

Tilvejebringelse af forslag til sundhedsmæssige og miljøkvalitets- kriterier for stoffer med relation til Grindstedværket

Indledende vurdering af tre enkeltstoffer

- allylamin (CAS 107-11-9)
- N-N-diethylnicotinamid (CAS 59-26-7)
- 3-methoxypropionitril (CAS 110-67-8)

Rapport

Reference A237370

13. april 2023

Tilvejebringelse af forslag til sundhedsmæssige og miljøkvalitetskriterier for stoffer med relation til Grindstedværket

Indledende vurdering af tre enkeltstoffer allylamin (CAS 107-11-9), N-N-diethylnicotinamid (CAS 59-26-7) og 3-methoxypropionitril (CAS 110-67-8)

Rapport
A237370

Udarbejdet for: Region Syddanmark
Repræsenteret ved: Jørgen F. Christensen

Godkendt af	
	14-04-2023
X	
Approved by	
Signed by: Jens Tørsløv	

Projektleder: Helle Buchardt Boyd
Kvalitetsansvarlig: Jens Tørsløv
Udarbejdet af: Anne Rathmann Pedersen
Projektnr.: 11829186
Godkendt af: Jens Tørsløv
Godkendelsesdato: 13-04-2023
Revision: Final 3.0
Klassifikation: **Fortrolig:** Dette dokument er kun tilgængeligt for medlemmerne af projektgruppen og må ikke deles med andre uden kundens forhåndsgodkendelse.
Filnavn: Indledende vurdering 3 stoffer 13042023

Indholdsfortegnelse

1	Opsummering	4
2	Baggrund	4
2.1	Metode	4
2.2	Stofidentitet	5
2.3	Litteratursøgning	5
2.4	Miljøkoncentrationer	6
3	Data for de tre stoffer	6
3.1	Fysisk-kemiske egenskaber og skæbne i miljøet	6
3.2	Økotoksicitet	7
4	Konklusion	11
5	Referencer	12

Tabeller

Tabel 1.1	Beskrivelse af stofidentitet og fareklassificering	5
Tabel 2.1	Fysisk-kemiske egenskaber samt bionedbrydelighed og bioakkumulation	6
Tabel 2.2	Giftighed af allylamin over for ferskvandsorganismer (EC ₅₀ , NOEC, EC _x osv.) - Akut toksicitet	8

1 Opsummering

I starten af projektet til tilvejebringelse af forslag til sundhedsmæssige og miljøkvalitetskriterier foretages en indledende vurdering af stofferne allylamin (CAS 107-11-9), N-N-diethylnicotinamid (CAS 59-26-7) og 3-methoxypropionitril (CAS 110-67-8) med henblik på at undersøge, hvorvidt der bør udarbejdes miljøkvalitetskriterier for ferskvand ud fra de målte koncentrationer i Grindsted by.

Der er foretaget datasøgning i tilgængelig litteratur og i relevante databaser for økotoksicitet i fersk overfladevand for de tre stoffer. Der er udelukkende fundet data for allylamin, mens der ikke er fundet data for økotoksicitet af stofferne N-N-diethylnicotinamid og 3-methoxypropionitril.

Der er fundet data for akut giftighed i miljøet for allylamin over for en række forskellige ferskvandorganismer, mens der ikke er fundet data for kronisk giftighed af allylamin.

Der er ikke fundet data for økotoksicitet for stofferne N-N-diethylnicotinamid og 3-methoxypropionitril.

Med udgangspunkt i en PNEC-værdi på 7,65 µg/L for allylamin, som er højere end de målte koncentrationer i å-vandet, konkluderes det, at der ikke er behov for at fastlægge et kvalitetskriterie for ferskvand for allylamin. Samtidig er allylamin kun påvist i én ud af 48 prøver for å-vandet.

N-N-diethylnicotinamid er udelukkende påvist i én ud af 48 prøver for å-vandet, mens 3-methoxypropionitril ikke er påvist i koncentrationer over detektionsgrænsen i 48 analyserede prøver. Derfor konkluderes det, at der ikke er behov for at fastlægge et kvalitetskriterie for ferskvand for de to stoffer.

2 Baggrund

Den indledende vurdering tager udgangspunkt i de målte koncentrationer i forureningsfanerne fra fabriksgrunden og lossepladsen samt koncentrationerne målt i Grindsted Å. Ud fra en søgning i umiddelbart tilgængelig litteratur og databaser identificeres de tre stoffers toksicitet og egenskaber.

Det vurderes, om det er sandsynligt, at stofferne medfører effekter ved de aktuelt målte koncentrationer. Resultatet af den indledende vurdering er en anbefaling af, hvorvidt det er relevant at udarbejde egentlige forslag til miljøkvalitetskriterier i ferskvand for stofferne.

