

## **1-chlor-2,4-dinitrobenzen (DNCB) (CAS No. 97-00-7)**

$$\begin{aligned}\text{VKK}_{\text{ferskvand}} &= 0,005 \text{ mg/l} = 5 \text{ }\mu\text{g/l} \\ \text{VKK}_{\text{saltvand}} &= 0,0005 \text{ mg/l} = 0,5 \text{ }\mu\text{g/l} \\ \text{KVKK} &= 0,037 \text{ mg/l} = 37 \text{ }\mu\text{g/l}\end{aligned}$$

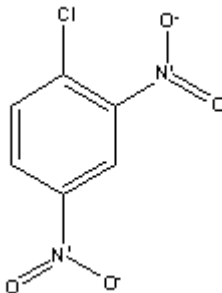
### **Summary**

A water quality standard for 1-chloro-2,4-dinitrobenzene was derived as described in the EU Water Framework Directive (EU, 2000A). Data were available from long-term studies with species from three trophic levels, among which the lowest NOEC value was 0.05 mg/l (fish). An assessment factor of 10 and 100 was used resulting in a PNEC value of 0.005 mg/l and 0.0005 mg/l respectively for freshwater and saltwater. There is no information on potential endocrine disrupting properties. The substance is not readily biodegradable in the aquatic environment but it is neither considered bioaccumulative. Therefore, no other considerations than the toxicity are relevant for deriving the water quality standards, which is set equal to the PNEC-value; i.e. The maximum acceptable concentration is derived with a factor of 10 applied to the lowest EC50 because there are many EC50 values from at least 4 different higher taxonomic groups. The WQS thus are:

$$\begin{aligned}\text{WQS}_{\text{freshwater}} &= 5 \text{ }\mu\text{g/l} \\ \text{WQS}_{\text{saltwater}} &= 0.5 \text{ }\mu\text{g/l} \\ \text{MAC} &= 37 \text{ }\mu\text{g/l}\end{aligned}$$

# 1 STRUKTUR, EGENSKABER OG FOREKOMST

Tabel 1.1 Fysisk-kemiske etc. egenskaber for 1-chlor-2,4-dinitrobenzen  
*Physico-chemical etc. properties of 1-chloro-2,4-dinitrobenzene*

CAS-nr. / CAS No.	97-00-7
Struktur / Structure	
Synonymer / Synonyms	2,4-Dinitrochlorbenzen; 1,3-Dinitro-4-chlorbenzen; Dinitrochlorbenzen; chlordinitrobenzen; 2,4-Dinitro-1-chlorbenzen; 4-Chlor-1,3-dinitrobenzen
Klassificering / Classification	T; R23/24/25 R33 N;R50/53 <sup>5</sup>
Molekylær formel / Empirical formula	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
Molvægt / Molar weight	202.55 g/mol <sup>2</sup>
Vandopløselighed / Water solubility (25°C)	8 mg/l <sup>3</sup>
Damptryk / Vapour pressure (25°C)	0,011 Pa <sup>3</sup>
Octanol-vand fordelingskoefficient/ Log P <sub>ow</sub>	2,17 <sup>3,4</sup>

1 Miljøministeriet (2002)

2 Chemfinder (2002)

3 Syracuse (2002)

4 Verschuereen (1997)

5 N-Class (2002)

1-chlor-2,4-dinitrobenzen (CAS-nr. 97-00-7, Annex I Index nr. 610-003-00-4) står ikke opført på Listen Over Farlige Stoffer (Miljøministeriet, 2002), men er klassificeret i N-Class (2002) med ovennævnte klassificering. Det kan nævnes, at chlordinitrobenzen (CAS-nr. 25567-67-3, Annex I Index nr. 610-003-00-4) er opført på Listen Over Farlige Stoffer med klassificeringen: T;R23/24/25 R33 N;R50/53.

Der er ikke fundet oplysninger om, at 1-chlor-2,4-dinitrobenzen er naturligt forekommende (Verschuereen, 1997).

1-chlor-2,4-dinitrobenzen anvendes bl.a. som mellemprodukt ved fremstilling af farvestoffer, pesticider, fotokemikalier og duftstoffer (Verschuereen, 1997).

Der er ikke fundet oplysninger om målte koncentrationer af 1-chlor-2,4-dinitrobenzen i vandmiljøet (Verschuereen, 1997).

## **2 GIFTIGHED**

### **2.1 Giftighed over for mennesker**

1-chlor-2,4-dinitrobenzen er ikke klassificeret med R-sætninger, der dækker carcinogene, mutagene eller reproduktionsskadende egenskaber (Miljøministeriet, 2002) og der er ikke fundet data for disse egenskaber i de anvendte kilder. Der foreligger ikke oplysninger om, hvorvidt stoffet har hormonforstyrrende egenskaber. 1-chlor-2,4-dinitrobenzen er ikke opført på EUs liste over stoffer med registrerede hormonforstyrrende egenskaber (EU, 2000B), og der er ikke fundet eksperimentelle data vedrørende sådanne egenskaber for stoffet.

