

19. april 2005

**4-chlor-3-methyl-phenol (PCMC)**  
**(CAS No. 59-50-7)**  
4-Chlor-m-cresol

**Vandkvalitetskriterie<sub>ferskvand</sub> = 9 µg/l**

**Vandkvalitetskriterie<sub>saltvand</sub> = 0,9 µg/l**

**KVKK = 90 µg/l**

### **Summary**

A water quality standard for 4-chloro-3-methyl-phenol was derived as described in the EU Water Framework Directive (EU, 2000A). The available data include E/LC<sub>50</sub> values from short-term studies with many species from various trophic levels among which 0.9 mg/l for fish is the lowest reliable value. An assessment factor of 100 and 1000 was used respectively for fresh- and saltwater. There is no information on potential endocrine disrupting properties and the substance is not bioaccumulative. Furthermore, it is readily degradable in the aquatic environment. Therefore, no other considerations are relevant for derivation of the water quality standard, which is set equal to the PNEC. The maximum acceptable concentration was derived using an assessment factor of on the lowest EC50 value (many EC50 values from 6 different higher taxonomic groups. The water quality standards thus are:

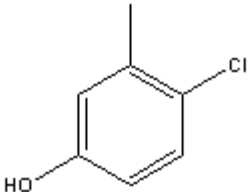
**WQS<sub>freshwater</sub> = 9 µg/l**

**WQS<sub>freshwater</sub> = 0.9 µg/l**

**MAC = 90 µg/l**

# 1 STRUKTUR, EGENSKABER OG FOREKOMST

Tabel 1.1 Fysisk-kemiske etc. egenskaber for 4-chlor-3-methyl-phenol  
*Physico-chemical etc. properties of 4-chloro-3-methyl-phenol*

CAS-nr. / CAS No.	59-50-7
Struktur / Structure	
Synonymer / Synonyms	p-chlor-m-cresol (PCMC); 6-chlor-3-hydroxytoluen m.m.
Klassificering / Classification	Xn;R21/22 Xi;R41 R43 N;R50 <sup>1,5</sup>
Molekylær formel / Empirical formula	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> ClO
Molvægt / Molar weight	142,6 g/mol <sup>2</sup>
Vandopløselighed / Water solubility (25°C)	3830 mg/l <sup>3</sup>
Damptryk / Vapour pressure (20°C)	6,67-8 Pa <sup>3,4</sup>
Octanol-vand fordelingskoefficient/ Log P <sub>ow</sub>	3,1 <sup>3,4</sup>

- 1 Miljøministeriet (2002)
- 2 Chemfinder (2002)
- 3 Syracuse (2002)
- 4 IUCLID (2000)
- 5 N-Class (2002)

Der er ikke fundet oplysninger om, at 4-chlor-3-methyl-phenol er naturligt forekommende (Verschueren, 1997).

4-chlor-3-methyl-phenol anvendes bl.a. i bakteriedræbende præparater til udvortes brug og som konserveringsmiddel i lime, gummi, blæk, tekstiler og lædervarer (Verschueren, 1997).

Der er ikke fundet oplysninger om målte koncentrationer af 4-chlor-3-methyl-phenol i vandmiljøet (Verschueren, 1997).

## 2 GIFTIGHED

### 2.1 Giftighed over for mennesker

4-chlor-3-methyl-phenol er ikke klassificeret med R-sætninger, der dækker carcinogene, mutagene eller reproduktionsskadelige egenskaber (Miljøministeriet, 2002) og der er ikke søgt yderligere data for disse egenskaber. Der foreligger ikke oplysninger om, hvorvidt stoffet har hormonforstyrrende egenskaber. 4-chlor-3-methyl-phenol 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 en del data for 4-chlor-3-methyl-phenol, hvoraf mange ikke er fra standardiserede studier. De studier, der bedst opfylder udvælgelseskriterierne, er summeret i tabel 2.1. Der foreligger toksicitetsdata fra et eller flere studier med organismer fra hvert af de tre trofiske niveauer. Der foreligger desuden NOEC-værdier fra længerevarende test med 4-chlor-3-methyl-phenol og fisk. NOEC-værdien for alger kan desuden betragtes som et flergenerationsstudie, der repræsenterer en længerevarende test. De fleste af resultaterne er publicerede i internationale tidsskrifter.

