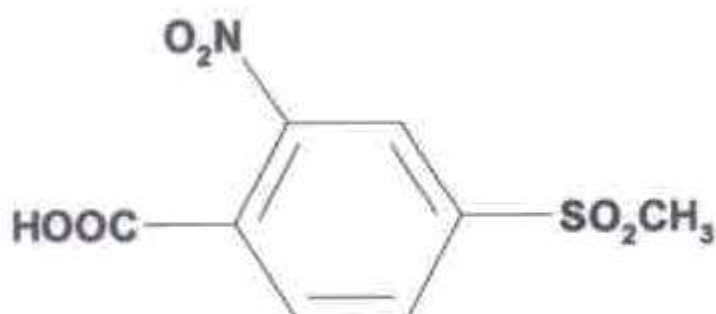




Miljøministeriet
Naturstyrelsen
Miljøstyrelsen

Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

4-(methylsulphonyl)-2-nitrobenzoesyre Mesosyre 110964-79-9



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	1 mg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	0,1 mg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	1,3 mg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	0,13 mg/kg

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	9
4.3 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	9
4.4 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	9
5 ANDRE EFFEKTER	10
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	11
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	11
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	11
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	11
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	11
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	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).

Stoffet er ikke registreret under REACH.

Den sidste litteratursøgning er foretaget august 2014.

English Summary and conclusions

EC₁₀ or NOEC values are available for 3 species representing 2 major taxonomic groups (fish and algae), but there are no such values for the species that was most sensitive in the acute tests (*Daphnia magna*). Further, the fish NOEC is from a "prolonged toxicity test", and thus not a real chronic test.

The tests from the REACH registration have not been quality checked as the reports are not readily available.

An assessment factor of 100 and 1000 has been applied to the lowest EC₁₀ or NOEC for fresh- and saltwater respectively for derivation of the EQS.

$$EQS_{\text{freshwater}} = 100 \text{ mg/l} : 100 = 1 \text{ mg/l}$$

$$EQS_{\text{saltwater}} = 100 \text{ mg/l} : 1000 = 0.1 \text{ mg/l}$$

Six EC₅₀ values are available for 3 major taxonomic groups, and an AF of respectively 100 and 1000 for fresh- and saltwater is applied to the lowest EC₅₀ for derivation of the maximum acceptable concentration (MAC).

$$MAC_{\text{freshwater}} = 130 \text{ mg/l} : 100 = 1.3 \text{ mg/l}$$

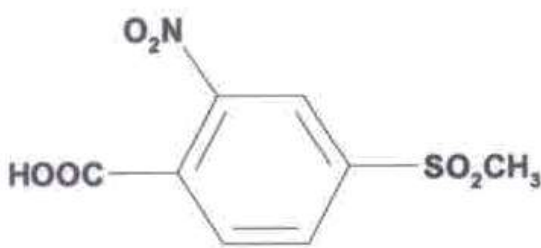
$$MAC_{\text{saltwater}} = 130 \text{ mg/l} : 1000 = 0.13 \text{ mg/l}$$

AS K_{oc} and log K_{ow} are low there will be a low potential for bioaccumulation and binding to sediment, and quality standards for sediment, biota and human health have not been derived.

1 Indledning

Identiteten af mesosyre fremgår af tabel 1.1.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	4-(methylsulphonyl)-2-nitrobenzoylsyre
Strukturformel	
CAS nr.	110964-79-9
EINECS nr.	
Kemisk formel	
SMILES	<chem>S(=O)(=O)C-c1ccc(cc1C(=O)O)[N+](=O)[O-]</chem>

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for mesosyre fremgår af tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for mesosyre

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	245 ¹	
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	215,3	REACH registrering, "Study report" 2009
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	Nedbrydes ved temperaturer >250	REACH registrering, "Study report" 2009
Damptryk, P_v (Pa)	$1,14\cdot 10^{-6}$	QSAR, REACH registrering
Henry's konstant, H ($\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)	$1\cdot 10^{-8}$ ¹	QSAR (HENRYWIN i EPI Suite)
Vandopløselighed, S_w ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	4,33 g/l pH 1,81-1,87	REACH registrering, "Study report" 2010
Dissociationskonstant, pK_a		
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	-0,8	Cheminova 2010
K_{oc}	10^1	QSAR (KOCWIN i EPI Suite)

¹Estimeret

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

QSAR programmet BIOWIN i programpakken EPI Suite fra USAs miljøstyrelses (US EPA) hjemmeside forudsiger, at stoffet ikke er let nedbrydeligt

3.2 Bioakkumulering

Log K_{ow} er estimeret til at være meget lavt, og der forventes at være ringe potentiale for bioakkumulering.

3.3 Naturlig forekomst

Ingen oplysninger.

4 Giftighedsdata

4.1 Giftighed over for vandlevende organismer

Tabel 4.1. Giftighed over for vandlevende organismer.

Overordnet systematisk gruppe	Art	Effektmål	Værdi (mg/l)	Reference
Alger	<i>Skeletonema costatum</i>	72 timer EC ₅₀	>929	DHI 2009
		72 timer EC ₁₀	300	DHI 2009
	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	72 timer EC ₅₀	>100	REACH registrering.
	<i>P. subcapitata</i>	72 timer NOEC	100	"Study report" 2010
Krebsdyr	<i>Acartia tonsa</i>	48 timer EC ₅₀	>1000	DHI 2009
	<i>Daphnia magna</i>	48 timer EC ₅₀	130	REACH registrering, "Study report" 1997
Fisk	<i>Scophthalmus maximus</i>	96 timer LC ₅₀	>1000	DHI 2010
	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 timer LC ₅₀	>120	REACH registrering, "Study report" 1997
	<i>O. mykiss</i>	21 dage NOEC (dødelighed)	100	REACH registrering, "Study report" 2002 "Prolonged toxicity"

Værdierne for *Pseudokirchneriella subcapitata* er fra REACH registreringen, som refererer til en "Study report", som ikke er umiddelbart tilgængelig. Sammendraget i REACH mangler oplysninger om temperatur, hårdhed, pH, iltforhold, samt dødelighed i kontroller og der er ingen rådata. På den anden side angives det, at forsøget er udført i henhold til OECD retningslinjer. Tildeles et troværdighedsindeks (Klimisch) på 2-4.

