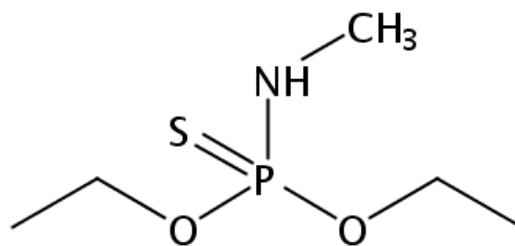




# Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

## EP1-methylamid

CAS nr. 17321-49-2



Vandkvalitetskriterium	VKK <sub>ferskvand</sub>	<u>50 µg/l</u>
Vandkvalitetskriterium	VKK <sub>saltvand</sub>	<u>5 µg/l</u>
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK <sub>ferskvand</sub>	<u>5000 µg/l</u>
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK <sub>saltvand</sub>	<u>500 µg/l</u>
Sedimentkvalitetskriterium	SKK <sub>ferskvand</sub>	Ikke relevant
Sedimentkvalitetskriterium	SKK <sub>saltvand</sub>	Ikke relevant
Biota-kvalitetskriterium, sundhed	BKK <sub>sundhed</sub>	Ikke relevant
Biota-kvalitetskriterium, sekundær forgiftning	BKK <sub>sek. forgiftning</sub>	Ikke relevant

# Indholdsfortegnelse

<b>FORORD</b>	<b>3</b>	
<b>ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS</b>	<b>4</b>	
<b>1 INDLEDNING</b>	<b>5</b>	
<b>2 FYSISK KEMISKE EGENSKABER</b>	<b>6</b>	
<b>3 SKÆBNE I MILJØET</b>	<b>7</b>	
3.1 NEDBRYDELIGHED	7	
3.2 BIOAKKUMULERING	7	
3.3 NATURLIG FOREKOMST	7	
<b>4 GIFTIGHEDSDATA</b>	<b>8</b>	
4.1 GIFTIGHED OVER FOR VANDLEVENDE ORGANISMER	8	
4.2 GIFTIGHED OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	9	
4.3 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	9	
4.4 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	9	
<b>5 ANDRE EFFEKTER</b>	<b>10</b>	
<b>6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM</b>	<b>11</b>	
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	11	
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	11	
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	11	
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	12	
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)		12
<b>7 KONKLUSION</b>	<b>13</b>	
<b>8 REFERENCER</b>	<b>14</b>	

# 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 kvalitetskriterier for kemikalier i vandsøjlen (vandkvalitetskriterium), i sediment og i biota.

Miljøstyrelsen 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 miljøkvalitetskriterier er harmoniseret i EU og baserer sig på vandrammedirektivet (EU, 2000), EU's vejledning til fastsættelse af kvalitetskriterier i vandmiljøet (TGD) (EU, 2018) og Miljøstyrelsens vejledning til fastsættelse af vandkvalitetskriterier (Miljøstyrelsen, 2004). Metodikken er endvidere i overensstemmelse med EU's vejledning til risikovurdering under REACH forordningen (EU, 2008).

Miljøstyrelsen har haft mulighed for at kommentere et udkast til databladet inden den endelige udgave. Kommentarerne findes her: [link](#)

Den sidste litteratursøgning er foretaget den 07.09.2020.

Forfattere: Hans Sanderson, Institut for Miljøvidenskab, Aarhus Universitet

Faglig kvalitetssikring: John Jensen/Katrin Vorkamp, Institut for Bioscience, Aarhus Universitet

Kvalitetssikring, DCE: Susanne Boutrup

# English Summary and conclusions

This review is based on validated data from the e-CHEM portal and data provided to the DK-EPA and QSAR data due to lacking further available data.

Based on these data sources we discerned the following conclusions in light of the EU TGD#27 for O,O-Diethyl N-methylphosphoramidothioate (EP1-methylamid):

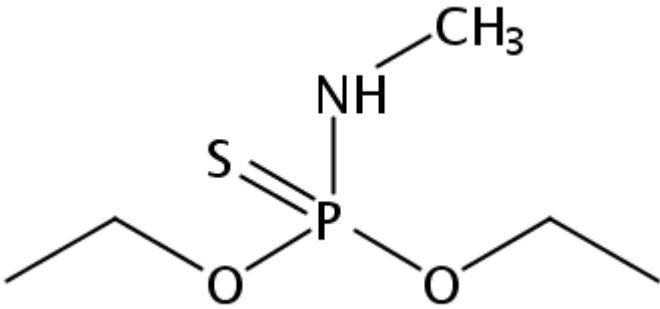
AA-QS <sub>freshwater</sub> =	<u>20 µg/L</u>
AA-QS <sub>saltwater</sub> =	<u>2.0 µg/L</u>
MAC-QS <sub>freshwater</sub> =	<u>2000 µg/L</u>
MAC-QS <sub>saltwater</sub> =	<u>200 µg/L</u>
QS <sub>sediment, freshwater</sub> =	<u>Not relevant</u>
QS <sub>sediment, saltwater</sub> =	<u>Not relevant</u>
QS <sub>biota, secondary poisoning</sub> =	<u>Not relevant</u>
QS <sub>biota, human health</sub> =	<u>Not relevant</u>