**Tabel 2.1 Økotoksikologiske data for 4-chlor-3-methyl-phenol (59-50-7)**  
**Ecotoxicity data for 4-chloro-3-methyl-phenol (59-50-7)**

Systematisk gruppe / <i>Taxonomic group</i>	Parameter, effekt mål / <i>End point</i>	Eksposeringstid / <i>Exposure time</i>	Resultat / <i>Result</i> [mg/l]	Antal studier / <i>Number of</i> <i>studies</i>
Alger / <i>Algae</i> ( <i>Chlorella pyrenoidosa</i> )	EC <sub>50</sub> (growth)	72 h	15 <sup>1</sup>	1
Alger / <i>Algae</i> ( <i>Chlorella pyrenoidosa</i> )	NOEC (growth)	72 h	1,9 <sup>1</sup>	1
Alger / <i>Algae</i> ( <i>Scenedesmus subspicatus</i> )	EC <sub>50</sub> (growth)	72 h	10 <sup>2</sup>	1 (5 test results, 48-96 h)
Krebsdyr / <i>Crustacea</i> ( <i>Daphnia magna</i> )	EC <sub>50</sub> (immobility)	48 h	1,5-2,3 <sup>3,4,5</sup>	3
Krebsdyr / <i>Crustacea</i> ( <i>Daphnia magna</i> )	NOEC (reproduction)	21 d	1,3 <sup>6</sup>	1
Padder / <i>Amphibia</i> ( <i>Xenopus sp.</i> )	LC <sub>50</sub>	112 h	12-13 <sup>10</sup>	1
Bløddyr / <i>Molluscs</i> ( <i>Lymnaea stagnalis</i> )	LC <sub>50</sub>	96 h	14 <sup>5</sup>	1
Fisk / <i>Fish</i> ( <i>Oncorhynchus mykiss</i> )	LC <sub>50</sub>	96 h	0,9 <sup>3</sup>	1
Fisk / <i>Fish</i> ( <i>Pimephales promelas</i> , <i>Poecilia reticulata</i> )	LC <sub>50</sub>	96 h	0,9-7,5 <sup>5,7,8</sup>	5
Fisk / <i>Fish</i> ( <i>Pimephales promelas</i> )	LC <sub>50</sub>	96 h	0,01-0,1 <sup>11</sup>	no information

h: Hours (timer)

1 Ramos et al. (1999) citeret i US EPA (2002)

2 Kuhn & Pattard (1990) citeret i US EPA (2002)

3 Office of Pesticide Programs (2000) citeret i US EPA (2002) Pesticide Ecotoxicity Database (Formerly: Environmental Effects Database (EEDB)), Environmental Fate and Effects Division, U.S.EPA, Washington, D.C.

4 Gersich & Mayes (1986) citeret i US EPA (2002)

5 Ramos et al. (1998) citeret i US EPA (2002)

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

7 Geiger et al. (1985) citeret i US EPA (2002)

8 Holcombe et al. (1984) citeret i US EPA (2002)

9 Broderius et al. (1995) citeret i US EPA (2002)

10 Bernardini et al. (1996) citeret i US EPA (2002)

11 US EPA (1972) citeret i Verschueren (1997)

De fleste oplysninger tyder på, at der ikke er forskel i følsomheden mellem de tre trofiske niveauer, om end NOEC-værdien fra et dafnie-reproduktionsstudie er højere end den laveste LC<sub>50</sub> fra korttidsstudierne med fisk og på niveau med EC<sub>50</sub>-værdierne (immobilitet) fra dafnie-korttidsstudierne. Derimod peger resultaterne i sidste række i tabellen på, at fisk skulle være den mest følsomme organismegruppe. Dokumentationen for disse oplysninger er dog meget svag, og referencen tyder på, at der er tale om data fra meget tidlige studier (1972). Datakvaliteten af de øvrige studier er ikke vurderet, men de nyere resultater (fra Hermens gruppe i Holland, der er kendt for kvalitetsundersøgelser (Ramos et al., 1998, 1999)) ligger generelt på et højere niveau. Det foreslås derfor, at der ses bort fra oplysningerne fra Verschueren ved fastsættelsen af vandkvalitetskriteriet.

