



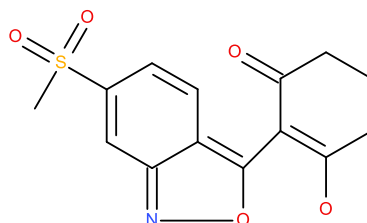
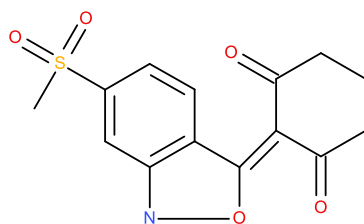
Miljøministeriet
Naturstyrelsen
Miljøstyrelsen

Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

2-cyclohexen-1-on,3-hydroxy-2-[6-(methylsulfonyl)-2,1-benzisoxazol-3-yl] (M4)

913545-19-4

1156459-77-6



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	47,6 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	4,8 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	476 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	47,6 µg/l

Juli 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 SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	8	
4.2 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	8	
4.3 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	8	
5 ANDRE EFFEKTER	9	
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	10	
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	10	
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	10	
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	10	
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	10	
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	10	10
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

There are short-term data for an alga, a crustacean, and a fish. There is as well a “chronic” EC₁₀ for the alga. An EC₁₀ for algae cannot be used without long-term EC₁₀ or NOEC values from other major taxonomic groups, so the environmental quality standards (EQS) are based on the EC₅₀ values with the application of an assessment factor (AF) of 1000 and 10000 to the lowest EC₅₀ for fresh- and saltwater respectively.

$$EQS_{\text{freshwater}} = 47,6 \text{ mg/l} : 1000 = 47.6 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$EQS_{\text{saltwater}} = 47,6 \text{ mg/l} : 10000 = 4.8 \text{ } \mu\text{g/l}$$

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

$$MAC_{\text{freshwater}} = 47,6 \text{ mg/l} : 100 = 476 \text{ } \mu\text{g/l}$$

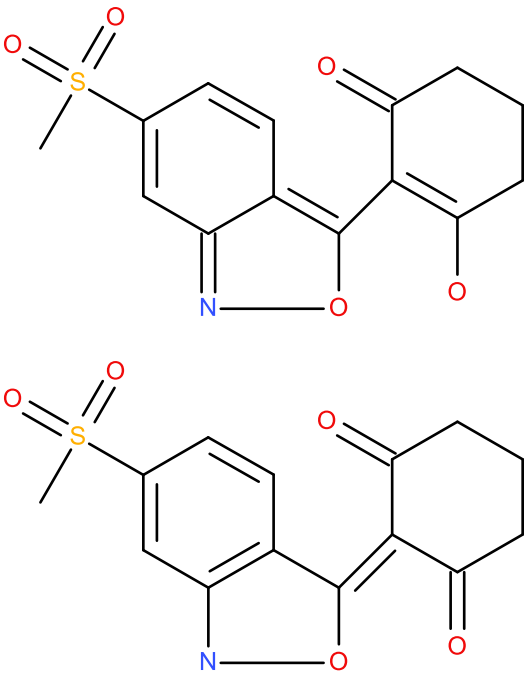
$$MAC_{\text{saltwater}} = 47,6 \text{ mg/l} : 1000 = 47.6 \text{ } \mu\text{g/l}$$

As log K_{ow} is very low the substance is not expected to bind to sediment or bioaccumulate. Thus sediment and biota and human health standards are not derived.

1 Indledning

Identiteten af M4 fremgår af tabel 1.1.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	2-cyclohexen-1-on,3-hydroxy-2-[6-(methylsulfonyl)-2,1-benzisoxazol-3-yl]
Strukturformel	
CAS nr.	1156459-77-6 913545-19-4
EINECS nr.	
Kemisk formel	C ₁₄ H ₁₃ NO ₅ S
SMILES	

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for M4 fremgår af tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for M4

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	307 ¹	
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 ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	*	Da $\log K_{ow}$ er meget lav er S formodentlig høj
Dissociationskonstant, pK_a	*	
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	-0,63	Cheminova
Sediment/vand fordelingskoefficient, K_p ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)	*	

¹Estimeret

- Ingen oplysninger

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

Ingen oplysninger. Stoffet antages at være ikke let nedbrydeligt.

3.2 Bioakkumulering

Log Kow = -0,63. Det betragtes som havende meget lille potentiale for bioakkumulering

3.3 Naturlig forekomst

Forekommer ikke naturligt.

4 Giftighedsdata

Tabel 4.1. Giftighed over for vandlevende organismer.

Overordnet systematisk gruppe	Art	Effekt mål	Værdi (mg/l)	Reference
Alger	<i>Skeletonema costatum</i>	72 timer EC ₅₀	47,6	DHI 2010
		72 timer EC ₁₀	6,2	DHI 2010
Krebsdyr	<i>Acartia tonsa</i>	48 timer EC ₅₀	>1000	DHI 2010
		48 timer EC ₁₀	324	DHI 2010
		48 timer EC ₃₀	1000	DHI 2010
Fisk	<i>Scophthalmus maximus</i>	96 timer LC ₅₀	>1000	DHI 2010

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

The DHI tests are well described and raw data are available. They are assigned an R.I. score of 1.

4.1 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Ingen oplysninger.

4.2 Giftighed over for pattedyr og fugle

Ingen oplysninger.

4.3 Giftighed over for mennesker

Ingen oplysninger.

5 Andre effekter

Ingen oplysninger

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der er brugbare EC50 værdier for 3 arter repræsenterende 3 overordnede systematiske grupper, samt en kronisk EC10 for algearten. EC10 for alger kan kun bruges sammen med kronisk EC10 for andre overordnede systematiske grupper.

VKK beregnes derfor med en usikkerhedsfaktor på 1000 og 10000 på laveste EC50 for henholdsvis fersk- og saltvand:

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 47,6 \text{ mg/l} : 1000 = 0,0476 \text{ mg/l} = 47,6 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$VKK_{\text{saltvand}} = 47,6 \text{ mg/l} : 10000 = 0,00476 \text{ mg/l} = 4,76 \text{ } \mu\text{g/l} \approx 4,8 \text{ } \mu\text{g/l}$$

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

KVKK beregnes med en usikkerhedsfaktor på 100 og 1000 for henholdsvis fersk- og saltvand:

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 47,6 \text{ mg/l} : 100 = 0,476 \text{ mg/l} = 476 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 47,6 \text{ mg/l} : 1000 = 0,0476 \text{ mg/l} = 47,6 \text{ } \mu\text{g/l}$$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Da $\log K_{ow}$ er meget lav forventes der ikke nævneværdig binding til sediment og der udarbejdes ikke et SKK.

6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Da $\log K_{ow}$ er meget lav forventes der et meget lille potentiale for bioakkumulering og der udarbejdes ikke et BKK.

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Da $\log K_{ow}$ er meget lav forventes der et meget lille potentiale for bioakkumulering og der udarbejdes ikke et HKK.

.

7 Konklusion

$$\begin{aligned} \text{VKK}_{\text{ferskvand}} &= 47,6 \text{ } \mu\text{g/l} \\ \text{VKK}_{\text{saltvand}} &= 4,8 \text{ } \mu\text{g/l} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{KVKK}_{\text{ferskvand}} &= 476 \text{ } \mu\text{g/l} \\ \text{KVKK}_{\text{saltvand}} &= 47,6 \text{ } \mu\text{g/l} \end{aligned}$$

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 2010: Økotoksikologisk karakterisering af M4. Rapport fra DHI 2010

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.