

Gribskød Kommune J.nr. 06.01.06 G01
01 8518 025

VANDKVALITETSINSTITUTTET ATV

Bilag nr. 168

KEMIKALIEINVENTERING AF INDHOLDSSTOFFER I SULFAFRI SPILDEVANDSSTRØMME OG RENSET SPILDEVAND



VKI • VAND •
KVALITETS-
INSTITUTTET

AGERN ALLE 11 • DK-2970 HØRSHOLM
SARALYST ALLE 52 • DK-8270 HØJBJERG

*02-86 52 11
*06-27 42 11

VANDKVALITETSINSTITUTTET ATV

RAPPORT TIL :

GRINDSTED PRODUCTS A/S

VEDRØRENDE

KEMIKALIEINVENTERING AF
INDHOLDSSTOFFER I
SULFAFRI SPILDEVANDSSTRØMME
OG RENSET SPILDEVAND

SAGSBEHANDELERE:

cand. scient. Palle Lindgaard-Jørgensen
lic. scient. K Ole Kusk

SAGSNUMMER: 97.411
DATO: 1985.07.08

MK



VKI • VAND •
KVALITETS •
INSTITUTTET

AGERN ALLE 11 · DK-2970 HØRSHOLM
SARALYST ALLE 52 · DK-8270 HØJBJERG

• *02-86 52 11
• *06-27 42 11

I N D H O L D S F O R T E G N E L S E

1.	INDLEDNING	1
2.	FORMAL	3
3.	OMFANG	3
4.	LITTERATURSØGNING.	9
5.	KEMISKE STOFFERS MILJØMESSIGE SKÆBNE OG EFFEKT	
5.1.	Transportprocesser	14
5.2.	Kemiske processer.	14
5.3.	Biologiske processer	15
5.4.	Stoffernes skæbne i rensningsanlæg	17
5.5.	Toksicitet	20
		21
6.	STOFBESKRIVELSER	24
6.1.	Struktur og fysisk-kemiske data.	24
6.2.	Nedbrydelighed	24
6.2.1.	Biologisk nedbrydning.	25
6.2.2.	Abiotisk nedbrydelighed.	25
6.3.	Akkumulerbarhed.	33
6.3.1.	Opkoncentrering i sediment	35
6.3.2.	Biokoncentrering	35
6.4.	Toksicitet	36
		40
7.	VURDERING AF SKÆBNE OG EFFEKT I RENSNINGSANLÆG OG RECIPIENT	53
7.1.	Vurderingsgrundlag	53
7.2.	Vurdering af toksicitet i forhold til beregnet recipientkoncentration	53
7.3.	Vurdering af akkumulering og nedbrydning i forhold til belastning	55
		61
8.	KONKLUSION	68
9.	REFERENCER	72
	BILAGSFORTEGNELSE	84

1. INDLEDNING

Efter anmodning fra Grindsted Products A/S (GP) udarbejdede VANDKVALITETS-INSTITUTTET, ATV (VKI) et oplæg vedrørende kemikalieinventering af de indholdsstoffer i GP's spildevand, som ikke var omfattet af VKI's rapport om sulfastoffer /34/.

GP fremsendte den 1984.08.10 en liste til VKI med 82 stoffer udvalgt på den måde, at stofferne er detekteret i GP's spildevand før og evt. også efter det biologiske rensningsanlæg. Af de 82 stoffer havde VKI som før nævnt vurderet de 14 i den tidligere kemikalieinventering. På baggrund af denne liste fremsendte VKI et foreløbigt oplæg til GP 1984.08.20 /1/. I oplægget var der en række uafklarede punkter angående mængder og detektionsgrænser for indholdsstoffer. Disse punkter er afklaret af GP, hvorefter VKI udarbejdede det endelige oplæg dateret 1984.09.05. Stoflisten er senere revideret af GP ifølge brev fra GP til VKI af 1984.11.07 /35/, 1985.02.11 /36/ og 1985.02.11 /79/.

Det skal bemærkes, at de stoffer, der er vurderet i nærværende kemikalieinventering idag udledes i en spildevandsstrøm sammen med sulfastofferne, som er blevet vurderet tidligere /34/.

Først efter etablering af særskilt rensning for sulfastofferne vil spildevandet blive opdelt på to strømme. Den ene vil indeholde sulfastofferne, og den anden de stoffer, der vurderes i nærværende undersøgelse, plus aminopyrimidin og methylurethan, som er vurderet i den tidligere omtalte kemikalieinventering.

De undersøgelser, omfattende GP's kemiske analyser og toksicitetstest, der refereres til i denne rapport, er således også foretaget på det nuværende samlede spildevand /31, 33/.

På basis af GP's kemiske screeningsundersøgelser er beregnet følgende sammensætning af det nuværende spildevand (alle tal angivet som kg/uge i tilløb til GP's rensningsanlæg i uge 16 og uge 34 i 1983).

	Tilløb uge 16, 1983	Tilløb uge 34, 1983
Sulfastoffer	1700	6400
Methylurethan	1300	4200
Aminopyrimidin	-	300
Eddikesyre	10400	14000
Alkoholer	3500	2800
Øvrige	2100	200 *

* Omfatter kun 7 af de stoffer, der er behandlet i kemikalieinventeringen

Tabel 1.1 Ugemængder (i kg) af stoffer tilført GP's rensningsanlæg (alle tal afrundet til nærmeste 100).

2. FORMAL

Formålet med kemikalieinventeringen har været at tilvejebringe relevante fysisk-kemiske og økotoxikologiske data for de omfattede stoffer og derefter at foretage en vurdering af stoffernes skæbne i GP's biologiske rensningsanlæg og videre i recipienten. Specielt er størrelsesordenen af stoffernes mulige akkumulering i fisk søgt vurderet. Også stoffernes toksicitet over for akvatiske organismer er søgt vurderet.

3. OMFANG

De resterende 68 stoffer på GP's stofliste, som ikke tidligere er vurderet, forekommer i meget forskellige mængder i spildevandet. Kun nogle få er detekteret i spildevandet efter rensning /31/. I de følgende tabeller er foretaget en sortering af stofferne efter følgende kriterier:

- Den tilførte ugemængde af stoffet til GP's rensningsanlæg
- Detektion af stoffet i spildevandet efter rensningsanlægget
- En vurdering af stoffets karakter, baseret på erfaring fra tidligere kemikalieinventeringer
- Vurdering af tilgængeligheden af oplysninger om stofferne.

Herved er fremkommet en liste bestående af:

- hvoraf
60 er
vurderet
af GP
(stofgrupper)*
- 28 stoffer + 1 stofgruppe med 8 stoffer, som er vurderet på baggrund af den litteratur, der fremkommer ved en grundig EDB-søgning
 - 24 stoffer, som er vurderet på basis af håndbogslitteratur eller parallelslutning til sammenlignelige stoffer
 - 8 stoffer, som ikke er vurderet, fordi de bl.a. forekommer i meget lave koncentrationer i afløbet.

I tabel 3.1 er givet en oversigt over, hvorledes litteratursøgningen er foretaget for de enkelte stoffer. Stofferne i tabel 3.1 er opdelt efter den ugentlige mængde, hvori de tilføres GP's rensningsanlæg.

I den øvrige del af rapporten, bortset fra vurderingsafsnittet - kapitel 7 - er stofferne opdelt alfabetisk efter anvendt navn (se f.eks. tabel 3.2).

Det skal bemærkes til tabel 3.1, at ifølge GP betyder et nej ud for kolonnen "detekteret i afløbet", at der er søgt efter stoffet, men at stoffet ikke er fundet, fordi koncentrationen var under detektionsgrænsen.

Mængde tilført GP's rensningsanlæg > 100 kg/uge	Detekteret i afløb fra rensningsanlæg	Detektions- grænse mg/l	Niveau for litteraturvurdering EDB-sægning	Håndbogs- litteratur	Vurderes ikke
Eddikesyre	ja	0,5			+
Methanol	ja	0,5			+
Ethanol	ja	0,2			+
2-methyl-2-propyl- 1,3-propandiol	nej	0,5	+		
Sorbitol	nej	50			+
Acetone	nej	5			+
n-propanol	ja	0,2			+
Pyridoxin, HCl		1,0	+		
Methylformiat (+methylal)	nej	0,5			+
Methylacetat	nej	0,5			+
Thiokrom	nej	5	+		
Thiazolon	nej	2	+		
Thiopyrimidopyrimidin	nej	2	+		
Isobutanol	nej	0,7			+

Tabel 3.1a Indholdsstoffer i Grindsted Products A/S' urensede spildevand, der er til stede i mængder større end 100 kg/uge.
Niveau for litteraturvurdering

Mængde tilført GP's rensningsanlæg 10-100 kg/uge	Detekteret i afsløb fra rensningsanlæg	Detektions- grænse mg/l	Niveau for litteraturvurdering Håndbogs- Vurderes EDB-sægning litteratur ikke
Malonsyre	?	ca. 0,5	+
2-methylpyridoxin	nej	1	+
Hydroxy(aminomethyl-) pyrimidin	nej	2	+
Furathiazolidin	nej	2	+
Oxythiazolon	nej	2	+
Bispyrimidin	nej	2	+
alfa-methoxymethylen- beta-methoxypropionitril	nej	2	+
beta-methoxypropionitril	nej	2	+
3,4-Xyldin	nej	0,4	+
Methylethyketon	nej	0,2	+
Phenol	nej	0,1	+
Methylisobutylcarbinol	ja	0,2	+
m-cresol	ja	0,15	+
Anilin	ja	0,05	+

Tabel 3.1b Indholdsstoffer i Grindsted Products A/S' urensede spildevand, der er til stede i mængder mellem 10 og 100 kg/uge. Niveau for litteraturvurdering

Mængde tilført GP's rensningsanlag 1-10 kg/uge	Detekteret i afløb fra rensningsanlag	Detektions- grænse mg/l	Niveau for litteraturvurdering Håndbogs- Vurderes EDB-søgning litteratur ikke
n-butylacetat	nej	0,3	+
Ethylacetat	nej	0,5	+
2,3-Xyldin	nej	0,4	+
3,4-Xylenol	nej	1	+
Acetanilid	nej	1	+
3,3-dimethoxy-2-(methoxy- methyl)propenenitril	nej	2	+
Trimethoxypropionitril	nej	2	+
4,6-dimethylpyrimidin	nej	0,5	
4,6-dimethyl-5-chlor- pyrimidin	nej	0,5	+
2,4,6-trimethyl- 3-chlor-pyridin	nej	0,5	
4-methyl-5-acetyloxazol	nej	1	+
2,4-dimethyl-5-acetyloxazol	nej	1	+
Mesityloxid	nej	0,2	+
5-Allyl-5-(pent-2-yl)- barbitursyre	nej	0,1	+
dimethylcyklohexenon	nej	0,5-1	+
Bis-(4-methylpent-2-yl)ether	nej	0,2	+
alfa-chlor-alfa-aceto- gamma-butyrolacton	nej	1	+
Malonestre	nej	1	som gruppe
2-methoxymethyl- glutaronitril	nej	2	+

Tabel 3.1c Indholdsstoffer i Grindsted Products A/S' urensede spildevand, der er til stede i mængder mellem 1 og 10 kg/uge.
Niveau for litteraturvurdering

Mængde tilført GP's rensningsanlag < 1 kg/uge	Detekteret i afløb fra rensningsanlag	Detektions- grænse mg/l	Niveau for litteraturvurdering Håndbogs- EDB-sagning	Vurderes litteratur ikke
4-Brom-o-Xylen	nej	1	+	
o-Xylen	nej	0,5		+
5-Allyl-5-(pent-3-yl)- barbitursyre	nej	0,04	+	
Dipropyleddikesyre	nej	1		+
2,4,6-Trimethyl-3,5- dichlorpyridin	nej	1	+	+
Dimethylphthalat	nej	0,05		++*
Diethylphthalat	nej	0,05		++*
2,4,6-Trimethylpyrimidin	nej	1	+	
2,4,5,6-Tetramethylpyrimidin	nej	1	+	
Dimethylcyclohexen-2-on-1	nej	0,2		+
Butandiolmonoacetat	nej	1		+
4-chloranilin	nej	0,04		+
2-chloranilin	nej	0,04		+

* iflg. GP er disse stoffer fremkommet ved en kontaminering af prøven ved udtagning og analyse /79/

Tabel 3.1d Indholdsstoffer i Grindsted Products A/S' urensede spildevand, der er til stede i mængder mindre end 1 kg/uge.
Niveau for litteraturvurdering

Kemikalieinventeringen er hovedsagelig baseret på en litteraturgennemgang. For en del af stofferne har det ikke været muligt at fremskaffe de nødvendige data. Dette skyldes for nogle stoffers vedkommende, at sådanne data ikke har kunnet findes i litteraturen, for andre stoffers vedkommende, at den pågældende litteratur ikke har kunnet fremskaffes. I disse tilfælde er nogle af de miljømæssige egenskaber skønnet på grundlag af kemisk struktur.

4. LITTERATURSØGNING

Den gennemførte litteraturundersøgelse har været baseret på følgende:

1. Gennemgang af materiale fremsendt af GP.
2. Gennemgang af tilgængelig håndbogslitteratur.
3. Litteratursøgning på Dialog database via VKI's on'line system. Der er søgt på følgende files:

<u>Nr.</u>	<u>Navn</u>	<u>Periode</u>
308-311,320	Chemical Abstracts (CA)	1967-1984
5,55,255	Biosis	1969-1984
117	Water Resources Abstracts	1968-1984

Søgestrategien har bl.a. omfattet brugen af følgende descriptorer:

Overordnede descriptorer:

- Stofnavne
- Synonymer
- CA-registreringsnumre.

Underordnede descriptorer (alle afledninger af nedenstående):

- Biodegrad
- Biological-oxidat
- Microbiol
- Hydrolysi
- Biomagnific
- Bioaccum
- Toxic
- Octanol-water-coeff
- Adsorpt
- Sorpt

I Chemical Abstracts er der endvidere søgt på følgende underordnede descriptorer:

- Physicochemical
- Solubility
- Acidit

En del af den relevante litteratur foreligger kun på mindre tilgængelige sprog (russisk, polsk, japansk, etc.) og har derfor ikke kunnet udnyttes.

For en række stoffer har det ikke været muligt at fremskaffe oplysninger fra litteraturen om nedbrydelighed og toksicitet overfor akvatiske organismer, til trods for, at litteratursøgningen har været ret omfattende. Dette skyldes enten at der ikke er foretaget undersøgelser af stofferne eller at oplysningerne ikke er publicerede i tilgængelige tidsskrifter.

I tabel 3.2 er der foretaget en sammenstilling af en række nøgleoplysninger af betydning for litteraturundersøgelsen. Det skal bemærkes, at der er søgt på de engelsksprogede synonymer. For malonestre er der alene søgt på CAS-numre.

Anvendt stofnavn	Bruttoformel	Cas-nr.	Synonymer
Acetanilid	C ₈ H ₉ NO	103-84-4	n-phenylacetamid
Acetone	C ₃ H ₆ O	67-64-1	Acetone dimethylketon
5-Allyl-5-(pent-2-yl)barbitursyre	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃	76-73-3	-
5-Allyl-5-(pent-3-yl)barbitursyre	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃	66941-66-0	-
Anilin	C ₆ H ₅ N	62-53-3	phenylamin aminobenzen
bis-(4-methylpent-2-yl)ether	C ₁₂ H ₂₆ O	intet	-
bispyrimidin	C ₁₂ H ₁₇ N ₇	intet	-
4 brom-o-xylen	C ₈ H ₉ Br	583-71-1	4-Brom-1,3-dimethylbenzen
ISO-butanol	C ₄ H ₁₀ O	78-83-1	isopropylcarbinol isobutanol
n-butylacetat	C ₆ H ₁₂ O ₂	123-86-4	butylethanoat
o-chloranilin	C ₆ H ₆ NCl	95-51-2	2-chlorophenylamin
p-chloranilin	C ₆ H ₆ NCL	106-47-8	4-chlorophenylamin
m-cresol	C ₇ H ₈ O	108-39-4	3-methylphenol
3,3-dimethoxy-2-(methoxymethyl) propenenitril	C ₇ H ₁₁ NO ₃	intet	-
2,4-dimethyl-5-acetyloxazol	C ₇ H ₉ NO ₂	23012-25-1	1-(2,4 dimethyl- 5-oxazolyl) ethanon
4,6-dimethyl-5-chlorpyrimidin	C ₆ H ₇ ClN ₂	75712-75-3	5-chloro-4,6 dimethyl- pyrimidin
dimethylphthalat	C ₁₀ H ₁₀ O ₄	133-11-3	methylphthalat
4,6-dimethylpyrimidin	C ₆ H ₈ N ₂	1558-17-4	-
Eddikesyre	C ₂ H ₄ O ₂	64-19-7	-
Ethanol	C ₂ H ₆ O	64-17-5	-
Ethylacetat	C ₄ H ₈ O ₂	141-78-6	Acetic ether ethylethanoat
Furathiazolidin	C ₁₂ H ₁₆ N ₄ OS ₂	intet	-
hydroxy(amino-methyl) pyrimidin	C ₆ H ₉ N ₃ O	intet	5-(aminomethyl)-2- methyl-4-pyrimidinol
malonsyre	C ₃ H ₄ O ₄	141-82-2	methandicarboxylsyre
mesityloxid	C ₆ H ₁₀ O	141-79-7	4-methyl-3-penten-2-on
methanol	CH ₄ O	67-56-1	-
alfa-methoxymethylen- beta-methoxypropionitril	C ₆ H ₉ NO ₂	1608-82-8	-
beta-methoxypropionitril	C ₄ H ₇ NO	110-67-8	2-methoxymethyl-propionitril
2-(methoxymethyl)- glutaronitril	C ₇ H ₁₀ N ₂ O	intet	(R,S)-2-(methoxymethyl)- 1,5-pentanedinitril
2-methyl-2-propyl- 1,3-propanediol	C ₇ H ₁₆ O ₂	78-26-2	-
4 methyl-5-acetyl- -oxazol	C ₇ H ₉ NO ₂	intet	1-(4-methyl-5-oxazolyl)ethan
Methylacetat	C ₃ H ₆ O ₂	79-20-9	-
Methylal	C ₃ H ₈ O ₂	109-87-5	dimethoxymethan
Methylformiat	C ₂ H ₄ O ₂	107-31-3	-
Methylethylketon	C ₄ H ₈ O	78-93-3	2-butanon
Methylisobutyl-carbinol	C ₆ H ₁₄ O	108-11-2	methylamylalkohol
2-Methylpyridoxin	C ₉ H ₁₃ NO ₃	19804-15-0	-

fortsættes

Tabel 3.2 Stofoplysninger af relevans for litteratursøgningen (stofferne ordnet alfabetisk efter anvendt navn)

Anvendt stofnavn	Bruttoformel	Cas-nr.	Synonymer
Oxythiazolon	C ₁₂ H ₁₆ N ₄ O ₂ S	490-82-4	-
Phenol	C ₆ H ₆ O	108-95-2	-
n-propanol	C ₃ H ₈ O	71-23-8	-
pyridoxin-HCl	C ₈ H ₁₂ NO ₃ Cl	58-56-0	
Sorbitol	C ₆ H ₁₄ O ₆	50-70-4	-
2,4,5,6-Tetramethylpyrimidin	C ₈ H ₁₂ N ₂	22868-80-0	-
Thiazolon	C ₁₂ H ₁₆ N ₄ OS ₂	92-35-6	
Thiokrom	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ OS	92-35-6	2,7-dimethylthiachromin-8 ethanol
Thiopyrimidopyrimidin	C ₇ H ₈ N ₄ S	intet	-
Trimethoxypropio-nitril	C ₇ H ₁₃ NO ₃	1608-83-9	(R,S)-3,3 dimethoxy-2-(methoxymethyl)propanenitril
2,4,6-trimethyl-pyrimidin	C ₇ H ₁₀ N ₂	22114-27-8	-
2,4,6-trimethyl-3-chlorpyridin	C ₈ H ₁₀ ClN	intet	-
2,4,6-trimethyl-3,5-dichlorpyridin	C ₈ H ₉ Cl ₂ N	13958-96-8	-
3,4-Xylenol	C ₈ H ₁₀ O	95-65-8	3,4-dimethylphenol
2,3-Xylidin	C ₈ H ₁₁ N	87-59-2	2,3-dimethylbenzamin
3,4-Xylidin	C ₈ H ₁₁ N	95-64-7	3,4-dimethylbenzamin

Tabel 3.2 Stofoplysninger af relevans for litteratursøgningen (stofferne ordnet alfabetisk efter anvendt navn).

Anvendt stofnavn	Bruttoformel	Cas-nr.	Synonymer
Ethylisoamylmalonester	C ₁₄ H ₂₆ O ₄	76-72-2	-
Ethylisoamylmalonester	C ₁₄ H ₂₆ O ₄	77-24-7	-
Diethylmalonester	C ₁₁ H ₂₀ O ₄	77-25-8	-
Malonester	C ₇ H ₁₂ O ₄	105-53-3	-
Ethylmalonester	C ₉ H ₁₆ O ₄	133-13-1	-
Isopropylmalonester	C ₁₀ H ₁₈ O ₄	759-36-4	-
Diallylmalonester	C ₁₃ H ₂₀ O ₄	3195-24-2	-
Isobutylmalonester	C ₁₁ H ₂₀ O ₄	10203-58-4	-

Tabel 3.3 Malonestre

5. KEMISKE STOFFERS MILJØMESSIGE SKÆBNE OG EFFEKT

En række fysiske, kemiske og biologiske processer påvirker koncentrationen af kemiske stoffer i vand. Disse processer omfatter fotokemisk nedbrydning, hydrolyse, oxidation, fordampning, adsorption, sedimentation, bioakkumulering og biologisk nedbrydning. Processerne vil alle have indflydelse på vurderingen af stoffernes skæbne og effekt i en recipient og/eller i et rensningsanlæg (særskilt omtalt i afsnit 5.4).

I dette afsnit vil relevansen af processerne kort blive gennemgået. Det må bemærkes, at litteraturen vedrørende skæbnen af specifikke stoffer er sparsom, og det er derfor ofte nødvendigt at foretage kvalitative vurderinger af stoffernes skæbne og transportprocesser i recipienten.

Afsnittet indeholder desuden en omtale af kemiske stoffers toksicitet og af toksicitesundersøgelser.

5.1. Transportprocesser

Fordampning

Fordampning af organiske kemikalier fra vand til atmosfæren kan være en vigtig transportvej for stoffer med et højt damptryk og lav vandopløselighed.

Der foreligger i dag matematiske modeller, på basis af hvilke det er muligt at beregne en halveringstid for et stof, der elimineres fra en vandig recipient udelukkende på grund af fordampning. /4/.

Adsorption

Adsorption af kemiske stoffer til suspenderet stof og bundsediment er en anden proces af stor betydning for transportforholdene i det akvatiske miljø og i rensningsanlæg. For neutrale organiske stoffer er graden af adsorption afhængig af mængden af organisk stof i sedimentet, stoffets vandopløselighed og stoffets fordelingskoefficient imellem oktanol og vand.