Den laveste effektkoncentration fra de øvrige studier er LC<sub>50</sub> = 0,9 mg/l fra en korttidstest med fisk (*Oncorhynchus mykiss*) (Office of Pesticide Programs, 2000). Stoffet er i 1995 klassificeret med N,R50 (N-Class, 2002), hvilket viser, at der er fundet resultater af toksicitetstest < 1 mg/l. LC<sub>50</sub>-værdien på 0,9 mg/l anses derfor for at være valid og anvendes som grundlag for vandkvalitetskriteriet.

### **3 BIOAKKUMULERING**

Der er fundet eksperimentelle data for bioakkumulering af 4-chlor-3-methyl-phenol med den højeste BCF-værdi på 13 fra et 6 ugers studie med *Cyprinus carpio* (Citi, 2002). 4-chlor-3-methyl-phenol har en log P<sub>ow</sub> på 3,1. På den baggrund vurderes 4-chlor-3-methyl-phenol ikke at være bioakkumulerbart.

### **4 NEDBRYDELIGHED**

Der er fundet data fra let nedbrydelighedstest eksempelvis OECD 301C med 100% nedbrydning efter 16 dage og OECD 301D med 83% nedbrydning efter 20 dage (IUCLID, 2000). Dette stemmer overens med N-Class-databasen, hvor 4-chlor-3-methyl-phenol står markeret som let nedbrydeligt (N-Class, 2002). 4-chlor-3-methyl-phenol, vurderes på den baggrund, at være let nedbrydeligt i vandmiljø.

### **5 LUGT OG SMAG**

Der er oplyst en detektionsgrænse for lugt på 0,1 mg/kg i Verschueren (1997) med henvisning til en undersøgelse af kiks (Griffiths & Land, 1973).

### **6 FORSLAG TIL VANDKVALITETSKRITERIE**

Som grundlag for vandkvalitetskriteriet kan en PNEC-værdi beregnes som beskrevet i Vandrammedirektivet (EU, 2000A). Da laveste NOEC er større end laveste EC<sub>50</sub> anvendes den laveste EC<sub>50</sub>, der er fundet pålidelig; LC<sub>50</sub> = 0,9 mg/l fra korttidstest med fisk. Denne værdi er fra USA's miljøstyrelses (EPA) "Pesticide Ecotoxicity Database", som indeholder data leveret af bl.a. industrien, som EPA har kvalitetsvurderet.

Da der haves NOEC-værdier for alger og krebsdyr, men ikke for fisk (de mest følsomme i akuttetene), samt at der er mange EC50-værdier fra 6 overordnede systematiske grupper, anvendes de en faktor 100 og 1000 på laveste EC50 værdi for henholdsvis fersk- og saltvand. dvs. PNEC bliver henholdsvis 0,009 mg/l og 0,0009 mg/l.

4-chlor-3-methyl-phenol er ikke klassificeret med carcinogene, mutagene eller reproduktionsforstyrrende egenskaber, og der foreligger ikke oplysninger om hormonforstyrrende egenskaber. Stoffet anses ikke for at være bioakkumulerbart og det er let nedbrydeligt i det akvatiske miljø.

Der er dermed ikke andre forhold, der kommer i betragtning ved fastsættelsen af vandkvalitetskriteriet.

Da der er mange EC50-værdier for adskillige overordnede systematiske grupper, bruges faktor 10 på laveste EC50 til beregning af korttidskvalitetskriteriet, dv.  $0,9 \text{ mg/l} : 10 = 0,09 \text{ mg/l}$ .

