

4-chlor-2-nitroanilin (CAS No. 89-63-4)

Vandkvalitetskriterie for ferskvand = 0,001 mg/l = 1 µg/l

Vandkvalitetskriterie for havvand = 0,0001 mg/l = 0,1 µg/l

Korttidsvandkvalitetskriteriet = 0,01 mg/ = 10 µg/l

Summary

A water quality standard for 4-chloro-2-nitroaniline was derived as described in the EU Water Framework Directive (EU, 2000A). The available data include E/LC₅₀ values from short-term studies with species from two trophic levels among which 1 mg/l for fish was the lowest value. An assessment factor of 1000 and 10000 was used for freshwater and saltwater respectively resulting in a PNEC values of 0.001 mg/l and 0,0001 mg/l. There is no information on potential endocrine disrupting properties. The substance is not readily biodegradable in the aquatic environment and it is not considered bioaccumulative. Therefore, no other considerations than the toxicity are relevant for deriving the water quality standard and it is set equal to the PNEC value. The maximum acceptable concentration is derived by employing a factor 100 to the lowest EC50, i.e. 0.01 mg/l.

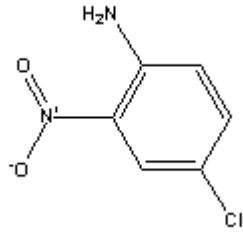
WQS_{freshwater} = 0.001 mg/l = 1 µg/l

WQS_{saltwater} = 0.0001 mg/l = 0,1 µg/l

MAC = 0.01 mg/l

1 STRUKTUR, EGENSKABER OG FOREKOMST

Tabel 1.1 Fysisk-kemiske etc. egenskaber for 4-chlor-2-nitroanilin
Physico-chemical etc. properties of 4-chloro-2-nitroaniline

CAS-nr. / CAS No.	89-63-4
Struktur / Structure	
Synonymer / Synonyms	4-chloro-2-nitrobenzenamine; C.I. Azoic Diazo Component No. 9
Klassificering / Classification	T+; R26/27/28 R33 N;R51-53 ⁵
Molekylær formel / Empirical formula	C ₆ H ₅ ClN ₂ O ₂
Molvægt / Molar weight	172.57 g/mol ²
Vandopløselighed / Water solubility (20°C)	500 mg/l ³
Damptryk / Vapour pressure (25°C)	0,0647 Pa ³
Octanol-vand fordelingskoefficient/ Log P _{ow}	2,7 ^{3,5}

1 Miljøministeriet (2002)

2 Chemfinder (2002)

3 Syracuse (2002)

- 4 Verschueren (1997)
- 5 N-Class (2002)

4-chlor-2-nitroanilin står opført på Listen Over Farlige Stoffer under indgangen ”Chloraniliner” (Miljøministeriet, 2002; N-Class 2005) og er klassificeret med ovennævnte klassificering.

Der er ikke fundet oplysninger om forekomst og anvendelse af 4-chlor-2-nitroanilin. Der er ikke fundet oplysninger om målte koncentrationer af 4-chlor-2-nitroanilin i vandmiljøet.

2 GIFTIGHED

2.1 Giftighed over for mennesker

4-chlor-2-nitroanilin er ikke klassificeret med R-sætninger, der dækker carcinogene, mutagene eller reproduktionsskadende egenskaber og der er ikke fundet data for disse egenskaber i de anvendte kilder. Der foreligger ikke oplysninger om, hvorvidt stoffet har hormonforstyrrende egenskaber. 4-chlor-2-nitroanilin 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 kun 3 studier med 4-chlor-2-nitroanilin, hvoraf det ene er af ældre dato (før 1980). Der er ikke fundet yderligere data ved en udvidet datasøgning (omfattende bl.a. arbejdspapirer fra EUs klassificeringsgruppe). Studierne er summeret i tabel 2.1. Der foreligger ikke NOEC-værdier fra længerevarende test med 4-chlor-2-nitroanilin.

Tabel 2.1 Økotoksikologiske data for 4-chlor-2-nitroanilin (89-63-4)
Ecotoxicity data for 4-chloro-2-nitroaniline (89-63-4)

Systematisk gruppe / <i>Taxonomic group</i>	Parameter, effektmål / <i>End point</i>	Eksponeeringstid / <i>Exposure time</i>	Resultat / <i>Result</i> [mg/l]	Antal studier / <i>Number of studies</i>
Krebsdyr / <i>Crustacea</i> (<i>Daphnia magna</i>)	EC ₅₀ (immobility)	48 h	3,2 ²	1
Fisk / <i>Fish</i> (<i>Oryzias latipes</i>)	LC ₅₀	48 h	17,4 ³	1
Fisk / <i>Fish</i> (<i>Oncorhynchus kisutch</i> , <i>Oncorhynchus tshawytscha</i> , <i>Ptychocheilus oregonensis</i>)	(mortality)	24 h	1-10 ¹	1 (20 test results)
Fisk / <i>Fish</i> (no species)	Not specified	Not specified	< 1 ⁴	Not specified

h: Hours (timer)

1 MacPhee & Ruelle (1969) citeret i US EPA (2002)

2 Kuhn et al. (1989) citeret i US EPA (2002)

3 Citi (2002)

4 GESAMP (1989) citeret i arbejdsdokument fra EUs klassificeringsgruppe

Der ser ikke ud til at være forskel i følsomheden for de to organismegrupper.