Adsorption er stigende med øget indhold af organisk kulstof i sedimentet og øget oktanol/vandfordelingskoefficient, men faldende med stoffets evne til at oploses i vand. Adsorptionen kan beregnes på empirisk grundlag ud fra kendskab til stoffets oktanol/vandfordelingskoefficient og sedimentets eller det suspenderede stofs indhold af organisk stof /2, 4, 5, 23, /

5.2. Kemiske processer

Fotolyse

Fotolyse af kemiske stoffer opløst i vand forekommer ved bølgelængder større end 290 nm (ozon i stratosfæren bortfiltrerer lys med kortere bølgelængde og mere energi).

Fotokemiske omdannelser kan ske på en eller flere måder afhængig af den kemiske struktur og forekomsten af andre stoffer i miljøet.

Direkte fotolyse sker, når et kemisk stof absorberer lys og undergår en ændring via en eller flere mekanismer (omlejring i molekyler, dissociering, oxidation, osv.). Hastigheden for denne reaktion afhænger af lysintensiteten, stoffets absorptionskoefficient og effektiviteten af omdannelsen af absorberet lys til en kemisk reaktion.

Det er ofte vanskeligt at sætte en halveringstid på disse processer, så tit må man nøjes med at konstatere, at stoffet kan omdannes fotokemisk.

Andre kemiske reaktioner

Kemisk omdannelse af organiske stoffer i vandigt miljø vil oftest være hydrolysereaktioner, (dvs. spaltning af stoffet ved reaktion med vand) eller oxidationsreaktioner.

Hydrolysereaktioner er generelt nogle af de bedst kendte omdannelsesreaktioner. Hastighedskonstanterne for hydrolyse af et givet stof under forskellige fysisk-kemiske forhold kan bestemmes ved laboratorieforsøg og benyttes til forudsigelse af den hastighed, hvormed stoffet vil hydrolyses i et vandigt system, når pH og temperatur er kendt. Der findes endvidere visse muligheder for teoretisk beregning af hydrolysehastigheder for stoffer, som man ikke har eksperimentelle data for /2/. Hydrolysehastigheder kan i akvatiske systemer påvirkes katalytisk af andre tilstedeværende stoffer, ligesom bl.a. sorptionsforholdene kan spille ind.

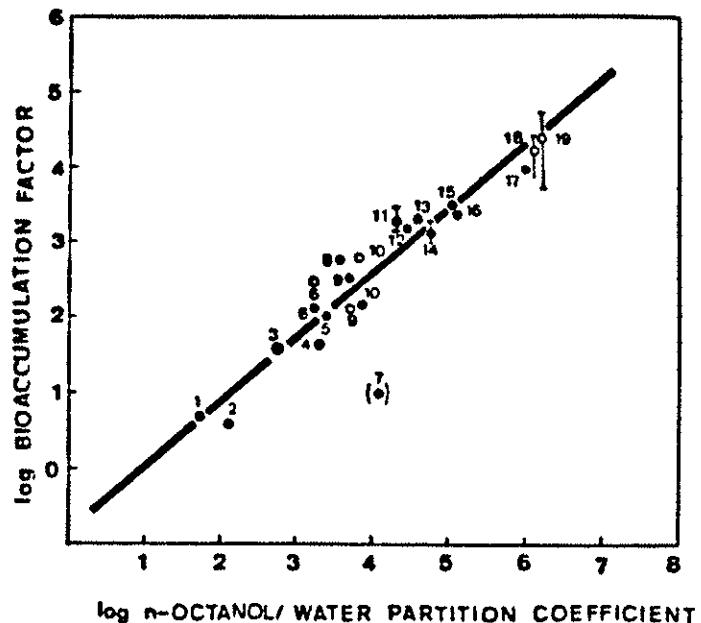
5.3. Biologiske processer

Bioakkumulering

Bioakkumulering af kemiske stoffer i levende organismer er vist at resultere i signifikante økologiske effekter. Bioakkumuleringen er specielt knyttet til hydrofobe stoffer, som kan gå ind i organismernes fedtvæv. Biokoncentreringsfaktoren (BCF) er almindeligvis defineret som koncentrationen i væv divideret med koncentrationen i vand.

Der er vist en række gode korrelationer imellem BCF, oktanol/vandfordelingskoefficienten (P_{OW}) og stoffernes vandopløselighed /6, 11, 13, 23, 24, 25, 26/. Et eksempel herpå er vist i figur 5.1.

Korrelationerne er brugbare ved vurdering af stoffernes bioakkumuleringspotentiale, og data for log P_{OW} og vandopløselighed er derfor medtaget i denne rapport.



Figur 5.1 Sammenhæng mellem oktanol/vandfordelingskoefficient og bioakkumuleringsfaktor i muslinger /25/.

Biologisk nedbrydning

Bionedbrydning er resultatet af en enzymkatalyseret omdannelse af kemiske stoffer. Organismerne kræver energi, kulstof og andre næringsstoffer til vækst. Ved denne proces dannes enzymer, som kan omdanne/nedbryde kemiske stoffer, som tilføres miljøet. Den biologiske nedbrydning i jord og akvatiske miljøer forårsages primært af mikroorganismer, og omdannelsesforårsaget af makroorganismer regnes normalt som ubetydelig. Bionedbrydningshastigheden er under givne miljøforhold en funktion af den mikrobielle biomasse og af koncentrationen af det kemiske stof.

Nedbrydningsforløbet kan beskrives matematisk, og det er ofte muligt under antagelse af en simpel første ordens kinetik at beregne den tid, der går

inden et kemiske stofs koncentration som følge af bionedbrydning er reduceret til 50% ($t_{1/2}$).

Når et kemisk stof initialt tilføres miljøet, går der ofte en vis tid, fra mikroorganismerne udsættes for stoffet, og til der sker en biologisk nedbrydning. Dette tidsrum kaldes lagperioden.

Lagperioden kræves, for at organismene kan producere de nødvendige enzymer eller udvikle nye enzymsystemer, evt gennem mutationer.

En lagperiode kan dog også være forårsaget af, at der kun er et meget lille antal mikroorganismer til stede, som kan producere de nødvendige enzymesystemer. Endelig kan lagperioden også skyldes, at mikroorganismerne "foretrækker" et lettere nedbrydeligt stof end det tilførte.

Akvatiske systemer indeholder en lang række organiske forbindelser, såvel naturlige som miljøfremmede. Nogle organiske forbindelser bliver kun nedbrudt/omdannet, hvis der er andre organiske stoffer til stede, der kan tjene som kulstof- eller energikilde.

Metoder til bestemmelse af den biologiske nedbrydning af et stof tilsat som eneste kulstof- eller fosfatkilde kan derfor underestimere den virkelige nedbrydning i miljøet.

Af øvrige miljøfaktorer spiller især temperaturen, koncentrationen af næringssalte og tilstedeværelse af ilt en vigtig rolle.

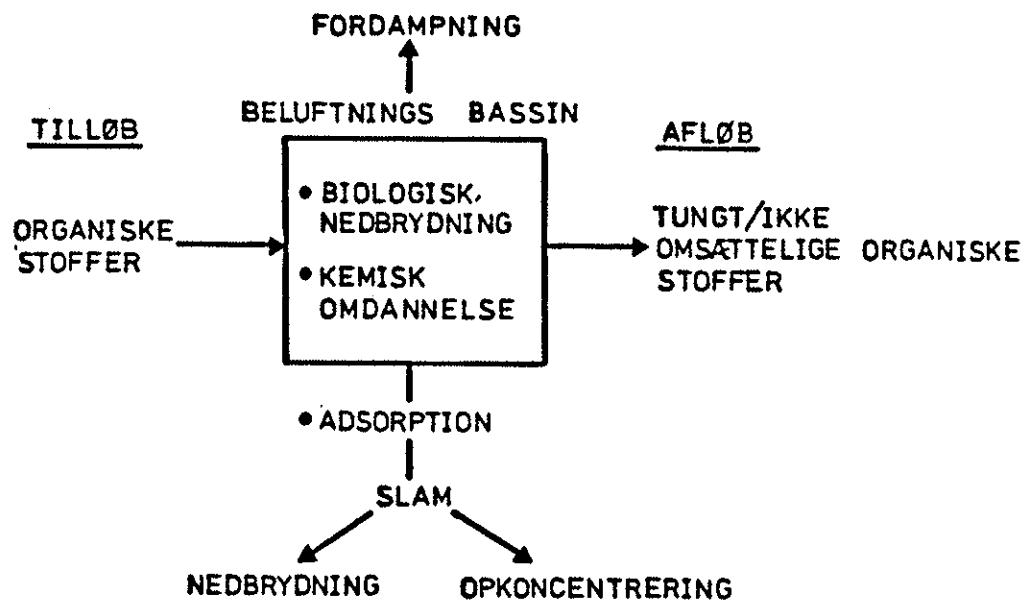
Nedbrydningshastigheden falder med temperaturen, og mængden af næringsalte kan på visse tider af året være begrænsende for nedbrydningen af organiske stoffer.

5.4. Stoffernes skæbne i rensningsanlæg

I mekanisk/biologisk rensningsanlæg kan fjernelsen af organiske stoffer fra vandfasen i store træk ske på en eller flere af følgende måder (se figur 5.2):

- ved sorption til slam og dermed bundfældning,
- Ved fordampning til atmosfæren (i beluftede anlæg kaldet stripning),
- ved kemisk omdannelse (f.eks. hydrolyse, oxidation, fotokemisk nedbrydning, udfældning),
- ved biologisk nedbrydning.

Hvilke af disse processer, der har betydning, afhænger af en række forhold, herunder det organiske stofs fysisk-kemiske egenskaber og dets koncentration i indløbet til rensningsanlægget samt af rensningsanlæggets driftsform og øvrige belastningsforhold.



Figur 5.2 Principskitse for organiske stoffers skæbne i et biologisk rensningsanlæg.

Erfaringerne vedrørende organiske stoffers skæbne i rensningsanlæg er baseret på undersøgelser af aktiverede slamanlæg, skivefiltre og laboratoriemodeler af disse /27, 28, 29, 30/.

5.5. Toksicitet

Ved undersøgelse af et stofs toksicitet udsættes testorganismér for forskellige koncentrationer af stoffet i en såkaldt fortyndingsrække. Ud fra undersøgelsen beregnes normalt den koncentration, som har en bestemt (oftest 50%) effekt på den observerede testorganisme.

Den valgte metode vil ofte have en vis indflydelse på resultatet, idet fysisk-kemiske faktorer kan påvirke testsystemet. Det gælder f.eks. temperatur, salinitet, lysstyrke, pH. Det er dog ikke muligt at

generalisere for disse faktorers indflydelse. Også fodring/ikke fodring af dyr under testen kan have indflydelse, idet teststoffet kan adsorbere til foderet, og ved dyrets indtagelse af foderet kan virkningen af stoffet enten formindskes, fordi koncentrationen falder, eller (antageligt sjældent) øges, fordi stoffet har specifikke effekter, når det indtages med føden. I korttidstest vil fodring normalt ikke finde sted.

Længden af en test vil som regel påvirke resultatet, idet den koncentration, som skal til for at udøve en vis effekt, vil være mindre, jo længere tid stoffer kan udøve effekten.

Endelig vil testorganismens følsomhed være afgørende for det opnåede resultat.

Når der, som i denne undersøgelse, er tale om organiske stoffer, synes ferskvands- og saltvandsorganismer generelt at have samme følsomhed. Der er langt større forskel mellem organismegrupperne indbyrdes. Krebsdyr er generelt en følsom gruppe over for de her behandlede stoffer, og fisk er mindre følsomme. Følsomheden hos bakterier, protozoer og alger varierer en del fra stof til stof. Også inden for de enkelte organismegrupper kan der være store forskelle i følsomhed, ligesom forskellige udviklingsstadier af en organisme har forskellige følsomheder. F.eks. vil embryoner og yngel af fisk være mere følsomme end de voksne dyr.

Det er forventeligt, at koncentrationer, der i laboratoriet er dødelige for en organisme, også i naturen vil være det overfor en organisme med samme følsomhed. Men koncentrationer, der i laboratoriet giver sig udslag i subletale effekter, f.eks. i

form af ændret adfærd, kan i naturen føre til døden for en organisme, idet den ændrede adfærd medfører, at organismen kan blive et let bytte for rovdyr og/eller ikke selv formår at fange sit bytte.

Undersøgelser af subletale effekter er imidlertid fåtallige sammenlignet med antallet af undersøgelser af letale effekter.

Det vil derfor ofte være nødvendigt at anvende en skønsmæssig ansat sikkerhedsfaktor på resultater fra letalitetstest, når man ønsker at fastlægge koncentrationsniveauer, som kan anses for værende uden risiko for miljøet på langt sigt.

6. STOFBESKRIVELSER

6.1. Struktur og fysisk-kemiske data

I bilag 2 ses strukturformlerne for en udvalgt del af stofferne, som er omfattet af kemikalieinventeringen. Ethanol, eddikesyre og lignende stoffer med simple strukturformler er ikke medtaget i bilag 2.

I forbindelse med beregning af eller skøn over de kemiske stoffers miljømæssige egenskaber, såsom adsorptionsforhold, akkumuleringsforhold og fordampningsforhold anvendes en række fysisk-kemiske data for stofferne. Disse data er, i det omfang de har kunnet findes i litteraturen, angivet i bilag 1.

Organiske stoffers oktanol/vandfordelingskoefficient, P_{ow} , anvendes som omtalt som beregningsgrundlag for adsorption til sediment og for bioakkumulering. Oktanol/vandfordelingskoefficienten anvendes desuden i en lang række andre fordelingssystemer, og der kan derfor i litteraturen findes værdier for overordentlig mange organiske stoffer. Dette har dannet grundlag for empiriske regler for beregning af P_{ow} ud fra et stofs struktur. Til beregning af fordelingskoefficienter ud fra nært beslægtede stoffer er disse empiriske regler særdeles anvendelige, mens usikkerheden er større ved beregning direkte ud fra stoffets struktur.

Fordelingskoefficienterne kan i mange tilfælde findes for andre fordelingssystemer end oktanol/vand. Disse fordelingskoefficienter kan med rimelig sikkerhed omregnes til oktanol/vandfordelingskoefficienter på grundlag af empiriske formler /2/.

Fordelingskoefficienten er angivet som fordeling af det uioniserede stof, hvilket vil sige, at fordeling af ioniserbare stoffer vil være påvirket af den aktuelle pH-værdi, således at fordelingsforholdet falder med stigende ioniseringsgrad. Med kendskab til stoffets pK_a -værdi kan effekten af ionisering beregnes. På grund af usikkerhed omkring pK_a bestemmelserne af en række af de stoffer, der indgår i denne rapport, er der ikke taget hensyn til ioniseringens betydning for akkumuleringen.

6.2. Nedbrydelighed

6.2.1. Biologisk nedbrydning

Et specifikt organisk stofs mulighed for at nedbrydes i et biologisk rensningsanlæg er nært knyttet til stoffets fysisk-kemiske egenskaber, struktur, koncentration, anlæggets driftsform etc.

I tabel 6.1 er der foretaget en sammenstilling af litteraturdata, der belyser stoffernes biologiske nedbrydning i såvel et biologisk rensningsanlæg, som i en ferskvandsrecipient. Der er specielt lagt vægt på data vedrørende nedbrydelighed i aerobt miljø. For nogle stoffer, f.eks. eddikesyre og ethanol, er litteraturen vedrørende nedbrydelighed meget omfattende, og de angivne data i tabel 6.1 er derfor udvalgt som repræsentative for de gennemførte undersøgelser.

Det ses, at en række af stofferne i tabel 6.2 er fundet nedbrydelige under forhold, der svarer til forholdene i et rensningsanlæg. Det formodes, at alle stofferne i tabel 6.1 nedbrydes under gunstige

* Es werden darüber noch nicht genauer gesagt, ob es gegenwärtig begrenzt

forhold. Under forhold, der har en vis lighed med forholdene i ferskvandsrecipienter, er stofferne o-chloranilin og 2-methyl-2-propyl-1,3-propandiol fundet langsomt nedbrydelige.

For en lang række stoffer er der ikke fundet eksperimentelle data for nedbrydelighed.

Vurderingen af disse stoffers nedbrydelighed er derfor baseret på parallelslutning fra andre stoffer med en vis strukturlighed, og må derfor kun tages som retningsgivende.

De øvrige stoffer falder stort set i fire grupper:

- 1) substituerede pyridiner
- 2) substituerede pyrimidiner, herunder større ringstrukturer,
- 3) nitriler
- 4) malonestre

Substituerede pyridiner er især blevet undersøgt af det japanske CITI /32, 38/. På basis af disse undersøgelser konkluderes, at pyridinerne substitueret med -OH og -COOH er letnedbrydelige, medens amino-og halogensubstituerede pyridiner er svært nedbrydelige.

Der foreligger ingen undersøgelse af ringmethylerede pyridiner, men hvis man paralleliserer over til benzener, formodes disse at være nedbrydelige, forudsat at der kun er 1-2 methylgrupper på aromatringen. /32, 39, 38, 44, 46/.

På basis af disse vurderinger formodes 3-chlor-2,4,6-trimethylpyridin og 3,5-dichlor-2,4,6-trimethylpyridin at være svært nedbrydelige.

Det er dog muligt, at methylgrupperne kan omdannes til COOH-grupper, hvorved tendensen til at stofferne bioakkumuleres kan mindskes.

Hvis de substituerede pyrimidiner antages at udvise lignende nedbrydelighedsforhold som pyridinerne, formodes 4,6-dimethylpyrimidin at kunne nedbrydes medens det er yderst usikkert, om de øvrige kan nedbrydes.

De øvrige pyrimidiner og stoffer, hvori pyrimidinstrukturen indgår er med undtagelse af furathiazolidin fundet naturligt i mikroorganismer, idet stofferne hos nogle fungerer som pro-vitamin B₁, hos andre som lavpotent pro-anti-vitamin B₁.

En række undersøgelser /18, 48, 49/ peger på, at tetrahydrofuranringen kan åbnes ved biologiske processer, hvorved stoffer omdannes til oxythiazolon.

Generelt vurderes uforgrenede nitriler som relativt letnedbrydelige /32, 38/. Beta-methoxypropio-nitril forventes derfor at være nedbrydeligt. De øvrige nitriler er forgrenede og indeholder et kvaternært bundet kulstof, hvilket erfaringsmæssigt formindsker stoffernes nedbrydelighed /43, 45, 47/.

Halogenerede xylener /32, 45/ og ethere er erfaringsmæssigt svært nedbrydelige. Det forventes derfor, at 4-brom-o-xylen og bis (4-methylpent-2yl) ether er relativt stabile.

Stofnavn	Testbetingelse	Miljø	Registreret biologisk omdannelse	Ref.
Acetanilid	Aktiveret slamanlæg ved 20°C. Belastning 50 mg/l. Aktiveret slamanlæg 20°C. Belastning 14,7 mg/COD/g BOD_{10}	Aerobt aktiveret slam (akklimatiseret) " " " SSTS/time Standard BOD	51-78% af ¹⁾ ThOD 94,5% af ²⁾ COD 40% af ThOD	1 1 1
Acetone	Aktiveret slamanlæg ved 20°C. Belastning 333 mg/l BOD_5 BOD_{20}	Aerobt aktiveret slam (akklimatiseret) Standard BOD-podevand	Hhv. 47 og 86% COD-fjernelse 30-56% af ThOD 78-84% af ThOD	1 1 1
Anilin	Aktiveret slamanlæg ved 20°C fjernelse ved 20°C ved belastning på 19,0 mg COD/g SSTS/time (stoffet givet som eneste kulstofkilde) BOD_5 BOD_{20}	Aerobt rensningsanlæg (adapteret) Ferskvand Ferskvand	94,5% COD 53% af ThOD 75% af ThOD	1 1
Butylacetat	BOD_{20} BOD_5	Ferskvand Standard BOD-podevand	65,7% af ThOD 75-52% af ThOD	1 1
isobutanol	Aktiveret slamanlæg ved 20°C belastning 500 og 333 mg/l BOD_5	Aerobt aktiveret slam (akklimatiseret) Aerobt Standard BOD	Hhv. 44 og 98% af ThOD fjernet 64% af ThOD	1 1
o-chloranilin	OECD confirmatory Test	Aerobt aktiveret slam	10% COD-fjernelse	48
p-chloranilin	OECD confirmatory Test Havvandingsscreeningstest, initialkonc. 13 mg COD pr. l ved 15°C Havvandssimulerings-test, initialkonc. 1-4 mg/l ved 15°C	Aerobt aktiveret slam Aerobt havvand Aerobt havvand	85% COD-fjernelse 0% DOC, fjernelse efter 103 døgn Halvering af stofkoncentration efter 91-95 døgn	48 17 17
m-cresol	Aktiveret slamanlæg Fjernelse efter 3 timer ved 1 og 10 mg/l, men kun 4% ved 100 mg/l 95,5% nedbrydning ved en belastning på 55 mg COD/g SSTS/time BOD_5	Aerobt rensningsanlæg (uadapteret) Aerobt rensningsanlæg (adapteret) Aerobt ferskvand	96% af m-cresol omdannet til $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$ bedømt på baggrund af COD målinger 95,5% m-cresol omdannet til $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$ 68% ThOD	1 1 1
Eddikesyre	Aktiveret slamanlæg Oxidation af 500 mg stof efter 12 timers beluftning Oxidation ved belastning med hhv. 333 og 716 mg/l v. 20°C BOD_{20}	Aerobt i rensningsanlæg (akklimatiseret) Aerobt aktiveret slamanlæg Aerobt ferskvandsmiljø	50% af ThOD 99% fjernelse af ThOD 96% af ThOD	/49/ 1 1

Tabel 6.1 Bionedbrydelighedsdata
(fortsættes)

Stofnavn	Testbetingelse	Miljø	Registreret biologisk omdannelse	Ref.
Ethanol	Aktiveret slamanlæg	Aerobt rensningsanlæg (akklimatiseret)	24-51% ThOD 99% DOC fjernelse	1,19
	BOD ₅ BOD ₂₀	Standard BOD-podevand	37-74% ThOD 75-84% ThOD	1 1
Ethylacetat	B			
	BOD ₂₀	Aerobt standard-podevand	53,8% af ThOD	1
Malonsyre	BOD ₂₀	Mikroorganismer fra jord	53% af ThOD	1
	BOD ₅	Standard BOD-podevand	38% af ThOD	1
mesityloxid	BOD ₅	Standard BOD-podevand	65% af ThOD	1
methanol	Aktiveret slamanlæg	Aktiveret slam (akklimatiseret)	55% af ThOD	1
		Aktiveret slam (ikke akklimatiseret)	3-30% af ThOD	
	BOD ₅ BOD ₂₀	Standard BOD-podevand	48-76% ThOD 67-97% ThOD	1
2-methyl-2-propyl-1,3-propanediol	OECD's guidelines Modificeret MITI-test 25± 2°C	Mikroorganisme fra rensnings-anlæg	10-12% af ThOD 4-17% DOC	37
Methylal	Aktiveret slamanlæg 20°C belastning 333 mg/l. (30 dage akklimatisering)	Aerobt aktiveret slam	88% COD fjernelse	1
Methylisobutyl- - carbinol	BOD ₅	Standard podevand	BOD ₅ = 81,5% COD	1
	Aktiveret slamanlæg		85% af COD fjernes	19
Methylethylketon	BOD ₅ BOD ₂₀	Standard BOD-podevand	46-91% af ThOD 79% af ThOD	1 1
Phenol	Aktiveret slamanlæg ved 29°C COD fjernelse af stoffet som eneste kulstofkilde ved belastning på 80 mg/g SSTS/time	Aerobt aktiveret slam (adapteret)	98,5% COD fjernelse	1
	BOD ₅ BOD ₂₀		33-90% af ThOD 96% af ThOD	1 1
n-propanol	Aktiveret slamanlæg COD fjernelse af stoffet som eneste kulstofkilde ved belastning på 71 mg COD/g SSTS/time	Aerobt aktiveret slam		
	BOD ₅	Aerobt	30-50% af ThOD	1
	OECD's Screenings Test	Aerobt	70% af DOC	1

Tabel 6.1 Bionedbrydelighedsdata
(fortsættes)

Stofnavn	Testbetingelse	Miljø	Registreret biologisk omdannelse	Ref.
3,4-Xylenol	Aktiveret slamanlæg ved 20°C. Belastning 13,4 mg COD/g SSTS/time COD-fjernelse af stoffet som eneste kulstofkilde BOD_5 BOD_5	Aerobt aktiveret slam-(adapteret) Standard BOD pode-materiale Mikroorganismær fra phenol nedbrydningsanlæg	97,5% COD-fjernelse 57% af ThOD 65% af ThOD	1 1 1
2,3 Xylidin	Aktiveret slamanlæg ved 20°C. COD-fjernelse af stoffet som eneste kulstofkilde ved belastning på 12,7 mg COD/g SSTS/time	Aerobt aktiveret slam	96,5% COD-fjernelse	1 48,49
3,4 Xylidin	Aktiveret slamanlæg ved 20°C. COD-fjernelse af stoffet som eneste kulstofkilde ved belastning på 30 mg COD/g SSTS/time	Aerobt aktiveret slam	76% COD-fjernelse	48,49

1) ThOD = teoretisk iltforbrug

2) BOD = biokemisk iltforbrug

3) COD = kemisk iltforbrug

Tabel 6.1 Bionedbrydelighedsdata.