På den baggrund foreslås følgende vandkvalitetskriterier for 4-chlor-3-methyl-phenol:

$$\begin{aligned} \text{VKK}_{\text{ferskvand}} &= 0,009 \text{ mg/l} = 9 \text{ }\mu\text{g/l} \\ \text{VKK}_{\text{saltvand}} &= 0,0009 \text{ mg/l} = 0,9 \text{ }\mu\text{g/l} \\ \text{KVKK} &= 0,09 \text{ mg/l} = 90 \text{ }\mu\text{g/l} \end{aligned}$$

## 7 **REFERENCER**

Bernardini, G., O. Spinelli, C. Presutti, C. Vismara, E. Bolzacchini, M. Orlandi, and R. Settimi (1996): Evaluation of the Developmental Toxicity of the Pesticide MCPA and Its Contaminants Phenol and Chlorocresol: *Environ.Toxicol.Chem.* 15(5):754-760

Broderius, S.J., M.D. Kahl, and M.D. Hoglund (1995). Use of Joint Toxic Response to Define the Primary Mode of Toxic Action for Diverse Industrial Organic Chemicals. *Environ.Toxicol.Chem.* 14(9):1591-1605 (Author Communication Used).

Bro-Rasmussen, F., P. Calow, J.H. Canton, P.L. Chambers, A. Silva Fernandes, L. Hoffmann, J.-M. Jouany, W. Klein, G. Persoone, M. Scoullous, J.V. Tarazona & M. Vighi (1994): EEC Water Quality Objectives for Chemicals Dangerous to Aquatic Environments (List 1). *Reviews of Environmental Contamination and Toxicology* 137:83-110.

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

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](http://www.cerij.or.jp/ceri_en/koukai/koukai_menu.html).

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.

Geiger, D.L., C.E. Northcott, D.J. Call, and L.T. Brooke (1985). Acute Toxicities of Organic Chemicals to Fathead Minnows (*Pimephales promelas*), Vol. 2. Center for Lake Superior Environmental Stud., Univ. of Wisconsin-Superior, Superior, WI I:326.

Gersich, F.M., and M.A. Mayes (1986). Acute Toxicity Tests with *Daphnia magna* Straus and *Pimephales promelas* Rafinesque in Support of National Pollutant Discharge Elimination Permit. *Water Res.* 20(7):939-941.

Griffiths, N.M. and D.G. Land (1973): 6-chloro-o-cresol taint in biscuits. *Chem. Ind. (London)* 904.

Holcombe, G.W., G.L. Phipps, M.L. Knuth, and T. Felhaber (1984). The Acute Toxicity of Selected Substituted Phenols, Benzenes and Benzoic Acid Esters to Fathead Minnows *Pimephales promelas*. *Environ. Pollut. Ser. A Ecol. Biol.* 35(4):367-381 (OECDG Data File).

IUCLID (2000): International Uniform Chemical Information Database. European Commission, Joint Research Centre, European Chemicals Bureau, EUR 19559 EN. CD-ROM.

Kuhn, R., and M. Pattard (1990). Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to Green Algae (*Scenedesmus subspicatus*) in the Cell Multiplication Inhibition Test. *Water Res.* 24(1):31-38 (OECDG Data File).

Kuhn, R., M. Pattard, K. Pernak, and A. Winter (1989). Results of the Harmful Effects of Water Pollutants to *Daphnia magna* in the 21 Day Reproduction Test. *Water Res.* 23(4):501-510 (OECDG Data File).

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](http://www.kemi.se) (okt./nov. 2002).

Office of Pesticide Programs (2000). Environmental Effects Database (EEDB). Environmental Fate and Effects Division, U.S.EPA, Washington, D.C.

Ramos, E.U., C. Vermeer, W.H.J. Vaes, and J.L.M. Hermens (1998). Acute Toxicity of Polar Narcotics to Three Aquatic Species (*Daphnia magna*, *Poecilia reticulata* and *Lymnaea stagnalis*) and Its Relation to Hydrophobicity. *Chemosphere* 37(4):633-650.

Ramos, E.U., W.H.J. Vaes, P. Mayer, and J.L.M. Hermens (1999). Algal Growth Inhibition of *Chlorella pyrenoidosa* by Polar Narcotic Pollutants: Toxic Cell Concentrations and QSAR Modeling. *Aquat.Toxicol.* 46(1):1-10.

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/):

US EPA (1978). U.S.Environmental Protection Agency (1978). In-Depth Studies on Health and Environmental Impact of Selected Water Pollutants. Contract No.68-01-4646, U.S.EPA :9 p.

US EPA (1972): MCA, The effect of chlorination on selected organic chemicals. US EPA-WPC Research series 12020 EXG 03/72.

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