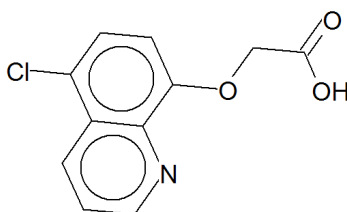




Miljøministeriet
Naturstyrelsen
Miljøstyrelsen

Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

Eddikesyre, [(5-chloro-8-quinolinyloxy)]-(9CI) (CLOQ-syre) CAS nr. 88349-88-6



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	30 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	3 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	300 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	30 µg/l

Da der kun er få data og kun for akut giftighed er der anvendt meget store usikkerhedsfaktorer (1000 for VKK_{ferskvand}, og 10.000 for VKK_{saltvand}).

Ved fremskaffelse af flere og bedre data ville usikkerhedsfaktorerne kunne reduceres væsentligt, hvilket efter al sandsynlighed ville forhøje VKK.

17. april 2012

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	8
4.3 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	8
4.4 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	8
5 ANDRE EFFEKTER	FEJL! BOGMÆRKE ER IKKE DEFINERET.
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	9
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	9
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	9
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	9
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	9
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	9
7 KONKLUSION	10
8 REFERENCER	11

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).

Den sidste litteratursøgning er foretaget i februar 2012.

English Summary and conclusions

2-[(5-chloroquinolin-8-yl)oxy]acetic acid (CLOQ-acid)

The only ecotoxicity data available is one LC₅₀ for fish, one EC₅₀ for crustaceans, and one EC₅₀ for algae. Therefore high assessment factors have been applied (1000 for freshwater EQS, and 10,000 for saltwater EQS).

An assessment factor of 100 has been employed in the calculation of the maximum accepted concentration (MAC).

The log K_{ow} = 1.4, and the substance is not expected to bioaccumulate or to bind strongly to organic carbon and particles. Thus EQS for sediment and biota are not considered.

The calculated environmental quality standards (EQS) and MACs are as follows:

$$\text{EQS}_{\text{freshwater}} = 30 \mu\text{g/l}$$

$$\text{EQS}_{\text{saltwater}} = 3 \mu\text{g/l}$$

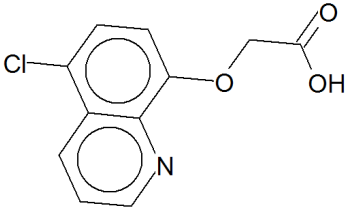
$$\text{MAC}_{\text{freshwater}} = 300 \mu\text{g/l}$$

$$\text{MAC}_{\text{saltwater}} = 30 \mu\text{g/l}$$

1 Indledning

Identiteten af CLOQ-syre fremgår af tabel 1.1.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	2-[(5-chloroquinolin-8-yl)oxy]acetic acid
Strukturformel	
CAS nr.	88349-88-6
EINECS nr.	
Kemisk formel	
SMILES	<chem>OC(=O)COc1c(ncc2)c(c2)c(Cl)c1</chem>

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for CLOQ-syre fremgår af tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for CLOQ-syre

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	237,65	Beregnet, ECOSAR
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)		
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)		
Damptryk, P_v (Pa)		
Henry's konstant, H ($\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)		
Vandopløselighed, S_w ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	4378	Beregnet, ECOSAR
Dissociationskonstant, pK_a		
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	1,4	Cheminova 2005
Sediment/vand fordelingskoefficient, K_p ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)		

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

BIOWIN QSAR programmet forudser at stoffet ikke er let nedbrydeligt.

3.2 Bioakkumulering

$\log K_{ow} = 1,4$ (Cheminova 2005). På den baggrund forventes CLOQ-syre at have et lavt potentiale for bioakkumulering.

3.3 Naturlig forekomst

Ingen oplysninger.

4 Giftighedsdata

4.1 Giftighed over for vandlevende organismer

Effektkoncentrationer over for vandlevende organismer er sammenstillet i tabel 4.1.

Tabel 4.1. Opsummering af giftighed over for vandlevende organismer. Alle data er fra DHI 2005.

Systematisk gruppe	Art	Effektmål	Værdi, mg/l
Alger	<i>Skeletonema costatum</i>	72 timer EC50	30
Krebsdyr	<i>Acartia tonsa</i>	48 timer EC50	232
Fisk	Pigvar (<i>Scophthalmus maximus</i>)	96 timer LC50	200

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Der er ikke fundet giftighedsdata for sedimentlevende organismer.

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Ingen oplysninger.

4.4 Giftighed over for mennesker

EU's industriliste med selvklassificeringer: H302, Acute tox.4.

5 Udledning af vandkvalitetskriterium

5.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der haves kun EC_{50} og LC_{50} data for en fisk, et krebsdyr og en alge, så der anvendes en usikkerhedsfaktor på 1000 og 10.000 for henholdsvis ferskvand og saltvand.

Laveste $EC_{50} = 30 \text{ mg/l}$

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 30.000 \text{ } \mu\text{g/l} : 1000 = 30 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$VKK_{\text{saltvand}} = 30.000 \text{ } \mu\text{g/l} : 10000 = 3 \text{ } \mu\text{g/l}$$

5.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Der anvendes en usikkerhedsfaktor på 100 og 1000 for henholdsvis ferskvand og saltvand.

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 30.000 \text{ } \mu\text{g/l} : 100 = 300 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 30.000 \text{ } \mu\text{g/l} : 1000 = 30 \text{ } \mu\text{g/l}$$

5.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

$\text{Log } K_{ow} = 1,4$ og stoffet forventes ikke at bindes stærkt i sediment. Der udarbejdes derfor ikke noget SKK.

5.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

$\text{Log } K_{ow} = 1,4$ og stoffet forventes ikke at bioakkumulere. Der udarbejdes derfor ikke noget BKK

5.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

$\text{Log } K_{ow} = 1,4$ og stoffet forventes ikke at bioakkumulere. Der udarbejdes derfor ikke noget HKK

6 Konklusion

Da der kun er få data og kun for akut giftighed er der anvendt meget store usikkerhedsfaktorer (1000 for $VKK_{\text{ferskvand}}$, og 10.000 for VKK_{saltvand}).

Ved fremskaffelse af flere og bedre data ville usikkerhedsfaktorerne kunne reduceres væsentligt, hvilket efter al sandsynlighed ville forhøje VKK.

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 30 \mu\text{g/l}$$

$$VKK_{\text{saltvand}} = 3 \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 300 \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 30 \mu\text{g/l}$$

7 Referencer

Cheminova 2005: Bestemmelse af n-Octanol/vand fordelingskoefficient for CLOQ-syre, CHQ og ACM-ester. Rapport fra Cheminova 2005.

DHI 2005: Økotoksikologisk undersøgelse af CHQ, CLOQ-syre og ACM-ester. Rapport fra DHI 2005.

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.