I tabel 6.2a ses rensningsgraden af enkelte af stofferne i GP's spildevand baseret på analyser af ind- og udløbsprøver i uge 16 og 34 i 1982.

Det ses, at alle stofferne fortrinsvis viser høj rensningsgrad bortset fra o-chloranilin, som viser moderat rensningsgrad. For de øvrige stoffer har en nedbrydelighedsgrad i rensningsanlægget ikke kunnet beregnes enten på grund af manglende analysedata, eller fordi stofkoncentrationen i indløb var under detektionsgrænsen.

For stofferne p-chloranilin, 2,3 -xylidin og 3,4-xylidin ligger et stort analysemateriale til grund for bedømmelsen af nedbrydningen i rensningsanlægget. Tabel 6.2.b.

Ved disse analyser er der for p-chloranilin i 22 tilfælde fundet 90% nedbrydning og derover, i 3 tilfælde mellem 80 og 90% og i 2 tilfælde mellem 69 og 80%.

For 2,3-xylidin er der i 3 tilfælde fundet over 90% nedbrydning, i 34 tilfælde mellem 80 og 90% og 2 tilfælde viste henholdsvis 55 og 7% nedbrydning.

Den konstaterede lave nedbrydning på 7% er reel nok, men kan ikke siges at være særlig hyppig (1 ud af 39 målinger). Denne måling er derfor ikke medtaget i tabel 6.2.b, idet det må forventes at anlægget normalt renser stoffet bedre.

3,4-xylidin viste i 22 tilfælde over 90%, i 1 tilfælde mellem 80 og 90% medens de to øvrige viste henholdsvis 74 og 80% nedbrydning.

Resultatet af analyserne er som det ses ved en sammenligning med tabel 6.1 i overensstemmelse med, at det forventedes af stofferne kunne nedbrydes.

Organiske analyser	Rensningsgrad i %
Acetone + methylacetat	62 - 98
Methanol	> 99
Ethanol	89 - 98
n-propanol	>40 - >99
iso-butanol	90 - 95
Methylisobutylcarbinol	> 90
Anilin	> 88 - 97
m-cresol	> 95
Eddikesyre*	> 99
o-Chloranilin	> 38
Thiazolon	> 80
Thiokrom	> 72
Methylethylketan	> 97
2-methyl-2-propyl-1,3-propandiol	> 98
Pyridoxin HCl	> 97
Methylpyridoxin	> 85
Rensningsgrad for TOC	88 (uge 16)

* analyseret som natriumacetat

Tabel 6.2a Rensningsgrad i % for en række indholdsstoffer i spildevand fra GP's renningsanlæg i uge 16 i 1983 ved vandføring 10356 m³/uge og TOC på 15475 kg/uge og i uge 34 i 1983 ved vandføring 8590 m³/uge og 18000 kg TOC/uge

Organiske analyser	Rensningsgrad i %
2,3-Xyldin	55 - 95
3,4-Xyldin	74 - > 98
p-Chloranilin	69 - > 96
Rensningsgrad for TOC	88 (uge 16)

Tabel 6.2.a Rensningsgrad i % for 2,3-Xyldin, 3,4-Xyldin og p-Chloranilin analyser fra perioden 1984. 01. 09 til 1984.06.25 fra ind- og afløb af internt rensningsanlæg.

Ved beregningen af procentvis nedbrydning i tabel 6.2 a og b er anvendt de data, hvor enten indløbskoncentrationen er mere end 10 gange større end detektionsgrænsen eller, hvor stoffer er detekteret i afløbet.

6.2.2. Abiotisk nedbrydelighed

Litteratursøgningen vedrørende abiotisk nedbrydelighed af stofferne har især focuseret på de stoffer, som ikke er biologisk let nedbrydelige (se herom i afsnit 6.2.1).

Thiopyrimido-pyrimidin, furathiazolidin, oxythiazolon, thiazolon, thiokrom og bispyrimidin hydrolyserer meget langsomt i pH-området 6-8, under frigivelse af aminopyrimidin og opbrydning af den øvrige ringstruktur. Det sidste gælder dog ikke bispyrimidin, der hydrolyserer under spaltning til aminopyrimidin og 4-amino-5-(hydroxymethyl)-2-methylpyrimidin.

4-amino-5-(hydroxymethyl)-2-methylpyrimidin, amino-pyrimidin samt hydroxy (aminomethyl) pyrimidin er derimod indifferente over for vand i pH-området 6-8. De er dog ikke helt indifferente over for kombinationen O_2 + variabelt valente metalioner. Stofferne må formodes at undergå en oxidation, men meget langsommere end eksempelvis anilin og phenol, idet 2 stk. N-atomer i den aromatiske ring drastisk forøger oxidationspotentialet (i forhold til anilin og phenol).

(Fotokemiske reaktioner i medium til nær-ultraviolet (290-350 nm) er mulige, specielt fotokemiske oxidationer, men da vand er lidet transparent for ovennævnte stråling, vil fotokemi næppe have praktisk betydning.)

For de ringmetylerede pyridiner og pyrimidiner gælder, at samtlige 8 stoffer er alle af en sådan kemisk indifferens, at ren kemisk omdannelse/nedbrydning ikke er tænkelig, idet stofferne ikke angribes af vand, O_2 , variabelt valente metalioner, svage syrer eller svage baser. (De kan reagere fotokemisk i medium til nær-ultraviolet (sollys), men vil næppe i nævneværdigt omfang møde den krævede stråling, for hvilken vand er lidet transparent).

For nitrilerne gælder, at den vigtigste abiotiske proces, som kan foregå i vand i pH-området omkring neutralitet og i temperaturområdet omkring 10°C, er hydrolyse af nitrilgrupperne til amider og siden til carboxylsyrer og ammoniak. Halveringstiden for denne proces under disse omstændigheder skønnes til måneder eller år.

Alle stofferne er ethere og kan peroxidere under indvirkning af synligt til ultraviolet lys fra (methoxymethyl)-gruppens methylendel under dannelse af hydroperoxider, peroxider og alkoholer.

Trimethoxypropionitril er desuden en acetal og hydrolyserer som sådan til methanol og aldehyd. For at opnå en rimelig hydrolysehastighed kræves dog en syrekatalyse.

6.3. Akkumulerbarhed

6.3.1. Opkoncentrering i sediment

Uladede hydrofobe organiske stoffer vil i et system med vand og sediment have en tendens til at forlade vandfasen og gå over i sedimentet, /5/.

Der er opstillet korrelationer, som viser en sammenhæng mellem stoffernes Pow og sedimentets indhold af organisk kulstof. Der gælder, at jo større Pow og jo større indhold af organisk kulstof i sedimentet, des større er indholdet af det fordelte stof i sedimentet i forhold til vandfasen.

Korrelationerne gælder kun for uladede stoffer, men kan formodentlig også anvendes for ladede stoffer, hvis man ved et givet pH kun regner med den del, der er på neutral form.

For ladede stoffer kan ionbytning og udfaldning også have betydning, men der er ikke opstillet simple sammenhænge herfor, som muliggør beregning ud fra fysisk-kemiske stofegenskaber.

I tabel 6.3 ses K_p , som er forholdet mellem koncentrationen i sediment og vand, beregnet for stofferne ud fra korrelationen /5/:

$$\log K_{OC} = \log P_{OW} - 0,21, \quad r^2 = 1,00$$
$$\text{og } K_p = K_{OC} \cdot OC,$$

hvor OC er brøkdelen af organisk kulstof i sedimentet, OC er her sat til 10%.
 K_p er sorptionskonsanten.

6.3.2. Biokoncentrering

Biokoncentreringsfaktoren (BCF), som for et givet stof og en given akvatisk organisme udtrykker forholdet mellem stoffets koncentration i henholdsvis organismen og vandfasen (under ligevægtsforhold), kan beregnes ud fra empiriske sammenhænge mellem BCF og stoffets P_{OW} -værdi. Denne type korrelationer er etableret på baggrund af forsøg med upolære, og uladede stoffer, dvs. stoffer, som i organismen hovedsagelig findesopløst i lipidstrukturer.

I tabel 6.3 er BCF for hvert af de 54 stoffer beregnet på basis af de fundne oktanol/vandfordelingskoefficienter ved hjælp af regressionsligningen:

$$\log BCF = 0,542 \cdot \log P_{OW} + 0,124, \quad r^2 = 0,95$$

Denne korrelation er opstillet på basis af forsøg med optagelse af organiske stoffer i regnbueørred i et gennemstrømningssystem /2, 6/. Regnbueørred er en "fed" fisk og vil derfor give anledning til større BCF-værdier end mindre fede fisk. De herved bestemte BCF-værdier kan derfor forventes at være miljømæssigt mere på den "sikre" side end bestem-

melser foretaget på grundlag af forsøg med mindre fede fisk (f.eks. fathead minnow). Med de aktuelle værdier af log P_{ow} medfører brugen af ovennævnte korrelation til gengæld en ekstrapolation af anvendelsesområdet til P_{ow} -værdier, der ligger en del under det område, hvori korrelationen er fastlagt. Ved beregningen er der ikke taget hensyn til en eventuel ionisering af stofferne i recipienten, hvilket i givet fald vil formindsk biokoncentreringen i lipidholdigt væv. De fundne BCF-værdier må derfor betegnes som vejledende og som angivelser af størrelsesordenen af biokoncentreringen i bl.a. ørredfisk.

For en række af stofferne er biokoncentringsfaktoren BCF beregnet på basis af vandoploseligheden (S) i (ppm) /2/:

$$\log BCF = 2,791 - 0,564 \cdot \log S \quad r^2 = 0,49$$

For denne korrelation gælder samme overvejelse som nævnt ovenfor.

Anvendt stofnavn	Bruttoformel	Cas-nr.	Log P _{ow}	S μmol/l (ppm)	K _p (OC = 10%)	BCF beregnet (exp.)
Acetanilid	C ₈ H ₉ NO	103-84-4	1,16		0,89	5,66
Acetone	C ₃ H ₆ O	67-64-1	-0,24		0,04	0,99
5-Allyl-5-(pent-2-yl)barbitursyre	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃	76-73-3	1,65		2,75	10,43
5-Allyl-5-(pent-3-yl)barbitursyre	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃	66941-66-0	1,65		2,75	10,43
Anilin	C ₆ H ₇ N	62-53-3	0,90		0,49	4,09
bis-(4-methylpent-2-yl)ether	C ₁₂ H ₂₆ O	intet				
bispymidin	C ₁₂ H ₁₇ N ₇	intet				
4 brom-o-xylen	C ₈ H ₉ Br	583-71-1	3,79		380	150
ISO-butanol	C ₄ H ₁₀ O	78-83-1	0,83		0,42	3,75
n-butylacetat	C ₆ H ₁₂ O ₂	123-86-4	?	(14000)		2,10
o-chloranilin	C ₆ H ₆ NCl	95-51-2	1,83		4,17	13,06
p-chloranilin	C ₆ H ₆ NCl	106-47-8	1,90		4,90	14,25
m-cresol	C ₇ H ₈ O	108-39-4	1,96		5,62	15,36
3,3-Dimethoxy-2-(methoxymethanyl) propenenitril	C ₇ H ₁₁ NO ₃	intet				
2,4-dimethyl-5-acetyloxazol	C ₇ H ₉ NO ₂	23012-25-1	0,97		0,575	4,46
4,6-dimethyl-5-chlorpyrimidin	C ₆ H ₇ ClN ₂	75712-75-3	1,33		1,32	7,00
4,6-dimethylpyrimidin	C ₆ H ₈ N ₂	1558-17-4	0,62		0,25	2,80
Eddikesyre	C ₂ H ₄ O ₂	64-19-7	-0,17		0,04	1,08
Ethanol	C ₂ H ₆ O	64-17-5	-0,32		0,03	0,89
Ethylacetat	C ₄ H ₈ O ₂	141-78-6	0,70		0,31	3,19
Furathiazolidin	C ₁₂ H ₁₆ N ₄ OS ₂	intet				
hydroxy(amino-methyl) pyrimidin	C ₆ H ₉ N ₃ O	intet				
malonsyre	C ₃ H ₄ O ₄	141-82-2	-0,18		0,04	1,06
mesityloxid	C ₆ H ₁₀ O	141-79-7	?	(28000)		4,39
methanol	CH ₄ O	67-56-1			0,013	0,58
alfa-methoxymethylene- beta-methoxypropionitril	C ₆ H ₉ NO ₂	1608-82-8				
beta-methoxypropionitril	C ₄ H ₇ NO	110-67-8				
2-methoxymethyl- glutaronitril		intet				
2-methyl-2-propyl- 1,3-propandiol	C ₇ H ₁₂ O ₂	78-26-2	0,11		0,08	1,53
4 methyl-5-acetyl- -oxazol	C ₆ H ₇ NO ₂	23012-19-3	0,31		0,126	1,96
Methylacetat	C ₃ H ₆ O ₂	79-20-9	0,18		0,09	1,67
Methylal	C ₃ H ₆ O ₂	109-87-5	0,00		0,06	1,33
Methylethylketon	C ₄ H ₈ O	78-93-3	0,26		0,11	1,84
Methylisobutyl-carbinol	C ₆ H ₁₄ O	108-11-2	1,64		2,69	10,3
2-Methylpyridoxin	C ₉ H ₁₃ NO ₃	19804-15-0	0,60		2,24	2,45
Methylformiat	C ₂ H ₄ O ₂	107-31-3	-0,37		0,03	0,84

Tabel 6.3 Beregnede sorptionskonstanter K og bio-koncentreringsfaktorer BCF.
(fortsættes)

Anvendt stofnavn	Bruttoformel	Cas-nr.	Log P _{ow}	S μmol/l (ppm)	K _p (OC = 10%)	BCF beregnet (exp.)
Oxythiazolon	C ₁₂ H ₁₆ N ₄ O ₂ S	490-82-4	-			
Phenol	C ₆ H ₆ O	108-95-2	1,46		1,78	8,23
n-propanol	C ₃ H ₈ O	71-23-8	0,34		0,13	2,03
pyridoxin-HCl	C ₈ H ₁₂ NO ₃ Cl	58-56-0	0,17		0,09	1,65
Sorbitol	C ₆ H ₁₄ O ₆	50-70-4				
2,4,5,6-Tetramethylpyrimidin	C ₈ H ₁₂ N ₂	22868-80-0	1,94		5,37	14,98
Thiazolon	C ₁₂ H ₁₆ N ₄ OS ₂	299-35-4				
Thiokrom	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ OS	92-35-3				
Thiopyrimidopyrimidin	C ₇ H ₈ N ₄ S	intet	1,40		1,54	7,63
Trimethoxypropionitril	C ₇ H ₁₃ NO ₃	1608-83-9				
2,4,6-trimethylpyrimidin	C ₇ H ₁₀ N ₂	22114-27-8	1,28		1,17	6,57
2,4,6-trimethyl-3-chlorpyridin	C ₈ H ₁₀ ClN	intet	2,43		16,6	27,61
2,4,6-trimethyl-3,5-dichlorpyridin	C ₈ H ₉ Cl ₂ N	13958-96-8	3,14		85,1	66,97
3,4-Xylenol	C ₈ H ₁₀ O	95-65-8	2,3		12,3	23,47
2,3-Xyldin	C ₈ H ₁₁ N	87-59-2	2,3		12,3	23,47
3,4-Xyldin	C ₈ H ₁₁ N	95-64-7	1,7		3,10	11,10

Tabel 6.3 Beregnede sorptionskonstanter K og bio-koncentreringsfaktorer BCF.

En absolut vurdering af talstørrelserne af de beregnede sorptionskonstanter afhænger for det enkelte stof af den udledte stofmængde, nedbrydeligheden af stoffet i Grindsted å og transport og fortynningsforholdene i åen.

Denne vurdering er søgt gennemført i afsnit 7.

Bedømt relativt ud fra størrelsen af K_p og BCF ses, at især 4-brom-o-xylen, chlorerede pyrimidiner og xylidiner må forventes at opkoncentreres i sediment og i biologisk materiale, medens opkoncentreringen af nitriler ikke kan vurderes. Et skøn baseret på strukturen af stofferne for denne sidstnævnte gruppe er, at opkoncentreringen er mindre end en faktor 10.

6.4. Toksicitet

En oversigt over enkeltstofferne toksicitet er givet i det følgende. Toksicitetsdata er angivet i bilag 3 til denne rapport.

For en række almindeligt anvendte stoffer, f.eks. acetone, ethanol, methanol er litteraturen meget omfattende, og de præsenterede data er udvalgt som repræsentative. For de stoffer, hvor der ikke er fundet eksperimentelle data, er data for struktur-analoge stoffer præsenteret, og i det omfang det har været muligt, er der foretaget analogislutninger.

Acetone

Acetones toksicitet er velundersøgt. Lavest fundne værdi for akut effekt er på 10 mg/l overfor Daphnia magna. Det skal imidlertid bemærkes, at alle andre undersøgelser af akut toksicitet har givet væsentlig højere testresultater, hvorfor værdien på 10 mg/l bør betragtes med stor skepsis.

Langtidseffekter af acetone er fundet ved en koncentration på 28 mg/l, idet der er konstateret en svag hæmmende effekt på væksten af en kultur af protozoer.

Acetanilid

Akut toksicitet overfor fisk er undersøgt, og der er fundet LC 50-værdier på ca 100 mg/l. Oplysninger om effekter på andre dyr- eller plantegrupper er ikke fundet, ligesom oplysninger om langtidseffekter ikke foreligger.

Anilin

Anilins toksiske effekter er velundersøgte. Alger og krebsdyr er fundet at være følsomme organisme-grupper.

Akutte toksiske effekter på dafnier er fundet ned til 0,1 mg/l og overfor blågrønalger er stoffet kronisk toksisk ved 0,16 mg/l (begyndende væksthæmning).

Fisk er noget mindre følsomme. Akutte effekter optræder ved koncentrationer > 20 mg/l.

En cellekultur af museceller hæmmes 30% i væksten ved 93 mg/l. Musecellerne i disse kulturer vokser enkeltvis og formerer sig ved simpel celledeling. Teknikken, der anvendes bliver derved den samme som anvendes ved tests på mikroorganismer. Testen med museceller har naturligvis ingen økologisk relevans og forholdet mellem musecells og f.eks. algecellers følsomhed varierer en del. Arsagen til, at denne test alligevel inddrages i vurderingerne er den, at der for en række stoffer kun er fundet testdata opnået med denne metode. For disse stoffers vedkommende, kan der derfor laves et groft skøn over effektniveaet overfor akvatiske organismer.

Brom-o-xylen

Der er ingen oplysninger fundet om dette stofs toksicitet.

Nogle analogislutninger fra phenol/Br-phenol og fra o-xylen/4-Br-o-xylen er derfor foretaget, hvilket kan give en indikation af et effektniveau.

Bromering af phenol giver en forbindelse, der er væsentlig mere toksisk overfor grønalgen Chlorella pyrenoidosa.

Akut toksiske effekter af o-xylen overfor krebsdyr og en alge er fundet i intervallet 1-10 mg/l.

En bromering af o-xylen vil muligvis øge toksiciteten.

Koncentrationsområdet for toksisk effekt vurderes herved at blive i det lave ppm- og ned til det høje ppb-område.

Isobutanol

Isobutanol er rimeligt velundersøgt.

Akutte effekter på krebsdyr er observeret ved 600 mg/l, mens kroniske effekter på en række mikroorganismer er konstateret i koncentrationsområdet 160-300 mg/l.

Akutte toksiske effekter på fisk forekommer ved koncentrationer højere end ca 1000 mg/l.

n-Butylacetat

n-Butylacetats toksicitet er rimeligt godt undersøgt.

Akutte toksiske effekter på krebsdyr forekommer ved ca 30-40 mg/l og på fisk ved lidt højere koncentrationer, 44-100 mg/l.

Kroniske effekter på alger (væksthæmning) er konstateret ved koncentrationer ned til 21 mg/l.

4-chloranilin

Der foreligger ingen data for toksicitet overfor mikroorganismer, men derimod for krebsdyr og fisk. Af disse er to organismer, en reje og guldrimte tillige testet overfor anilin. Den chlorerede forbindelse er ca dobbelt så toksisk overfor disse to organismer, som den ikke-chlorerede.

Akut toksiske effekter overfor krebsdyr og fisk forekommer ved koncentrationer ned til 2-3 mg/l.

Kronisk effekt overfor et saltvandskrebsdyr er konstateret ved koncentrationer ned til 0,1 mg/l, og for en rotifer angives at være effekter på reproduktionen ved koncentrationer < 10 mg/l.

m-cresol

Stoffets toksicitet er rimeligt velundersøgt. Det er knap så toksisk som ortho-forbindelsen.

Akut toksiske koncentrationer overfor fisk og krebsdyr forekommer i koncentrationsområdet 7-30 mg/l. Det ses, at yngel (embryoner) af fisk er mere følsomme end voksne individer, hvilket er almindeligt.

