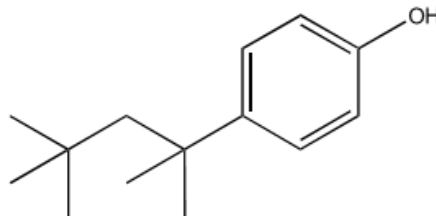




Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

4-tert-octylphenol

CAS nr. 140-66-9



(OECD, 1994)

Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	0,1 µg/l (AA-EQS; EU)
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	0,01 µg/l (AA-EQS; EU)
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	Anvendes ikke ¹
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	Anvendes ikke ¹
Sedimentkvalitetskriterium	SKK _{ferskvand}	2,0 mg/kg tørstof (5% OC)
Sedimentkvalitetskriterium	SKK _{saltvand}	0,2 mg/kg tørstof (5% OC)
Biota-kvalitetskriterium, sekundær forgiftning	BKK _{sek.forgiftn.}	5,2 mg/kg vådvægt (fisk)
Biota-kvalitetskriterium, sundhed	BKK _{sundhed}	Ikke relevant

Juni 2020

¹ Højeste tilladt koncentration (MAC-EQS) er ikke anført i BEK nr. 1625 af 19/12/2017. Ved 'Anvendes ikke' betragtes AA-EQS-værdierne som beskyttelse mod kortvarig høj forurening i kontinuerlige udledninger, da de er væsentligt lavere end de værdier, der er afledt af den akutte toksicitet.

Indhold

FORORD	3
ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS	4
1 INDLEDNING	5
2 FYSISK KEMISKE EGENSKABER	7
3 SKÆBNE I MILJØET	8
3.1 NEDBRYDELIGHED	8
3.2 BIOAKKUMULERING	8
3.3 NATURLIG FOREKOMST	9
4 GIFTIGHEDSDATA	10
4.1 GIFTIGHED OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	10
4.2 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	11
4.3 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	12
5 ANDRE EFFEKTER	13
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	14
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	14
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	14
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	14
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	15
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMANT KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	16
7 KONKLUSION	18
8 REFERENCER	19

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 (vandkvalitetskriterium), i sediment og i dyr og planter (biota).

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 kriteriedokument er oprindeligt udarbejdet i 2009, men er ultimo 2019 - primo 2020 opdateret og udvidet med kriterier for sediment, biota og humant konsum af fiskeprodukter.

Den sidste litteratursøgning i forbindelse med opdateringen er foretaget maj 2020.

English summary and conclusions

The EU has established official AA-EQS values for 4-tert-octylphenol in freshwater of 0.1 µg/L and 0.01 µg/L in saltwater (EU Directive 2013/39/EU). These values are not discussed in this datasheet.

In the EU WFD implementation datasheet for octylphenol (EU, 2005), tentative quality standards for sediment were given, based on the equilibrium-partitioning method. The tentative sediment QS's were 34 µg/kg dw for freshwater sediment, and 3.4 µg/kg dw for marine sediment.

A need for more certain QS values arose as more monitoring data became available with several cases of exceedance of the tentative QS values, and therefore the Istituto di Ricerca sulle Acque (IRSA) in Italy and the Danish Environmental Protection Agency (DEPA) in cooperation have provided new data (2015) based on ecotoxicological tests according to international guidelines with three benthic species, *Lumbriculus variegatus*, *Hyalella azteca*, and *Chironomus riparius*. The consultant DHI in Denmark performed the tests that DEPA were responsible for. Further, for the preparation of this datasheet, the mentioned new experimental data were supplemented by a literature search focused on studies on sediment-dwelling organisms (conducted in April 2020²).

Based primarily on the results of the new experimental studies, QS_{sediment} values have been derived for both freshwater and marine sediments. Following normalisation to standard EU sediment with 5% OC, the study with the oligochaete *Lumbriculus variegatus* turns out to be the most sensitive: EC₁₀ (increase in number of worms) = 8.8 mg/kg (2.24 % OC) ≈ EC₁₀ = 19.6 mg/kg dw (5% OC).