2.1 Metode

Vurderingen baseres på om de målte koncentrationer er meget lavere end rapporterede effektkoncentrationer i litteraturen, dvs. at sandsynligheden for at der er økotoksikologiske effekter af stoffet ved de observerede koncentrationer er meget lille. Hvis dette ikke er tilfældet, bør der fastlægges et kvalitetskriterie.

Usikkerheden af den indledende vurdering ligger i et forventet begrænset datagrundlag, da der ikke foretages en tilbundsående vurdering af litteratur og data i den indledende vurdering. Vejledningen for fastlæggelse af kvalitetskriterier i vandmiljøet opererer med applikationsfaktorer på op til 1000

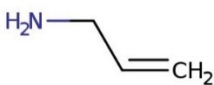
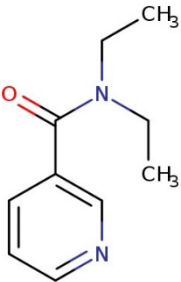

Vurdering af
usikkerhed

for ferskvand. Størrelsen af faktoren afhænger af datagrundlaget, og er et udtryk for et forsigtighedsprincip ved ekstraoppløring fra test af en enkelt art i laboratoriet til en effekt på økosystemniveau i vandmiljøet.

2.2 Stofidentitet

I nedenstående tabel er vist en oversigt over de tre stoffers identitet og fareklassificering. Det fremgår af tabellen, at det kun er allylamin, som har en miljøklassificering. Miljøklassificeringen af allylamin er H411, som betyder, at stoffet er klassificeret som "Giftig for vandlevende organismer, med langvarige virkninger".

Tabel 1.1 Beskrivelse af stofidentitet og fareklassificering

	Allylamin	N, N-diethylnicotinamid	3-Methoxypropionitril
IUPAC navn	prop-2-en-1-amin	N,N-diethylpyridin-3-carboxamide	3-methoxypropanenitril
Molekylestruktur			
CAS nr.	107-11-9	59-26-7	110-67-8
EC nr.	203-463-9	200-418-5	203-790-7
Kemisk formel	C3H7N	C10H14N2O	C4H7NO
Molvægt	57,09 g/mol	178,23 g/mol	85,10 g/mol
Smiles kode	C=CCN	CCN(CC)C(=O)C1=CN=CC=C1	COCCC#N
Synonym	dipropenylamin	Nikethamid, Nicordamin	2-cyanoethyl methyl ether
Miljøklassificering	H411 ¹	ingen	ingen
Anden klassificering	H331, H311, H301, H225 ¹	H301, H315, H319, H335 ²	H315; H319, H335 ³

¹ Harmoniseret CLP klassificering ECHA.europa.eu (CAS 107-11-9)

² Selvklassificering ECHA.europa.eu (CAS 59-26-7)

³ Selvklassificering ECHA.europa.eu (CAS 110-67-8)

2.3 Litteratursøgning

Der er søgt efter data for stoffernes egenskaber og økotoksicitet i ferskvand i tilgængelig litteratur og i relevante databaser. Der er foretaget søgning baseret på stofnavn og CAS nr. suppleret med relevante søgeord i følgende kilder:

- ECHA's website (ECHA.europa.eu)
- Ecotoxicology database (ECOTOX) (cfpub.epa.gov/ecotox)
- eChemportal (www.echemportal.org)
- Google Scholar (scholar.google.com)
- Science Direct (www.sciencedirect.com)
- PubChem (pubchem.ncbi.nlm.nih.gov).

2.4 Miljøkoncentrationer

For at vurdere om målte koncentrationer i Grindsted by kan udgøre en risiko for fersk overfladevand i Grindsted tager vurderingen udgangspunkt i de målte koncentrationer af de tre stoffer allylamin, N-N-diethylnicotinamid og 3-methoxypropionitril i forureningsfanerne fra fabriksgrunden og lossepladsen samt koncentrationerne målt i Grindsted Å. For de målte koncentrationer henvises der til bilag 4 fra udbudsmaterialet og til NIRAS (2009) /1/.

De målte koncentrationer i å-vandet i Grindsted by er for de tre stoffer:

Allylamin: 0,11 µg/L

N-N-diethylnicotinamid: 3,2 µg/L

3-methoxypropionitril: < 0,1 µg/L.

Ifølge oplysninger tilgængelige i Regionens GeoGIS-database er der i å-vandet kun påvist allylamin og N-N-diethylnicotinamid i én ud af 48 prøver, mens 3-methoxypropionitril ikke er påvist i koncentrationer over detektionsgrænsen på 0,1 µg/L i de 48 analyserede prøver.

3 Data for de tre stoffer

3.1 Fysisk-kemiske egenskaber og skæbne i miljøet

Stoffernes fysisk-kemiske egenskaber samt data for nedbrydelighed og bioakkumulering er vist i nedenstående tabel.