Kronisk toksiske koncentrationer er fundet for alger ned til 13-15 mg/l.

Stoffet er fundet at påvirke en række dyregruppers adfærd (irritabilitet) ved koncentrationsniveauet 0,5-1 mg/l.

Stoffet angives at give afsmag i fisk og havdyr ved koncentrationer fra 0,2 mg/l og opefter.

4,6-dimethylpyridin

Toksiciteten af dimethyl-, aminopyridin og andre pyridiner behandles samlet under "pyridin" på grund af de få data, der er fundet om disse.

Eddikesyre (acetat)

Eddikesyres toksiske effekter er undersøgt overfor en række forskellige organismegrupper. De angivne toksicitetsdata refererer til tilsat mængde eddikesyre. Da testsystemerne er bufrede til pH ca 6-8, vil eddikesyre være på acetatform.

Halvering af overlevelsen hos krebsdyr (LC 50-værdier) er fundet ved 32 mg/l, mens det hos fisk er højere (75 mg/l).

Algernes og protozoers vækst kan hæmmes (kronisk effekt) ved koncentrationer på ca 80-90 mg/l.

Krebsdyrene synes således at være nogle af de følsomste organismer overfor eddikesyre.

Eddikesyre påvirker også dyrs adfærd, og for et krebsdyr er fundet et irritabilitetsniveau (ændret adfærd) ved 6 mg/l, mens det for en protozo og en snegl lå lidt højere (12-15 mg/l).

Ethanol

Akut toksicitet overfor forskellige organismegrupper optræder ved koncentrationer højere end 6000 mg/l.

Kronisk toksicitet er konstateret ved 65 mg/l overfor en kultur af protozoer. Andre fundne koncentrationer med kroniske effekter er væsentlig højere.

Ethylacetat

Stoffets toksicitet er relativt velundersøgt.

Begyndende akutte effekter på krebsdyr, padde og fisk optræder i koncentrationer på 100-200 mg/l. For andre organismegrupper er fundet akutte effekter ved højere koncentrationer.

Effekter på en alges vækst (kronisk toksicitet) er konstateret ved 15 mg/l, som er laveste fundne koncentration med toksisk effekt.

Mesityloxid

Kun en enkelt reference vedrørende akut toksicitet er fundet. 540 mg/l af stoffet halverede overlevelsen af guldfisk i løbet af 24 timer.

Methanol

Den lavest fundne akut toksiske koncentration (LC 50-værdi) var for hestereje 1700 mg/l. For andre organismer er den tilsvarende værdi noget større.

Kroniske effekter er ikke fundet ved koncentrationer lavere end 530 mg/l, hvor der er begyndende væksthæmning for en blågrønalge.

2-methyl-2-propyl-1,3-propandiol

Kun en enkelt reference giver oplysninger om toksiciteten af dette stof.

Ved 625 mg/l var der igennem 96 timer ingen akut effekt på zebrafisks overlevelsesevne, mens halvdelen døde ved ca 1000 mg/l.

Methylacetat

For dette stof er kun fundet den lidt upræcise oplysning, at der på fisk er skadevirkning ved 400-1000 mg/l.

Det kan dog rimeligvis antages, at toksicitet ikke adskiller sig væsentligt fra eddikesyrens og ethylacetatets toksicitet, dvs. skønsmæssigt lidt mindre toksisk end eddikesyre og lidt mere end ethylacetat.

Methylethylketon

Lavest fundne akut toksiske koncentrationer er for fisk og krebsdyr på ca 2000 mg/l.

Kronisk toksicitet er undersøgt overfor en række mikroorganismer, og der er fundet begyndende væksthæmning i kulturer af alger og protozoer ved henholdsvis 110 og 190 mg/l.

Methylformiat

En enkelt reference angiver, at stoffet har giftvirkning overfor alger, og at giftvirkning overfor fisk ikke kan udelukkes. Tillige angives en skadelighedsgrænse på 100-120 mg/l, som må antages at referere til de nævnte organismegrupper. Ingen andre data for toksicitet er fundet.

Methylisobutylcarbinol

Kun en reference vedrørende toksicitet er fundet. Denne angiver, at koncentration på 360 mg/l halverer overlevelsen af guldfisk i løbet af 24 timer (24 t LC 50).

Phenol

Stoffet er undersøgt overfor en meget lang række organismer.

Phenol er fundet akut toksisk overfor krebsdyr og fisk ved koncentrationer ned til omkring 5 mg/l.

Kronisk toksiske koncentrationer overfor følsomme alger ligger i samme niveau.

For en rotifer angives LC 50-værdien til 600 mg/l, mens der var effekter på samme organismes reproduction ved 10 mg/l.

Adfærdsforstyrrelser hos protozoer er konstateret ved 3 mg/l.

Kulturer bestående af enkeltvoksende museceller hæmmes i væksten begyndende ved 9 mg/l og 25% ved 94 mg/l.

n-Propanol

n-Propanols toksicitet er velundersøgt. Akut toksicitet overfor fisk optræder ved koncentrationer på 200-500 mg/l og overfor krebsdyr ved 2300 mg/l.

For andre organismegrupper er der konstateret akutte effekter ved højere koncentrationer.

Laveste fundne koncentration med kronisk effekt var på 38 mg/l hvor begyndende hæmning af en protozkulturs vækst kunne konstateres.

Pyridiner

Yderst få oplysninger om pyridiners og intet om pyrimidiners toksicitet er fremskaffet.

Pyridin er fundet at hæmme bakterier ved 10 g/l. 50 mg/l af stoffet havde ingen akut effekt på en reje. Ved 9000 mg/l blev en protozo-kultur dræbt på 24 timer.

2-methylpyridin dræbte på 24 timer ved 6000 mg/l en protozo-kultur.

2,6-dimethylpyridin dræbte i løbet af 24 t en kul-
tur af en protozo ved 3500 mg/l.

4-aminopyridine var toksisk overfor fisk ved 2-7 mg/l.

Kulturer af enkeltvoksende museceller blev svagt hæmmet i deres vækst af 79 mg/l (1 mM) pyridin, 107 mg/l (1 mM) 2,6-dimethylpyridin eller 121 mg/l (1 mM) 2,4,6-trimethylpyridin.

Disse sparsomme oplysninger giver ikke et tilstræk-
keligt grundlag for en skønsmæssig ansættelse af et effektniveau overfor akvatiske organismer for de pyridiner, som indgår i denne litteraturvurdering.

En chlorering af pyridin-ringen vil muligvis øge toksiciteten.

Pyridoxine = Vitamin B⁶

For dette stof er der ikke fundet oplysninger om toksiske effekter overfor akvatiske organismer.

Ved indgivelse til hund over 100 dage med 150 mg/kg/dag opstod skader på nervesystemet.

Rotters reproductionsevne blev ikke påvirket ved indgivelse i 10 af drægtighedsperiodens dage med op til 80 mg/kg/dag.

Som vitamin er stoffet essentielt for mange organismer i såvel dyre- som planteriget.

Der er imidlertid som nævnt ikke fremskaffet angivelser af toksiske koncentrationsniveauer for akvatiske organismer.

Nitriler

alle i C6+willow

Der er fremskaffet data for fem nitrilers toksitet.

Lactonitril er fundet mest toksisk med en LC 50-værdi for fisk på 0,2 mg/l.

Malonnitril er fundet at give LC 50-værdier overfor fisk ved 1,6 mg/l efter 96 timer.

Acrylonitril er fundet at give LC 50-værdier overfor fisk på 14-25 mg/l og overfor krebsdyr på 6 mg/l.

Den lidt større (C⁶) ugrenede adiponitril er fundet at give LC 50-værdier overfor fisk på 720 mg/l og opefter.

Benzonitril er fundet at give LC 50-værdier overfor fisk ved 78-400 mg/l, medens effekter på alger er fundet ved 34 mg/l.

Det er ikke på det foreliggende grundlag muligt at skønne over effektorådet for de nitriler, der findes i GP's spildevand.

3,4-xylenol

Fisk synes følsomme organismer overfor 3,4-Xylenol. Der er fundet LC 50-værdier for fisk fra 7 mg/l og opefter.

På krebsdyr er der begyndende akutte effekter ved ca 15 mg/l.

På alger er der fundet effekter på væksten (kronisk toksicitet) fra ca 50 mg/l.

Toksiciteten af xylenoler med methylgrupperne i forskellige positioner synes ikke at variere meget.

Xylidiner

For 2,4-xylidin foreligger et rimeligt bedømmelsesgrundlag for toksisk effekt, mens der for 2,3-, 2,5- og 2,6-xylidin er data for effekt på vækst i musecellekulturer. 1 mM af de tre stoffer (121 mg/l) hæmmer musecellernes vækst med 10-16%.

Dette kunne tyde på, at som for xylenolerne betyder stillingen af methylgrupperne ikke noget væsentligt for stoffernes toksicitet, hvorfor xylidiners effektniveauer kan skønnes ud fra effektniveauerne fundet for 2,4-xylidin.

Akutte effekter på en fisk er observeret i koncentrationsintervallet 100-200 mg/l. Der er ikke fundet toksicitetsdata for krebsdyr, hverken for akut eller kronisk effekt.

Kroniske effekter på mikroorganismer (alger, bakterier og krebsdyr) forekommer fra 5-12 mg/l.

7. VURDERING AF SKÆBNE OG EFFEKT I RENSNINGSANLÆG OG RECIPIENT

7.1. Vurderingsgrundlag

I de følgende afsnit vil skæbne og effekt af de 68 indholdsstoffer (heraf 1 stofgruppe med 8 stoffer) blive søgt vurderet i relation til den fremtidige udledningssituation. (Se i øvrigt afsnit 1).

Grundlaget for vurderingen er dels den ovenfor nævnte litteraturgennemgang, dels nogle forudsætninger vedrørende udledningen.

Forudsætningerne vedrørende udledningen vil blive beskrevet i dette afsnit.

Som det er fremgået af litteraturgennemgangen er data om ca halvdelen af stofferne - de stoffer, som tilføres rensningsanlægget i de højeste mængder - så fyldestgørende, at det er muligt at foretage en relativ sikker vurdering af skæbnen og effekten af stofferne i rensningsanlæg og recipient.

For den øvrige del af stofferne - især pyrimidiner, pyridiner og nitriler, er litteraturen meget sparsom, og vurderingen af skæbnen og effekten er baseret på skøn og parallelslutninger. For enkelte stoffer har det ikke været muligt at foretage parallelslutninger fra stoffer med lignende strukturer.

Fra GP oplyses det, at de stoffer, der er omfattet af denne kemikalieinventering i den fremtidige situation kan forventes udledt i ca 1000 m^3 spilde-

vand pr døgn. Inden udledning til Grindsted å opblandes spildevandet med yderligere 1000 m³ pr døgn fra sulfarensning /34/.

På dette grundlag er der i tabel 7.1 a-d opstillet en oversigt over de koncentrationer af de undersøgte stoffer, der kan forventes udledt til Grindsted å.

Den angivne forventede koncentration i indløb til Grindsted å er fremkommet på følgende måde:

- 1) enten som den analyserede koncentration i udløb fra GP's rensningsanlæg baseret på analyser foretaget enten i uge 16, uge 26 eller uge 34 i 1983 /31/.
- 2) eller som detektionsgrænsen for stoffer i vandige prøver. Dette tal er anvendt hvor koncentrationen i indløb til rensningsanlægget er højere end detektionsgrænsen, medens den i afløbet er lavere. Der er altså tale om, at fjernelse af stoffet i rensningsanlægget iflg. tabel 6.2a og b bringer koncentrationen i afløb fra rensningsanlæg ned under detektionsgrænsen. Disse tal er baseret på ovennævnte analysedata, og især delstrømsanalyser.
- 3) eller som afløbskoncentration, beregnet på basis af delstrømsanalyser af mere koncentrerede spildevandsstrømme. Disse tal er anvendt, hvor såvel stoffets indløbs- som afløbskoncentration fra rensningsanlægget har været lavere end detektionsgrænsen.

Det oplyses, at medianminimumsvandføringen i Grindsted å omkring udledningspunktet er ca $1 \text{ m}^3/\text{s}$. Med denne værdi som grundlag fås efter opblanding af den udledte spildevandsmængde på $2000 \text{ m}^3/\text{døgn}$ ($= 0,023 \text{ m}^3/\text{s}$) med åvandet en fortyndning af spildevandet på ca 43 gange.

7.2. Vurdering af toksicitet i forhold til beregnet recipientkoncentration

De resulterende stofkoncentrationer efter fuld opblanding af spildevandet i åvandet er vist i tabel 7.1, hvor stofkoncentrationerne endvidere er sammenstillet med tilgængelige data om enkeltstoffernes toksiske effekter på akvatiskne organismer.

Det ses, at en lang række stoffer, f.eks. methanol, eddikesyre, ethanol forekommer i koncentrationer, der efter initialfortyndning er mere end 1000-10.000 gange under grænsen for målte toksiske effekter (tabel 7.1).

For ingen af de stoffer, hvis toksicitetsniveau kendes, ligger koncentrationen efter initialfortyndning nær de koncentrationer, der er vist toksiske. Den mindste margin på ca en faktor 100-350 er for anilin, 3,4-xylenol og acetone.

For de stoffer, hvor en toksicitetsgrænse ikke er fundet er den beregnede recipientkoncentration af disse stoffer: for sorbitol mindre en $1,2 \text{ mg/l}$, for thiokrom mindre end $0,130 \text{ mg/l}$. For alle øvrige stoffer herunder pyridiner, pyrimidiner og nitriler er koncentrationen mindre end $0,05 \text{ mg/l}$.

Som det fremgår af afsnit 6.4 blev toksiske effekter af uchlorerede pyridiner fundet ved 2-3500 mg/l og for nitriler ved 0,2-720 mg/l.

En sammenligning ti de pyrimidiner, pyridiner og nitriler, der er i GP's spildevand er dog ikke mulig, og en toksicitetsgrænse kan kun fastslås ved undersøgelser heraf.

Hvorvidt stofferne også er toksiske ved de beregnede recipientkoncentrationer, vil eventuelt kunne fastslås ved eksperimentelle biotests på enten enkeltstoffer eller på en spildevandsprøve der ikke indeholder sulfastoffer.

Mængde tilført GP's renningsanleg > 100 kg/uge	Dekoreret 1 afløb fra renningsanleg	Forventet konc. i afløb til Grindsted å	Beregnet * recipient- koncentrat. (ng/l)	Akut toksisk ** effekt på mest folsome organisme (ng/l)	Kronisk toksisk** effekt på mest folsome organisme (ng/l)	Effekt konc. dividert med afløbs- konz.
Eddikesyre (acetat)	Ja	4	0,09	32	80-90	335
Methanol	Ja	5,4 ¹⁾	0,13	1700	530	4076
Ethanol	Ja	1,3 ¹⁾	0,03	<6000	65	2166
2-methyl-2-propyl- 1,3-propanediol	nej	<0,5 ²⁾	<0,01	>625	?	>62500
Sorbitol	nej	<50	2)	<1,20	?	?
Acetone	nej	<5	2)	<0,13	10	28
n-propanol	Ja	1,0 ¹⁾	0,02	38	?	>215
Pyridoxin, HCl	nej	<1,0 ¹⁾	<0,02	?	?	1900
Methylformiat (+methylal)	nej	<0,5 ²⁾	<0,01	100-200	?	>10000
Metylacetat	nej	<0,5 ²⁾	<0,01	400-1000	?	>40000
Thiokrom	nej	<5	2)	<0,13	?	-
Thiazolon	nej	<2	2)	<0,05	?	-
Thiopyrimidopyrimidin	nej	<2	<0,05	?	?	-
Isobutanol	nej	<0,7 ²⁾	<0,02	600	169	>8450

* Beregnet under forudsætning af en initialfortynding på 43 gange ved anvendelse af enten detektionsgrænse eller analyseret afløbskoncentration.

** Se afsnit 6.4,

Tabel 7.1.a-d Beregnede recipientkoncentrationer sat i relation til toksicitetsgrænser. Vedrørende fodnoter 1), 2) og 3) se tekst.

Mengde tilført GP's rensningsanlæg 10-100 kg/uge	Deketertet i afsløb fra rensningsanlæg	Forventet konc. i afsløb til Grindsted å	Beregnet * akut toksisk ** effekt på mest kronisk toksisk** afsløse-	Kronisk toksisk** effekt på mest afsløse-
		(ng/l)	recipient- konzentrat. (ng/l)	felsomme organisme (ng/l)
Malonsyre	nej	<0,5 ²⁾	<0,01	?
2-methylpyridoxin	nej	<1 2)	<0,02	?
Hydroxy(aminomethyl-) pyrimidin	nej	<2 2)	<0,05	?
Furathiazolidin	nej	<2 2)	<0,05	?
Oxythiazolon	nej	<2 2)	<0,05	?
Bispyrimidin	nej	<2 2)	<0,05	?
alfa-methoxymethylen- beta-methoxypropionitril	nej	<2 2)	<0,05	?
beta-methoxypropionitril	nej	<2 2)	<0,05	?
3,4-Xyldin	nej	<0,4 ²⁾	<0,01	100-200
Methylethyketon	nej	<0,2 ²⁾	<0,005	2000
Phenol	nej	<0,1 ²⁾	<0,002	5
Methylisobutylcarbinol	ja	<0,2 ²⁾	0,2	360
mcresol	ja	<0,15 ²⁾	<0,05	7-30
Anilin	ja	<0,05 ²⁾	<0,01	0,10

Tabel 7.1 a-d fortsat

Mengde tilført OP's renningsanlag 1-10 kg/uge	Detekteret i afsløb fra renningsanlag	Førventet konc. i afsløb til Grindsted & organisme (ng/l)	Beregnet * recipient- koncentrat. (ng/l)	Akut toksisk ** effekt på mest følsomme organisme (ng/l)	Kronisk toksisk *** effekt på mest følsomme organisme (ng/l)	Effekt konc. dividert med ar1abs- konc.
n-butylacetat	nej	<0,3 ²⁾	<0,007	30-40	21	>3000
Ethylacetat	nej	0,5 ³⁾	<0,007	100-200	15	2150
2,3-Xyldin	nej	<0,4 ²⁾	<0,009	100-200	5-12	>555
3,4-Xylenol	nej	<1 ²⁾	<0,02	7	50	>350
Acetanilid	nej	<0,4 ³⁾	<0,009	100	?	10750
3,3-dimethoxy-2-(methoxy- methyl)propanenitril	nej	<2 ²⁾	<0,05	?	?	?
Trimethoxypropionitril	nej	<2 ²⁾	<0,05	?	?	?
4,6-dimethylpyrimidin	nej	<0,5 ²⁾	<0,01	?	?	?
4,6-dimethyl-5-chlor- pyrimidin	nej	<0,5 ²⁾	<0,01	?	?	?
2,4,6-trimethyl- 3-chlor-pyridin	nej	<0,5 ²⁾	<0,01	?	?	?
4-methyl-5-acetylloxazol	nej	1 ³⁾	<0,02	?	?	?
2,4-dimethyl-5-acetylloxazol	nej	0,23 ³⁾	0,005	?	?	?
Mesityloxid	nej	0,23 ³⁾	0,005	540	2	>108000
5-Allyl-5-(pent-2-yl)- barbitursyre	nej	<0,1 ²⁾	<0,002	?	?	?
Bis-(4-nethylpent-2-yl)ether	nej	0,13	<0,003	?	?	?
Malonestre	nej	1 ²⁾	<0,02	?	?	?
2-methoxymethyl- glutaronitril	nej	2 ²⁾	<0,05	?	?	?

Tabel 7.1 a-d fortsat

Mengde tilført GPs renningsanlæg < 1 kg/uge	Detekteret i afsløb fra renningsanlæg	Forventet konc. i afsløb til Grindsted & renningsanlæg	Beregnet * recipient- koncentrat. (mg/l)	Akut toksisk ** effekt på mest organisme (mg/l)	Kronisk toksisk *** effekt på mest organisme (mg/l)	Korrekt konc. divideret med afsløbs- konc.
4-Brom-o-Xylen	nej	0,033) 0,0013)	<0,0007	<1-10	?	>1400
5-Allyl-5-(pent-3-yl)- barbitursyre	nej		<0,00002	2	?	?
2,4,6-Trimethyl-3,5- dichlorpyridin	nej	0,0013)	<0,00002	?	?	?
2,4,6-Trimethylpyrimidin	nej	0,113)	<0,003	?	?	?
2,4,5,6-Tetramethylpyrimidin	nej	0,083)	<0,002	?	?	?
4-chloranlin	nej	0,043)	<0,001	2-3	>10	>2000
2-chloranlin	nej	0,043)	<0,001	?	?	?

Tabel 7.1 a-d fortsat

7.3. Vurdering af akkumulering og nedbrydning i forhold til belastning

I tabel 7.2 a-d ses en sammenstilling baseret på den ugentlige mængde af stofferne, der tilføres rensningsanlægget. I det omfang, der er kendskab til rensningsgraden i GP's rensningsanlæg, er denne ligeledes anført i tabellen.

De stofmængder, der tilføres Grindsted å giver sammen med litteraturdata vedrørende stoffernes egenskaber (nedbrydelighed, akkumulering osv.) et vurderingsgrundlag for betydningen af belastningen af Grindsted å med miljøfremmede stoffer.

I tabel 7.2 a-d er der især præsenteret data, der belyser stoffernes mulighed for at opkoncentreres i sediment og biologisk materiale. K_p og BCF hovedsagelig er baseret på korrelationer til stoffernes fysisk/kemiske egenskaber, og ikke på eksperimentelle undersøgelser (se i øvrigt afsnit 6.1).

De stoffer, der tildedes GP's rensningsanlæg i en ugentlig mængde større end 100 kg (tabel 7.2 a) forventes for hovedparten at kunne nedbrydes og/eller fordampe fra rensningsanlæg og forventes at have en lignende skæbne i Grindsted å.

Af stofferne i denne gruppe forventes thiopyrimido-pyrimidin at opkoncentreres i biota ($BCF > 1$), men kun med en faktor ca 7. Thiokrom og thiazolon formodes at vise en opkoncentrering af samme størrelsesorden. For disse stoffer bemærkes, at de er vist at fjernes henholdsvis mere end 72 og 80% i rensningsanlægget. Ingen af de 3 stoffer er detekteret i afløb fra rensningsanlægget.

Skæbnen af stofferne, der tilføres i en mængde på 10-100 kg/uge (tabel 7.2 b) forventes for en række stoffer at være nedbrydning i rensningsanlæg og muligvis også recipient. For en række af stofferne er såvel skæbnen i rensningsanlæg som i recipient dårligt bestemt. Det må dog forventes, at der er en vis lighed mellem skæbnen af furathiazolidin, oxythiozol, hydroxy(aminomethyl)pyrimidin, bispyrimidin og thiopyrimidopyrimidin som nævnt ovenfor.

Af stofferne i denne gruppe er methylsobutylcarbinol, m-cresol og anilin påvist i afløbet fra rensningsanlægget.