According to EU's draft Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards, TGD27 (EU, 2018), the QS_{sediment} is derived by applying an assessment factor of 10 to the lowest NOEC or EC₁₀ value in a situation like this where relevant, valid data are available for three or more groups of organisms with different feeding and living conditions. An additional assessment factor of 10 is applied for derivation of the QS_{sediment, saltwater} as no data on marine benthic organisms are available.

$$QS_{\text{sediment, freshwater}} = EC_{10} / 10 = 19.6 / 10 = 1.96 \text{ mg/kg dw} \approx \mathbf{2.0 \text{ mg/kg dw (5\% OC)}}$$

$$QS_{\text{sediment, saltwater}} = QS_{\text{sediment, freshwater}} / 10 = \mathbf{0.2 \text{ mg/kg dw (5\% OC)}}.$$

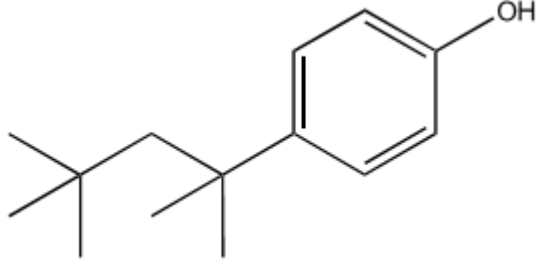
A QS for secondary poisoning of biota, QS_{biota, secpois}, was calculated based on a NOEAL = 15 mg/kg bw/day (2-generation reproduction study with rats). With this QS_{biota, secpois}, was calculated to be 5.2 mg/kg_{fish ww}. In the water column the QS_{biota, secpois} was calculated to be higher than the AA-EQS.

² In ECHA's REACH database, US EPA's ECOTOX database, via OECD's eChemPortal meta-database as well as by conducting a literature search focused on sediment-dwelling organisms using Google Scholar.

1 Indledning

Oplysninger om identiteten af 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol (4-tert-octylphenol) fremgår af tabel 1.1.

Tabel 1.1. Identitet og struktur af 4-tert-octylphenol (REACH registrering).

IUPAC navn	4-(2,4,4-trimethylpentan-2-yl)phenol
Strukturformel	 OECD 1994
CAS nr.	140-66-9
EINECS nr.	205-426-2 (UK EPA 2005)
Kemisk formel	C ₁₄ H ₂₂ O
SMILES	Oc(ccc(c1)C(CC(C)(C)C)(C)C)c1 (UK EPA, 2005)

4-tert-octylphenol anvendes, ifølge UKs risikovurderingsrapport (UK EPA, 2005), primært til at producere phenol-resiner. Disse anvendes primært til at lave gummimaterialer som anvendes til produktion af dæk. 4-tert-octylphenol anvendes bl.a. også til at producere isoleringsmateriale til elektronik, f.eks. i motorer og transformere, samt til printerblæk (UK EPA, 2005).

Ifølge REACH registreringen fremstilles/importeres 4-tert-octylphenol i en tonnage på 10.000-100.000 tons per år i EU.

4-tert-octylphenol har i CLP Reguleringen (EC Nr. 1272/2008), Anneks VI, følgende harmoniserede klassificeringer: Skin Irrit. 2; H315 (forårsager hudirritation), Eye Dam. 1; H318 (forårsager seriøs øjenskade), Aquatic Acute 1; H400 (Meget giftig for vandlevende organismer) og Aquatic Chronic 1; H410 (meget giftig med langvarende virkninger for vandlevende organismer).

4-tert-octylphenol er grundet hormonforstyrrende egenskaber identificeret som et SVHC ('Substance of Very High Concern') under REACH artikel 57(f) – miljø:
"stoffer — som f.eks. stoffer med hormonforstyrrende egenskaber eller stoffer med persistente, bioakkumulerende og toksiske eller meget persistente og meget bioakkumulerende egenskaber, der

ikke opfylder kriterierne i litra d) eller e) — for hvilke der foreligger videnskabelig dokumentation for sandsynlige alvorlige virkninger på menneskers sundhed eller miljøet, der er problematiske i samme grad som virkningerne af de andre stoffer, der er anført i litra a)-e); disse stoffer identificeres enkeltvis i overensstemmelse med den i artikel 59 fastlagte procedure."

4-tert-octylphenol er opført på ECHAs PBT-vurderingslisten, som er en liste der inkluderer stoffer hvor en PBT/vPvB under REACH eller BPR Reguleringen er ved at blive foretaget. Vurderingen er dog p.t. udskudt³.

³ <https://echa.europa.eu/da/pbt/-/dislist/cdetails/0b0236e1809feda7>

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for 4-tert-octylphenol fremgår af tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for 4-tert-octylphenol.