### **2.2 Giftighed over for vandorganismer**

Der foreligger en del data for 1-chlor-2,4-dinitrobenzen, hvoraf mange ikke er fra standardiserede studier. De studier, der bedst opfylder udvælgelseskriterierne, er summeret i tabel 2.1. Der foreligger toksicitetsdata fra såvel korttids- som længerevarende studier med organismer fra hvert af de tre trofiske niveauer. Kun enkelte af resultaterne er publicerede i internationale tidsskrifter.

**Tabel 2.1 Økotoksikologiske data for 1-chlor-2,4-dinitrobenzen (97-00-7)**  
**Ecotoxicity data for 1-chloro-2,4-dinitrobenzene (97-00-7)**

Systematisk gruppe / <i>Taxonomic group</i>	Parameter, effektmål / <i>End point</i>	Eksponeringstid / <i>Exposure time</i>	Resultat / <i>Result</i> [mg/l]	Antal studier / <i>Number of studies</i>
Alger / <i>Algae</i> ( <i>Chlorella pyrenoidosa</i> )	EC <sub>50</sub> , (growth)	96 h	0,8 <sup>1</sup>	1
Alger / <i>Algae</i> ( <i>Scenedesmus subspicatus</i> )	NOEC (growth)	72 h	0,067 <sup>6</sup>	2
Hjuldyr / <i>Rotifers</i> <i>Brachionus calyciflorus</i>	LC <sub>50</sub>	24 h	1,3-2,0 <sup>8</sup>	1 (3 test results)
Krebsdyr / <i>Crustacea</i> ( <i>Daphnia magna</i> )	E/LC <sub>50</sub>	48 h	0,49-0,8 <sup>1,2</sup>	2 (3 test results)
Krebsdyr / <i>Crustacea</i> ( <i>Daphnia magna</i> )	NOEC (immobility; reproduction)	21 d	0,1-0,32 <sup>7</sup>	2
Fisk / <i>Fish</i> ( <i>Poecilia reticulata</i> )	LC <sub>50</sub>	14 d	0,2 <sup>1</sup>	1
Fisk / <i>Fish</i> ( <i>Oryzias latipes</i> )	LC <sub>50</sub>	48 h	0,37 <sup>3</sup>	1
Fisk / <i>Fish</i> ( <i>Brachydanio rerio</i> , <i>Leuciscus idus melanotus</i> )	LC <sub>50</sub>	96 h	0,71-0,75 <sup>5</sup>	3
Fisk / <i>Fish</i> ( <i>Brachydanio rerio</i> )	NOEC (mortality)	28 d	0,05 <sup>4</sup>	1

h: Hours (timer)

D: Days (dage)

1 Maas-Diepeveen & Van Leeuwen (1986) citeret i US EPA (2002)

2 Dierickx & Van der Wielen (1986) citeret i US EPA (2002)

3 Citi (2002)

4 IUCLID (2000). Studier fra 1994

5 IUCLID (2000). Studier fra 1980, 1989

6 IUCLID (2000). Studier fra 1994

7 IUCLID (2000). Studier fra 1994

8 Snell et al. (1991) citeret i US EPA (2002)

Der ser ikke ud til at være forskel i følsomheden af de undersøgte organismegrupper.

Den laveste NOEC-værdi er på 0,05 mg/l for fisk. Datakvaliteten er ikke vurderet, men der foreligger NOEC-værdier fra studier med alger og dafnier, hvor toksicitetsniveauet ligger meget tæt og i fin sammenhæng med E/LC<sub>50</sub>-værdierne. Resultaterne vurderes derfor at bekræfte hinanden. Den laveste NOEC-værdi på 0,05 mg/l anses derfor for at være valid og anvendes som grundlag for vandkvalitetskriteriet.

### 3 BIOAKKUMULERING

Der er fundet et enkelt eksperiment for bioakkumulering af 1-chlor-2,4-dinitrobenzen med den højeste BCF-værdi på 44 fra et 6 ugers studie med *Cyprinus carpio* (Citi, 2002). 1-Chlor-2,4-dinitrobenzen har en log P<sub>ow</sub> på 2,1. På den baggrund vurderes 1-chlor-2,4-dinitrobenzen ikke at være bioakkumulerbart.

## 4 **NEDBRYDELIGHED**

Der er kun fundet data fra en enkelt let nedbrydelighedstest (MITI test I), hvor der blev målt 0% nedbrydning efter 14 dage og på den baggrund vurderes 1-chlor-2,4-dinitrobenzen at være ikke let nedbrydeligt (Citi, 2002). Dette stemmer overens med, at stoffet er klassificeret med R53. 1-chlor-2,4-dinitrobenzen, vurderes på den baggrund ikke at være let nedbrydeligt i vandmiljø.

## 5 **LUGT OG SMAG**

Der er ikke fundet oplysninger om stoffets afgivelse af lugt og/eller smag til levende organismer i vandmiljøet.

