

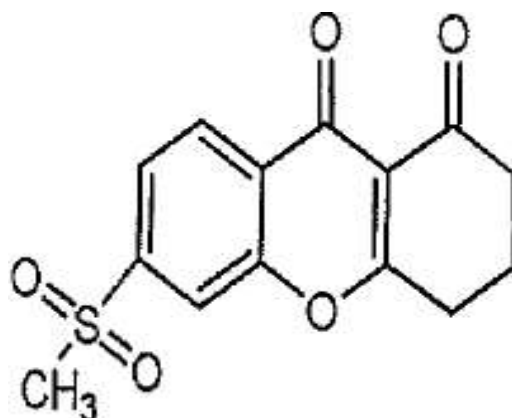


Miljøministeriet
Naturstyrelsen
Miljøstyrelsen

Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

3,4-dihydro-6-(methylsulphonyl)-1H-xanthene-1,9(2H)-dion (Xanth)

887502-60-5



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	83 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	8,3 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	830 µg/l
m		
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	83 µg/l
m		

August 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	8	
4.3 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	8	
4.4 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	8	
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	13	
8 REFERENCER	15	

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 august 2014.

English Summary and conclusions

EC₁₀ or NOEC values are available for algae only. According to the guidelines an EQS cannot be based on a single algae EC₁₀ or NOEC, and the EQS will be based on the EC₅₀ values.

EC₅₀ values are available for 3 species representing 3 major taxonomic groups.

An assessment factor (AF) of 1000 and 10000 is used respectively for derivation of EQS for fresh- and saltwater.

$$EQS_{\text{freshwater}} = \text{lowest } EC_{50}/1000 = 83 \text{ mg/l}:1000 = 83 \text{ }\mu\text{g/l}$$

$$EQS_{\text{saltwater}} = \text{lowest } EC_{50}/10000 = 83 \text{ mg/l}:10000 = 8.3 \text{ }\mu\text{g/l}$$

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

$$MAC_{\text{freshwater}} = 83 \text{ mg/l}:100 = 830 \text{ }\mu\text{g/l}$$

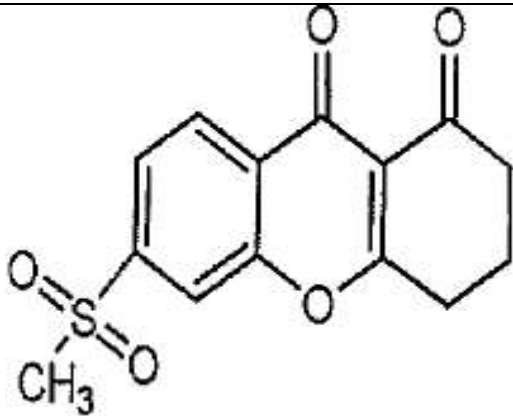
$$MAC_{\text{saltwater}} = 83 \text{ mg/l}:1000 = 83 \text{ }\mu\text{g/l}$$

As K_{oc} and log K_{ow} are low the substance is not expected to bind to sediment or to bioaccumulate. Therefore no EQS for sediment, biota or human health are set.

1 Indledning

Identiteten af XANTH fremgår af tabel 1.1.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	
Strukturformel	
CAS nr.	887502-60-5
EINECS nr.	
Kemisk formel	C ₁₄ H ₁₂ O ₅ S
SMILES	<chem>C3cc2c(cc3S(=O)(=O)C)OC1=C(C2(=O))C(=O)CCC1</chem>

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for [stofnavn] fremgår af tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for [stofnavn]

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	292,31 ¹	
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	191	QSAR: MPBPWIN ver. 1.43
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	454	QSAR: MPBPWIN ver. 1.43
Damptryk, P_v (Pa)	$9,4\cdot 10^{-7}$	QSAR: MPBPWIN ver. 1.43
Henry's konstant, H ($\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)	$7,4\cdot 10^{-9}$	QSAR: HENRYWIN ver. 3.20
Vandopløselighed, S_w ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	758 28170	WATERNT ver. 1.01 WSKOWWIN ver. 1.42
Dissociationskonstant, pK_a		
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	-0,37	Cheminova
K_{oc} ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)	17,3 15,5	KOCWIN ver. 2.00: First Order Molecular Connectivity Index Log K_{ow}

¹Estimeret

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

QSAR programmet BIOWIN ver. 4.10 forudsiger stoffet ikke er let nedbrydeligt.