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($g \cdot mol^{-1}$)	206,32	ECHA 2011
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}C$)	79-82 ~80,5	UK EPA 2005
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}C$)	280-283 ⁴	UK EPA 2005
Damptryk, P_v (Pa)	0,21 ⁵	UK EPA 2005
Henry's konstant, H ($pa \cdot m^3 \cdot mol^{-1}$)	0,52 ⁶	UK EPA 2005
Vandopløselighed, S_w ($mg \cdot L^{-1}$)	19 ⁷	UK EPA 2005
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	4,12 ⁸	UK EPA 2005
Organisk kulstof/vand fordelingskoefficient, K_{oc} ($L \cdot kg^{-1}$)	2740 ⁹	UK EPA 2005

⁴ Tryk er ikke oplyst

⁵ ved 20 $^{\circ}C$

⁶ ved 25 $^{\circ}C$

⁷ ved 22 $^{\circ}C$

⁸ ved 20,5 $^{\circ}C$

⁹ Udregnet

3 Skæbne i miljøet

UK's risikovurderingsrapport (UK EPA, 2005) gennemgår tilgængelig data for 4-tert-octylphenols og vurderer adsorptionspotentiale i miljøet. 4-tert-phenol har ifølge denne vurdering et stort potentiale til at adsorbere til jord, slam og sedimenter. Hertil noteres at 4-tert-octylphenol er en svag syre, hvilket også påvirker stoffet adsorptionsevne. Dog påpeges det i UK's risikovurderingsrapport at pKA-værdien for 4-tert-octylphenol er ~ 10 , hvilket gør at stoffet i langt de fleste tilfælde i naturen vil forekomme i dissocieret, og derfor mere hydrofob, form.

Skæbnen for 4-tert-octylphenol i miljøet bliver gennemgået i støttedokumentet for identificeringen af 4-tert-octylphenol som et SVHC (ECHA, 2011). I støttedokument er der bl.a. gennemgået data fra UK's risikovurderingen (UK EPA, 2005) og OECDs Screening Informations DataSet (OECD, 1994).

3.1 Nedbrydelighed

Hydrolyse af 4-tert-octylphenol forventes ikke at forekomme i naturlige forhold pga. den kemiske struktur (aromatisk alkohol) (ECHA, 2011).

Fotolyse kan bidrage til den abiotiske nedbrydning i miljøet. UK's risikovurderingsrapport beskriver et studie med målingstider for fotolyse i en plastikbeholder og en bæk (20-25 cm.), med halveringstider (DT_{50}) på henholdsvis 13,9 timer og 6,9 timer. Det forventes, at 4-tert-octylphenol adsorberer til opløst organisk materiale og sediment i naturlige miljøer ($K_{oc} = 2740$ (Tabel 2.1)). Derfor forventes fotolyse kun at forekomme i klart overfladevand, hvorfor at fotolyse vurderes ikke at bidrage væsentligt i praksis mht. til nedbrydning af 4-tert-octylphenol i miljøet (ECHA 2011).

Støttedokumentet for identifikation af 4-tert-octylphenol som et SVHC (ECHA, 2011), gennemgår flere modstridende studier vedr. bionedbrydningen. Overordnet vurderes 4-tert-octylphenol ikke at være let-bionedbrydelig, dog med nogle indikationer på at der kan forekomme bionedbrydning efter en adaptations-periode (ECHA, 2011).

3.2 Bioakkumulering

Med udgangspunkt i en $\log K_{ow}$ -værdi på 4,12 har den britiske miljøstyrelse beregnet en BCF-værdi for fisk lig 634 (UK EPA, 2005), som blev anvendt til beregninger vedr. sekundær forgiftning i risikovurderingsrapporten. Dermed blev der anvendt en 'worst-case' BCF-værdi. OECDs vurderingsrapport for 4-tert-phenol (OECD 1994) angiver en lavere $\log K_{ow}$ på 3,7 og ved anvendelse af denne udregnes der i rapporten en BCF-værdi på 290. Samlet vurderes det at bioakkumuleringspotentialet for 4-tert-octylphenol er lavt til moderat.

Octylphenoler, inklusiv 4-tert-octylphenol, bliver angivet i EU's EQS datablad (EU, 2005) til at have en forholdsvis høj metabolisering og ekskretion i pattedyr, og det vurderes at der ikke forekommer en bioakkumulering i pattedyr.