Tabel 2.1 Fysisk-kemiske egenskaber samt bionedbrydelighed og bioakkumulation

	Allylamin	N, N-diethylnicotinamid	3-Methoxypropionitril
Octanol/vand fordelingskoefficient, log K_{ow}	0,03 /1/ 0,13 (20 °C) Eksperimentel værdi /2/	0,33 /1/	-0,42 /1/
Vandopløselighed	100 g/L (20 °C) /2/	> 100 g/L (23 °C) /3/	159 g/L /1/
Damptryk	32 kPa (25 °C) /2/	0 Pa (20-25°C) /1/	291 Pa (20-25°C) /1/
Henry's konstant	1,84 Pa. m ³ /mol (20-25°C) /1/	2,5E-06 Pa. m ³ /mol (20-25°C) /1/	0,048 Pa. m ³ /mol (20-25°C) /1/

Adsorptionskoefficient, jord, Koc	4,13 L/kg Estimeret værdi /4/	41,5 L/kg Estimeret værdi /4/	17,9 L/kg Estimeret værdi /4/
Biologisk nedbrydelighed	Let bionedbrydelig /2/	Ingen oplysning	Ingen oplysning
Biologisk halveringstid	5,15 dage Estimeret værdi /4/	4,91 dage Estimeret værdi /4/	4,12 dage Estimeret værdi /4/
Bioakkumulation, BCF	1,98 Estimeret værdi /4/	4,69 Estimeret værdi /4/	1,51 Estimeret værdi /4/

3.2 Økotoksicitet

Der er udelukkende søgt efter data for økotoksicitet i fersk overfladevand og dermed effekter på ferskvandsorganismer.

Der er ikke fundet data for økotoksicitet for stofferne N-N-diethylnicotinamid og 3-methoxypropionitril.

Data for giftighed af allylamin over for ferskvandorganismer er vist i nedenstående tabel. Der er fundet data for akut giftighed i miljøet for allylamin over for en række forskellige ferskvandorganismer herunder alger, krebsdyr, fisk, mikroorganismer, insekter, invertebrater, padder, bløddyr og orme.

Der er ikke fundet data for kronisk giftighed af allylamin.

I REACH registreringsdossieret for allylamin /2/ er der udledt nul-effektkoncentrationer, PNEC-værdier på baggrund af det tilgængelige datasæt for giftighed i miljøet. På baggrund af data for giftigheden over for ferskvandsfisk med EC50 på 7,65 mg/L er der udledt en PNEC-værdi for allylamin på 7,65 µg/L og ved anvendelse af en usikkerhedsfaktor på 1000. Denne usikkerhedsfaktor er baseret på et datasæt med tilgængelige data for korttidstest på tre trofiske organismeniveauer (alger, krebsdyr og fisk).

Tabel 2.2 Giftighed af allylamin over for ferskvandsorganismer (EC₅₀, NOEC, EC_x osv.) - Akut toksicitet

Art	Eksposeringstid	Effekt	Værdi	Reference	Bemærkning
Alger					
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	72 timer	EC50, vækstrate EC10, vækstrate LOEC, vækstrate NOEC, vækstrate	22,31 mg/L 9,25 mg/L 6,71 mg/L 2,17 mg/L	/2/	
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	48 timer	EC10, vækstrate EC50, vækstrate	181 mg/L 459 mg/L	Kusk, K.O., A.M. Christensen, and N. Nyholm, 2008 refereret i /5/	Nominelle værdier
<i>Chlorella pyrenoidosa</i>	48 timer	NOEC, vækstrate	16 mg/L	/6/	Nominelle værdier
<i>Raphidocelis subcapitata</i>	48 timer	NOEC, vækstrate	13 mg/L		
<i>Scenedesmus pannonicus</i>	192 timer		17 mg/L		
Krebsdyr					
<i>Daphnia magna</i>	48 timer 48 timer 48 timer	EC50, mobilitet NOEC, mobilitet LOEC, mobilitet	28,9 mg/L 19,2 - 117 mg/L 43,4 - 256 mg/L	/2/	, statistisk
<i>Asellus aquaticus</i>	48 timer	LC50	100 mg/L	/7/	Nominelle værdier
<i>Gammarus pulex</i>	48 timer	LC50	130 mg/L		
Fisk					
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96 timer	LC50	7,65 mg/L	/2/	semi-statisk