## 6 **FORSLAG TIL VANDKVALITETSKRITERIE**

Som grundlag for vandkvalitetskriteriet beregnes først en PNEC-værdi som beskrevet i Vandrammedirektivet (EU, 2000A). Hertil er der NOEC-værdier fra længerevarende test med arter fra de tre trofiske niveauer, hvor 0,05 mg/l for fisk er laveste værdi. Der anvendes henholdsvis en faktor 10 og 100 ved beregning af PNEC-værdien, dvs.  $PNEC_{\text{ferskvand}}$  bliver 0,005 mg/l og  $PNEC_{\text{saltvand}}$  bliver 0,0005 mg/l.

1-chlor-2,4-dinitrobenzen er ikke klassificeret med carcinogene, mutagene eller reproduktionsskadelige egenskaber, og der er ikke fundet oplysninger vedrørende 1-chlor-2,4-dinitrobenzens hormonforstyrrende egenskaber. 1-chlor-2,4-dinitrobenzen er ikke let nedbrydeligt i vandmiljø, men det anses ikke for at være bioakkumulerbart.

Der er dermed ikke andre forhold, der kommer i betragtning ved fastsættelsen af vandkvalitetskriteriet, der sættes lig med PNEC-værdien.

Da der er mange EC50 værdier fra mindst 4 overordnede systematiske grupper, bruges der en faktor 10 på laveste EC50 ved beregning af korttidsvandkvalitetskriteriet, dvs.  $0,37\text{mg/l}:10 = 0,037\text{ mg/l}$ .

På den baggrund foreslås fås følgende vandkvalitetskriterier for 1-chlor-2,4-dinitrobenzen:

$$\begin{aligned} \mathbf{VKK_{\text{ferskvand}} = 0,005\text{ mg/l} = 5\text{ }\mu\text{g/l}} \\ \mathbf{VKK_{\text{saltvand}} = 0,0005\text{ mg/l} = 0,5\text{ }\mu\text{g/l}} \\ \mathbf{KVKK = 0,037\text{ mg/l} = 37\text{ }\mu\text{g/l}} \end{aligned}$$

## 7 **REFERENCER**

Citi (2002). Chemicals Inspection & Testing Institute, Japan (CITI). On-line database (okt./nov. 2002): [http://www.cerij.or.jp/ceri\\_en/koukai/koukai\\_menu.html](http://www.cerij.or.jp/ceri_en/koukai/koukai_menu.html).

Chemfinder (2002) On-line database (okt./nov. 2002): <http://www.chemfinder.com/cgi-win/cfserver.exe/>

Dierickx, P.J., and C. Van der Wielen (1986). Glutathione-Dependent Toxicity of the Algicide 1-Chloro-2,4-Dinitrobenzene to *Daphnia magna* Straus. Bull. Environ. Contam. Toxicol. 37(4):629-632.

EU (2000A). The European Parliament and the Council. Directive 2000/60/EC of the European Parliament and of the Council of 23 October 2000 establishing a framework for Community action in the field of water policy.

[www.europa.eu.int/eur-lex/pri/en/oj/dat/2000/l\\_327/l\\_32720001222en00010072.pdf](http://www.europa.eu.int/eur-lex/pri/en/oj/dat/2000/l_327/l_32720001222en00010072.pdf)

EU (2000B). European Commission DG ENV. June 2000. Towards establishment of priority list of substances for further evaluation of their role in endocrine disruption – preparation of a candidate list of substances as a basis for priority setting.

IUCLID (2000): International Uniform Chemical Information Database. European Commission, Joint Research Centre, European Chemicals Bureau, EUR 19559 EN. CD-ROM.

Maas-Diepeveen, J.L., and C.J. Van Leeuwen (1986). Aquatic Toxicity of Aromatic Nitro Compounds and Anilines to Several Freshwater Species. Laboratory for Ecotoxicology, Institute for Inland Water Management and Waste Water Treatment, Report No.86-42:10 p.(DUT).

Miljø- og Energiministeriet (1996): Miljø- og Energiministeriets bekendtgørelse nr. 921 om kvalitetskrav for vandområder og krav til udledning af visse farlige stoffer til vandløb, søer eller havet.

Miljøministeriet (2002). Bekendtgørelse nr. 439 af 3. juni 2002. Listen over farlige stoffer 2002. Miljøministeriet, Miljøstyrelsen.

N-Class (2002): Den Nordiske klassificeringsdatabase. On-line på: [www.kemi.se](http://www.kemi.se) (okt./nov. 2002).

Snell, T.W., B.D. Moffat, C. Janssen, and G. Persoone (1991): Acute Toxicity Tests Using Rotifers IV. Effects of Cyst Age, Temperature, and Salinity on the Sensitivity of *Brachionus calyciflorus*: *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 21(3):308-317 (OECDG Data File)

Syracuse (2002): Online database (okt./nov. 2002): <http://esc.syrres.com/>

US EPA (2002). Online database (okt./nov. 2002): [www.epa.gov/ecotox/](http://www.epa.gov/ecotox/):

Verschuere, K. (1997). Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals. 3. ed. Van Nostrand Reinhold Company.