

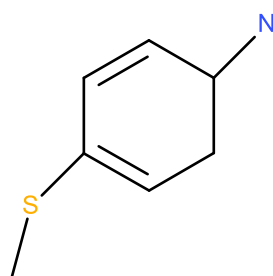


Miljøministeriet
Naturstyrelsen
Miljøstyrelsen

Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

4-(methylmercapto)anilin

CAS nr. 104-96-1



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	1,5 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	0,15 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	15 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	1,5 µg/l

November 2015

Indhold

FORORD	4
ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS	5
1 INDLEDNING	6
2 FYSISK KEMISKE EGENSKABER	7
3 SKÆBNE I MILJØET	8
3.1 NEDBRYDELIGHED	8
3.2 BIOAKKUMULERING	8
3.3 NATURLIG FOREKOMST	8
4 GIFTIGHEDSDATA	9
4.1 GIFTIGHED OVER FOR VANDLEVENDE ORGANISMER	9
4.2 GIFTIGHED OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	9
4.3 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	9
4.4 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	9
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
7 KONKLUSION	12
8 REFERENCER	13

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 november 2015.

English Summary and conclusions

Environmental Water Quality Standards for 4-(methylthio)aniline (CAS No. 104-96-1)

Derivation of the quality standard follows EU 2011 and Miljøstyrelsen 2004.

Available data are EC₅₀ values for a fish, a crustacean and an alga, and an EC₁₀ for the alga.
Lowest EC₅₀ = 1.46 mg/l.

The environmental quality standards (EQS) for freshwater and saltwater are derived by applying an assessment factor of respectively 1000 and 10000:

$$EQS_{\text{freshwater}} = 1.46 \text{ mg/l} : 1000 = 0.00146 \text{ mg/l} = 1.5 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$EQS_{\text{saltwater}} = 1.46 \text{ mg/l} : 10000 = 0.000146 \text{ mg/l} = 0.15 \text{ } \mu\text{g/l}$$

For derivation of the maximum acceptable concentration (MAC) an assessment factor of 100 and 1000 is applied respectively for fresh- and saltwater:

$$MAC_{\text{freshwater}} = 1.46 \text{ mg/l} : 100 = 0.0146 \text{ mg/l} = 15 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$MAC_{\text{saltwater}} = 1.46 \text{ mg/l} : 1000 = 0.00146 \text{ mg/l} = 1.5 \text{ } \mu\text{g/l}$$

There is no information on effects on sediment dwelling organisms. The estimated K_{oc} and log K_{ow} values are low (Table 2.1). Thus the substance is not expected to bind to sediment or to bioaccumulate, and the triggers for deriving quality standards for sediment and biota are not fulfilled.

QSAR estimations (Danish QSAR database, <http://qsardb.food.dtu.dk/database/index.html>) predict mutations in thymidine kinase locus in mouse lymphoma cells, sister chromatid exchange in mouse bone marrow cells, and positive outcome of comet assay in mouse, while the outcome for 8 other markers for genotoxicity is negative. The predictions for all carcinogenicity and teratogenicity markers are either negative or inconclusive.

No information on ADI, TDI or RfD has been found. Neither has sufficient data for estimating these values been found.

On the other hand the bioaccumulation potential is regarded as small and exposure of humans via “seafood” is probably quite limited.

No quality standard based on human health has been derived.

$$EQS_{\text{freshwater}} = 1.5 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$EQS_{\text{saltwater}} = 0.15 \text{ } \mu\text{g/l}$$

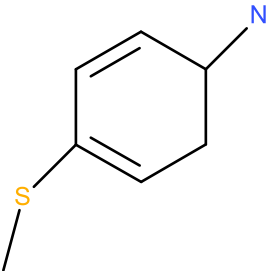
$$MAC_{\text{freshwater}} = 15 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$MAC_{\text{saltwater}} = 1.5 \text{ } \mu\text{g/l}$$

1 Indledning

Identiteten af 4-(methylmercapto)anilin fremgår af tabel 1.1.

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	4-(methylthio)aniline
Strukturformel	
CAS nr.	104-96-1
EC nr.	203-256-3
Kemisk formel	C ₇ H ₉ NS
SMILES	<chem>c1(SC)ccc(N)cc1</chem>

2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for 4-(methylmercapto)anilin fremgår af tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for [stofnavn]

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	139,22	Beregnet
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	44,2	MPBPWIN 1.43 ¹
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	256,97	MPBPWIN 1.43 ¹
Damptryk, P_v (Pa)	0,739	MPBPWIN 1.43 ¹
Henry's konstant, H ($\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)	$5,62\cdot 10^{-3}$ $1,06\cdot 10^{-2}$	HENRYWIN 3.20 ¹ Bond estimate Group estimate
Vandopløselighed, S_w ($\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	3,1 3,2	WSKOWWIN 1.42 ¹ WATERNT 1.01 ¹
Dissociationskonstant, pK_a		
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	1,68	KOWWIN 1.68 ¹
K_{oc} ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)	68 - 215	KOCWIN 2.00 ¹

¹Estimeret med QSAR programmer fra US EPAs pakke EPIWIN

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

QSAR programmet BIOWIN version 4.10 forudsiger at stoffet ikke er let nedbrydeligt.