3.3 Naturlig forekomst

4-tert-octylphenol forekommer ikke naturligt i miljøet, men bliver udledt gennem industriel udledning af selve stoffet og indirekte gennem nedbrydning af andre udledte stoffer, f.eks. ethoxylater.

4 Giftighedsdata

4.1 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Der foreligger ingen EU risikovurderingsrapport (RAR) for octylphenol, men derimod en risikoreport for stoffet udarbejdet af den britiske miljøstyrelse, Environment Agency (UK EPA, 2005) samt et SVHC-støttedokument for 4-tert-octylphenol fra EU's kemikalieagentur (ECHA, 2011). I begge disse dokumenter nævnes det, at der foreligger enkelte studier udført med sedimentlevende organismer, men hverken i den britiske rapport eller i ECHA's SVHC-dokument benyttes disse data i forbindelse med selve risikovurderingen da de pågældende studier ikke findes tilstrækkeligt entydige og valide til formålet. I stedet udleder UK EPA en PNEC for sediment baseret på data for vandlevende organismer og anvendelse af EqP-metoden.

Særligt skal nævnes et studie udført i sediment med den ungefødende dyndsnegl *Potamopyrgus antipodarum* (Duft et al., 2003). Studiet er ikke udført efter en standard guideline, og dets fokus har været at teste produktionen af embryoner som en mulig, egnet indikator for hormonforstyrrende effekter af alkylphenoler, herunder octylphenol, på denne type sedimentlevende organisme. Der er beregnet en EC₁₀-værdi for den relative andel af nye embryoner (embryoner uden skal) i sneglens "brood pouch" efter 4 ugers eksponering (mest følsomme parameter) så lav som 0,004 µg/kg tørvægt (= 4 ng/kg tørvægt), mens EC₁₀ for totalt antal embryoner efter samme tidsrum var 2,11 µg/kg tørvægt, altså en ca. 500 gange højere værdi.

Effekten er således en stimulering af reproduktionen hos dyndsneglen, og den må principielt vurderes som økologisk relevant, men resultaterne er baseret på ekstrapolation af nominelle, højere koncentrationer, og der er kun en rimelig klar dosis-respons korrelation efter 4 ugers eksponering, men ikke efter hverken 2 eller 8 ugers eksponering. Derfor vurderes det, at resultaterne af studiet ikke bør indgå i grundlaget for udledningen af SKK for octylphenol, men studiet indikerer dog, at snegle (bløddyr) kan være en særlig følsom organismegruppe. At få dette verificeret vil kræve udførelse af nye, bedre studier med bløddyr/snegle.

Det skal bemærkes, at studiet også er gennemgået og vurderet af såvel den britiske miljøstyrelse (UK EPA, 2005) som af ECHA i sit SVHC-støttedokument for 4-tert-octylphenol (ECHA, 2011). Begge disse instanser når frem til samme konklusion som ovenfor vedrørende studiets validitet og anvendelighed.

Der er i forbindelse udarbejdelsen af dette datablad søgt efter nyere data (dvs. data efter 2004, da de ikke forventes at være vurderet i UK EPA's RAR fra 2005) i hhv. databaser og ved en bibliografisk litteratursøgning fokuseret på sedimentlevende organismer¹⁰. Desuden har Miljøstyrelsen i 2015 fået udført test til belysning af økotoksiske effekter af 4-tert-octylphenol (CAS nr. 140-66-9) på tre arter af sedimentlevende ferskvandsorganismer, som der foreligger testrapporter for (IRSA, 2015a og 2015b samt DHI, 2015).

¹⁰ Der er foretaget søgninger i REACH-registreringsdata, i ECOTOX-databasen og via metadatabasen eChemPortal samt ved specifik søgning med Google Scholar efter økotox-studier på octylphenol + sedimentlevende organismer.

Hovedresultaterne af disse tre studier er sammenfattet i Tabel 4.1 herunder.

Tabel 4.1. Giftighedsdata fra studier af effekter af octylphenol på sedimentlevende organismer (ferskvand). Tabellen omfatter kun studier nyere end 2004, dvs. studier der ikke er omfattet af den britiske miljøstyrelses risikovurdering (UK EPA, 2005) eller ECHA's SVHC-dokument (ECHA, 2011).

