

27/7-2005

**Benzylidenchlorid**  
**(CAS No. 98-87-3)**  
 $\alpha,\alpha$ -dichlorotoluen

På grund af et spinkelt datagrundlag sættes *foreløbige* vandkvalitetskriterier:

**Vandkvalitetskriterie<sub>ferskvand</sub> = 0,21 µg/l**

**Vandkvalitetskriterie<sub>saltvand</sub> = 0,021 µg/l**

**Korttidsvandkvalitetskriterie = 2,1 µg/l**

### **Summary**

The only data available are 48 hour LC<sub>0</sub> and LC<sub>100</sub> for one fish species and IC<sub>50</sub> for a protozoan. These data have been supplemented with QSAR estimations, which are far below the 48 h EC<sub>0</sub>.

The water quality standards are *tentatively* derived by applying an assessment factor of respectively 1000, 10000 and 100 to the lowest estimated (QSAR) EC<sub>50</sub> to calculate the WQS for freshwater, saltwater and the maximum acceptable concentration:

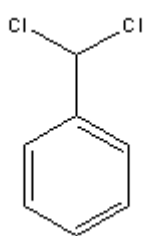
**WQS<sub>freshwater</sub> = 0.21 µg/l**

**WQS<sub>saltwater</sub> = 0.021 µg/l**

**MAC = 2.1 µg/l**

# 1 STRUKTUR, EGENSKABER OG FOREKOMST

Tabel 1.1 Fysisk-kemiske etc. egenskaber for benzylidenchlorid  
*Physico-chemical etc. properties of benzylidene chloride*

CAS-nr. / CAS No.	98-87-3
Struktur / Structure	
Synonymer / Synonyms	(Dichloromethyl)-benzen; Benzalchlorid; Benzyl dichloride; Benzylene chloride; Benzylidene chloride; Chlorobenzal; Dichlorophenylmethane; Dichlorotoluene; a,a-Dichlorotoluene
Klassificering / Classification	Xn;R22 T;R23 Xi;R37/38-41 Carc3;R40 <sup>1,4</sup>
Molekylær formel / Empirical formula	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>2</sub> <sup>2</sup>
Molvægt / Molar weight	161,03 g/mol <sup>2</sup>
Vandopløselighed / Water solubility (30°C)	250 mg/L <sup>3</sup>
Damptryk / Vapour pressure (25°C)	62,65 Pa <sup>3</sup>
Octanol-vand fordelingskoefficient/ Log P <sub>ow</sub>	2,97-3,22 <sup>3</sup>

1 Miljøministeriet (2002)

2 Chemfinder (2002)

3 Syracuse (2002)

4 N-Class (2002)

I N-Class-databasen (N-Class, 2002) oplyses det endvidere, at stoffet beskrives med betegnelsen "ingen miljøfareklassificering" (No classification – N.C.), samt at dette er baseret på data. Der foreligger dog ikke data for giftighed, men stoffet anses for at være let nedbrydeligt og ikke bioakkumulerbart (log P<sub>ow</sub>: 3,22).

Der er ikke fundet oplysninger om naturlig forekomst eller målte koncentrationer af benzylidenchlorid.

Der er ikke fundet oplysninger om anvendelsen af benzylidenchlorid.

## 2 GIFTIGHED

### 2.1 Giftighed over for mennesker

Benzylidenchlorid er klassificeret Carc3;R40 (mistænkt for at være kræftfremkaldende) (Miljøministeriet, 2002; N-Class, 2004). Der foreligger ikke oplysninger om, hvorvidt stoffet har hormonforstyrrende egenskaber. Benzylidenchlorid 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 et enkelt studie med benzylidenchlorid. Der er ikke fundet yderligere data ved en udvidet datasøgning (omfattende bl.a. arbejdsrapporter fra EUs klassificeringsgruppe). Der er derfor suppleret med QSAR-beregninger fra EPI-programmet for alger og krebsdyr samt fra Miljøstyrelsens ECOSAR-program for fisk. Resultaterne er samlet i tabel 2.1.

**Tabel 2.1 Økotoksikologiske data for benzylidenchlorid (98-87-3)**  
**Ecotoxicity data for benzylidene chloride (98-87-3)**

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</i> <i>studies</i>
Alger / <i>Algae</i>	EC <sub>50</sub>	96 h	0,21 <sup>2</sup>	Beregnet
Krebsdyr / <i>Crustacea</i>	LC <sub>50</sub>	48 h	0,21 <sup>2</sup>	Beregnet
Fisk / <i>Fish</i>	LC <sub>50</sub>	96 h	0,2 <sup>1,2</sup>	Beregnet
Alger	EC <sub>50</sub>	72	12,2 <sup>3</sup>	Beregnet
Fisk	LC <sub>50</sub>	96	12	Beregnet
Tetrahymena	IC <sub>50</sub>		21,2 <sup>3</sup>	Beregnet
Tetrahymena	IC <sub>50</sub>		125 <sup>3</sup>	1
Fisk / <i>Fish</i> ( <i>Leuciscus idus</i> )	LC <sub>0</sub>	48 h	50 <sup>1</sup>	1
Fisk / <i>Fish</i> ( <i>Leuciscus idus</i> )	LC <sub>100</sub>	48 h	100 <sup>1</sup>	1

h: Hours (timer)

1 IUCLID (2000) et studie fra 1978

2 EPI (2004)

3 Miljøstyrelsen (2004)

De eneste målte værdier er en LC<sub>0</sub> og en LC<sub>100</sub> på henholdsvis 50 og 100 mg/L for fisk samt en IC<sub>50</sub> for protozoen Tetrahymena.

## 3 BIOAKKUMULERING

Der er ikke fundet eksperimentelle data for bioakkumulering af benzylidenchlorid. Benzylidenchlorid har en log P<sub>ow</sub> på 3,22. På den baggrund vurderes benzylidenchlorid at være bioakkumulerbart.

## 4 NEDBRYDELIGHED

Benzylidenchlorid er fundet let nedbrydeligt i en OECD 301D test fra 1978 med >70% nedbrydning efter 20 dage samt 100% nedbrydning efter 3 dage i OECD 301E (IUCLID, 2000). Benzylidenchlorid står desuden anført som let nedbrydeligt i N-Class (2002). Benzylidenchlorid anses på den baggrund for 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**

De eneste målte værdier er en LC<sub>0</sub> og en LC<sub>100</sub> på henholdsvis 50 og 100 mg/L for fisk samt en IC<sub>50</sub> = 125 mg/l for protozoen Tetrahymena.

De beregnede QSAR-værdier er betydeligt mindre end de målte værdier, og det foreslås at beregne et foreløbigt vandkvalitetskriterie ved at applicere en usikkerhedsfaktor på henholdsvis 1000 og 10000 for ferskvand og saltvand til laveste QSAR-EC50. Korttidskvalitetskriteriet beregnes med en usikkerhedsfaktor 100 på laveste QSAR-EC50.

Foreløbige vandkvalitetskriterier:

$$\text{VKKferskvand} = 0,21 \text{ mg/l} : 1000 = 0,21 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$\text{VKKsaltvand} = 0,21 \text{ mg/l} : 10000 = 0,021 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$\text{KVKK} = 0,21 \text{ mg/l} : 100 = 2,1 \text{ } \mu\text{g/l}$$

## 7 **REFERENCER**

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

EPI (2000). EPIwin version 3.10 US EPA (on-line) <http://www.epa.gov/oppt/exposure/docs/episuitd1.htm>

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.

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.

Miljøstyrelsen (2002): Beregninger gennemført med QSAR-programmet ECOSAR.

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

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