Den relativt største opkoncentrering på 10-15 gange - bedømt ud fra den beregnede BCF forventes for methylisobutyl-carbinol, m-cresol og 3,4-xylidin. Som det fremgår af tabel 7.2 er disse stoffer vist nedbrydelige i rensningsanlægget. Det er usikkert om 3,4-Xyldin vil nedbrydes under forhold, der findes i overfladenvand.

I gruppen af stoffer, der tildedes GP's rensningsanlæg i en mængde på 1-10 kg/uge (tabel 7.2. c) er der ingen af de stoffer, der er data for, der formodes at opkoncentreres i biologisk materiale mere end 10 gange.

For Bis-(4-methyl-pent-2-yl)ether er beregnet en log P_{ow} på ca 6 ud fra stoffets struktur. Da beregningsmetoden er relativt usikker, synes det rimeligt at søge denne fordelingskoefficient bestemt eksperimentelt, før der drages konklusioner vedrørende den potentielle opkoncentrering af dette stof. At dette kan synes berettiget understøttes af, at stoffet ikke formodes at være biologisk nedbrydeligt.

Ingen af stofferne i denne gruppe er detekteret i afløbet fra rensningsanlægget.

I gruppen af stoffer, der tillede GP's rensningsanlæg i en ugentlig mængde på mindre end 1 kg om ugen (tabel 7.2. d) findes de stoffer, der forventes at opkoncentreres mest i sediment og biologisk materiale. Således er BCF for 4-brom-o-xylen på 150 og for 2,4,6-trimethyl-3,5-dichlorphenol 67.

Stofferne 4-brom-o-xylen og 2,4,6-trimethyl-3,5-dichlorpyridin bedømmes ud fra analogislutninger til andre stoffer at være svært nedbrydelige. Det forventes dog, at sorption til organisk stof i rensningsanlægget i en vis grad kan medvirke til at reducere den udledte stofmængde.

Ingen af stofferne i denne gruppe er detekteret i afløbet fra rensningsanlægget.

Mangde tilført GP's rensningsanleg > 100 kg/age	Dekteret i afslø fra rensningsanleg	Dektions- grænse ug/1	Skæbne 1 rensnings- anlag	Rensnings- grad 1 % (rensn.- anlag)	Sorptions- konstant K_p (OC=10%)	Biotkonzentre- ringssfaktor BCF
Eddikesyre (acetat)	Ja	0,5	nedbrydning	>99	$4 \cdot 10^{-2}$	1,0
Methanol	Ja	0,5	nedbrydning	>99	$1,3 \cdot 10^{-2}$	0,6
Ethanol	Ja	0,2	nedbrydning	89-98	$3 \cdot 10^{-2}$	0,9
2-methyl-2-propyl- 1,3-propanidiol	nej	0,5	nedbrydning	>98	$8 \cdot 10^{-2}$	1,5
Sorbitol	nej	50	nedbrydning?	?	< 1 (skøn)	< 1 (skøn)
Acetone	nej	5	nedbrydning	62-98	$4 \cdot 10^{-2}$	1,0
n-propanol	ja	0,2	nedbrydning	70->99	$1,3 \cdot 10^{-1}$	2,0
Pyridoxin, HC1	nej	1,0	nedbrydning	>97	$9 \cdot 10^{-2}$	1,7
Methylformiat (+methylal)	nej	0,5	fordampning/hydrolyse	?	$3 \cdot 10^{-2} / 6 \cdot 10^{-2}$	0,84/1,3
Methylacetat	nej	0,5	nedbr./fordampn.	62-98	$9 \cdot 10^{-2}$	1,7
Thiokrom	nej	5	nedbrydning	>72	?	?
Thiazolon	nej	2	nedbrydning	>80	?	?
Thiopyrimidopyrimidin	nej	2	?	?	1,5	7,6
Isobutanol	nej	0,7	nedbrydning	90-95	0,4	3,8

Tabel 7.2 a-d Sammenstilling af stofmængder tilført GP's rensningsanleg samt grundlag for vurdering af stoffernes skæbne i rensningsanleg og recipient.

Mangde tilfert	Dekkeret i	Dekkteret i	Sorbne i	Rensnings-	Sorptions-	Biokoncentra-
GP's reningsanlag	afslb fra	grunse	renings-	grad 1 %	konsant	ringsfaktor
10-100 kg/uge	reningsanlag	mg/l	anlag	(rensn.-	K _P	BCF
Malonsyre	?	ca. 0,5	nedbrydning	>10 ⁻²	7,1	
2-methylpyridin	nej	1	nedbrydning	>85	?	?
Hydroxy(aminomethyl-)	nej	2	?	?	?	?
pyrimidin						
Furathiazolidin	nej	2	?	?	?	?
Oxythiazolon	nej	2	?	?	?	?
Bispyrimidin	nej	2	?	?	?	?
alfa-methoxymethylen-						
beta-methoxypropionitril	nej	2	?	?	?	?
beta-methoxypropionitril	nej	2	?	?	?	?
3,4-Xyldin	0,15	0,4	nedbrydning ?	74->98	3	11
Methylketon	nej	0,2	nedbrydning	>97	0,1	1,8
Phenol	nej	0,1	nedbrydning		1,8	8,3
Methylisobutylearbinol	ja	0,2	nedbrydning	>90	2,7	10
m-cresol	0,15	0,15	nedbrydning	>95	5,6	15
Anilin	ja	0,05	nedbrydning	>88-97	0,5	4,1

Tabel 7.2 a-d fortsat

Mangde tillfert GP's renningsanläg 1-10 Yz/uge	Dekterret 1 arbet fra renningsanläg	Dekterret 1 grænse mg/1	Skabne 1 rennings- anläg	Renningar- grad 1 % (rensn.- anläg)	Sorptions- konstant K_F (OC=10%)	Biotkoncentre- ringefaktor BCF
n-butylacetat	nej	0,3	nedbrydning	?	0,14	2,1
Ethylacetat	nej	0,5	nedbrydning	2	0,3	3,2
2,3-Xyldin	nej	0,4	nedbrydning	55-95	12	23
3,4-Xylenol	nej	1	nedbrydning	?	12	23
Acetanilid	nej	1	nedbrydning	?	0,9	5,6
3,3-dimethoxy-2-(methoxy- methyl)propanenitril	nej	2	?	?	?	?
Trimethoxypropionitril	nej	2	?	?	?	?
4,6-dimethylpyrimidin	nej	0,5	nedbrydning ?	?	0,25	2,9
4,6-dimethyl-5-chlor- pyrimidin	nej	0,5	?	?	1,3	7,0
2,4,6-trimethyl- 3-chlor-pyridin	nej	0,5	?	?	16	27
4-methyl-5-acetylloxazol	nej	1	?	?	?	?
2,4-dimethyl-5-acetylloxazol	nej	1	?	?	?	?
Mesityloxid	nej	0,2	nedbrydning ?	?	0,8	4,4
5-Allyl-5-(pent-2-yl)- barbitursyre	nej	0,1	?	?	2,8	10
Bis-(4-methylpent-2-yl)ether	nej	0,2	?	?	?	?
Malonestre	nej	1	?	?	<1 (skøn)	<1 (skøn)
2-methoxymethyl- glutaronitril	nej	2	?	?	$1,2 \cdot 10^{-3}$	0,16

Tabel 7.2 a-d fortsat

Mengde tilført GP's renningsanlæg < 1 kg/uge	Dektekteret i afslø fra renningsanlæg	Dektekteret i grænse mg/l	Skabne i rennings- anlæg	Rensnings- grad i % (rensn.- anlæg)	Sorptions- konstant K^P (OC=10%)	Biotkoncentre- ringsfaktor BCF
4-Brom-o-Xylen	nej	1	sorption til slam	?	380	150
5-Allyl-5-(pent-3-yl)- barbitursyre	nej	0,04	?	?	2,8	10
2,4,6-Trimethyl-3,5- dichlorpyridin	nej	1	sorption til slam	?	85	67
2,4,6-Trimethylpyrimidin	nej	1	?	?	1,2	6,6
2,4,5,6-Tetramethylpyrimidin	nej	1	sorption til slam	?	5,4	15
4-Chloranilin	nej	0,04	nedbrydning?	69->98	4,9	14
2-chloranilin	nej	0,04	?	38	4,1	13

Tabel 7.2 a-d fortsat

8. KONKLUSION

Konklusionen er baseret på resultatet af litteraturundersøgelsen for 52 stoffer og 1 stofgruppe - stoffer som hovedsagelig stammer fra GP's produktioner, dog ikke af sulfastoffer. Konklusionen er yderligere baseret på resultatet af analyser på GP's spildevand foretaget af GP i uge 16, 26 og 34 i 1983, analyser i 1984 og herunder beregnede ugemængder og nedbrydning i rensningsanlæg samt beregnede koncentrationer i indløb til Grindsted å og efter initialfortynding.

Sidstnævnte koncentrationer er beregnet ud fra den fremtidige situation, hvor stofferne omfattet af denne kemikalieinventering forventes udledt i 1000 m^3 spildevand pr døgn, som inden udledning til Grindsted å opblandes i 1000 m^3 renset sulfaspildevand. Herved vil den samlede udledning på ca. $2000\text{ m}^3/\text{døgn}$ efter opblanding med åens vand blive fortyndet ca 43 gange, forudsat at åens vandføring kan antages at være $1\text{ m}^3/\text{Time}$.

Stoffernes skæbne og effekt i rensningsanlæg og recipient er bedømt ud fra kriterierne:

- nedbrydning
- tendens til opkoncentrering i sediment og biologisk materiale
- toksicitet, sat i relation til recipient-koncentrationer
- udledt mængde af stof (belastning).

På basis af resultatet af GP's kemiske analyser på ovennævnte spildevandsprøver kan stofferne opdeles i 3 grupper af enkeltstoffer.

- Jærling se side 5/6*
- 1) Stoffer, der er detekteret i afløbet fra rensninganlægget omfattende: Eddikesyre (acetat), Methanol, Ethanol, n-propanol, Methylisobutylcarbinol, m-cresol og Anilin.

Disse stoffer nedbrydes i rensningsanlægget og må formodes også at kunne nedbrydes i recipienten.

Den beregnede recipientkoncentration ligger for Anilin mere end 100 gange under grænsen for toksiske effekter.

For de øvrige stoffer ligger recipientkoncentrationen 335-18000 gange under grænsen for toksiske effekter.

Alene n-cresol og Isobutylcarbinol formodes at kunne opkoncentreres omend i mindre grad i sediment og biologisk materiale.

- 2) Stoffer, som ikke er detekteret i afløbet, men som tilføres Grindsted å i en mængde på mere end 10 kg/uge, omfatter Sorbitol, Acetone, Thiokrom, Thiazolon, Thiopyrimidopyrimidin, Hydroxy-(aminomethyl)pyrimidin, Furathiozolidin, Oxythiazolon, Bispyrimidin og Alfa-methoxymethen-beta-methoxypropionitril.

Skæbnen og effekten af disse stoffer i rensningsanlæg og recipient bortset fra acetone er behæftet med betydelig usikkerhed p.g.a. sparsomme litteraturoplysninger. Acetone er vist at nedbrydes i rensningsanlæg og recipient, og forventes ikke at opkoncentreres i sediment og biologisk materiale.

En svag opkoncentrering - mindre end 10 gange - i sediment og biologisk materiale forventes bedømt ud fra stofstrukturen.

Nitrilerne forventes bortset fra beta-methoxypropionitril at være relativt stabile i rensningsanlæg og recipient, men stoffernes forventes ikke at opkoncentreres i sediment og biologisk materiale.

Den toksiske effekt af disse er ikke undersøgt overfor vandlevende organismer.

- 3) De resterende stoffer er ikke detekteret i afløbet fra rensningsanlægget og forventes at tilføres Grindsted å i en koncentration mindre end 1 mg/l svarende til mindre end 10 kg/uge.

Af disse stoffer skiller især 4-brom-oxylen, 2,4,6-trimethyl-3-chlorpyridin og 2,4,6-trimethyl-3,5-dichlorpyridin og muligvis også Bis-(4methyl-pent-2-yl)-ether sig ud fra de øvrige stoffer. De formodes at være tungtnedbrydelige i rensningsanlæg og recipient, og stofferne skønnes tillige at opkoncentreres i betydelig grad i sediment og biota.

Biokoncentreringsfaktoren BCF for 4-bromoxylen er beregnet til 150, og for 2,4,6-trimethyl-3,5-dichlorpyridin til 67 gange. Måske kan methylgrupperne i sidstnævnte stof omdannes til carboxylgrupper, hvorved tendensen til at biokoncentreres mindskes.

De ovennævnte stoffer udledes til Grindsted å i en ugentlig mængde, der er mindre end 300 g. For stofferne, hvoraf der udledes mindre end 10 kg/uge er der ikke kendskab til, om stofferne kan have en toksisk effekt ved de beregnede recipientkoncentrationer på under 0,05 mg/l. Dette kan kun fastslås ved eksperimentelle undersøgelser

Toksiciteten af spildevand indeholdende stofferne omfattet af denne kemikalieinventering vil være en kombination - ofte additiv - af effekten af enkeltstofferne toksitet. Den samlede toksitet af det sulfafri spildevand bestemt overfor Daphnia magna viste ingen signifikante akutte effekter ved mere end 10 ganges fortynning af spildevand.

9. REFERENCER

- /1/ Verschueren, K.:
Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, 2nd Ed.
Van Nostrand Reinhold Company, 1977.
- /2/ Lyman, W.J., W.F. Reehl & D.H. Rosenblatt (Eds.):
Handbook of Chemical Property Estimation Methods.
Environmental Behaviour of Organic Compounds.
McGraw-Hill, 1982.
- /3/ Windholz, M. (Ed.):
The Merck Index. 10th Edition.
Merck & Co. Inc., Rahway, N.J., USA, 1983.
- /4/ Roberts, J.R. et al.:
A Screen for the Relative Persistence of Lipophilic Organic Chemicals in Aquatic Ecosystems. - An Analysis of the Role of a Simple Computer Model in Screening.
National Research Council of Canada, pp. 157-171, 1981.
- /5/ Karickhoff, S.W., D.S. Brown & T.A. Scott:
Sorption of Hydrophobic Pollutants on Natural Sediments. Water Res. 13, pp. 241-248, 1979.
- /6/ Leo, A., C. Hansch & Elkins:
Partition Coefficients and their Uses.
Chemical Reviews 71, (6), pp. 525-616, December 1971.
- /7/ Wells, Martha J.M., Clark, C. Randall, Patterson, Richard M.:
Correlation of reversed-phase capacity factors for barbiturates with biological activities, partition coefficients, and molecular connectivity indexes.
J. Chromatogr. Sci.: 19, (11) pp 573-82, 1981

- /8/ Frater-Schroeder, M.:
Neurotoxic effects of pyridoxine and analogs
in rats.
Proc. Eur. Soc. Toxicol. 17, pp. 277-284, 1976.
- /9/ Stryjek, Roman, Rogalski, Marek, Treszczanowicz,
Teresa, Luszczynska, Marek:
Vapor-liquid equilibrium and mutual solubility
of the .beta.-methoxypropionitrile-water system.
Bull. Acad. Pol. Sci., Ser. Sci. Chim.: 26, (24),
pp. 327-35, 1978.
- /10/ Valvani, S.C., Yalkowsky, S.H., Roseman, T.J.:
Solubility and partitioning. IV: Aqueous solubi-
lity and octanol-water partition coefficients of
liquid nonelectrolytes.
Pharm. Res. Upjohn Co. Kalamazoo USA, MI. 49001.
J. Pharm. Sci.: 70 (5), pp. 502-7, 1981.
- /11/ Gossett, R.W., D.A. Brown and David R. Yong:
Predicting the bioaccumulation of organic compounds
in marine organisms using Octanol/Water Partition
coefficients.
Marine Pol. Bull. 14, pp. 387-392, 1983.
- /12/ Watanabe, Jun., Kozaki, Akio:
Drug distribution in the body. Part II. Relation-
ship between partition coefficients and apparent
volumes of distribution for basic drugs. II.
Fac. Pharm. Sci. Nagoya City Univ., Nagoya.
Chem. Pharm. Bull.: 26 (11), pp. 3463-70, 1978.
- /13/ Geyer, H., R. Wiswanathan, D. Freitag & F. Korte:
Relationship between water solubility of organic
chemicals and their bioaccumulation by the alge
chlerella.
Chemosphere, 11, pp. 1307-1311, 1981.

- /14/ Konemann, H., Zelle, R., Busser, F., Hammers, W.F.:
Determination of log Poct values of chloro-substituted benzenes, toluenes and anilines by high-performance liquid chromatography on ODS-silica.
Inst. Vet. Pharmacol. Toxicol. Univ. Utrecht, Utrecht, Neth. 3572 BP.
J. Chromatogr.: 178 (2), pp. 559-65, 1979.
- /15/ Chou, W. Lin, Speece, R.E. & Rashid H. Siddiqi:
Acclimation and degradation of petrochemical wastewater components by methane fermentation.
Drexel Univ., Philadelphia, USA, PA. 19104.
Biotechnol. Bioeng. Symp.: 8, pp. 391-414, 1979.
- /16/ Janicke, W. & G. Hilge:
Behaviour of synthetic organic compounds in wastewater treatment. Measurement of biological elimination of chloroanilines.
Inst. Wasser-, Boden- und Lufthyg. Bundesgesundheitsamtes Berlin, Ned.Rep.Ger. 1000/33.
GWF, Gas-Wasserfach: Wasser/Abwasser, 121 (3), pp. 131-5, 1980.
- /17/ Vandkvalitetsinstituttet, 1984:
Bionedbrydelighedsundersøgelser af chloracetanilid, chloranilin og dumpningslud i havvand.
Rapport til Grindsted Products, 16. marts 1984.
- /18/ Rott, B., Wiswanathan, R., D. Freitag und F. Korte
Vergleichende Untersuchungen der Anwendbarkeit verschiedene Tests zur Überprüfung der Abbaubarkeit von Umweltchemikalien.
Chemosphere 11, pp. 531-538, 1982.

- /19/ Yonezawa, Yoshitaka & Yoshikuni Urushigawa.
Chemico-biological interactions in biological
purification systems. V. Relation between bio-
degradation rate constants of aliphatic alcohols
by activated sludge and their partition coeffi-
cients in a l-octanol-water system.
Chemosphere 8 (3), pp. 139-142, 1979.
- /20/ Carlson, Robert M. & Duane W. Long.
Chlorinated organics as a factor in reduced bio-
logical oxygen demand (BOD).
J. Environ. Sci. Health, Part A A 113 (2),
pp. 177-186, 1978.
- /21/ Chou, W.L., Speece, R.E., Siddiqi, R.H. & K. Mc
Keon:
The effect of Petrochemical Structure on methane
fermentation toxicity.
Prog. Wat. Tech. 5/6, pp. 545-558, 1978.
- /22/ Baird, R., Carmond, L. & R.L. Jenkins:
Behaviour of benzidine and other amines in aero-
bic wastewater treatment.
J.W.P.G.F., 10, pp. 1609-1615, 1977.
- /23/ Kenaga, E.E.:
Predicted Bioconcentration Factors and Soil Sorp-
tion Coefficients of Pesticides and other Chemicals.
Ecotox. Environm. Safety 4, 26, 1980.
- /24/ Chiou, C.T., V.H. Freed, D.W. Schmedding & R.L.
Kohnert:
Partition Coefficients and Bioaccumulation of Se-
lected Organic Chemicals.
Environm. Sci. Technol. 11, pp. 475-478, 1977.

- /25/ Veith, G.D., D.L. DeFoe & B.V. Bergstedt:
Measuring and Estimating the Bioconcentration
Factor of Chemicals in Fish.
J. Fish. Res. Board Can. 36, pp. 1040-1048, 1979.
- /26/ Geyer, H., Scheehan, P., Kotzias, D., Freitag, D.
& F. Korte:
Prediction of Ecotoxicological Behaviour of Che-
micals: Relationships between Physico-Chemical
Properties and Bioaccumulation of Organic Chemi-
cals in the Mussel, *Mytilius edulis*.
Chemosphere 11, pp. 1121-1134, 1982.
- /27/ Burns & Roe Industrial Services Corporation:
Fate of Priority Toxic Pollutants in Publicly Ow-
ned Treatment Works.
Final Report. Vol. 1, EPA-440/1-82/303, Septemb-
er 1982.
- /28/ Strier, M.P. & J.D. Gallup:
Removal Pathways and Fate of Organic Priority Pol-
lutants in Treatment Systems - Chemical Considera-
tions.
Proc. 37th Ind. Waste Conf., West Lafayette, Indiana,
1982.
- /29/ Kincamon, D.F. et al.:
Removal Mechanisms for Biodegradable and Non-Bio-
degradable Toxic Priority Pollutants in Industrial
Wastewaters.
Proc. Ind. Wastes Symposia, 54th Annual WPCF Conf.,
Detroit, Mich., October 1981.
- /30/ Matter-Müller, C.W., Gujer, W., Giger, W. & W. Stum:
Non-Biological Elimination Mechanisms in a Biologi-
cal Sewage Treatment Plant.
Prog. Wat. Tech. 12, pp. 299-314, 1980.
- /31/ Grindsted Products A/S:
Oversigt over screeningsanalyser, GP's spildevands-
system. Oktober 1983.

- /32/ Kawasaki, M.:
Experiences with the Test Sceme under the chemical control law in Japan. An approach to structure-activity Correlations.
Ecotox and Envir. Safety 4, pp. 444-554 (1980).
- /33/ Vandkvalitetsinstituttet, ATV:
Spildevandskarakterisering. Økotoksikologisk screeningsundersøgelse af to spildevandsprøver.
Rapport til Grindsted Products A/S.
Hørsholm, 30. november 1983.
- /34/ Vandkvalitetsinstituttet, ATV:
Oplæg til Grindsted Products A/S vedrørende kemikalieinventering af indholdsstoffer i spildevandsstrømme og renset spildevand, fase II.
- /35/ Grindsted Products A/S:
Brev til VKI af 7.11.1984. Vedrørende kemikalieinventering, fase 2.
- /36/ Grindsted Products A/S:
Brev til VKI af 28.11.1984. Vedrørende kemikalieinventering, fase 2.
- /37/ Birxham Laboratory. ICI:
Biodegradability of 2-methyl-2-n-propylpropandiol following the OECD Guideline 301.C, (1983).
- /38/ Personlig kommunikation. Masaru Kitano. Chemicals Inspection & Testing Institute Japan (CITI). Chemical Structure and Biodegradability (1983).
- /39/ Freed, V.H. & R. Haque.:
Chemical structure and properties of selected benzene compounds in relation to biological activity.
Environ. Health Sci. Cent. Oregon State Univ., Corvallis.
Environ. Health Perspect. 13, pp. 23-6, 1976.