Species	Test	Effect parameter	Endpoint	Value	Reference (validity)
<i>Chironomus riparius</i> Midge, larvae (fw)	OECD 218, sed. with 1.98% OC, 28 days	Survival, 10d	EC ₁₀ , survival	17 mg/kg dw (≈ 42.9 mg/kg dw at 5% OC)	IRSA, 2015a
		Emergence, 28d	EC ₁₀ , emerg.	15 mg/kg dw (≈ 37.9 mg/kg dw at 5% OC)	
<i>Lumbriculus variegatus</i> Annelid worm (fw)	OECD 225, sed. with 2.24% OC, 28 days	Total no. of worms	EC ₁₀ , total no.	17 mg/kg dw (≈ 37.9 mg/kg dw at 5% OC)	IRSA, 2015b
		Increase in no. of worms	EC ₁₀ , increase	8.8 mg/kg dw (≈ 19.6 mg/kg dw at 5% OC)	
<i>Hyalella azteca</i> Crustacean, amphipod (fw)	US EPA test, sed. with 2.0% OC, 28 days (42 d obs)	Survival	EC ₁₀ (28 d)	8.4 mg/kg dw (≈ 21.0 mg/kg dw at 5% OC)	DHI, 2015

Der foreligger således resultater af valide langtidstest med tre ferskvandsarter af sedimentlevende organismer (*Chironomus riparius*, *Hyalella azteca* og *Lumbriculus variegatus*), der repræsenterer forskellige organismegrupper (insekter, krebsdyr og orme) og forskellig levevis. Alle studierne er udført efter anerkendte internationale guidelines og de vurderes alle som tilstrækkeligt valide til at kunne lægges til grund for beregning af SKK for octylphenol.

Imidlertid er ingen af de tre langtidstest udført med EU standardsediment (dvs. sediment med 5% OC), men OC-indholdet er kendt for alle tre. Når der korrigeres for OC-indholdet og standardiseres til 5% OC er studiet med *Lumbriculus variegatus* det mest følsomme af de tre: EC₁₀ (forøgelse i antallet af orme) = 8,8 mg/kg (2,24 % OC) svarer til EC₁₀ = 19,6 mg/kg tørvægt (5% OC). Studiet med *Hyalella azteca* har en OC-normaliseret EC₁₀ på 21 mg/kg tørvægt.

4.2 Giftighed over for pattedyr og fugle

I UK's risikovurderingsrapport (UK EPA, 2005) er der ikke identificeret nogen terrestriske toksiske data til at kunne vurdere 4-tert-phenols giftighed over for pattedyr og fugle. Det vurderes i risikovurderingsrapporten at det mest anvendelige studie er et to-generationsstudie med rotter (Tyl et al., 1999). Tyl et al., (1999) angiver en NOAEL på 200 ppm som kan omregnes til 15 mg/kg/lgv/dag (UK EPA, 2005). Denne NOAEL-værdi på 15 mg/kg/lgv/dag understøttes af to kortere studier, et 28 oral gavage studie og et 29 dages oral gavage studie, som begge påviser NOAEL-værdier lig 15 mg/kg lgv/dag. Disse studier fremgår ligeledes af OECDs vurderingsrapport (OECD 1994) og EU's EQS datablad (EU, 2005).

I UK's risikovurdering er der desuden beregnet en PNEC værdi på 10 mg/kg_{foder}, men da denne vurderes at være beregnet ud fra forældede beregningsmetoder anvendes denne ikke.

4.3 Giftighed over for mennesker

I OECDs vurderingsrapport for 4-tert-phenol (OECD 1994) er der udregnet en Acceptable Daily Intake (ADI) ved brug af NOAEL på 15 mg/kg lgv/dag fra et to-generations reproduktionsstudie med rotter. Den estimerede dosis for en lav bekymring er i rapporten udregnet brug af en usikkerhedsfaktor på 300 (typisk ligger usikkerhedsfaktoren i intervallet 100-300).

$$ADI = 15 \text{ mg/kg lgv/day} / 300 = 0,05 \text{ mg/kg lgv/day}$$

5 Andre effekter

4-tert-octylphenol er identificeret som et SVHC (ECHA, 2011), grundet hormonforstyrrende effekter i miljøet. Grundet denne identifikation af 4-tert-octylphenols hormonforstyrrende egenskaber er stoffet tilføjet på listen over stoffer identificerede som hormonforstyrrende på EU-niveau (liste 1) på edlists.org.

