregnes en EC₁₀ = 13 mg/l. LOEC = 36 mg/l svarer til EC₅₇.

Det viser sig dog at vægtvæksten er mere følsom, idet der for denne faktor fås: EC₁₀ = 10 mg/l, EC₂₀ = 15 mg/l og $r = -0,996$.

The chronic test with O. mykiss is assigned an R.I. score of 1 as it has been performed in accordance with the guidelines, is well documented, fulfill the requirements, and raw data are available. The REACH data-sheet reports EC₂₀ = 18 mg/l, NOEC = 19 mg/l and LOEC = 36 mg/l. Thus the reported NOEC represents about 20% effect. According to the remarks in the data sheet two of the concentrations were left out of the analysis because the mortality in the controls exceeded 10%. However, an EC₂₀ of 18 mg/l is obtained only for growth expressed as length with the inclusion of data for these two concentrations. Those values also fit well into the dataset as the correlation between concentration and effect has a value of $r = -0.9995$, including those values, so it seems sensible to include them in spite of the greater than 10 % mortality. The EC₁₀ for the rate of growth in length can be calculated as 13 mg/l.

However, data are given as well for growth rate in weight, and calculation of the EC₁₀ and EC₂₀ for this parameter results in an EC₁₀ = 10 mg/l and EC₂₀ = 15 mg/l, with a correlation of $r = -0.996$.

2 dages forsøget med *Daphnia magna* fra REACH registreringen er i registreringskemaet blevet rapporteret med rådata, så det er muligt at efterprøve beregningerne. Det er endvidere velbeskrevet og udført i overensstemmelse med retningslinjerne og tildeles R.I. = 1.

The acute test with D. magna is assigned an R.I. of 1 as it is well described, performed in accordance with the guidelines, and raw data are available.

21 dages forsøget med *Daphnia magna* reproduktion fra REACH registreringen er i registreringskemaet blevet rapporteret med rådata, så det er muligt at efterprøve beregningerne. Det er endvidere udført i overensstemmelse med retningslinjerne og er velbeskrevet. Det tildeles R.I. = 1.

The chronic test with D. magna is assigned an R.I. of 1 as it is well described, performed in accordance with the guidelines, and raw data are available.

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Ingen oplysninger. Log K_{oc} er relativt lav og stoffet forventes ikke at binde sig nævneværdigt til sediment.

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Stoffet anses ikke for bioakkumulerende og sekundær forgiftning af pattedyr og fugle tages ikke i betragtning ($\log K_{ow} = 0,93$).

.

4.4 Giftighed over for mennesker

Stoffet anses ikke for bioakkumulerende og sundhedseffekter tages ikke i betragtning ($\log K_{ow} = 0,93$).

5 Andre effekter

Ingen oplysninger

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der er brugbare EC_{10} eller NOEC værdier for 6 arter repræsenterende 3 overordnede systematiske grupper. Laveste værdi er 10 mg/l for *Oncorhynchus mykiss*, som også var den mest følsomme af de testede arter i de akutte test. Til beregning af VKK anvendes en usikkerhedsfaktor på henholdsvis 10 og 100 for fersk- og saltvand:

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 10 \text{ mg/l} : 10 = 1,0 \text{ mg/l}$$

$$VKK_{\text{saltkvand}} = 10 \text{ mg/l} : 100 = 0,1 \text{ mg/l}$$

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Der er brugbare EC_{50} værdier for 6 arter repræsenterende 3 overordnede systematiske grupper. Laveste EC_{50} er 59 mg/l for *Oncorhynchus mykiss*. Da standardafvigelsen på de log10 transformerede EC_{50} værdier er under 0,5 (0,14) kan der anvendes en usikkerhedsfaktor på henholdsvis 10 og 100 for fersk- og saltvand. KVKK for fersk- og saltvand bliver henholdsvis

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 59 \text{ mg/l} : 10 = 5,9 \text{ mg/l}$$

$$KVKK_{\text{saltkvand}} = 59 \text{ mg/l} : 100 = 0,59 \text{ mg/l}$$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Stoffet forventes ikke at binde til sediment, og der udarbejdes ikke et SKK.

6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Stoffet har meget lille potentiale for bioakkumulering og der udarbejdes ikke et BKK.

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Stoffet har meget lille potentiale for bioakkumulering og der udarbejdes ikke et HKK.

7 Konklusion

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 1,0 \text{ mg/l}$$

$$VKK_{\text{saltkvand}} = 0,1 \text{ mg/l}$$

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 5,9 \text{ mg/l}$$

$$KVKK_{\text{saltkvand}} = 0,59 \text{ mg/l}$$

Usikkerhedsfaktoren for KVKK ville kunne sænkes med en faktor, 10 hvis der var EC_{50} værdier for flere arter fra flere overordnede systematiske grupper, f.eks. 10 arter repræsenterende 6 overordnede systematiske grupper. Faktoren ville kunne sænkes yderligere, hvis der kunne laves en artsfølsomhedsanalyse, dvs. mindst 10 arter repræsenterende mindst 8 overordnede systematiske grupper.

For både $VKK_{\text{saltkvand}}$ og $KVKK_{\text{saltkvand}}$ gælder, at værdierne vil kunne sænkes til samme niveau som for ferskvand, hvis der var yderligere EC_{50} værdier for mindst 2 overordnede systematiske grupper, der var specifikke for havmiljøet, f.eks. pighuder og havbørsteorme.

8 Referencer

DHI 2010:

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 registreringen på EU's Miljøagenturs (ECHA) hjemmeside:

http://apps.echa.europa.eu/registered/data/dossiers/DISS-a212666c-deaa-6867-e044-00144f67d031/DISS-a212666c-deaa-6867-e044-00144f67d031_DISS-a212666c-deaa-6867-e044-00144f67d031.html