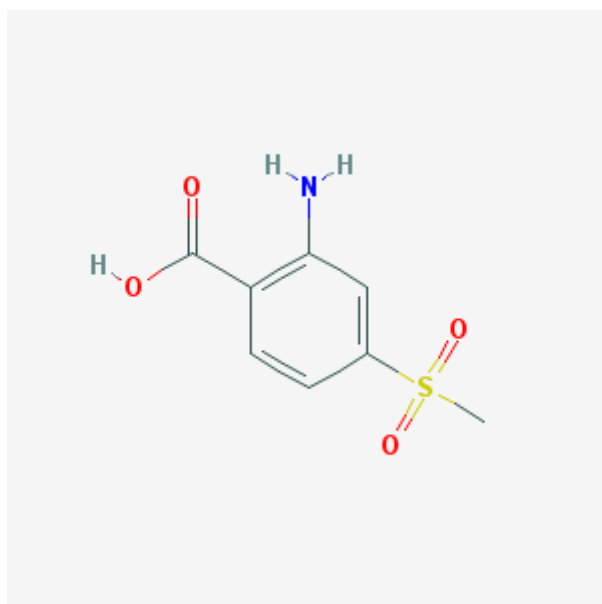




Miljøministeriet
Naturstyrelsen
Miljøstyrelsen

Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

2-amino-4-(methylsulphonyl)benzoesyre (AMBA) 393085-45-5



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	77 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	7,7 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	140 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	14 µg/l

Juli 2014
(opdateret november 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)	11	11
7 KONKLUSION	12	
8 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 2011) og Miljøstyrelsens vejledning til fastsættelse af vandkvalitetskriterier (Miljøstyrelsen 2004).

Stoffet er ikke registreret under REACH.

Den sidste litteratursøgning er foretaget juli 2014.

English Summary and conclusions

Ecotoxicity data are from DHI and the REACH registration. All studies have been performed in accordance with international guidelines and are well described. They are given a reliability index score of 1 or 2 (Klimisch reliability index).

There are EC₅₀ data for two species of algae, two species of fish, and two species of crustacea. There are only EC₁₀ or NOEC values for algae. As the *Selenastrum capricornutum* was the most sensitive species in the acute tests and there is a NOEC for a second species of algae an assessment factor (AF) of 100 and 1000 is applied for fresh- and saltwater respectively.

$$EQS_{\text{freshwater, eco}} = 7.7 \text{ mg/l} : 100 = 0.077 \text{ mg/l} = 77 \text{ }\mu\text{g/l}$$

$$EQS_{\text{saltwater, eco}} = 7.7 \text{ mg/l} : 1000 = 0.0077 \text{ mg/l} = 7,7 \text{ }\mu\text{g/l}$$

The maximum acceptable concentration (MAC) is derived with an AF of 100 and 1000 for fresh- and saltwater respectively.

$$MAC_{\text{freshwater}} = 14 \text{ mg/l} : 100 = 0,14 \text{ mg/l} = 140 \text{ }\mu\text{g/l}$$

$$MAC_{\text{salthwater}} = 14 \text{ mg/l} : 1000 = 0.014 \text{ mg/l} = 14 \text{ }\mu\text{g/l}$$

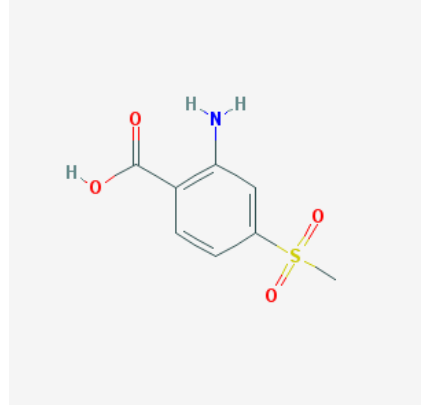
As K_{oc} and log K_{ow} are very low, binding to sediment and bioaccumulation are not likely to occur, and the criteria triggering derivation of sediment and biota standards are not fulfilled.

1 Indledning

Identiteten af AMBA fremgår af tabel 1.1.

Stoffet er et nedbrydningsprodukt af visse pesticider

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	2-amino-4-(methylsulphonyl)benzoesyre
Strukturformel	
CAS nr.	393085-45-5
EINECS nr.	
Kemisk formel	C ₈ H ₉ SO ₄ N
SMILES	

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for AMBA fremgår af tabel 2.1.

Stoffet er meget opløseligt i vand og har meget lav binding til organisk kulstof.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for AMBA

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	215,23 ¹	
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	168 ¹	
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	405 ¹	
Damptryk, P_v (Pa)	$2,7\cdot 10^{-5}$ ¹	
Henry's konstant, H ($\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)	$3,4\cdot 10^{-7}$ Ved 20°C	91/414
Vandopløselighed, S_w ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	pH 4,7: 1,8 pH 6,1: 23	91/414
Dissociationskonstant, pK_a		
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	0,19	Cheminova
K_{oc} ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)	18 – 158 Ved pH6,7: 62	pH afhængig. 91/414

¹Estimeret med QSAR pakken EPI Suite

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

QSAR programmet BIOWIN forudsiger at stoffet er ikke let nedbrydeligt.