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

EU har ved Europa-Parlamentets og Rådets Direktiv 2013/39/EU af 12. august 2013 om ændring af Direktiv 2000/60/EF og 2008/105/EF for så vidt angår prioriterede stoffer inden for vandpolitikken fastsat kvalitetskrav for 4-tert-octylphenol (CAS nr. 140-66-4) i vandmiljøet. Kvalitetskravene er implementeret i dansk lovgivning ved Bekendtgørelse nr. 1625 af 19/12/2017 om fastlæggelse af miljømål for vandløb, søer, overgangsvande, kystvande og grundvand:

Generelle vandkvalitetskrav:

Indlandsvand	0,1 µg/l
Andet overfladevand:	0,01 µg/l

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

EU har ikke fastsat noget korttidsvandkvalitetskriterium for 4-tert-octylphenol ("anvendes ikke").

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

4-tert-octylphenol har en $\log K_{ow}$ på > 3 (4,12 jf. afsnit 2), og der skal derfor, jf. EU's Guidance Document No. 27: Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards (EU, 2018), beregnes et sedimentkvalitetskriterium, SKK, for stoffet.

Som det fremgår af afsnit 4.2 foreligger der resultater af langtidstest med stoffet på tre ferskvandsarter af sedimentlevende organismer (*Chironomus riparius*, *Hyalella azteca* og *Lumbriculus variegatus*), der repræsenterer forskellige organismegrupper (insekter, krebsdyr og orme) og forskellig levevis.

De nævnte studier vurderes alle som valide og kan dermed lægges til grund for beregning af SKK for octylphenol. Jf. EU's Technical Guidance Document for udarbejdelse af miljøkvalitetskrav, TGD 27 (EU, 2018), beregnes SKK derfor ved at applikere en usikkerhedsfaktor på 10 til den laveste NOEC eller EC_{10} -værdi.

Ingen af de tre langtidstest er udført med EU standardsediment (dvs. sediment med 5% OC), men studiet med *Lumbriculus variegatus* er det mest følsomme af de tre idet EC_{10} (forøgelse i antallet af orme) = 8,8 mg/kg (2,24 % OC) svarer til $EC_{10} = 19,6$ mg/kg tørvægt (5% OC).

SKK beregnes derfor som $SKK_{ferskvand} = EC_{10} / 10 = 19,6 / 10 = 1,96$ mg/kg tørvægt \approx **2,0 mg/kg tørvægt**

Hvilket svarer til $SKK_{ferskvand} = 39,3 \times f_{oc}$ (jf. kriteriet i Bek. 1625 (2017)).

Da der kun foreligger sedimentdata for følsomheden af ferskvandsorganismer over for 4-tert-octylphenol appliceres en ekstra usikkerhedsfaktor på 10 ved fastsættelsen af det tilsvarende kvalitetskriterie for saltvandssediment, dvs.: $SKK_{\text{saltvand}} = SKK_{\text{ferskvand}} / 10 = 0,2 \text{ mg/kg tørvægt}$.

Hvilket svarer til $SKK_{\text{saltvand}} = 3,93 \times f_{oc}$.

6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

4-tert-octylphenol har en $\log K_{ow}$ på >3 (4,12 jf. afsnit 2) og en $BCF_{\text{fisk}} > 100$ (jf. afsnit 3.2), og der skal derfor jf. EU's Guidance Document No. 27: Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards (EU, 2018), beregnes et biotakvalitetskriterium, BKK, for stoffet.

I UK's risikovurderingsrapport (UK EPA, 2005) vurderes det mest anvendelige studie til at vurdere giftigheden overfor pattedyr og fugle at være et to-generationsstudie på rotter (Tyl et al., 1999). Tyl et al., (1999) angiver en NOAEL på 200 ppm svarende til 15 mg/kg lgv/dag (UK EPA, 2005).

I EU's EQS datablad (EU, 2005) er der udregnet et biotakriterie ved brug af NOAEL fundet i Tyl et al. (1999). Denne vurderes dog at være beregnet ud fra forældede beregningsmetoder og anvendes derfor ikke.

