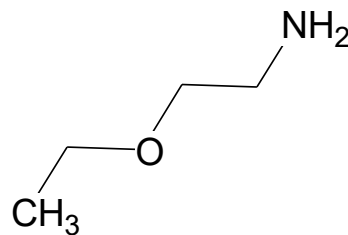


Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

2-Ethoxyethylamin 110-76-9



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	152 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	15,2 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	1,52 mg/l
	KVKK _{saltvand}	0,15 mg/l

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 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	11
5.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	11
5.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	11
5.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	11
5.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	12
5.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	12
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 2009) og Miljøstyrelsens vejledning til fastsættelse af vandkvalitetskriterier (Miljøstyrelsen 2004).

Den sidste litteratursøgning er foretaget i februar 2011.

English Summary and conclusions

Environmental water quality standards (EQS) were derived for 2-Ethoxyethylamine (CAS No. 110-76-9) following guidelines from EU (2003; 2009) and the Danish EPA (Miljøstyrelsen 2004).

2-Ethoxyethylamine was concluded to be readily biodegradable and have low potential for bioaccumulation.

The toxicity dataset for 2-Ethoxyethylamine is limited to acute studies for algae, crustaceans and fish from saltwater. (Q)SAR estimates and test data from analogous substances was in the same range as test results for 2-ethoxyethylamine thus confirming the validity of these studies.

The lowest toxicity value was an acute EC₅₀ of 152 mg/l for *Skeletonema costatum*. The dataset is limited but is precisely filling the minimum requirements for deriving an EQS. Hence large assessment factors of 1,000 for freshwater and 10,000 for saltwater are applied to the EC₅₀ for *S. costatum*. This yields a PNEC_{freshwater} of 152 µg/l and PNEC_{saltwater} of 15.2 µg/l.

A MAC was calculated from the EC₅₀ for *S. costatum* and an assessment factor of 100. Hence MAC is 1.52 mg/l.

The following water quality standards are derived for 2-Ethoxyethylamine:

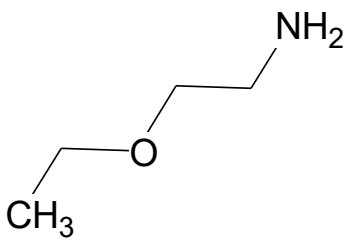
Water quality standard	EQS _{freshwater}	152 µg/l
Water quality standard	EQS _{saltwater}	15.2 µg/l
Maximum acceptable concentration	MAC	1.52 mg/l

1 Indledning

Identiteten af 2-ethoxyethylamin fremgår af tabel 1.1.

Der er ikke fundet informationer om anvendelse af stoffet.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	2-ethoxyethan-1-amine
Strukturformel	
CAS nr.	110-76-9
EINECS nr.	203-801-5
Kemisk formel	C ₄ H ₁₁ NO
SMILES	C(CN)OCC

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for 2-ethoxyethylamine fremgår af tabel 2.1. Det fleste fysiske kemiske egenskaber er estimeret med Epiwin, da der ikke er fundet testdata i litteraturen. Simple alkylaminer har pK_a værdier på mellem 9,8 – 10,8 (OECD 2011), hvilket medfører, at de hovedsageligt vil forekomme i protoneret form i vandmiljøet. De fleste (Q)SAR modeller tager dog udgangspunkt i den neutrale (uprotonerede) form af strukturen, og de angivne estimater er derfor behæftet med en del usikkerhed.

Fordelingen i miljøet af 2-ethoxyethylamin er estimeret vha. McKay level III fugacitetsmodellen. Med udgangspunkt i ens og kontinuerlig udledning til vand, luft og jord forudsiger modellen følgende fordeling ved ligevægt:

Vand ~ 50 %, jord ~ 50 %, sediment < 1 %, luft < 1 %

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for [stofnavn]