- /40/ Jori, A. et al.
Ecotoxicological profile of Pyredine.
Working Party on Ecotoxicological Profiles of
Chemicals.
Ecotox. and Env. Safety, 7, (3) pp. 1-45, 1983.
- /41/ Moriguchi, Ikuo:
Quantitative structure-activity studies. I. Pa-
rameters relating to hydrophobicity.
Sch. Pharm. Sci. Kitasato Univ., Tokyo.
Chem. Pharm. Bull. 23 (2) pp. 247-257,
1975.
- /42/ Kuchar, M., Brunova, B., Rejholec, V. & V. Rabek.
Relation betweeen paper chromatographic RM values
and Hansch's .pi. parameters in dissociable com-
pounds.
Res. Inst. Pharm. Biochem. Prague.
J. Chromatogr. 92 (2) pp. 381-389, 1974.
- /43/ Ludzack, F.J. and M.B. Ettinger.
Chemical structures resistant to aerobic Bioche-
mical stabilization.
Journal WPFC, Nov., pp. 1173-1200, 1960.
- /44/ Alexander, M.
Biodegradation: Problems of Molecular Recalcitrance
and Microbial Fallability.
Adv. Appl. Microbiol. 7, p. 35, 1965.
- /45/ Alexander, M.
Nonbiodegradable and other Recalcitrant Molecules.
Biotechnol. Bioeng. 15, p. 611, 1973.
- /46/ Alexander, M. & B.K. Lustigman.
Effect of chemical structure on Microbial Degrada-
tion of substituted Benzenes.
J. Agric. Food Chem. 14, p. 410 (1966).

- /47/ Swisher, R.D.
Surfactant biodegradation.
Marcel Dekker Inc., New York (1970).
- /48/ Gericke, P. & W.K. Fisher.
A Correlation study of biodegradability. Determinations with various chemicals in various Tests.
Ecotoxicology and Environmental Safety. 3, pp. 159-173, 1979.
- /49/ Pitter, P.
Determination of biological degradability of organic substances.
Water Res. 10, pp. 231-235, 1975.
- /50/ Bringmann, G. & R. Kühn.
Bestimmung der biologischen Schadwirkung wassergefährdender Stoffe gegen Protozoen.
III Saprozoische Flagellaten.
Z. Wasser-Abwasser Forschung 13(5)pp.170-173, 1980.
- /51/ Bringmann, G. & R. Kuhn.
Befunde der Schadwirkung wassergefährdender Stoffe gegen Daphnia magna.
Z. Wasser-Abwasser Forschung 10 (5)pp.161-166, 1977.
- /52/ Linden, E. et al.
The acute toxicity of 78 chemicals and pesticide formulations against two brackish water organisms, the bleak (*Alburnus alburnus*) and the harpacticoid *Nitocra spinipes*.
Chemosphere 11/12, pp. 843-85, 1979.
- /53/ Vandkvalitetsinstituttet, ATV:
Litteraturundersøgelse vedrørende udvægte, udsivende stoffer fra A/S Cheminova's gamle fabriksgrund på Rønland.
Rapport til Ringkøbing Amtskommune, 1983.03.01.
1983.

- /54/ Ruthven, J.A. & J. Cairns, Jr.
Response of fresh-water protozoan artificial
communities to metals.
J. Protozool. 20 (1) pp. 127-135, 1973.
- /55/ Protmann, J.E. & K.W. Wilson.
The Toxicity of 140 substances to brown shrimp
and other marine animals.
Shellfish Information Leaflet No. 22. MAFF.
- /56/ Price, K.S., Waggy, G.T. & R.A. Conway.
Brine shrimp bioassay and seawater BOD of petro-
chemicals.
Journ. Water Pollut. Cont. Fed. 46 (1) pp. 63-
77. 1974.
- /57/ Juhnke, V.J. & D. Lüdemann.
Ergebnisse der Untersuchung von 200 chemischen
Verbindungen auf akute Fischtoxizität mit dem
Goldorfentest.
Z. f. Wasser- und Abwasser-Forschung 5 pp. 161-164
1978.
- /58/ Bringmann, G. & R. Kühn.
Befunde der Schadwirkung wassergefährdender Stof-
fe gegen Daphnia magna.
Z. f. Wasser- und Abwasser-Forschung 5 pp. 161-166
1977.
- /59/ Wellens, Heino.
Vergleich der Empfindlichkeit von Brachydanio re-
gio und Leuciscus idus bei der Untersuchung der
Fischtoxizität von chemischen Verbindungen und
Abwassern.
Z. f. Wasser- und Abwasser-Forschung 15 (2)
pp. 49-52, 1982.

- /60/ Sloof, W., Canton, J.H. & J.L.M. Hermens.
Comparison of the susceptibility of 22 freshwater species to 15 chemical compounds. I. (Sub)acute toxicity tests.
Aquatic Toxicol. 4, pp. 113-128, 1983.
- /61/ Bringmann, G. & R. Kühn.
Ergebnisse der Schadwirkung wassergefährdender Stoffe gegen Daphnia magna in einem weiterentwickelten standardisierten Testverfahren.
Z. f. Wasser- und Abwasser Forschung 15 (1)pp.1-6, 1982.
- /62/ Buccafusco, R.J., Ells, S.J. & G.A. Le Blanc.
Acute toxicity of priority pollutants to Bluegill (*Lepomis macrochirus*).
Bull. Environm. Contam. Toxicol. 26, pp. 446-452, 1981.
- /63/ Heitmuller, P.T., Hollester, T.A. & P.R. Parrish.
Acute toxicity of 54 industrial chemicals to sheepshead minnows (*Cyprinodon variegatus*).
Bull. Environm. Contam. Toxicol. 27, pp.596-604, 1981.
- /64/ U.S. EPA.
Phthalate esters: Ambient Water Quality Criteria.
PB 79 - 296 804. 1978.
- /65/ Vandkvalitetsinstituttet, ATV.
Økotoksikologisk undersøgelse af 4-chloranilin.
Bestemmelse af akut og kronisk toksicitet overfor Nitocra spinipes.
Testrapport til Cheminova A/S. 1984.09.04. 1984.
- /66/ Inveresk Research Int. Ltd.
2-methyl-2-n-propyl-propandiol (1,3): Acute toxicity (LC₅₀) to Zebrafish (*Brachydanio rerio*). 96 h static test. Report to Grindsted Products A/S. Inveresk Res. Int. Ltd., Musselburgh, EH 21 7UB, Scotland. 1983.

- /67/ Roth, L.
Wasser-gefährdende Stoffe.
Ecomed. 1982.
- /68/ Mc Leese, D.W., Zitko, V. & M.R. Peterson.
Structure-lethality relationships for phenols,
anilines and other aromatic compounds in shrimp
and clams.
Chemospher 8 (2) pp. 53-57, 1979.
- /69/ Halbach, V. et al.
Population ecology of rotifers as a bioassay
tool for ecotoxicological tests in aquatic envi-
ronments.
Ecotoxicol. Environm. Safety 7, pp. 484-513, 1983.
- /70/ Huang, J.C. & E.F. Gloyna.
Effects of organic compounds on photosynthetic
oxygenation. I. Chlorophyll destruction and sup-
pression of photosynthetic oxygen production.
Water Res. 2, pp. 347-366, 1968.
- /71/ Bridie, A.L., Wolff, C.J.M. & M. Winter.
The acute toxicity of some petrochemicals to gold-
fish.
Water Res. 13, pp. 623-626, 1979.
- /72/ Knie, J. et al.
Ergebnisse der Untersuchungen von chemischen Stof-
fen mit vier Bioteests.
Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen 27 (3)
pp. 77-79, 1983.
- /73/ Seiler, H., Blaim, H. und M. Busse.
Die Hemmstoffresistenz dominanter Bakteriengrup-
pen in der Belebtschlammmanlage eines Chemiewerks.
Z. f. Wasser- und Abwasser-Forschung 17, pp. 127-
133, 1984.

- /74/ Pilotti, A. et al.
Effects of tobacco and tobacco smoke constituents on cell multiplication in vitro.
Toxicology 5, pp. 49-62, 1975.
- /75/ Kher, K.S.
Teratogenicity study in rats given high doses of pyridoxine (Vitamin B₆) during organogenesis.
Experientia 31 (4) pp. 469-470, 1975.
- /76/ Hoover, D.M., Carlton, W.W. & C.K. Henrikson.
Ultrastructural lesions of pyridoxine toxicity in beagle dogs.
Vet. Pathol. 18, pp. 769-777, 1981.
- /77/ Kusk, K.O.
Effects of hydrocarbons on respiration, photosynthesis and growth of the diatom Phalodactylum tricornutum.
Botanica Marina 24, pp. 413-418, 1981.
- /78/ Miljøstyrelsen.
Vejledning fra Miljøstyrelsen.
Vejledning i recipientkvalitetsplanlægning. Del II.
Kystvande. Vejledning nr. 2/1983. 1983.
- /79/ Grindsted Products A/S
Brev til VKI af 11.02.84.
Vedrørende kemikalieinventering fase 2.
- /80/ Vandkvalitetsinstituttet, ATV:
Spildevandskarakterisering. Økotoxikologisk screeningsundersøgelse af fire spildevandsprøver.
Rapport til Grindsted Products A/S 4. maj 1984.

B I L A G S F O R T E G N E L S E

BILAG 1

Fysisk / kemiske data 85

BILAG 2

Strukturformler 90

BILAG 3

Toksicitetsdata 98

B I L A G 1

FYSISK / KEMISKE DATA

Anvendt stofnavn	Bruttoformel	Cas-nr.	Molvægt	Vandoplosse-lighed g/l	SMP °C	Kogepunkt °C	Damptryk mmHg v. (°C)	Log P _{ow}
Acetanilid	C ₈ H ₉ NO	103-84-4	135,16	5,6 (25°C)	114/21/	305	-	1,16/21/
Acetone	C ₃ H ₆ O	67-64-1	58,08	blandbar	-95/21/	52,6	89(5)	-0,24/21/
5-Allyl-5-(pent-2-yl)barbitursyre	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃	76-73-3	238,2	-	155-157	-	-	1,65/22/
5-Allyl-5-(pent-3-yl)barbitursyre	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃	66941-66-0	238,5	-	-	-	-	1,65/22/
Anilin	C ₆ H ₇ N	62-53-3	93,1	34	-6/21/	184/21/	0,3(20)	0,90/21/
bis-(4-methylpent-2-yl)ether	C ₁₂ H ₂₆ O	intet						6,2/11/
bispyrimidin	C ₁₂ H ₁₇ N ₇	intet	259,3	-	275	intet	-	-/14/
4-brom-o-xilen	C ₈ H ₉ Br	583-71-1	185,07	uopl.	9	199-200	-	3,76
ISO-butanol	C ₄ H ₁₀ O	78-83-1	74,12	95 (20°C)	-108/21/	108	10(25)	0,83/21/
n-butylacetat	C ₆ H ₁₂ O ₂	123-86-4	116,2	14	-76,8	124	10(20)	?
o-chloranilin	C ₆ H ₆ NCl	95-51-2	127,57	-	-	208	-	1,83/21/
p-chloranilin	C ₆ H ₅ NCl	106-47-8	127,57	-	-	232	0,015 (20)	1,90/21/
m-cresol	C ₇ H ₈ O	108-39-4	108,13	23,5 (20°C)	12	202	0,04 (20)	1,96
2,4-dimethyl-5-acetyloxazol	C ₇ H ₉ NO ₂	23012-25-1	139,2	140	61	195	-	0,97/11/
4,6-dimethyl-5-chlorPyrimidin	C ₆ H ₇ ClN ₂	75712-75-3	142,6	-	23	67/12mm Hg	12	1,33/11/
4,6-dimethylpyrimidin	C ₆ H ₈ N ₂	1558-17-4	108,1	-	25/5/	159/5/	-	0,62/12/
Eddikesyre	C ₂ H ₄ O ₂	64-19-7	60,05	blandbar	16,7	118,1	11,4(20)	-0,17
Ethanol	C ₂ H ₆ O	64-17-5	46,07	blandbar	-114/21/	78,4/21/	44(20)	-0,32
Ethylacetat	C ₄ H ₈ O ₂	141-78-6	88,1	79 (20°C)	-83/21/	77/21/	73(20)	0,70
Furathiazolidin	C ₁₂ H ₁₆ N ₄ OS ₂	intet	296,4	-	250	intet	-	-/14/
hydroxy(amino-methyl) pyrimidin	C ₆ H ₉ N ₃ O	intet	139,2	-	195	intet	ca 7	-/14/
malonsyre	C ₃ H ₄ O ₄	141-82-2	104,06	735	135,6	dec.	-	-0,18
mesityloxiid	C ₆ H ₁₀ O	141-79-7	98,14	28 (20°C)	-59/21/	130/21/	8,9(20)	?
methanol	CH ₄ O	67-56-1	32,04	blandbar	-98	65	92(20)	-0,66
alfa-methoxymethylen-beta-methoxypropionitril	C ₆ H ₉ NO ₂	1608-82-8 uspecif.	127,1		22	97/2mm Hg		-1,99/11/
beta-methoxypropionitril	C ₄ H ₇ NO	50744-77-3 Z-isomer	127,1		3	150/20mm Hg		
		39800-76-5 E-isomer	127,1				1,4(20)	
		110-67-8						
2-methoxymethyl-glutaronitril		intet	138,2	< -30			-	-1,72/11/
2-methyl-2-propyl-1,3-propandiol	C ₇ H ₁₂ O ₂	78-26-2	132,2		62/1/	237/1/	-	0,11/11/
4 methyl-5-acetyl-oxazol	C ₇ H ₉ NO ₂	intet	125,1		16	182	-	0,31
Methylacetat	C ₃ H ₆ O ₂	79-20-9	74,1	292	-99	58	170(20)	0,18
Methylal	C ₃ H ₈ O ₂	109-87-5	76,09	330	-105/3/	41,5/3/		0,00/12/
Methylethylketon	C ₄ H ₈ O	78-93-3	72,1	353 (10°C)	-86,4/21/	79,6	77,5(20)	0,26
Methylisobutyl-carbinol	C ₆ H ₁₄ O	108-11-2	102,18	17	-	133	5(20)	1,64/21/
2-Methylpyridoxin	C ₉ H ₁₃ NO ₃	19804-15-0			89-70/21/			0,6/21/
Methylformiat	C ₂ H ₄ O ₂	107-31-3	60,05	300	-100/2/	31,5/2/	480(20)	0,37/11/

Bilag 1

tabel 1 (fysisk/kemiske data) fortsættes

Anvendt stofnavn	Bruttoformel	Cas-nr.	Molvægt	Vandopløselighed g/l	SMP °C	Kogepunkt °C	Damptryk mm Hg v. (°C)	Log P _{ow}
Oxythiazolon	C ₁₂ H ₁₆ N ₄ O ₂ S	490-82-4	280,3		220, d	intet	-	-
Phenol	C ₆ H ₆ O	108-95-2	94,1	82	41	182	0,2(20)	1,46
n-propanol	C ₃ H ₈ O	71-23-8	60,09	blandbar	-127	97,8	14(20)	0,34
pyridoxin-HCl	C ₈ H ₁₂ NO ₃ Cl	58-56-0	205,6	222	-	-	-	0,17
Sorbitol	C ₆ H ₁₄ O ₆	50-70-4	182,17	blandbar	-	-	-	-
2,4,5,6-Tetramethylpyrimidin	C ₈ H ₁₂ N ₂	22868-80-0	136,2		ca 100 /10/ /20mm Hg			1,94 /11/
Thiazolon	C ₁₂ H ₁₆ N ₄ OS ₂	299-35-4	296,4		235	intet	-	- /14/
Thiokrom	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ OS	92-35-3	262,3		220	intet	-	- /14/
Thiopyrimidopyrimidin	C ₇ H ₈ N ₄ S	intet	180,2		275	intet	-	1,40 /13/
Trimethoxypropionitril	C ₇ H ₁₃ NO ₃	1608-83-9	159,2		< -40 95/2mm Hg 48 /6/	-	-	-1,19 /11/
2,4,6-trimethylpyrimidin	C ₇ H ₁₀ N ₂	22114-27-8	122,2		(dihydrat) 172 /10/ 151 /7/	172 /10/ 191 /7/	-	1,28 /11/
2,4,6-trimethyl-3-chlorpyridin	C ₈ H ₁₀ ClN	intet	155,6				-	2,43 /11/
2,4,6-trimethyl-3,5-dichlorpyridin	C ₈ H ₉ Cl ₂ N	13958-96-8	190,1		80 /8/	220 /8/	-	3,14 /11/
3,4-Xylenol	C ₈ H ₁₀ O	95-65-8	122,16		6,5	225		2,26 /11/
2,3-Xyldin	C ₈ H ₁₁ N	87-59-2	121,18		2,5	221		2,3
3,4-Xyldin	C ₈ H ₁₁ N	95-64-7	121,18		49-51 /4/	226 /4/	-	1,7 /12/

Bilag 1

tabel 1 fortsat (fysisk/kemiske data)

Anvendt stofnavn	Bruttoformel	Cas-nr.	Molvægt	Vandopløselighed g/l	SMP °C	Kogepunkt °C	Damptryk mm Hg v. (°C)	Log P _{ow}
Ethylamylmalonester	C ₁₄ H ₂₆ O ₄	76-72-2	258		242	0,008		
Ethylamylmalonester	C ₁₄ H ₂₆ O ₄	77-24-7	258		250	0,0043		
Diethylmalonester	C ₁₁ H ₂₀ O ₄	77-25-8	216		225	0,060		
Malonester	C ₇ H ₁₂ O ₄	105-53-3	160	-50	198,5	0,23		
Ethyimalonester	C ₉ H ₁₆ O ₄	133-13-1	188		209	0,11		
Isopropylmalonester	C ₁₀ H ₁₈ O ₄	759-36-4	202		214	0,10		
Diallylmalonester	C ₁₃ H ₂₀ O ₄	3195-24-2	240		243	0,0075		
Isobutylmalonester	C ₁₁ H ₂₀ O ₄	10203-58-4	216		225	0,029		

Bilag 1

tabel 2 (fysisk/kemiske data - Malonestre)

Referencer til fysisk-kemiske data

- 1) Beilsteins Handbuch der organischen Chemie,
System nr. 30, E 1 side 254, E 4 side 2585.
- 2) The Merch Index 10. ed, 5947.
- 3) The Merck Index 10. ed, 5890.
- 4) Beilsteins Handbuch, system nr. 1704.
- 5) Beilsteins Handbuch, system nr. 3469, H 95
- 6) Journal of the Chemical Society 1937, side 494
- 7) Chemical Abstract 57, 15066g.
- 8) Chemical Abstract 66, 94886f.
- 9) Chemical Abstract 47, 2661a.
- 10) Chemical Abstracct 47, 1711.
- 11) = /2/ i hovedrapport.
- 12) "Chemical Reviews" 1971, vol. 71, nr. 6 side
555 ff.
- 13) Målt af GP efter metoderne i Rapport 82'03,
udarbejdet af "statens Naturvårdsverk" og "in-
stituttet för vatten- och luftvårdsforskning",
Sverige, se bilag.
- 14) Forsøget målt af GP efter metoderne i 13), men
målingen mislykkedes.

- 15) Efter Jerry March: "Advanced Organic Chemistry", 226'227, McGraw-Hill 1977.
- 16) Vurderet af GP ud fra 17).
- 17) "Handbook of Biochemistry", CRC 1970, J218.
- 18) "Handbook of Biochemistry", CRC 1970, J217.
- 19) Beregnet ud fra Hammett-regressionsligningen for pyrimidinium- og pyridinium-ioners syre-styrke.
- 20) "Journal of the Chemical Society", B, 1969, 270-276.
- 21) = /1/ i hovedrapport.
- 22) = /7/ i hovedrapport.
- 23) = /11/ i hovedrapport.

Øvrige data er opgivet af GP.

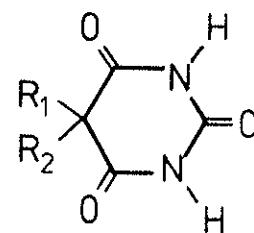
B I L A G 2

STRUKTURFORMLER

Stofbetegnelse

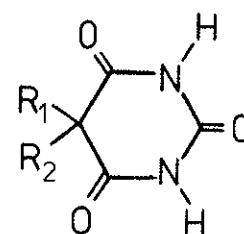
Struktur

5-Allyl-5-(pent-2-yl)-barbitursyre



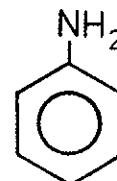
$$\begin{aligned}R_1 &= -\text{CH}_2=\text{CH}- & = \text{CH}_2 \\R_2 &= \text{CH}_3 \text{CH}_2 \text{CH}_2 \text{CH} & \text{CH}_3\end{aligned}$$

5-Allyl-5-(pent-3-yl)-barbitursyre

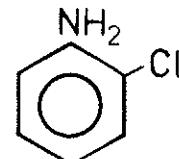


$$\begin{aligned}R_1 &= -\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}_2 \\R_2 &= \text{CH}_3 \text{CH}_2 \text{CH}_2 \text{CH} & \text{CH}_3\end{aligned}$$