Med udgangspunkt i en NOAEL-værdi på 15 mg/kg lgv/dag beregnes et biotakvalitetskriterium ved brug af EU's Guidance Document No. 27: Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards (EU, 2018):

Energiindholdet normaliseres jf. EU's Guidance Document No. 27 (EU, 2018) – metode A (*Input parameters daily dose and body weight*), hvor ligningen for pattedyr anvendes for at finde et dyrs, i dette tilfælde rotte, daglige energi-konsum via føde:

$$\log(DEE)_{kJ/d} = 0,8136 + 0,7149 * \log(lgv)g$$

NOAEL værdien i Tyl et al., (1999) er udledt efter observerede effekter i hunner, hanner og kuld ved 200 ppm. Da der i de videre beregninger skal anvendes en gennemsnitlig vægt for dyrene hvori effekterne blev observeret, anvendes den mindste værdi for de tre grupperinger: den gennemsnitlige værdi for kullet. Den gennemsnitlige vægt per rotte som anvendes er lig: $(98,31 \text{ g} + 206,09 \text{ g}) / 2 = 152,28 \text{ g}$.

$$\begin{aligned} \log(DEE)_{kJ/d} &= 0,8136 + 0,7149 * \log(152,28)g \\ \log(DEE)_{kJ/d} &= 2,37 \\ DEE &= 10^{2,37} \end{aligned}$$

Herefter anvendes rottens daglige energi konsum via indtaget føde per dag og NOAEL-værdien (15 mg/kg lgv/dag) til at beregne den energi-normaliseret koncentration:

$$\text{Konc}_{\text{energinormaliseret}} = \text{dose} * \frac{bw}{DEE}$$

$$\text{Konc}_{\text{energinormaliseret}} = 15 \text{ mg/kg lgv/dag} * \frac{0,1498 \text{ kg}}{10^{2,37} \text{ kJ/dag}}$$

$$\text{Konc}_{\text{energinormaliseret}} = 0,0096 \text{ mg/kJ}$$

Jf. EU's Guidance Document No. 27 (EU, 2018) betragtes fisk som det kritiske fødeemne for 4-tert-octylphenol, da bioakkumuleringspotentiale for fisk er det mest pålidelige. Værdien omregnes derfor til en koncentration i fisk som føde.

$$\text{Energiindhold}_{\text{fisk}} = 21,0 \text{ kJ} * g_{\text{tv}}^{-1} \quad \text{Vandindhold}_{\text{fisk}} = 74\%$$

$$\text{Konc}_{\text{fødeemne,vv}} = \text{Konc}_{\text{energi,norm}} * \text{energiindhold}_{\text{fødeemne,tv}} * (1 - \text{vandindhold}_{\text{fisk}})$$

$$=$$

$$C_{\text{fisk,vv}} = 0,0096 \text{ mg} * \text{kJ}^{-1} * 21.000 \text{ kJ} * \text{kg}_{\text{tv}}^{-1} * (1 - 0,74)$$

$$=$$

$$C_{\text{fisk,vv}} = 52,4 \text{ mg} * \text{kg}_{\text{fisk,vv}}^{-1}$$

Et studie som inkluderer alle sensitive livsstadier vurderes ifølge EU's Guidance Document No. 27 (EU, 2018) at kunne betragtes som et kronisk studie, hvorfor at tre-generationsstudiet anses som værende et kronisk studie. Dermed skal der ikke anvendes en faktor for omregning til kronisk toksicitet (Tabel 9 i EU, 2018).

Da der ved udledning af kriteriet kun foreligger én kronisk toksicitetsværdi fra et relevant studie, anvendes den højeste usikkerhedsfaktor på 10, jf. tabel 10, s. 89 i EU's Guidance Document No. 27 (EU, 2018), og følgende koncentration foreslås til kriterie:

$$\text{BKK}_{\text{fisk,vv}} \frac{52,4 \text{ mg} * \text{kg}^{-1}}{10} = 5,2 \text{ mg} * (\text{kg}_{\text{fisk,vv}})^{-1}$$

BKK_{fisk} kan omregnes til et biotakvilitetskriterium i vand ved at dividere BKK med BCF, der er 634 l/kg for 4-tert-octylphenol (jf. afsnit 3.2):

$$\text{BKK}_{\text{vand}} = \frac{5,2 \text{ mg/kg}(\text{fisk}, \text{vv})}{634 \text{ l/kg}} = 0,0082 \text{ mg/l} \sim 8,3 \text{ } \mu\text{g/l}$$

BKK_{vand} er højere end de fastsatte generelle vandkvalitetskrav for både ferskvand og saltvand, hvilket betyder at vandkvalitetskravet sikre beskyttelse af biota for sekundær forgiftning.