EP1 methyladmid has the following hazard notifications: Acute Tox. 4; H302 (Harmful if swallowed) and Aquatic Chronic 3; H412 (Harmful to aquatic life with long lasting effects).

# 1 Indledning

Identiteten af EP1-methylamid fremgår af tabel 1.1.

**Tabel 1.1.** Identitet af EP1-methylamid

IUPAC navn	O,O-Diethyl N-methylphosphoramidothioate
Strukturformel	
CAS nr.	17321-49-2
EINECS nr.	NA
Kemisk formel	C <sub>5</sub> H <sub>14</sub> N <sub>1</sub> O <sub>2</sub> P <sub>1</sub> S <sub>1</sub>
SMILES	CCOP(=S)(NC)OCC

Stoffet er et nedbrydningsprodukt af et organofosfat insekticid. Der er ingen produktions- eller forbrugsdata for EP1-methylamid i Danmark (<http://www.spin2000.net>).

## 2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for EP1-methylamid fremgår af tabel 2.1.

**Tabel 2.1.** Fysisk kemiske egenskaber for EP1-methylamid.

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, $M_w$ ( $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ )	183,21	SDS
Smeltepunkt, $T_m$ ( $^{\circ}\text{C}$ )	-49,41 <sup>1</sup>	QSAR EPI Suite
Kogepunkt, $T_b$ ( $^{\circ}\text{C}$ )	224,6 <sup>1</sup>	QSAR EPI Suite
Damptryk, $P_v$ (Pa)	13,8 <sup>12</sup>	QSAR EPI Suite
Henry's konstant, $H$ ( $\text{atm}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$ )	$2,83 \cdot 10^{-6}$ <sup>1</sup>	QSAR EPI Suite
Vandopløselighed, $S_w$ ( $\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ )	2,919 <sup>1</sup>	QSAR EPI Suite
Dissociationskonstant, $\text{pK}_a$	NA	NA
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	1,48 <sup>1</sup>	QSAR EPI Suite
$\log K_{oc}$ ( $\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$ )	1,668 <sup>1</sup>	QSAR EPI Suite

<sup>1</sup> estimeret værdi (EPI Suite, se bilag A)

<sup>2</sup> Ved 25  $^{\circ}\text{C}$

## 3 Skæbne i miljøet

### 3.1 Nedbrydelighed

Der er ingen eksperimentelle data om stoffets nedbrydelighed. En QSAR BIOWIN analyse i EPI Suite viser, at stoffet ikke er let bionedbrydeligt (se bilag A).

### 3.2 Bioakkumulering

Stoffet har en lav  $\log K_{ow}$  værdi på 1,48 og forventes derfor ikke at bioakkumulere. BCF er bestemt til 4,369 L/kg vådvægt ( $\log BCF = 0,64$ ) (Estimation Program Interface (EPI Suite)), og det konkluderes derfor, at bioakkumuleringspotentialet for EP1-methylamid i akvatiske organismer er lavt (se bilag A).

### 3.3 Naturlig forekomst

EP1-methylamid er ikke naturligt forekommende.

# 4 Giftighedsdata

## 4.1 Giftighed over for vandlevende organismer

Der er tre eksperimentelle data for stoffets giftighed, og disse er medtaget i denne rapport, se nedenfor fra DHI rapporten (DHI, 2004). Der er ingen registrering af stoffet hos ECHA. I SciFinder gav en søgning på stoffet 17 resultater, ingen af disse indeholdt toksikologiske eller andre relevante data til denne analyse. Der er ingen data på stoffet i US EPA OPP eller EcoTox databaserne.