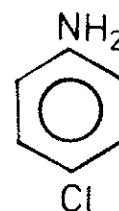
Anilin



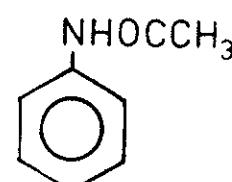
o-chloranilin



p-chloranilin



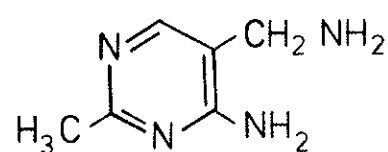
Acetanilid



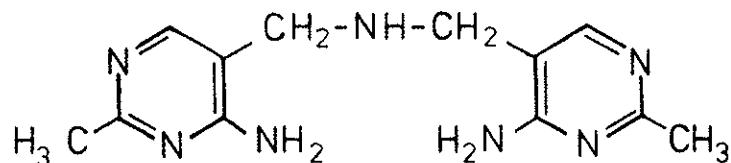
Stofbetegnelse

Struktur

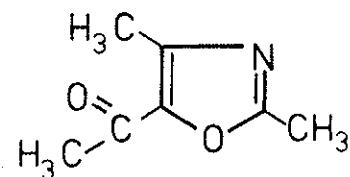
Aminopyrimidin



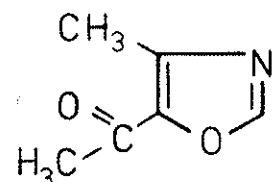
Bispyrimidin



2,4-dimethyl-5-acetyloxazol



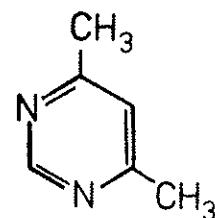
4-methyl-5-acetyloxazol



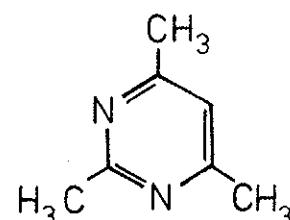
Stofbetegnelse

Struktur

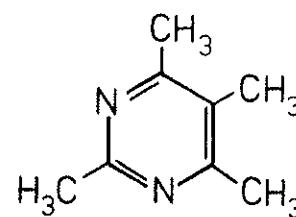
4,6-dimethylpyrimidine



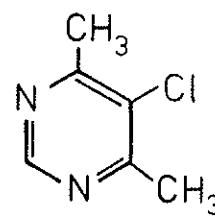
2,4,6-trimethylpyrimidine



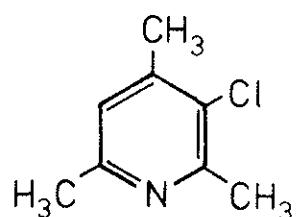
2,4,5,6-tetramethylpyrimidine



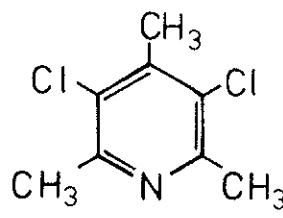
5-chlor-4,6-dimethylpyrimidine



3-chloro-2,4,6-trimethylpyridine



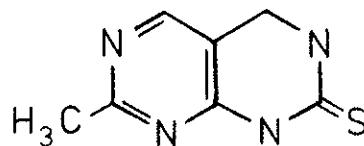
3,5-dichloro-2,4,6-trimethylpyridine



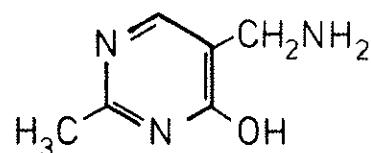
Stofbetegnelse

Struktur

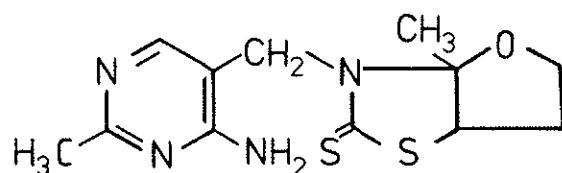
Thiopyrimido-pyrimidin



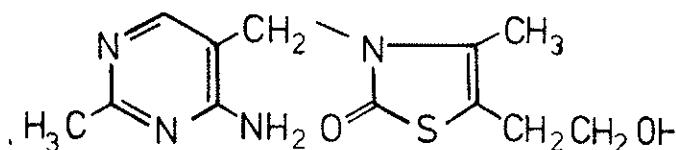
Hydroxy-(aminomethyl) pyrimidin



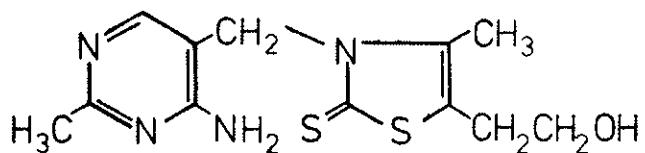
Furathiazolidine



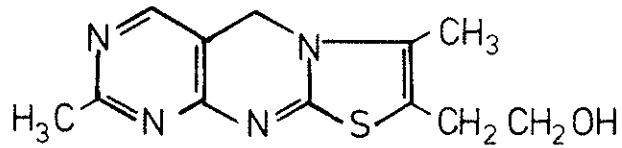
Oxythiazolon



Thiazolon



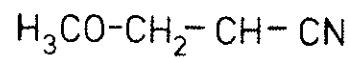
Thiokrom



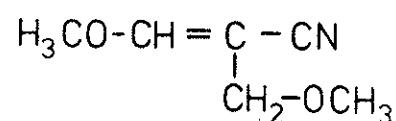
Stofbetegnelse

Struktur

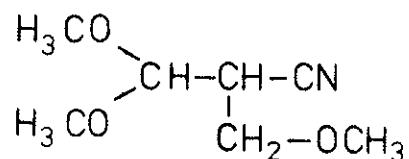
beta-methoxypropionitril



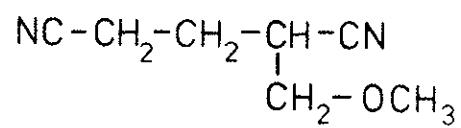
alfa-methoxymethylen-beta-methoxypropionitril



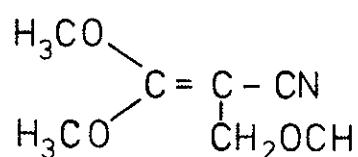
Trimethoxypropionitril



2-methoxymethylglutaronitril



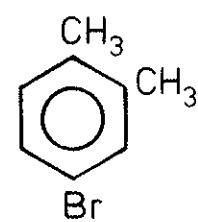
3,3-dimethoxy-2-(methoxymethyl)propanenitril



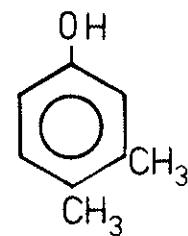
Stofbetegnelse

Struktur

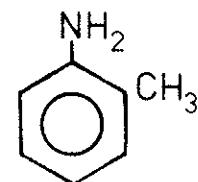
4-brom-o-xilen



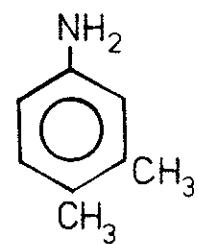
3, 4-xylenol



2, 3-xylidin



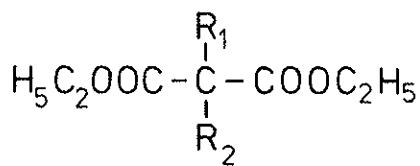
3,4-xylidin



Stofnavn

Struktur

Malonestre (alle diethyl)



Malonester

$$R_1 = H, \quad R_2 = H$$

Ethylmalonester

$$R_1 = H, \quad R_2 = C_2H_5$$

Isopropyl malonester

$$R_1 = H, \quad R_2 = -CH(CH_3)_2$$

Isobutyl malonester

$$R_1 = H, \quad R_2 = -CH_2CH(CH_3)_2$$

Ethyl iso malonester

$$R_1 = C_2H_5, \quad R_2 = -CH(CH_3)CH_2CH_2CH_3$$

— „ —

Diallyl malonester

$$R_1 = -CH_2-CH=CH_2, \quad R_2 = -CH_2-CH=CH_2$$

Diethyl malonester

$$R_1 = C_2H_5, \quad R_2 = C_2H_5$$

B I L A G 3

TOKSICITETSDATA

(REF. ANGIVET I AFSNIT 9)

STOFNAVN: Acetone

S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F	<u>Bakterie</u> <i>Pseudomonas</i>	begyndende hæmning af glucoseoptagelse		1700	/1/
F	<u>Alge</u> <i>Microcystis aeruginosa</i>		begyndende hæmning af vækst	530	/1/
F	<i>Scenedesmus quadricauda</i>		begyndende hæmning af vækst	7500	/1/
F	<u>Protozoa</u> <i>Uronema parduczi</i>		begyndende hæmning af vækst	1710	/1/
F	<i>Chilomonas</i>		begyndende hæmning af vækst	3516	/50/
F	<i>Entosiphon</i>		begyndende hæmning af vækst	28	/1/
F	<u>Krebsdyr</u> <i>Daphnia magna</i>	48 t LC 50		10	/1/
F	<i>Daphnia magna</i>	24 t LC 50		> 10000	/51/
S	<i>Saltreje</i>	48 t LC 50		2100	/1/
F	<i>Tangløkke</i>	LC 50		5500	/1/
S	<i>Nitocra spinipes</i>	96 t LC 50		16700	/52/
S	<u>Fisk</u> <i>Løje</i>	96 t LC 50		11000	/52/
S	<i>Moskitofisk</i>	48 t LC 50		13000	/1/
F	<i>Guldfisk</i>	24 t LC 50		5000	/1/
F	<i>Lepomis machochirus</i>	96 t LC 50		8300	/1/
F	<i>Ørredyngel</i>	24 t LC 50		6100	/1/
F	<i>Gyppy</i>	14 d LC 50		7032	/1/

STOFNAVN: Acetanilid

S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F	<u>Fisk</u> <i>Leponis macrochirus</i>	96 t LC 50		100	/1/
S	<i>Menida beryllina</i>	96 t LC 50		115	/1/

STOFNAVN: Anilin (phenylamin)

S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F: ferskvand					
S, F	<u>Bakterie</u> E. coli	ingen effekt		> 1000	/1/
	Pseudomonas putida		Begyndende hæmning af vækst	130	/1/
F	<u>Alger</u> Microcystis aeruginosa		begyndende hæmning af vækst	0,16	/1/
F	Microcystis aeruginosa	EC 50		20	/1/
F	Scenedesmus		begyndende hæmning af vækst	8,3	/1/
F	4 arter	NOEC		8-16	/60/
F	<u>Protozoa</u> Entosiphon sulcatum	NOEC		24	
F	Uronema parduczi	NOEC		91	
F	Tetrahymena pyriformis	24 t LC 100		2000	/1/
F	<u>Krebsdyr</u> Daphnia magna	24 t LC 50		0,5	/58/
F	Daphnia magna	48 t LC 50		0,64	/60/
F	Daphnia pulex	48 t LC 50		0,1	/60/
F	Daphnia cullata	48 t LC 50		0,68	/60/
S	Reje	begyndende toks.		29	/68/
F	<u>Fisk</u> Zebrafisk	96 t LC 50		20	/59/
F	Zebrafisk	96 t LC 50		32	/59/
F	Guldrimte	48 t LC 50		61-65	/57/
F	Guldrimte	48 t LC 50		49	/60/
F	Regnbueørred	NOLC		36	/60/
F	Regnbueørred	48 t LC 50		43	/60/
F	Guppy	48 t LC 50		100	/60/
F	<u>Insekter (myggelarver)</u> Aedes aegypti	48 t LC 50		406	/60/
F	Culex pipiens	48 t LC 50		94	/60/
F	<u>Coelenterat</u> Hydra oligactis	48 t LC 50		406	/60/
F	<u>Snegl</u> Lymnaea stagnalis	48 t LC 50		800	/60/
	<u>Cellekultur</u> Fra mus	48 t EC 30 for væksthæmning		93	/74/

STOFNAVN:		o-xylen				
S:	saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT/	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F:	ferskvand					
<u>Protozoa</u>						
F		<u>Uronema parduczi</u>		begyndende hæmning af vækst	> 160	/1/
<u>Alger</u>						
F		<u>Chlorella vulgaris</u>		EC 50 for vækst	55	/1/
S		<u>Phaeodactylum tricornutum</u>		EC 20 for vækst	5	/77/
S		<u>Phaeodactylum tricornutum</u>	2 t EC 20 for fotosyntese		10	/77/
<u>Krebsdyr</u>						
S		<u>Græsreje</u>	96 t LC 50		7,4	/1/
S		<u>Krabbelarver</u>	96 t LC 50		6	/1/
S		<u>Reje</u>	96 t LC 50		1,3	/1/
<u>Fisk</u>						
F		<u>Guldfisk</u>	24 t LC 50		13	/1/
F		<u>Regnbueørred</u>	96 t LC 50		13,5	/1/
F		<u>Bars</u>	96 t LC 50		11	/1/
F		<u>Regnbueørred</u>	flugtreaktion		0,01	/1/

TOKSICITET

STOFNAVN:		Br-phenol				
S:	saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F:	ferskvand					
<u>Alger</u>						
F		<u>Chlorella pyrenoidosa</u>		toksisk	78	/1/
F		<u>Chlorella pyrenoidosa</u>		toksisk	36	/1/
F		<u>Chlorella pyrenoidosa</u>		toksisk	36	/1/

STOFNAVN:		Isobutanol				
S:	saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR <u>AKUT</u> TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR <u>KRONISK</u> TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F:	ferskvand					
B:	brakvand					
F		<u>Bakterie</u> <i>Pseudomonas putida</i>		begyndende hæmning af vækst	280	/1/
F		<u>Alger</u> <i>Microcystis aeruginosa</i>		begyndende hæmning af vækst	290	/1/
F		<i>Scenedesmus quadricauda</i>		begyndende hæmning af vækst	350	/1/
F		<u>Protozoa</u> <i>Entosiphon sulcatum</i>		begyndende hæmning af vækst	295	/1/
F		<i>Uronema parduczi</i>		begyndende hæmning af vækst	169	/1/
S		<u>Krebsdyr</u> <i>Saltreje</i>	48 t LC 50		600	/56/
F		<i>Daphnia magna</i>	24 t LC 50		1220	/58/
F, B		<u>Fisk</u> <i>Løje</i>	96 t LC 50		1000-3000	/52/
F		<i>Guldrimte</i>	48 t LC 50		800-970	/57/
F		<i>Guldrimte</i>	48 t LC 50		1520-1750	/57/

STOFNAVN: n-Butylacetat

S:	saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR <u>AKUT</u> TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR <u>KRONISK</u> TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F:	ferskvand					
S, F		<u>Bakterier</u> <i>E. coli</i>	begyndende effekt		> 1000	/1/
F		<i>Pseudomonas putida</i>		begyndende hæmning af vækst	115	/1/
F		<u>Alger</u> <i>Microcystis aeruginosa</i>		begyndende hæmning af vækst	280	/1/
F		<i>Scenedesmus</i>		begyndende hæmning af vækst	21	/1/
F		<i>Scenedesmus</i>	96 t EC 50		320	/1/
F		<u>Protozoa</u> <i>Entosiphon sulcatum</i>		begyndende hæmning af vækst	321	/1/
F		<i>Uronema perduczi</i>		begyndende hæmning af vækst	574	
F		<u>Krebsdyr</u> <i>Daphnia magna</i>	48 t LC 50		44	/1/
S		<i>Artemia</i>	48 t LC 50		32	/56/
F		<u>Fisk</u> <i>Lepomis macrochirus</i>	96 t LC 50		100	/1/
S		<i>Menidia beryllina</i>	96 t LC 50		185	/1/
F		Guldrimte	48 t LC 10		44	/57/
F		Guldrimte	48 t LC 50		141	/57/

STOFNAVN: 4-chloranilin (p chloranilin)

S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F: ferskvand					
<u>Krebsdyr</u>					
S	Nitocra spinipes	96 t LC 10		3,2	/65/
S	Nitocra spinipes	96 t LC 50		10	/65/
S	Nitocra spinipes		12 d EC 20 (reproduktion)	0,1	/65/
S	Nitocra spinipes		12 d EC 50 (reproduktion)	0,2-0,3	/65/
S	Reje	begyndende toks.		12,5	/68/
<u>Fisk</u>					
F	Regnbueørred	96 t LC 50		14	/1/
F	Fathead minnows (elritze)	98 t LC 50		12	/1/
F	Channel catfish (malle)	96 t LC 50		23	/1/
F	Bluegill	96 t LC 50		2	/1/
F	Guldrimte	48 t LC 50		21	/72/
F	Guldrimte	48 t LC 50		23	/72/
F	Guldrimte	48 t LC 100		25	/72/
<u>Rotifer</u>					
F	Brachionus rubens	24 t LC 50		100	/69/
F	Brachionus rubens		effekt på reproduktion	< 10	/69/

STOFNAVN: m-cresol (3-methylphenol)

S:	saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F:	ferskvand					
S, F		<u>Bakterie</u> <i>E. coli</i>	LC 0		600	/1/
F		Pseudomonas putida		begyndende hæmning af vækst	53	/1/
F		<u>Alge</u> <i>Microcystis aeruginosa</i>		begyndende hæmning af vækst	13	/1/
F		Scenedesmus quadricauda		begyndende effekt af vækst	15	/1/
F		Chlorella purenoidosa		begyndende hæmning af vækst	50-100	/70/
F		<u>Protozoa</u> <i>Entosiphon sulcatum</i>		begyndende hæmning af vækst	31	/1/
F		<i>Uronema parduczi</i>			62	/1/
F		Vorticella campanula	irritabilitetsniveau		0,5	/1/
F		Paramaecium caudatum	irritabilitetsniveau		0,9	/1/
F		Tetrahymena puriformis	24 t LC 100		378	/1/
F		<u>Krebsdyr</u> <i>Daphnia</i>	LC 0		28	/1/
F		<i>Gammarus pulex</i>	irritabilitetsniveau		0,7	/1/
F		<u>Snegl</u> <i>Glossosiphonia complanata</i>	irritabilitetsniveau		1,1	/1/
F		<u>Fisk</u> <i>Moskitofisk</i>	24 t 96 t LC 50		24	/1/
F		<i>Bluegill</i>	96 t LC 50		10-14	/1/
F		Karpe	24 t LC 50		25	/1/
F		Skalle	24 t LC 50		23	/1/
F		Suder	24 t LC 50		21	/1/
F		Ørred-embryoner	24 t LC 50		7	/1/
F		<u>Fisk m.v</u>	afsmagsgivende		0,2	/1/
F		<u>Cellekultur af mus</u>	48 t EC 5 for væksthæmning		11	/74/
"			48 t LC 31 for væksthæmning		108	/74/

Stofnavn: 2-methylphenol (o-cresol)					
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT	PARAMETER FOR KRONISK	mg/l	REFERENC
F: ferskvand					
F	<u>Bakterie</u> <i>Pseudomonas fluorescens</i>		begyndende hæmning af celledeling	33	/53/
	" "	begyndende hæmning af respiration		66	/53/
F	<u>Alger</u> <i>Scenedesmus sp.</i> (grønalge)		begyndende hæmning af vækst	40	/53/
F	<i>Scenedesmus quadricauda</i>		begyndende hæmning af vækst	11	/53/
F	<i>Microcystic aeruginosa</i> (blågrønalge)		begyndende hæmning af vækst	6,8	/53/
S	Naturlig plankton	begyndende hæmning af fotosyntese		0,1-1	/53/
S	Dinoflagellater	begyndende hæmning af fotosyntese		1	/53/
S	Kiselalger	begyndende hæmning af fotosyntese		1	/23/
F	<u>Protozoa</u> <i>Micro regma</i>		begyndende hæmning af næringsoptagelse	50	/53/
F	<i>Enterosiphon sulcatum</i>		begyndende hæmning af celledeling	17	/53/
F	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	LC 100 - 24 hr		400	/53/
F	<u>Krebsdyr</u> <i>Daphnia magna</i>	begyndende bevægelses-hæmning		16	/53/
F	<i>Daphnia publicaria</i>	LC 50 - 48 hr		94	/53/
F	<i>Daphnia magna</i>	LC 0 - 24 hr		9,5	/53/
		LC 50 - 24 hr		20	/53/
		LC 100 - 24 hr		36	/53/
		LC 0 - 24 hr		6,3	/53/
		LC 50 - 24 hr		19	/53/
		LC 100 - 24 hr		50	/53/
S	<i>Elasmopus pectenicus</i>	LC 50 - 24 hr		16	/53/
		LC 50 - 48 hr		11,8	/53/
		LC 50 - 96 hr		10,2	/53/
F	<u>Fisk</u> <i>Regnbueørred</i>	LC 50 - 96 hr		8,4	/53/
F	<i>Fathead minnow</i>	LC 50 - 96 hr		18	/53/
F	<i>Zebrafisk</i>	LC 0 - 96 hr		20	/53/
		LC 50 - 96 hr		24	/53/
		LC 100 - 96 hr		30	/53/

S:	saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F:	ferskvand					
		<u>Bakterier:</u>				
F		Pseudomonas		Begyndende hæmning af vækst	2850	/1/
		<u>Protozoa:</u>				
F		Entosiphon		Begyndende hæmning af vækst	78	/1/
F		Chilomonas		Begyndende hæmning af vækst	408	/50/
F		flere arter	24 t toksisk		180	/54/
F		flere arter	24 t tolereret		100	/54/
F		Vorticella	Irritabilitetsniveau (adfærdsforstyrrelse)		12	/1/
		<u>Alger:</u>				
F		Scenedesmus		Begyndende hæmning af vækst	4000	/1/
F		Microcystis		Begyndende hæmning af vækst	90	/1/
		<u>Krebsdyr:</u>				
F		Daphnia	24 t LC 50		47	/1/
S		Saltreje (Artemia)	48 t LC 50		32	/56/
F		Ferskvands tangløkke	Irritabilitetsniveau		6	/1/
S		Hestereje	48 t LC 50		100-330	/55/
S		Strandkrabbe	48 t LC 50		180	/55/
		<u>Snegl:</u>				
S		Strandsnegl	Irritabilitetsniveau		15	/1/
		<u>Fisk:</u>				
F		Moskitofisk	96 t LC 50		251	/1/
F		"Fathead minnow" (elritze)	96 t LC 50		79-88	/1/
F		Bluegill	96 t LC 50		75	/1/
		<u>Insekt:</u>				
F		Myggelarve	48 t LC 50		1500	/1/

STOFNAVN:	Ethanol					
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE	
Bakterie:						
F	Pseudomonas	Begyndende hæmning af glucoseoptagelse		6500	/1/	
Protozoa:						
F	Chilomonas	Begyndende hæmning af vækst	> 10000	/50/		
F	Uronema parduczi	Begyndende hæmning af vækst	6120	/1/		
F	Entosiphon	Begyndende hæmning af vækst	65	/1/		
Alger:						
F	Microcystis	Begyndende hæmning af vækst	1450	/1/		
F	Scenedesmus	Begyndende hæmning af vækst	5000	/1/		
Krebsdyr:						
F	Daphnia	24 t LC 50	> 10000	/51/		
S	Nitocra spinipes	96 t LC 50	7750	/52/		
	Artemia salina	24 t LC 50	> 10000	/56/		
Fisk:						
F	Ørreddyngel	24 t LC 50	11200	/1/		
F	"Fathead minnow"					
F	(Eritze)	96 t LC 50	13480	/1/		
F	Guppy	7 d LC 50	11050	/1/		
F	Skalle	24 t LC 50	7000-9000	/1/		
S	Løje	96 t LC 50	11000	/52/		

STOFNAVN: Ethylacetat

S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F: ferskvand					

Bakterie:

F	<i>Pseudomonas putida</i>	Begyndende hæmning af vækst	650	/1/
---	---------------------------	-----------------------------	-----	-----

Alger:

F	<i>Microcystis aeruginosa</i>	Begyndende hæmning af vækst	550	/1/
F	<i>Scenedesmus quadricauda</i>	Begyndende hæmning af vækst	15	/1/
F	<i>Selenastrum capricornutum</i>	Begyndende hæmning af vækst	200	

Protozoa:

F	<i>Entosiphon sulcatum</i>	Begyndende hæmning af vækst	202	/1/
F	<i>Uronema parduczi</i>	Begyndende hæmning af vækst	1620	/1/

Padder:

F	Mexikansk axolotl	48 t LC 50	150	/1/
F	Klo-tudse (clawed toad)	48 t LC 50	180	/1/

Krebsdyr:

F	<i>Daphnia magna</i>	24 t LC 0	1562	/61/
F	<i>Daphnia magna</i>	24 t LC 50	3090	/61)
F	<i>Daphnia magna</i>	48 t LC 0	370	/60/
F	<i>Daphnia magna</i>	48 t LC 50	590	/60/
F	<i>D. pulex</i>	48 t LC 0	103	/60/
F	<i>D. pulex</i>	48 t LC 50	262	/60/
F	<i>D. cucullata</i>	48 t LC 50	164	/60/

Insektslarver:

Myg:				
F	<i>Aedes aegypti</i>	48 t LC 0	160	/60/
F	<i>Aedes aegypti</i>	48 t LC 50	350	/60/
F	<i>Culex pipiens</i>	48 t LC 0	2400	/60/
F	<i>Culex pipiens</i>	48 t LC 50	3950	/60/

Colenterater:

F	<i>Hydra oligactis</i>	48 t LC 0	1120	/60/
		48 t LC 50	1350	/60/

Mollusk:

F	<i>Lymnea stagnalis</i> (snegl)	48 t LC 0	560	/60/
		48 t LC 50	1100	/60/

Fisk:

F	Rimte	48 t LC 50	270	/60/
F	Regnbueørred	48 t LC 0	240	/60/
F	Regnbueørred	48 t LC 50	260	/60/
F	Guppy	48 t LC 0	160	/60/
F	Guppy	48 t LC 50	210	/60/
	Oryzias latipes	48 t LC 0	100	/60/
	Oryzias latipes	48 t LC 50	125	/60/
	Pimephales promelas	48 t LC 0	180	/60/
	Pimephales promelas	48 t LC 50	270	/60/

STOFNAVN: Mesityloxid (4-methyl-3-penten-2-one)

S:	saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F:	ferskvand					
		<u>Fisk:</u> Guldfisk	24 t LC 50		540	/71/

STOFNAVN: 2-methyl-2-n-propyl-1,3-propandiol

S:	saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F:	ferskvand					
		<u>Fisk:</u> Zebrafisk	96 t LC 50		ca. 1000	/66/
		Zebrafisk	96 t NO EC		625	/66/

STOFNAVN: Methylacetat

S:	saltvand	ORGANISKE	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/i	REFERENCE
F:	ferskvand					
		<u>Fisk:</u> Fisk	Skadenvirkning		400-1000	/67/

STOFNAVN:	Methanol				
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KNONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F: ferskvand					
<u>Bakterie:</u>					
F	Pseudomonas	Begyndende hæmning af glucoseoptagelse		6500	/1/
<u>Protozoa:</u>					
F	Entosiphon	Begyndende hæmning af vækst		> 10000	/1/
<u>Blågrønalge:</u>					
F	Microcystis	Begyndende hæmning af vækst		530	/1/
<u>Grønalge:</u>					
F	Scenedesmus	Begyndende hæmning af vækst		8000	/1/
<u>Krebsdyr:</u>					
F	Daphnia	24 t LC 50		> 10000	/51/
S	Saltreje	24 t LC 50		10000	/1/
S	Hestereje	48 t LC 50		1700	/55/
S	Nitocra spinipes	96 t LC 50		12000	/52/
<u>Musling:</u>					
S	Hjertemusling	48 t LC 50		3300-10000	/55/
<u>Fisk:</u>					
S	Ørred	48 t LC 50		8000	/1/
S	Panserulik	48 t LC 50		10000-33000	/55/
S	Løje	96 t LC 50		28000	/52/
	Guldrimte	48 t LC 0		7900	/57/
	Guldrimte	48 t LC 50		> 10000	/57/

S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F: ferskvand					
	Bakterier:				
F	Pseudomonas putida		Begyndende hæmning af vækst	1150	/1/
F	Pseudomonas putida	EC 0		2500	/1/
Alger:					
F	Microcystis aeruginosa		Begyndende hæmning af vækst	110	/1/
F	Scenedesmus quadricauda		Begyndende hæmning af vækst	4300	/1/
F	Scenedesmus quadricauda	EC 0		12500	/1/
Protozoa:					
F	Entosiphon sulcatum		Begyndende hæmning af vækst	190	/1/
F	Uronema parduczi		Begyndende hæmning af vækst	2830	/1/
F	Colpoda	LC 0		5000	/1/
Krebsdyr:					
S	Saltreje (Artemia)	24 t LC 50		1950	/56/
F	Daphnia magna	24 t LC 50		7060	/61/
Fisk:					
F	Moskitofisk	96 t LC 50		5600	/1/
F	Bluegill	96 t LC 50		1700-5600	/1/
F	Guldfisk	24 t LC 50		> 5000	/71/
F	Guldrimte	48 t LC 0		4400	/57/
F	Guldrimte	48 t LC 50		4600	/57/

STOFNAVN:	Methylformiat				
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F: ferskvand					
	<u>Alger:</u>				
			Giftvirkning	ikke angivet	/67/
	<u>Fisk:</u>		Giftvirkning kan ikke udelukkes	ikke angivet	/67/
	Organisme ikke angivet		Skadelighedsgrænse	100-120	/67/

STOFNAVN:	Methyliisobutylcarbinol (methylamylalkohol)				
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F: ferskvand					
	<u>Fisk:</u>				
	Guldfisk	24 t LC 50		360	/71/

STOFNAVN:	2-Methylpyridine				
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F: ferskvand					
	<u>Protozoa:</u>				
	Tetrahymena pyriformis	24 t LC 100		6000	/1/

STOFNAVN:	n-propanol				
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
Bakterier:					
F	Pseudomonas putida		Begyndende hemning af vækst	2700	/1/
Alger:					
F	Microcystis aeruginosa		Begyndende hemning af vækst	255	/1/
F	Scenedesmus quadricauda		Begyndende hemning af vækst	3100	/1/
F	Chlorella pyrenoidosa	Toksisk		11200	/1/
F	Chlorella pyrenoidosa		Begyndende hemning af vækst	1150	/60/
F	Selenastrum capricornutum		Begyndende hemning af vækst	2000	/60/
Protozoa:					
F	Entosiphon sulcatum		Begyndende hemning af vækst	38	/1/
F	Uronema parduczi		Begyndende hemning af vækst	568	/1/
F	Chilomonas paramecium		Begyndende hemning af vækst	175	/60/
Krebsdyr:					
S	Nitocra spinipes	96 t LC 50		2300	/52/
S	Nitocra spinipes	48 t LC 0		4100	/60/
F	Daphnia magna	48 t LC 50		6300	/60/
F	Daphnia magna	48 t LC 0		2300	/60/
F	D. pulex	48 t LC 50		3025	/60/
F	D. cucullata	48 t LC 50		5820	/60/
S	Saltreje (Artemia)	24 t LC 50		4200	/56/
F	Daphnia magna	24 t LC 0		2960	/58/
F	Daphnia magna	24 t LC 50		4450	/58/
Insekter: (myggelarver)					
F	Aedes aegypti	48 t LC 0		3200	/60/
F	Aedes aegypti	48 t LC 50		4400	/60/
F	Culex pipiens	48 t LC 0		3600	/60/
F	Culex pipiens	48 t LC 50		4800	/60/
Colentarat:					
F	Hydra oligactis	48 t LC 0		5100	/60/
F	Hydra oligactis	48 t LC 50		6800	/60/
Snegle:					
F	Lymnaea stagnalis	48 t LC 0		4000	/60/
F	Lymnaea stagnalis	48 t LC 50		6500	/60/
Padder:					
F	Mexikansk axolotl	48 t LC 50		4000	/1/
F	Klo-tudse (clawed toad)	48 t LC 50		4000	/1/
Fisk:					
F	Grundling	LC 50		200-500	/1/
F	Døbel (Creek chub)	24 t LC 0		200	/1/
F	Døbel (Creek chub)	24 t LC 100		500	/1/
B	Løje	96 t LC 50		3000-4000	/52/
F	Guldrimte	48 t LC 0		3600-4000	/57/
F	Guldrimte	48 t LC 50		4320-4560	/57/
F	Guldrimte	48 t LC 50		4830	/60/
F	Regnbueørred	48 t LC 0		2000	/60/
F	Regnbueørred	48 t LC 50		3200	/60/
F	Guppy	48 t LC 0		6200	/60/
F	Guppy	48 t LC 50		6700	/60/
F	Oryzias latipes	48 t LC 0		4400	/60/
F	Oryzias latipes	48 t LC 50		5900	/60/
F	Pimephales promelas	48 t LC 0		2600	/60/
F	Pimephales promelas	48 t LC 50		5000	/60/

STOFNAVN:		2-propanol (Isopropanol)				
S: saltvand	F: ferskvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
<u>Bakterie:</u>						
F		Pseudomonas		Begyndende hæmning af vækst	1050	/26/
<u>Protozoa:</u>						
F		Chilomonas		Begyndende hæmning af vækst	104	/27/
		Entosiphon		Begyndende hæmning af vækst	4930	/22/
<u>Blågrønalge:</u>						
F		Microcystis		Begyndende hæmning af vækst	1000	/21/
<u>Grønalge:</u>						
F		Scenedesmus		Begyndende hæmning af vækst	1800	/21/
<u>Krebsdyr:</u>						
F		Daphnia	24 t LC 50		4450	/28/
F		Daphnia	24 t LC 0		2960	/28/
S		Hestereje	48 t LC 50		1400	/1/
S		Hestereje	96 t LC 50		1150	/1/
S		Hestereje	96 t LC 50		1150	/15/

STOFNAVN:		Pyridine				
S: saltvand	F: ferskvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
<u>Bakterier:</u>						
F		Flere grupper fra renseanlæg		Begyndende hæmning af vækst	10000	/73/
<u>Protozoa:</u>						
F		Tetrahymena pyriformis	24 t LC 100		9000	/1/
<u>Krebsdyr:</u>						
S		Reje		Begyndende toksicitet	> 50	/68/
<u>Cellekultur af mus:</u>						
			48 t EC 3 for væksthæmning		79	/74/

STOFNAVN:	Phenol				
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
<u>Bakterier:</u>					
F	Pseudomonas putida	Begyndende hemning af vækst		64	/1/
F, S	E. coli	Begyndende hemning af vækst		> 1000	/1/
<u>Alger:</u>					
F	Microcystis aeruginosa	Begyndende hemning af vækst		4,6	/1/
F	Scenedesmus quadricauda	Begyndende hemning af vækst		7,5	/1/
F	Chlorella pyrenoidosa	Toksisk		233	/1/
F	Scenedesmus	LC 0		40	/1/
F	Protococcus sp.	10 d EC 40 for vækst		300	/1/
F	Chlorella sp.	10 d EC 40 for vækst		300	/1/
F	Dunaliella euchlora	10 d EC 50 for vækst		100	/1/
S	Phaeodactylum tricornutum	Vækst ophørt		100	/1/
S	Monochrysis lutheri	Vækst ophørt		100	/1/
F	Chlorella pyrenoidosa	Vækst hemmet		50	/70/
<u>Protozoa:</u>					
F	Entosiphon sulcatum	Begyndende hemning af vækst		33	/1/
F	Uronema parduczi	Begyndende hemning af vækst		144	/1/
F	Paramaecium caudatum	Irritabilitetsniveau		10	/1/
F	Vorticella campanula	Irritabilitetsniveau		3	/1/
<u>Rotifer:</u>					
F	Brachionus rubens	24 t LC 50		600	/69/
			Effekter på reproduktion	10	/69/
<u>Krebsdyr:</u>					
F	Daphnia magna (unge)	50 t LC 50		7	/1/
F	Daphnia magna (voksne)	50 t LC 50		21	/1/
S	Saltreje (Artemia)	48 t LC 50		56	/56/
S	Hestereje	96 t LC 50		25	/1/
F	Daphnia magna	24 t LC 50		12	/61/
S	Reje	Begyndende toksicitet		7,5	/68/
<u>Skaldyr:</u>					
S	Am. østers (æg)	48 t LC 50		58	/1/
S	Mercenaria mer cenaria (æg)	48 t LC 50		53	/1/
S	Mercenaria mer cenaria (larver)		12 d EC 50	55	
<u>Fisk:</u>					
F	Bluegill	96 t LC 50		5,7	/1/
F	"Fathead minnow"	96 t LC 50		32-34	/1/
F	Regnbueørred	3 t LC 100		5	/1/
F	Aborre	1 t LC 100		9	/1/
F	Krusisk karpe	24 t LC 50		25	/1/
F	Skalle	24 t LC 50		15	/1/
F	Ørred embryonex	24 t LC 50		5	/1/
F	Suder	24 t LC 50		17	/1/
F	Regnbueørred	18 uger LC 50		4,0	/1/
F	Bluegill	96 t LC 50		24	/1/
F	Zebrafisk	96 t LC 50		29	/1/
F	Ørred	96 t LC 50		11,6	/1/
S	Lille kutling	96 t LC 50		9	/1/
F	Regnbueørred	24 t LC 50		5,6-11	/1/
F	Guldritme	48 t LC 50		14-25	/59/
F	Guldfisk	24 t LC 50		46	/71/
<u>Cellekultur af mus:</u>					
		48 t EC 5 for veksthemmning		9	/74/
		48 t EC 25 for veksthemmning		94	/74/

STOFNAVN:	2,6-dimethylpyridin (2,6-lutidin)				
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F: ferskvand					
<u>Protozoa:</u>					
F	Tetrahymena pyriformis	24 t LC 100		3500	/1/
	<u>Cellekulturer af mus:</u>	48 t EC 3 for vækst		108	/74/

STOFNAVN:	4-aminopyridine				
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F: ferskvand					
<u>Fisk:</u>					
F	Bluegill	96 t LC 50		3-7	/1/
F	Channel catfish	96 t LC 50		2-6	/1/

STOFNAVN:	2,4,6-trimethylpyridine				
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
F: ferskvand					
	<u>Cellekultur af mus:</u>	48 t EC 2 for vækst		134	/74/

STOFNAVN:	Pyridoxine				
	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/kgxdag	REFERENCE
<u>Rotte:</u>					
			Reproduktionshæmning (10 dages dosering)	> 80	/75/
	<u>Hund:</u>		Virkninger på nerve- system (100 dages dosering)	150	/76/

STOFNAVN: 2,5-xylenol

S:	saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFEREN
F:	ferskvand					
		<u>Alger:</u>				
F		Chlorella pyrenoidosa		Begyndende hæmning af vækst	50-100	/70/
		<u>Fisk:</u>				
F		Regnbueørred	96 t LC 50		3,2-5,6	/1/
		<u>Cellekultur af mus:</u>				
			48 t EC 74 for væksthæmning		122	/74/
			48 t EC 0 for væksthæmning		12	/74/

STOFNAVN: 2,6-xylenol (dimethylphenol)

S:	saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFEREN
F:	ferskvand					
<hr/>						
		<u>Protozoa:</u>				
F		Tetrahymena pyriformis	24 t LC 100		325	/1/
<hr/>						
		<u>Krebsdyr:</u>				
S		Reje	Begyndende toksicitet		17	/68/
<hr/>						
		<u>Alger:</u>				
F		Chlorella pyrenoidosa		Begyndende hæmning af vækst	50-100	/70/
<hr/>						
		<u>Cellekultur af mus:</u>	48 t EC 5 for væksthæmning		12	/74/
			48 t EC 79 for væksthæmning		122	/74/

STOFNAVN:	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
S: saltvand F: ferskvand					
Bakterier:					
F	Pseudomonas putida		Begyndende hæmning af vækst	11	/1/
Alger:					
F	Microcystis aeruginosa		Begyndende hæmning af vækst	3,4	/1/
F	Scenedesmus		Begyndende hæmning af vækst	75	
Protozoa:					
F	Entosiphon sulcatum		Begyndende hæmning af vækst	30	/1/
F	Uronema parduczi			119	/1/
Fisk:					
F	Fathead minnow	96 t LC 50 (blødt vand)		78	/1/
F	Fathead minnow	96 t LC 50 (hårdt vand)		135	/1/
F	Bluegill	96 t LC 50		78	/1/
F	Guppy	96 t LC 50		400	/1/
F	Bluegill	Ingen afsmagseffekt		35	/1/

STOFNAVN:	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
S: saltvand F: ferskvand					
Bakterier:					
F	Pseudomonas putida		Begyndende hæmning af vækst	53	/1/
Krebsdyr:					
S	Hestereje	96 t LC 50		6	/1/
Fisk:					
F	Fathead minnow	96 t LC 50		14-18	/1/
S	Lille kutling	96 t LC 50		14	/1/
?	Lagodon rhomboides	24 t LC 50		24,5	/1/

STOFNAVN: Adiponitril

S:	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
<u>Fisk:</u>					
F	Fathead minnow	96 t LC 50		820-1250	/1/
F	Bluegill	96 t LC 50		720	/1/
F	Guppy	96 t LC 50		775	/1/
F	Bluegill sunfish	24 t LC 50		1250	/1/

STOFNAVN: Lactonitril

S:	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
<u>Fisk:</u>					
S	Pinperch (Pigget aborre)	24 t LC 50		0,215	/1/
F	Fathead minnow	96 t LC 50		0,9	/1/
F	Bluegill	96 t LC 50		0,9	/1/
F	Guppy	96 t LC 50		1,37	/1/

STOFNAVN: Malonnitril

S:	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
<u>Fisk:</u>					
F	Regnbueørred	24 t LC 50		6,2	/1/
F	Regnbueørred	96 t LC 50		1,6	/1/

STOFNAVN: 2,3-xylenol

S:	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERENCE
<u>Cellekultur af mus:</u>					
		48 t EC 2 for vækst-hæmning		12	/74/
		48 t EC 78 for vækst-hæmning		122	/74/

STOFNAVN: 3,4-xylenol (3,4-dimethylphenol)

S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFEREN.
F: ferskvand					
	<u>Bakterier:</u>				
F	E. coli	LC 0		> 100	/1/
	<u>Alger:</u>				
F	Scenedesmus	EC 0		40	/1/
F	Chlorella pyrenoidosa	Toksisk		49-81	/1/
F	Chlorella pyrenoidosa		Begyndende hæmning af vækst	50-100	/70/
	<u>Krebsdyr:</u>				
F	Daphnia magna	LC 0		16	/1/
S	Reje	Begyndende toksicitet		14	/68/
	<u>Fisk:</u>				
F	Krusisk karpe	24 t LC 50		21	/1/
F	Ørred-yingel	24 t LC 50		7	/1/
F	Fathead minnow (Tykhovedet elritze)	96 t LC 50		14	/1/
F	Skalle	24 t LC 50		16	/1/
F	Suder	24 t LC 50		18	/1/
	<u>Cellekultur af mus:</u>				
		48 t EC 5 for væksthæmning		12	/74/
		48 t EC 75 for væksthæmning		122	/74/

STOFNAVN: 2,4-xylenol

S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFEREN.
F: ferskvand					
	<u>Bakterier:</u>				
F	E. coli	LC 0		500	/1/
	<u>Alger:</u>				
F	Scenedesmus	LC 0		40	/1/
F	Chlorella pyrenoidosa		Begyndende hæmning af vækst	50-100	/70/
	<u>Krebsdyr:</u>				
F	Daphnia	LC 0		24	/1/
	<u>Fisk:</u>				
F	Krusisk karpe	24 t LC 50		30	/1/
F	Suder	24 t LC 50		13	/1/
F	Ørred-embryoner	24 t LC 50		28	/1/
F	Bluegill	24 t LC 50		18	/62/
F	Bluegill	96 t LC 50		7,8	/62/
	<u>Cellekultur af mus:</u>				
		48 t EC 11 for væksthæmning		12	/74/
		48 t EC 99 for væksthæmning		122	/74/

STOFNAVN:	3,5-xylenol					
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERE	
F: ferskvand						
<u>Bakterier:</u>						
F	E. coli	LC 0		> 100	/1/	
<u>Alger:</u>						
F	Scenedesmus	LC 0		40	/1/	
F	Chlorella pyrenoidosa		Begyndende hæmning af vækst	50-100	/70/	
<u>Protozoa:</u>						
F	Tetrahymena pyriformis	24 t LC 100		280	/1/	
<u>Krebsdyr:</u>						
S	Reje	Begyndende toksicitet		15	/68/	
<u>Fisk:</u>						
F	Krusisk karpe	24 t LC 50		53	/1/	
F	Suder	24 t LC 50		52	/1/	
F	Ørred embryoner	24 t LC 50		50	/1/	
F	Guldfisk	24 t LC 50		34	/71/	
		96 t LC 50		22	/71/	
<u>Cellekultur af mus:</u>						
		48 t EC 7 for væksthæmning		12	/74/	
		48 t EC 44 for væksthæmning		122	/74/	

STOFNAVN:	2,4-xylidin (2,4-dimethylanilin)					
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFERE	
F: ferskvand						
<u>Bakterie:</u>						
F	Pseudomonas putida		Begyndende hæmning af vækst	8	/1/	
<u>Alger:</u>						
F	Scenedesmus quadricauda		Begyndende hæmning af vækst	5	/1/	
<u>Protozoa:</u>						
F	Entosiphon sulcatum		Begyndende hæmning af vækst	9,8	/1/	
F	Uronema parduczi		Begyndende hæmning af vækst	12	/1/	
<u>Fisk:</u>						
F	Guldrimte	48 t LC 0		98	/57/	
F	Guldrimte	48 t LC 50		196	/57/	

STOFNAVN:	2,3-xylidin				
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFEREN
F: ferskvand					
	<u>Cellekultur af mus:</u>	48 t EC 16 for væksthæmning		121	/74/
STOFNAVN:	2,5-xylidin				
S: saltvand	ORGANISME	PARAMETER FOR AKUT TOKSISK EFFEKT	PARAMETER FOR KRONISK TOKSISK EFFEKT	mg/l	REFEREN
F: ferskvand					
	<u>Cellekultur af mus:</u>	48 t EC 12 for væksthæmning		121	/74/
STOFNAVN:	2,6-xylidin (2,6-dimethylanilin)				
	<u>Protozoa:</u>				
F	Tetrahymena pyriformis	24 t LC 100		150	/1/
	<u>Cellekultur af mus:</u>	48 t EC 10 for væksthæmning		121	/74/



AGERN ALLE 11 · DK-2970 HØRSHOLM
SARALYST ALLE 52 · DK-8270 HØJBJERG

*02-8652

*06-2741

RAPPORTDATABLA

1. Sag nr: 97.411.600

6. Titel

KEMIKALIEINVENTERING AF INDHOLDS-STOFFER I FULFAFRI SPILDEVANDS-STRØMME OG RENSET SPILDEVAND

Dato: 1985.07.08

Antal sider: 123

2. Sagsbeh. - Sekr. - Afd.

PLJ/KOK	MK	øktoksi-kologisk
---------	----	------------------

7. Nøgleord på dansk:
 Litteraturundersøgelse
 Spildevand
 Skæbne
 Effekter
 52 Organiske stoffer

Keywords in English:
 Literature study
 Waste water
 Fate
 Effects
 52 Organic substances

3. Rekvirent:

Grindsted Products A/S
 Edwin RAhrs Vej 38
 8220 Brabrand

Abstract in English:

A literature study of fate and effects of 52 organic substances occurring in the effluent from a planned waste water treatment system has been performed. The study has included collection of physical/chemical, biochemical, biological and ecotoxicological data, pertaining to the fate and effect of the compounds within the waste water treatment plant and following discharge of the effluent into a small river system (Grindsted å)

4. Evt. geografisk område:

DK-7200 Grindsted,
 Grindsted å

5. Rekvireret rapport: X
Forskningsrapport:

~~Rapporten forhandles af:~~
 ikke til salg

Pris:

YOU MAY REACH US BY FONOTELEX. CALL TELF. ^{Telex 37874 vkiiph dk} EX DK. ATTN: WATERQUALITY HØRSHOLM



II. AGERN ALLE
 DK-2970 HØRSHOLM
 D E N M A R K

PHONE 045 (02) 86 52 11

CABLE: WATERQUALITY, HØRSHOLM

GIRO ACCOUNT: 314 48 09

BANKERS: HANDELSBANKEN