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($g \cdot mol^{-1}$)	89,14	
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}C$)	-40,4	Epiwin (v.4.00) estimeret
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}C$)	108	Epiwin (v.4.00) eksperimentel data
Damptryk, P_v (Pa)	$3,53 \cdot 10^3$	Epiwin (v.4.00) estimeret
Henry's konstant, H ($pa \cdot m^3 \cdot mol^{-1}$)	$1,58 \cdot 10^{-2}$	Epiwin (v.4.00) estimeret
Vandopløselighed, S_w ($mg \cdot L^{-1}$)	Meget høj	Epiwin (v.4.00) estimeret
Dissociationskonstant, pK_a	9,8-10,8 ¹	OECD 2011
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	1,5	Rapport 2010

¹Baseret på testdata fra andre primære aminer med analoge strukturer

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

Bionedbrydelighed af 2-ethoxyethylamin er undersøgt i en OECD TG301 A (Die Away Test), hvor stoffet blev fundet let bionedbrydeligt (AEE Consortium 2009) (studiet har ikke været tilgængeligt for kvalitetssikring). Dette resultat er i overensstemmelse med bionedbrydningsstudier for strukturelt beslægtede primære aminer som methylamin, ethylamin, isopropylamin, butylamin, octylamin og 2-ethylhexylamin (OECD 2011). (Q)SAR estimater fra Biowin (v.4.10) og den danske (Q)SAR database forudsiger begge, at 2-ethoxyethylamin er let bionedbrydeligt.

Den overordnede konklusion er, at 2-ethoxyethylamin er let bionedbrydeligt.

3.2 Bioakkumulering

Der er ikke fundet testresultater for bioakkumulering af 2-ethoxyethylamin. (Q)SAR estimater fra BCFBAF (v.3.00) forudsiger BCF værdier på 3,16 (regressionsbaseret metode) og 0,9 (Arnot-Gobas metoden).

Der er fundet en log Kow på 1,5 for 2-ethoxyethylamin. Andre strukturelt beslægtede primære aminer har log Kow < 3 (OECD 2011).

Den overordnede konklusion er, at 2-ethoxyethylamin har lavt potentiale for bioakkumulering.

3.3 Naturlig forekomst

Der er ikke fundet informationer om, at 2-ethoxyethylamin er naturligt forekommende.

4 Giftighedsdata

4.1 Giftighed over for vandlevende organismer

Der er fundet begrænsede informationer om giftigheden af 2-ethoxyethylamin over for vandlevende organismer. Datasættet, som fremgår af tabel 4.1, omfatter akutte forsøg med tre saltvandslevende arter fra tre forskellige højere systematiske grupper (alger, krebsdyr og fisk). Der er ingen kroniske studier, der kan belyse langtidseffekten af 2-ethoxyethylamin i vandmiljøet. Alle tre akutte tests er beskrevet i en upubliceret testprotokol fra DHI (2010). Testene er udført efter internationale retningslinjer/guidelines og der er foretaget analytiske målinger af testkoncentrationerne. De udførte forsøg vurderes at være troværdige uden restriktioner (Klimisch code 1) og egnede til fastsættelse af vandkvalitetskriterier.

Tabel 4.1. Akut giftighed af 2-ethoxyethylamin over for saltvandsorganismer

	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Reference
Alger					
<i>Skeletonema costatum</i>	Ja	72 t	EC ₅₀ , vækstrate	152	DHI 2010
<i>Skeletonema costatum</i>	Ja	72 t	EC ₁₀ , vækstrate	80	DHI 2010
Krebsdyr					
<i>Acartia tonsa</i>	Ja	48 t	EC ₅₀ , ubevægelighed	211	DHI 2010
Fisk					
<i>Scophthalmus maximus</i>	Ja	96 t	LC ₅₀ , dødelighed	>1000	DHI 2010

Grundet det begrænsede datasæt er der indsamlet forudsigelser fra (Q)SAR modeller (Tabel 4.2). ECOSAR modellerne er baseret på et træningssæt bestående af alifatisk aminer og da data i træningssættet derfor må formodes at være baseret på protonerede former af teststofferne vurderes de angivne estimater at være troværdige. Estimaterne i den danske (Q)SAR database er inden for modellernes domæner for fisk og krebsdyr, men uden for domænet for algemodellen.