Der forelægger et sikkerhedsdatablad (Safety Data Sheet (SDS 2019)) for stoffet fra 2019 med tilhørende rapport fra DHI (2004) om de tre økotoksikologiske studier, som alle er på marine organismer. Studierne fulgte ISO og OSPAR guidelines (DHI, 2004). Rapporten fra DHI (2004) rapporterer følgende akutte værdier:

Art / test guideline	Effekt konc. (mg/L)	Eksponeringstid	Effekt mål	Klimish score
<i>Akut test:</i>				
Pighvar ( <i>Scophthalmus maximus</i> ) (OECD 203)	>50-100 (LC <sub>50</sub> )	96 t	Overlevelse	1
Invertebrat ( <i>Arcartia tonsa</i> ) (ISO 14669)	88,1 (LC <sub>50</sub> )	48 t	Overlevelse	1
Alge ( <i>Skelotonema costatum</i> ) (ISO 10253)	20-50 (EC <sub>r50</sub> )	72 t	Vækstrate	1
<i>Kronisk (akut) test:</i>				
Alge ( <i>Skelotonema costatum</i> ) (ISO 10253)	13,2 (EC <sub>r10</sub> )	72 t	Vækstrate	1

DHI rapporten er fortrolig.

Med QSAR blev der fundet følgende estimer fra EPI Suite for EP1-methylamid for ferskvandsarter:

Fisk (kronisk) = 2,047 mg/L

Dafnie (kronisk) = 0,0001 mg/L

Grønalge (kronisk) = 10,8 mg/L

De eksperimentelle data fra DHI vurderes mere valide (Klimish score 1) end QSAR data (Klimish score 2).



#### 4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Der er ingen data for giftigheden over for sedimentlevende organismer.

#### 4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Safety Data Sheet (SDS 2019) indeholder følgende værdier for giftighed over for pattedyr: LD<sub>50</sub> rotter (oralt) = 500-2000 mg/kg, rotte (dermal) LD<sub>50</sub> >2000 mg/kg. Der er ingen data angående giftighed over for fugle.

#### 4.4 Giftighed over for mennesker

Der er ingen giftighedsdata over for mennesker.

## 5 Andre effekter

Ifølge EU's forordning for klassificering, mærkning og emballering af stoffer (CLP-forordning) er EP1-methylamid selvklassificeret med følgende fareklasser og faresætninger:

- Acute tox. 4; H302: Farlig ved indtagelse.
- Aquatic Chronic 3; H412: Skadelig for vandlevende organismer, med langvarige virkninger.

# 6 Udledning af vandkvalitetskriterium

## 6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Da der kun er akutte saltvandsdata for stoffet, bliver AF (assessment factor – også betegnet som usikkerhedsfaktoren og tidligere sikkerhedsfaktoren) = 1000 (EU TGD 2018, Tab 3), og da den laveste effektkoncentration er for alger på 20 mg/L fastsættes VKK<sub>ferskvand</sub> derfor til:

$$\text{VKK}_{\text{ferskvand}} = 20 \text{ mg/L} / 1000 = 0,02 \text{ mg/L} = \underline{20 \mu\text{g/L}}$$

Der er kun tale om tre akutte saltvandstoksicitetsværdier, hvorfor AF sættes til 10.000 iflg. EU TDG Tab 4 (2018) og derfor bliver VKK<sub>saltvand</sub> udledt således:

$$\text{VKK}_{\text{saltvand}} = 20 \text{ mg/L} / 10.000 = 0,002 \text{ mg/L} = \underline{2 \mu\text{g/L}}$$

Der er en kronisk algeværdi, men denne kan ikke stå alene til udledning af VKK værdien. Desuden bør QSAR data heller ikke stå alene ifølge EU TDG (2018), hvorfor disse målte værdier ikke benyttes.

## 6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Der er tre akutte eksperimentelle toksicitetsværdier, og standardafvigelsen på de logtransformerede toksicitetsværdier er 0,32, hvilket er mindre end tærskelværdien (0,5) (EU, 2018). Derfor kan en AF på 10 anvendes til udledning af KVKK<sub>ferskvand</sub>, som:

$$\text{KVKK}_{\text{ferskvand}} = 20 \text{ mg/L} / 10 = 2,0 \text{ mg/L} = \underline{2000 \mu\text{g/L}}$$

KVKK<sub>saltvand</sub> er med en ekstra AF på 10 udledes KVKK<sub>saltvand</sub> således:

$$\text{KVKK}_{\text{saltvand}} = 20 \text{ mg/L} / 10 / 10 = 0,2 \text{ mg/L} = \underline{200 \mu\text{g/L}}$$

## 6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Da log K<sub>oc</sub> er mindre end 3 for EP1-methylamid (Log K<sub>oc</sub> = 1,668) samt pga. af den lave log K<sub>ow</sub> værdi på 1,48, skal der ifølge det tekniske guidance-dokument ikke beregnes et SKK for EP1-methylamid (EU, 2018).