Art	Eksposeringstid	Effekt	Værdi	Reference	Bemærkning
	96 timer	NOEC, opførsel	1,09 mg/L		
<i>Oryzias latipes</i>	48 timer	LC50	16 mg/L	/6/	Nominelle værdier
<i>Pimephales promelas</i>	48 timer	LC50	2,1 mg/L		
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	48 timer	LC50	15 mg/L		
Mikroorganismer					
Aktivt slam	3 timer	EC50 NOEC	234 mg/L 10 mg/L	/2/	Inhibering af aktivt slam
<i>Vibrio fischeri</i>	3 timer	EC50, fluorescens	18 mg/L	/8/	
Andre organismer					
Insekter					
<i>Culex pipiens</i>	48 timer	LC50	171 mg/L	/6/	Nominelle værdier
<i>Aedes aegypti</i>	48 timer	LC50	120 mg/L		
<i>Cloeon dipterum</i>	48 timer	LC50	30 mg/L	/7/	Nominelle værdier
<i>Corixa punctata</i>	48 timer	LC50	120 mg/L		
<i>Ischnura elegans</i>	48 timer	LC50	180 mg/L		
<i>Nemoura cinerea</i>	48 timer	LC50	100 mg/L		
<i>Chironomus riparius</i>	48 timer	LC50	14 mg/L		
Invertebrater					
<i>Hydra oligactis</i>	48 timer	LC50	17,5 mg/L	/7/	Nominelle værdier
Padder					
<i>Xenopus laevis</i>	48 timer	LC50	12,4 mg/L	/2/	Larver
Bløddyr og orme					

Art	Eksponeeringstid	Effekt	Værdi	Reference	Bemærkning
<i>Lymnaea stagnalis</i>	48 timer	LC50	5 mg/L	/7/	Nominelle værdier
<i>Dugesia lugubris</i>	48 timer	LC50	66 mg/L		
<i>Erpobdella octoculata</i>	48 timer	LC50	26 mg/L		
<i>Tubificidae</i>	48 timer	LC50	18 mg/L		

4 Konklusion

Det er relevant at sammenligne PNEC-værdien, som er udledt i forbindelse med REACH registreringen af allylamin med de målte koncentrationer i Grindsted by. Den udledte PNEC-værdi på 7,65 µg/L er højere end den målte koncentration i å-vandet på 0,11 µg/L, og samtidig er allylamin kun påvist i én ud af 48 prøver for å-vandet. Derfor peger denne indledende vurdering på, at der ikke er behov for at fastlægge et kvalitetskriterie for ferskvand for allylamin.

Hvis der skal anvendes en usikkerhedsfaktor, der er lavere end 1000, skal der være tilgængelige data for kronisk giftighed. Det vil således være muligt at anvende en lavere usikkerhedsfaktor end 1000, hvis data blev suppleret med resultater fra langtidstest.

For de to stoffer N-N-diethylnicotinamid og 3-methoxypropionitril, hvor der ikke er fundet data, er det som udgangspunkt ikke muligt at udlede et miljøkvalitetskriterie. Der vil dog kunne udledes et vejledende kriterie baseret på ikke-test data herunder anvendelse af estimerede værdier ved hjælp af QSAR-metoder¹ eller ved anvendelse af en "read-across"-tilgang, hvor der ses på data for en gruppe af strukturelt lignende stoffer.

Det er muligt, at en simpel QSAR-analyse kan estimere giftigheden af de to stoffer overfor ferskvandsorganismer og dermed sandsynliggøre, om der er behov for udledning af et kvalitetskriterie for de to stoffer.

Når det tages i betragtning at N-N-diethylnicotinamid udelukkende er påvist i én ud af 48 prøver, og 3-methoxypropionitril ikke er påvist i koncentrationer over detektionsgrænsen i 48 prøver, vurderes det, at der ikke er behov for at fastlægge et kvalitetskriterie for ferskvand for de to stoffer.

¹ Quantitative Structure-Activity Relationship

5 Referencer

- /1/ Redegørelse over anvendte kemikalier på Grindstedværket og deres potentielle trussel i forhold til miljøet. NIRAS for Region Syddanmark, November 2009.
- /2/ REACH registreringsdossier (CAS 107-11-9) ECHA.europa.eu
- /3/ Pubchem.ncbi.nlm.nih.gov (CAS 59-26-7, CAS 110-67-8)
- /4/ Comptox.epa.gov (CAS 59-26-7, CAS 110-67-8)
- /5/ Ecotoxicology database (ECOTOX) (cfpub.epa.gov/ecotox)
- /6/ Slooff,W., J.H. Canton & J.L.M. Hermens (1983). Comparison of the Susceptibility of 22 Freshwater Species to 15 Chemical Compounds. I. (Sub)Acute Toxicity Tests. *Aquat. Toxicol.*4(2): 113-128, 1983.
- /7/ Slooff,W. (1983). Benthic Macroinvertebrates and Water Quality Assessment: Some Toxicological Considerations. *Aquat. Toxicol.*4:73-82, 1983.
- /8/ Rogers,K.R., S.L. Harper, and G. Robertson (2005). Screening for Toxic Industrial Chemicals Using Semipermeable Membrane Devices with Rapid Toxicity Assays. *Anal. Chim. Acta*543(1/2): 229-235, 2005.