Tabel 4.2 (Q)SAR forudsigelser for 2-ethoxyethylamin

	Effekt	Værdi mg/l	Model
Alger	96 t, EC ₅₀	5,36	ECOSAR, aliphatic amines
Alger	72 t, EC ₅₀	57,9	Danish (Q)SAR database
Krebsdyr	48 t, EC ₅₀	27,4	ECOSAR, aliphatic amines
Krebsdyr	48 t, EC ₅₀	40,5	Danish (Q)SAR database
Fisk	96 t, LC ₅₀	448	ECOSAR, aliphatic amines
Fisk	96 t, LC ₅₀	1000	Danish (Q)SAR database

Der er endvidere indsamlet data fra to strukturelt beslægtede stoffer (strukturnaloger). Tabel 4.3 viser effektværdier for butylamin og butan-2-amin. Der er medtaget (Q)SAR estimeret for strukturnalogerne for at give en indikation for, om de anvendte modeller er nøjagtige for denne type af stoffer. De anvendte strukturnaloger fremgår af tabel 4.4.

Tabel 4.1. Akut giftighed af strukturnaloger til 2-ethoxyethylamin over for vandlevendeorganismer

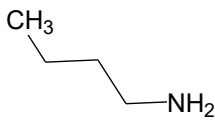
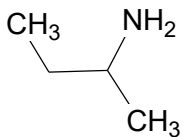
Strukturnalog	Art	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Reference
Butylamin	Alger estimeret ²	96 t	EC ₅₀	1,50	ECOSAR
	<i>Ceriodaphnia dubia</i> (m)	48 t	EC ₅₀	8,2	OECD 2011
	<i>Daphnia</i> estimeret ²	48 t	EC ₅₀	5,1	ECOSAR
	<i>Pimephales promelas</i> (m)	96 t	LC ₅₀	268	OECD 2011
	<i>Lepomis macrochirus</i> (n)	96 t	LC ₅₀	32	OECD 2011
	<i>Menidia beryllina</i> (n)	96 t	LC ₅₀	24	OECD 2011
	Fisk estimeret ²	96 t	LC ₅₀	65	ECOSAR
Butan-2-amin	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	72 t	E _r C ₅₀	4,11 ¹	OECD 2011
	Alger estimeret ²	96 t	EC ₅₀	1,6	ECOSAR
	<i>Daphnia magna</i> (n)	48 t	EC ₅₀	40	OECD 2011
	<i>Daphnia</i> estimeret ²	48 t	EC ₅₀	5,6	ECOSAR
	<i>Leuciscus idus</i> (n)	96 t	LC ₅₀	46-68	OECD 2011
	Fisk estimeret ²	96 t	LC ₅₀	71	ECOSAR

¹ Geomiddelværdi af tre rapporterede effektværdier

² Estimeret ved hjælp af ECOSAR (v.4.00), model: Aliphatic Amines

m = målt, n = nominel

Tabel 4.3. Strukturnaloger for 2-ethoxyethylamin

Navn på strukturnalog	Kemisk struktur	Fysisk kemisk data	
Butylamin CAS nr. 109-73-9		Vandopløselighed Log K _{ow}	1 · 10 ⁶ mg/l 0,97
Butan-2-amin CAS nr. 13952-84-6		Vandopløselighed Log K _{ow}	112 mg/l 0,6

Når alle informationer tages i betragtning (testdata for 2-ethoxyethylamin, (Q)SAR estimater for 2-ethoxyethylamin og testdata for de to strukturanaloger) kan følgende konklusioner opstilles:

- Langtidseffekten af 2-ethoxyethylamin i vandmiljøet kan ikke belyses, da der ikke er fundet kroniske data, hverken for 2-ethoxyethylamin eller for strukturanaloger.
- Alger er den mest følsomme af de testede grupper i korttidsforsøg mens krebsdyr er en anelse mindre følsomme. Fisk er væsentlig mindre følsomme end alger og krebsdyr.
- Det ser ikke ud til, at der er generel forskel i giftigheden af primære aminer over for henholdsvis ferskvands- og saltvandsorganismer inden for de tre testede højere systematiske grupper.
- Der er generelt forholdsvis god overensstemmelse mellem testdata og (Q)SAR estimater for strukturanalogerne. Dog er effektværdierne for alger og krebsdyr for 2-ethoxyethylamin noget højere end estimaterne.