Tabel 2.2 QSAR forudsigelser af giftigheden overfor alger protozoer og fisk. Anvendte modeller er fra Miljøstyrelsens Multicase program. Krebsdyr er ikke medtaget da programmet blot har inkluderet testværdien. QSAR predictions of toxicity to algae, protozoa, and fish. Multicase models of the Danish Environmental Protection Agency have been employed. Crustacea are not included because the model simply used the measured test value.

Systematisk gruppe / <i>Taxonomic group</i>	Parameter, effektmål / <i>End point</i>	Eksponeeringstid / <i>Exposure time</i>	Resultat / <i>Result</i> [mg/l]
Alger/ <i>Algae</i>	E _r C ₅₀	48 h	4,8
Protozoa	EC ₅₀	48 h	29
Fisk / <i>Fish</i>	LC ₅₀	96 h	16

I tabel 2.2 er vist QSAR forudsigelser af EC₅₀ værdier for alger, encellede dyr og fisk. Som det ses forudsiger modellen, at algernes følsomhed er på niveau med testdata for krebsdyr og fisk.

Den laveste egentlige E/LC₅₀-værdi er på 1 mg/l for fisk. Den angiveligt lavere værdi på "<1 mg/l" kan ikke anvendes, da den er totalt uspecificeret. Datakvaliteten af de øvrige fiskeresultater er ikke vurderet, men der foreligger i alt 20 test resultater fra 3 forskellige fiskearter, hvor toksicitetsniveauet ligger meget tæt, så data vurderes at bekræfte hinanden. Den laveste E/LC₅₀-værdi på 1 mg/l anses derfor for at være valid og anvendes som grundlag for vandkvalitetskriteriet.

3 BIOAKKUMULERING

Der er fundet en enkelt eksperimentel værdi for bioakkumulering af 4-chlor-2-nitroanilin med den højeste BCF-værdi på 13 fra et 6 ugers studie med *Cyprinus carpio* (Citi, 2002). 4-chlor-2-nitroanilin har en log P_{ow} på 2,7. På den baggrund vurderes 4-chlor-2-nitroanilin ikke at være bioakkumulerbart.

4 NEDBRYDELIGHED

Der er kun fundet data fra en enkelt let nedbrydelighedstest (MITI test I), hvor der nedbrydes 0% efter 14 dage. 4-chlor-2-nitroanilin kan dermed ikke anses for at være let nedbrydeligt (Citi, 2002). Dette stemmer overens med, at stoffet er klassificeret med R53. 4-chlor-2-nitroanilin, vurderes på den baggrund ikke at være let nedbrydeligt i vandmiljøet.

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

Da der ikke foreligger resultater af test med alger eller andre planter, kan det ikke vurderes, hvorvidt denne organismegruppe er mere følsom end de øvrige. Det afledte vandkvalitetskriterie for 4-chlor-2-nitroanilin må derfor være foreløbigt.

Som grundlag for vandkvalitetskriteriet beregnes først en PNEC-værdi som beskrevet i Vandrammedirektivet (EU, 2000A). Hertil anvendes E/LC₅₀-værdierne fra korttidstest med arter fra de to trofiske niveauer, hvor 1 mg/l for fisk er laveste værdi. Der anvendes en faktor 1000 og 10000 ved beregning af PNEC-værdien for henholdsvis ferskvand og havvand, dvs. PNEC bliver henholdsvis 0,001 mg/l og 0,0001 mg/l.

4-chlor-2-nitroanilin er ikke klassificeret med carcinogene, mutagene eller reproduktionshæmmende egenskaber, og der er ikke oplysninger om, hvorvidt stoffet har hormonforstyrrende egenskaber. 4-chlor-2-nitroanilin er ikke let nedbrydeligt i vandmiljøet, men det anses ikke for at være bioakkumulerbart.

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

Korttidsvandkvalitetskriteriet fås ved at brug en faktor 100 på Laveste EC50, dvs. 1 mg/l:100 = 0,01 mg/l

På den baggrund foreslås følgende vandkvalitetskriterier for 4-chlor-2-nitroanilin:

Vandkvalitetskriterie for ferskvand = 0,001 mg/l = 1 µg/l
Vandkvalitetskriterie for havvand = 0,0001 mg/l = 0,1 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriteriet = 0,01 mg/ = 10 µg/l

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.

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

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

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.

Kuhn, R., M. Pattard, K. Pernak, and A. Winter (1989). Results of the Harmful Effects of Selected Water Pollutants (Anilines, Phenols, Aliphatic Compounds) to *Daphnia magna*. Water Res. 23(4):495-499 (OECDG Data File).

MacPhee, C., and R. Ruelle (1969). Lethal Effects of 1888 Chemicals upon Four Species of Fish From Western North America. Univ. of Idaho Forest, Wildl. Range Exp. Station Bull. No. 3, Moscow, ID, 112 p.

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 (okt./nov. 2002).

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

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

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