3.2 Bioakkumulering

Log $K_{ow} = 0,19$ og stoffet betragtes som havende lavt 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	Effekt mål	Værdi	Reference
Alger	Skeletonema costatum	72 timer EC ₅₀	408 mg/l	DHI R.I. 1
		72 timer EC ₁₀	231 mg/l	DHI R.I. 1
	Selenastrum capricornutum	72 timer EC ₅₀	14 mg/l	91/414 R.I. 2
	S. capricornutum	72 timer NOEC	7,7 mg/l	91/414 R.I. 2
Krebsdyr	Acartia tonsa	48 timer LC ₅₀	>1000 mg/l	DHI R.I. 1
	Daphnia magna	48 timer EC ₅₀	160 mg/l	91/414 R.I. 2
Fisk	Scophthalmus maximus (Pigvar)	96 timer LC ₅₀	>1000 mg/l	DHI R.I. 1
	Oncorhynchus mykiss	96 timer LC ₅₀	150 mg/l	91/414 R.I. 2

Miljøstyrelsen har gennemgået DHI rapporten med beskrivelse af forsøgene, som vurderes at være af høj kvalitet og tildeles et "reliability index" på 1 (Klimisch RI).

The DHI report is regarded as being of high quality and is assigned an R.I. of 1.

91/414 forsøgene er beskrevet i rapporter indsendt i forbindelse med ansøgning om godkendelse af mesotrion som herbicid, hvor AMBA er et af omdannelsesprodukterne. Forsøgene er velbeskrevne og udført efter internationale retningslinjer. Variationen i pH er stor mellem kontrollen og højeste testkoncentration, men under én pH enhed mellem kontrollen og den koncentration, der svarer til EC₅₀. Tildeles en R.I. på 2.

The 91/414 tests are part of the registration dossier for the herbicide mesotrion where AMBA is a major metabolite. The tests are well described and performed according to international guidelines. The variation in pH between the control and the greatest test concentration is relatively high, but the is below one pH unit between the control and the concentration corresponding to EC₅₀. Is assigned an R.I. of 2.

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Ingen oplysninger. Den ringe binding til organisk kulstof og den meget lave K_{ow} gør at binding til sediment ikke er sandsynligt.

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Ingen oplysninger

4.4 Giftighed over for mennesker

Miljøstyrelsen har ingen oplysninger.

5 Andre effekter

Ingen oplysninger

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der er EC_{50} værdier for to algearter, to krebsdyrarter og to fiskearter, samt EC_{10} for den ene algeart og NOEC for den anden. Jævnfør vejledningerne kan VKK ikke baseres på EC_{10} eller NOEC kun for alger. VKK beregnes derfor udfra laveste EC_{50} med en faktor 1000 og 10000 for henholdsvis fersk- og saltvand.

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 7,7 \text{ mg/l} : 100 = 0,077 \text{ mg/l} = 77 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$VKK_{\text{saltvand}} = 7,7 \text{ mg/l} : 1000 = 0,0077 \text{ mg/l} = 7,7 \text{ } \mu\text{g/l}$$

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Ved beregning af KVKK bruges en usikkerhedsfaktor på henholdsvis 100 og 1000 for fersk- og saltvand.

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 14 \text{ mg/l} : 100 = 0,14 \text{ mg/l} = 140 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 14 \text{ mg/l} : 1000 = 0,014 \text{ mg/l} = 14 \text{ } \mu\text{g/l}$$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Kriterierne for fastsættelse af SKK er ikke opfyldt, idet K_{oc} og $\log K_{ow}$ er meget lave og stoffet forventes således ikke at akkumulere i sediment.

6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Kriterierne for fastsættelse af BKK er ikke opfyldt idet $\log K_{ow}$ er meget lav og stoffet forventes således ikke at bioakkumulere.

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Kriterierne for fastsættelse af BKK er ikke opfyldt idet $\log K_{ow}$ er meget lav og stoffet forventes således ikke at bioakkumulere.

7 Konklusion

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 77 \mu\text{g/l}$$

$$VKK_{\text{saltvand}} = 7,7 \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 140 \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 14 \mu\text{g/l}$$

For saltvand gælder, at UF ville kunne sænkes til samme niveau som for ferskvand, hvis der yderligere var data for mindst to overordnede systematiske grupper, der er specifikke for saltvand, f.eks. pighuder og havbørsteorme.

Hvis der var EC10 eller NOEC værdier for mindst de 3 overordnede systematiske grupper ville UF blive nedsat til 10 for ferskvand.

8 Referencer

DHI 2010: Økotoksikologisk karakterisering af 2-amino-4(methylsulfonyl) benzoic 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.

91/414: Dossierer i forbindelse med ansøgning om godkendelse af mesotrion som herbicid under EU-Direktiv 91/414/EF.