Data for Pseudokirchneriella subcapitata is from the REACH registration which refers to a "Study report" that is not available. The summary lacks information on temperature, hardness, pH, dissolved oxygen, and raw data while on the other hand it is stated that the test was performed in accordance with OECD test guidelines. Is assigned an R.I. score of 2-4.

De akutte tests med *D. magna* og *O. mykiss* er nogenlunde velbeskrevne bortset fra at der mangler rådata og oplysninger om dødelighed i kontroller. Variationen i pH (5,5-8,0 for *D.m.* og 5,2-7,6 for *O.m.*) er større end anbefalet (1,5 pH enhed). Tildeles et troværdighedsindeks (Klimisch) på 2-3.
The descriptions of the acute tests with D. magna and O. mykiss are fair except for the lack of raw data and information on mortality in controls. The variation in pH (5,5-8,0 for D.m. og 5,2-7,6 for O.m.) is greater than recommended (within 1.5 pH unit). Is assigned an R.I. score of 2-3.

21 dages testen *O. mykiss* er nogenlunde velbeskrevet bortset fra at der mangler rådata og oplysninger om dødelighed i kontroller. Variationen i pH er indenfor det anbefalede interval. Tildeles et troværdighedsindeks (Klimisch) på 2.
The description of the 21 day test O. mykiss is fair except for the lack of raw data and information on mortality in controls. The variation in pH is within the recommended range. Is assigned an R.I. score of 2.

DHI forsøgene er velbeskrevne, er udført i henhold til internationale retningslinjer og indeholder rådata og vurderes at være af høj kvalitet. Tildeles et "reliability index" på 1 (Klimisch RI).
The DHI tests are well described, performed in accordance with international guidelines, and include raw data. Are assigned an R.I. score of 1.

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Ingen oplysninger

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

NOAEL = 1 g/kg lgv/dag (REACH registrering, "Study report" 1998).

4.4 Giftighed over for mennesker

NOAEL = 1 g/kg lgv/dag (REACH registrering, "Study report" 1998).

5 Andre effekter

Ingen oplysninger

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der haves kroniske EC₁₀ eller NOEC værdier for 3 arter repræsenterende 2 overordnede systematiske grupper (alger og fisk), men der er ingen EC₁₀ eller NOEC værdier for den art, som var den mest følsomme i akuttetene (*Daphnia magna*). Endvidere er NOEC værdien for fisken fra en ”prolonged toxicity test” og altså ikke fra en rigtig kronisk test. Testene fra REACH registreringen er ikke blevet nærmere kvalitetsvurderede da rapporterne ikke er umiddelbart tilgængelige.

Det vælges derfor at bruge en usikkerhedsfaktor på 100 og 1000 på den laveste EC₁₀ eller NOEC for henholdsvis fersk- og saltvand.

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 100 \text{ mg/l} : 100 = 1 \text{ mg/l}$$

$$VKK_{\text{saltvand}} = 100 \text{ mg/l} : 1000 = 0,1 \text{ mg/l}$$

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Der er EC₅₀ værdier for 6 arter repræsenterende 3 overordnede systematiske grupper. Alle værdierne, på nær én er ”mere end” værdier.

Der anvendes en usikkerhedsfaktor på 100 og 1000 på laveste EC₅₀ for henholdsvis fersk- og saltvand.

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 130 \text{ mg/l} : 100 = 1,3 \text{ mg/l}$$

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 130 \text{ mg/l} : 1000 = 0,13 \text{ mg/l}$$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

K_{oc} og log K_{ow} er lave og stoffet forventes ikke at binde til sediment. Der udarbejdes ikke et SKK.

6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

K_{oc} og log K_{ow} er lave og stoffet forventes ikke at bioakkumulere. Endvidere er giftigheden overfor pattedyr relativt lav. Der udarbejdes ikke et BKK.

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

K_{oc} og $\log K_{ow}$ er lave og stoffet forventes ikke at bioakkumulere. Endvidere er giftigheden overfor pattedyr relativt lav. Der udarbejdes ikke et HKK.

7 Konklusion

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

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

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 1,3 \text{ mg/l}$$

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 0,13 \text{ mg/l}$$

For saltvand gælder, at UF ville kunne sænkes med en faktor 10, hvis der yderligere var data for mindst to overordnede systematiske grupper, der er specifikke for saltvand, f.eks. pighuder og havbørsteorme.

8 Referencer

Cheminova 2010: Rapport fra Cheminova 2010 om bestemmelse af n-octanol/vand forhold

DHI 2009: Økotoksikologisk karakterisering af 4-(methylsulphonyl)-2-nitrobenzoic acid. Rapport fra DHI.

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: http://apps.echa.europa.eu/registered/data/dossiers/DISS-9ff29361-22e1-23e0-e044-00144f67d031/DISS-9ff29361-22e1-23e0-e044-00144f67d031_DISS-9ff29361-22e1-23e0-e044-00144f67d031.html