#### 6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Der skal ifølge EU Technical Guidance Document (EU, 2018) ikke laves et BKK for EP1-methylamid, da BCF for EP1-methylamid er 4,369 L/kg (EPI Suite, 2020), hvilket er mindre end tærskelværdien på 100 L/kg i EU TGD (2018).

#### 6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

EP1-methylamid er skadeligt ved indtagelse ud fra faresætning H302. Der er mistanke om giftighed over for mennesker som følge af konsumtion af vandlevende organismer (fisk), men H302 udløser kun behov for udledning af HKK, hvis stoffet samtidig forventes at bioakkumulere (EU, 2018). Stoffet forventes ikke at bioakkumulere og derved er kriterierne for udledning af HKK ikke opfyldt.

# 7 Konklusion

Der er fundet følgende miljøkvalitetskriterier for EP1-methylamid baseret på tilgængelige review data fra e-CHEM portal (2020), sikkerhedsdatablad (SDS) og en fortrolig økotoksikologisk rapport fra DHI (2004), samt den videnskabelige litteratur (som ikke indeholdt relevante data til denne analyse), og metoder beskrevet i EU TGD 2018;

VKK<sub>ferskvand</sub> = 20 µg/L

VKK<sub>saltvand</sub> = 2,0 µg/L

KVKK<sub>ferskvand</sub> = 2000 µg/L

KVKK<sub>saltvand</sub> = 200 µg/L

SKK<sub>ferskvand</sub> = Ikke relevant

SKK<sub>saltkvand</sub> = Ikke relevant

BKK<sub>sek. forgiftn.</sub> = Ikke relevant

BKK<sub>sundhed.</sub> = Ikke relevant

# 8 Referencer

DHI (2004). Økotoksikologisk undersøgelse af EP-1-methylamid. ERA/52326-5/2004.01.04

e-CHEM (2020): <https://www.echemportal.org/echemportal/>

EU (2000). Europa-Parlamentets og Rådets Direktiv 2000/60/EF om fastsættelse af en ramme for fællesskabets vandpolitiske foranstaltninger af 23. oktober 2000.

EU (2008). ECHA: Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.10: Characterisation of dose [concentration]-response for environment ([https://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information\\_requirements\\_r10\\_en.pdf/bb902be7-a503-4ab7-9036-d866b8ddce69](https://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r10_en.pdf/bb902be7-a503-4ab7-9036-d866b8ddce69))

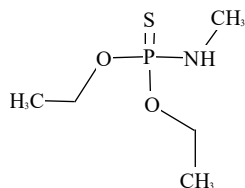
EU (2018). Scientific Committee on Health, Environmental and Emerging Risks SCHEER. Scientific Advice on Guidance Document n°27: Technical Guidance for Deriving Environmental Quality Standards. Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). Guidance Document No. 27. Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards.

Miljøstyrelsen (2004). Principper for fastsættelse af vandkvalitetskriterier for stoffer i overfladevand. Vejledning fra Miljøstyrelsen nr. 4, 2004.

Sikkerhedsbladet (SDS) sheet for EP1-methylamide (2019).

# 9 Bilag A EPISUITE resultater

## EPI Suite Results For CAS



SMILES : CCOP(=S) (NC) OCC

CHEM :

MOL FOR: C5 H14 N1 O2 P1 S1

MOL WT : 183.21

----- EPI SUMMARY (v4.11) -----

Physical Property Inputs:

Log Kow (octanol-water): -----

Boiling Point (deg C) : -----

Melting Point (deg C) : -----

Vapor Pressure (mm Hg) : -----

Water Solubility (mg/L): -----

Henry LC (atm-m<sup>3</sup>/mole) : -----

Log Octanol-Water Partition Coef (SRC):

Log Kow (KOWWIN v1.68 estimate) = 1.48

Boiling Pt, Melting Pt, Vapor Pressure Estimations (MPBPVP v1.43):

Boiling Pt (deg C): 224.60 (Adapted Stein & Brown method)

Melting Pt (deg C): -49.41 (Mean or Weighted MP)

VP(mm Hg,25 deg C): 0.103 (Mean VP of Antoine & Grain methods)

VP (Pa, 25 deg C) : 13.8 (Mean VP of Antoine & Grain methods)

Water Solubility Estimate from Log Kow (WSKOW v1.42):

Water Solubility at 25 deg C (mg/L): 2919

log Kow used: 1.48 (estimated)

no-melting pt equation used

Water Sol Estimate from Fragments:

Wat Sol (v1.01 est) = 3517.4 mg/L

ECOSAR Class Program (ECOSAR v1.11):

Class(es) found:

Esters, Monothiophosphates

Henrys Law Constant (25 deg C) [HENRYWIN v3.20]:

Bond Method : 2.83E-006 atm-m3/mole (2.87E-001 Pa-m3/mole)

Group Method: Incomplete

For Henry LC Comparison Purposes:

User-Entered Henry LC: not entered

Henrys LC [via VP/WSol estimate using User-Entered or Estimated values]:

HLC: 8.506E-006 atm-m3/mole (8.619E-001 Pa-m3/mole)

VP: 0.103 mm Hg (source: MPBPVP)



WS: 2.92E+003 mg/L (source: WSKOWWIN)

Log Octanol-Air Partition Coefficient (25 deg C) [KOAWIN v1.10]:

Log Kow used: 1.48 (KowWin est)

Log Kaw used: -3.937 (HenryWin est)

Log Koa (KOAWIN v1.10 estimate): 5.417

Log Koa (experimental database): None

Probability of Rapid Biodegradation (BIOWIN v4.10):

Biowin1 (Linear Model) : 0.6603

Biowin2 (Non-Linear Model) : 0.6004

Expert Survey Biodegradation Results:

Biowin3 (Ultimate Survey Model): 2.7943 (weeks )

Biowin4 (Primary Survey Model) : 3.5834 (days-weeks )

MITI Biodegradation Probability:

Biowin5 (MITI Linear Model) : 0.2672

Biowin6 (MITI Non-Linear Model): 0.1363

Anaerobic Biodegradation Probability:

Biowin7 (Anaerobic Linear Model): 0.6493

Ready Biodegradability Prediction: NO

Hydrocarbon Biodegradation (BioHCwin v1.01):

Structure incompatible with current estimation method!

Sorption to aerosols (25 Dec C) [AEROWIN v1.00]:

Vapor pressure (liquid/subcooled): 12.9 Pa (0.0968 mm Hg)

Log Koa (Koawin est ): 5.417

Kp (particle/gas partition coef. (m3/ug)):

Mackay model : 2.32E-007

Octanol/air (Koa) model: 6.41E-008

Fraction sorbed to airborne particulates (phi):

Junge-Pankow model : 8.4E-006

Mackay model : 1.86E-005

Octanol/air (Koa) model: 5.13E-006

Atmospheric Oxidation (25 deg C) [AopWin v1.92]:

Hydroxyl Radicals Reaction:

OVERALL OH Rate Constant = 270.8934 E-12 cm<sup>3</sup>/molecule-sec

Half-Life = 0.039 Days (12-hr day; 1.5E6 OH/cm<sup>3</sup>)

Half-Life = 28.429 Min

Ozone Reaction:

No Ozone Reaction Estimation

Fraction sorbed to airborne particulates (phi):

1.35E-005 (Junge-Pankow, Mackay avg)

5.13E-006 (Koa method)

Note: the sorbed fraction may be resistant to atmospheric oxidation

Soil Adsorption Coefficient (KOCWIN v2.00):

Koc : 46.54 L/kg (MCI method)

Log Koc: 1.668 (MCI method)

Koc : 42.68 L/kg (Kow method)

Log Koc: 1.630 (Kow method)

Aqueous Base/Acid-Catalyzed Hydrolysis (25 deg C) [HYDROWIN v2.00]:

Rate constants can NOT be estimated for this structure!

Bioaccumulation Estimates (BCFBAF v3.01):

Log BCF from regression-based method = 0.640 (BCF = 4.369 L/kg wet-wt)

Log Biotransformation Half-life (HL) = -0.7698 days (HL = 0.1699 days)

Log BCF Arnot-Gobas method (upper trophic) = 0.553 (BCF = 3.576)

Log BAF Arnot-Gobas method (upper trophic) = 0.553 (BAF = 3.576)

log Kow used: 1.48 (estimated)

Volatilization from Water:

Henry LC: 2.83E-006 atm-m<sup>3</sup>/mole (estimated by Bond SAR Method)

Half-Life from Model River: 281.4 hours (11.73 days)

Half-Life from Model Lake : 3183 hours (132.6 days)

Removal In Wastewater Treatment:

Total removal: 2.12 percent

Total biodegradation: 0.09 percent

Total sludge adsorption: 1.87 percent

Total to Air: 0.16 percent

(using 10000 hr Bio P,A,S)

Level III Fugacity Model:

Mass Amount	Half-Life	Emissions	
(percent)	(hr)	(kg/hr)	
Air	0.114	0.948	1000
Water	31.4	360	1000
Soil	68.4	720	1000
Sediment	0.118	3.24e+003	0

Persistence Time: 413 hr

....