3.2 Bioakkumulering

Log K_{ow} er beregnet til at være 1,68 og potentialet for bioakkumulering betragtes derfor som lille.

3.3 Naturlig forekomst

Ingen oplysninger

4 Giftighedsdata

4.1 Giftighed over for vandlevende organismer

Effekt-koncentrationer over for vandlevende organismer er sammenstillet i tabel 4.1.

	Varighed, timer	EC50, mg/l	Reference
Fisk			
<i>Cyprinodon variegatus</i>	96	54,5 (nominel)	DHI 2012
Krebsdyr			
<i>Acartia tonsa</i>	48	13 (baseret på målte koncentrationer, 15 baseret på nominelle konc.)	DHI 2012
Alger			
<i>Skeletonema costatum</i>	72	1,46 (målt = nominel)	DHI 2007
<i>Skeletonema costatum</i>	72	EC ₁₀ = 0,95 (målt = nominel)	DHI 2007

4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Ingen oplysninger

4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Den danske QSAR database (DK_QSAR) forudsiger oral LD₅₀ for rotter og mus på henholdsvis 560 mg/kg lgv/dag og 400 mg/kg lgv/dag.

4.4 Giftighed over for mennesker

Den danske QSAR database (DK_QSAR) forudsiger at stoffet kan medføre mutationer i thymidin kinase locus i muse lymphom celler og søster kromatid udveksling muse benmarvsceller samt "Comet Assay in mouse"(også et mål for genotoxicitet). Øvrige 8 mål for genotoxicitet er enten negative eller "inconclusive". Alle forudsigelser vedrørende kræft og fosterskader er negative eller i enkelte tilfælde "inconclusive".

Der er ikke fundet TDI, ADI eller RfD værdier for stoffet.

5 Andre effekter

Ingen oplysninger

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der haves EC_{50} værdier for fisk, krebsdyr og alger samt en EC_{10} værdi for alger. Til beregning af VKK anvendes, jævnfør vejledningerne (Miljøstyrelsen 2004 og EU 2011) en usikkerhedsfaktor på laveste EC_{50} på henholdsvis 1000 og 10000 for fersk- og saltvand:

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 1,46 \text{ mg/l} : 1000 = 0,00146 \text{ mg/l} = 1,5 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$VKK_{\text{saltvand}} = 1,46 \text{ mg/l} : 10000 = 0,00146 \text{ mg/l} = 0,15 \text{ } \mu\text{g/l}$$

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Til beregning af VKK anvendes, jævnfør vejledningerne (Miljøstyrelsen 2004 og EU 2011) en usikkerhedsfaktor på laveste EC_{50} på henholdsvis 100 og 1000 for fersk- og saltvand:

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 1,46 \text{ mg/l} : 100 = 0,0146 \text{ mg/l} = 15 \text{ } \mu\text{g/l}$$

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 1,46 \text{ mg/l} : 1000 = 0,00146 \text{ mg/l} = 1,5 \text{ } \mu\text{g/l}$$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

K_{oc} er lav og stoffet forventes ikke at bindes til sedimentet. Der udarbejdes ikke et SKK.

6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

$\log K_{ow}$ er lav og stoffet forventes ikke at bioakkumulere, og der udarbejdes ikke et BKK.

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Stoffet er muligvis genotoksisk, men der er ikke fundet en TDI, ADI eller RfD værdi, og der er ikke data til at beregne en ADI eller TDI. Desuden vurderes bioakkumuleringspotentialen at være ringe. Der udarbejdes derfor ikke et HKK.

7 Konklusion

VKK_{ferskvand} = 1,5 µg/l

VKK_{saltvand} = 0,15 µg/l

KVKK_{ferskvand} = 15 µg/l

KVKK_{saltvand} = 1,5 µg/l

8 Referencer

DHI 2007: Økotoksikologisk karakterisering af 4-(methylmercapto)anilin, Algehæmningstest med *Skeletonema costatum*. Rapport fra DHI januar 2007.

DHI 2012: Økotoksikologisk karakterisering af 4-(methylmercapto)anilin, Akut toksicitetstest med *Acartia tonsa* og akut toksicitetstest med sheepshead minnow (*Cyprinodon variegatus*). Rapport fra DHI august 2012.

DK-QSAR: <http://qsar.db.food.dtu.dk/database/index.html>

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.