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Der er ikke fundet giftighedsdata for sedimentlevende organismer.

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Der er ikke fundet giftighedsdata for pattedyr og fugle.

4.4 Giftighed over for mennesker

Der er ikke fundet giftighedsdata for mennesker.

5 Udledning af vandkvalitetskriterium

5.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der er fundet meget få informationer om giftigheden af 2-ethoxyethylamin. Datasættet er begrænset til korttidsforsøg med alger, krebsdyr og fisk fra saltvand, hvor den laveste effektværdi er EC₅₀ på 152 mg/l for alger (*Skeletonema costatum*).

Disse oplysninger er suppleret med (Q)SAR estimater og akutte testdata fra strukturanaloger, der ikke viser nogen forskel i følsomhed mellem saltvands- og ferskvandsorganismer for de testede højere systematiske grupper. Der er dog ingen informationer om kroniske effekter, hverken for 2-ethoxyethylamin eller nogen af strukturanalogerne.

Datasættet opfylder dermed lige præcis minimumskravet for at kunne fastsætte vandkvalitetskriterier, og der anvendes derfor høje usikkerhedsfaktor på 1.000 for ferskvand og 10.000 for saltvand (jævnfør EU 2003; 2009 samt Miljøstyrelsen 2004).

$$\text{PNEC}_{\text{ferskvand}} = \frac{152 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}}{1.000} = 152 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$\text{PNEC}_{\text{saltvand}} = \frac{152 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}}{10.000} = 15,2 \text{ } \mu\text{g/l}$$

5.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Ved fastsættelse af KVKK anvendes EC₅₀ fra studiet med alger samt en usikkerhedsfaktor på 100 (ferskvand) eller 1000 (saltvand).

$$\text{KVKK}_{\text{ferskvand}} = \frac{152 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}}{100} = 1,52 \text{ mg/l}$$

$$\text{KVKK}_{\text{saltvand}} = \frac{152 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}}{1000} = 0,152 \text{ mg/l}$$

5.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Log Kow er < 3, og der er ikke oplysninger om, at 2-ethoxyethylamin akkumulerer i sediment. Derved er kriterierne ikke opfyldt for at beregne kvalitetskriterium for sediment (EU 2009).

5.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Log K_{ow} er < 3, og der er ikke oplysninger om, at 2-ethoxyethylamin bioakkumulerer. Derved er kriterierne ikke opfyldt for at beregne kvalitetskriterium for biota (EU 2009).

5.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

2-ethoxyethylamin er ikke klassificeret med R-sætninger, som udløser beregning af HKK.

6 Konklusion

Følgende kvalitetskriterier er fastsat for 2-ethoxyethylamin:

Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	152 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	15,2 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	1,52 mg/l
	KVKK _{saltvand}	0,15 mg/l

Der gøres opmærksom på, at kvalitetskriterierne er fastsat på baggrund af et spinkelt datagrundlag, som dog præcist opfylder minimumskravene til at kunne fastsætte kvalitetskriterier. Derfor er der også anvendt forholdsvis høje usikkerhedsfaktorer.

7 Referencer

AEE Consortium 2009. U.S. High Production Volume (HPV) Challenge Program.

<http://www.epa.gov/hpv/pubs/summaries/ethanol2-2amino/c16831tp.pdf>

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 2009. Chemicals and the Water Framework Directive: Technical Guidance for Deriving Environmental Quality Standards. Unpublished draft.

DHI 2010. Økotoksikologisk karakterisering af 2-ethoxyethylamin. Upubliceret testprotokol.

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

OECD 2011. SIDS Initial Assessment Profile. Primary Amines Category. Upubliceret udkast til OECD SIAM 32, forår 2011.

Rapport 2010. Determination of the partition coefficient (n-octanol/water) of EEA and IBP. Ikke-publiceret testrapport.