6.5 Kvalitetskriterium for humant konsum af vandlevende organismer (HKK)

Kriterier for, hvorvidt der skal beregnes et kvalitetskriterium for humant konsum af vandlevende organismer (HKK), fremgår af EU (2018), afsnit 2.4.3.2. I dette afsnit fremgår det 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 langsigtet effekter, som kan have en indflydelse på populationer.

Der foreligger ikke oplysninger for 4-tert-octylphenol som gør en udledning af HKK relevant, hvorfor at denne ikke er beregnet.

7 Konklusion

EU har ved Europa-Parlamentets og Rådets Direktiv 2013/39/EU af 12. august 2013 om ændring af Direktiv 2000/60/EF og 2008/105/EF for så vidt angår prioriterede stoffer inden for vandpolitikken fastsat kvalitetskrav for 4-tert-octylphenol (CAS nr. 140-66-4) i vandmiljøet. Kvalitetskravene er implementeret i dansk lovgivning ved Bekendtgørelse nr. 1625 af 19/12/2017 om fastlæggelse af miljømål for vandløb, søer, overgangsvande, kystvande og grundvand:

Generelle vandkvalitetskrav:	Indlandsvand	0,1 µg/l
	Andet overfladevand:	0,01 µg/l

EU har ikke fastsat noget korttidsvandkvalitetskriterium for 4-tert-octylphenol ("anvendes ikke").

Sammenfattende er følgende kriterier beregnet for 4-octylphenol:

$SKK_{\text{ferskvand}} = 2,0 \text{ mg/kg tørstof (5\% OC)}$

$SKK_{\text{saltvand}} = 0,2 \text{ mg/kg tørstof (5\% OC)}$

$BKK_{\text{sek. forgiftning}} = 5,2 \text{ mg/kg vådvægt (fisk)}$

BKK_{sundhed} vurderes ikke at være relevant.

8 Referencer

DCE (2019). Assessment of hazardous substances in Danish sediment and biota according to Norwegian, Swedish and Dutch quality standards. Technical Report from DCE – Danish Centre for Environment and Energy No. 146, 2019, 38 pp.

Duft, M., Schulte-Oehlmann, U., Weltje, L., Tillmann, M. & Oehlmann, J. (2003). Stimulated embryo production as a parameter of estrogenic exposure via sediments in the freshwater mudsnail *Potamopyrgus antipodarum*. *Aquatic Toxicology* 64 (2003), pp. 437-449.

ECHA (2011). SVHC Support Document. 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol, 4-tert-octylphenol. European Chemicals Agency. Adopted on 9 December 2011.

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

EU (2005). Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive. Environmental Quality Standards (EQS). Substance Data Sheet. Priority Substance No. 25. Octylphenols (para-tert-octylphenol). CAS-NO. 1806-26-4 and 140-66-9. Final version. Brussels, 31 July 2005.

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.

DHI (2015). Sediment-water toxicity test on *Hyalella azteca* using sediment spiked with branched 4-tert-octylphenol. Study undertaken by DHI for the Danish Environmental Protection Agency. Project No. 11815184. 2015.05.29.

IRSA (2015a). Sediment-water toxicity test on *Chironomus riparius* using sediment spiked with 4-tert-octylphenol. Study undertaken by IRSA (Istituto di Ricerca Sulle Acque) for the Danish Environmental Protection Agency. Study No. 0003800. 15/09/2015.

IRSA (2015b). Sediment-water toxicity test on *Lumbriculus variegatus* using sediment spiked with 4-tert-octylphenol. Study undertaken by IRSA (Istituto di Ricerca Sulle Acque) for the Danish Environmental Protection Agency. Study No. 0003803. 15/09/2015.

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

OECD (1994). OECD SIDS. Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-. CAS N^o: 140-66-9. UNEP Publications.

Tyl, R.W., Myers, C.B., Mar, M., Brine, D.R., Fail, P.A., Seely, J.C. & Van Miller, J.P. (1999). Two-generation reproduction study with p-tert-octylphenol (OP) in rats. *Regional Toxicology and Pharmacology*. 30, 81-95.

UK EPA (2005). Environmental Risk Evaluation Report: 4-tert-Octylphenol. 2005. Environment Agency, UK.