3.2 Bioakkumulering

Log Kow = -0,37. Stoffet betragtes som ikke bioakkumulerende.

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. Giftighed over for vandlevende organismer.

OVERORDNET SYSTEMATISK GRUPPE	ART	EFFEKT MÅL	VÆRDI (MG/L)	REFERENCE	BEMÆRKNINGER
Alger	<i>Skeletonema costatum</i>	72 timer EC ₅₀	83	DHI 2010	R.I. 1
		72 timer EC ₁₀	38	DHI 2010	R.I. 1
Krebsdyr	<i>Acartia tonsa</i>	48 timer EC ₅₀	396	DHI 2010	R.I. 1
Fisk	<i>Scophthalmus maximus</i>	96 timer LC ₅₀	781	DHI 2010	R.I. 1

Forsøgene i DHI rapporten er velbeskrevet og testene udført i henhold til internationalt anerkendte retningslinjer.

The tests in the DHI report are well described, and the tests have been performed in accordance with internationally accepted guidelines.

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Der er ikke fundet giftighedsdata for sedimentlevende organismer.

K_{oc} er lav og stoffet forventes ikke at binde til sedimentet.

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

K_{ow} er meget lav og stoffet forventes ikke at bioakkumulere. Giftighed overfor pattedyr og fugle tages derfor ikke i betragtning.

4.4 Giftighed over for mennesker

K_{ow} er meget lav og stoffet forventes ikke at bioakkumulere. Giftighed overfor mennesker tages derfor ikke i betragtning.

5 Andre effekter

Ingen oplysninger

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der haves EC_{50} værdier for 3 arter repræsenterende 3 overordnede systematiske grupper, og én EC_{10} eller NOEC værdi for *Skeletonema costatum*. Én EC_{10} eller NOEC værdi for alger kan ikke danne grundlaget for VKK, så VKK beregnes med en usikkerhedsfaktor (UF) på 1000 og 10000 på laveste EC_{50} for henholdsvis fersk- og saltvand.

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 83 \text{ mg/l} : 1000 = 0,083 \text{ mg/l} = 83 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$VKK_{\text{saltvand}} = 83 \text{ mg/l} : 10000 = 0,0083 \text{ mg/l} = 8,3 \text{ } \mu\text{g/l}$$

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Variationen i data er ret stor og der anvendes derfor en UF 100 og 1000 til beregning af KVKK for henholdsvis fersk- og saltvand.

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 83 \text{ mg/l} : 100 = 0,83 \text{ mg/l} = 830 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 83 \text{ mg/l} : 1000 = 0,083 \text{ mg/l} = 83 \text{ } \mu\text{g/l}$$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Stoffet forventes ikke at bindes til sediment, da K_{oc} er lav. Der udarbejdes ikke et SKK.

6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Stoffet forventes ikke at bioakkumulere, da $\log K_{oc}$ er meget lav. Der udarbejdes ikke et BKK.

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Stoffet forventes ikke at bioakkumulere, da $\log K_{oc}$ er meget lav. Der udarbejdes ikke et HKK.

7 Konklusion

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 83 \text{ mg/l} : 1000 = 0,083 \text{ mg/l} = 83 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$VKK_{\text{saltvand}} = 83 \text{ mg/l} : 10000 = 0,0083 \text{ mg/l} = 8,3 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 83 \text{ mg/l} : 100 = 0,83 \text{ mg/l} = 830 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 83 \text{ mg/l} : 1000 = 0,083 \text{ mg/l} = 83 \text{ } \mu\text{g/l}$$

Usikkerhedsfaktoren ville kunne sænkes ned til en faktor 10 og 100 for henholdsvis fersk- og saltvand, hvis der var EC_{10} eller NOEC data for 3 overordnede systematiske grupper.

For saltvand gælder, at UF ville kunne sænkes med nok 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

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.