



## **Datablad för Kvintozen och pentakloranilin**

Kemakta Konsult AB  
Institutet för Miljömedicin

**Juni 2016**

# Innehåll

<b>Inledning</b> .....	<b>1</b>
<i>Generella riktvärden för kvintozen och pentakloranilin</i> .....	1
<i>Ämnesidentifikation</i> .....	1
<b>Fysikaliska och kemiska uppgifter</b> .....	<b>2</b>
<i>Fördelningskoefficienten mellan jord och vatten, <math>K_d</math></i> .....	2
<i>Fördelningskoefficienter för organiska och flyktiga ämnen, <math>K_{oc}</math>, <math>K_{ow}</math> och <math>H</math></i> .....	2
<i>Frifasgräns</i> .....	3
<b>Bioupptagsfaktorer</b> .....	<b>3</b>
<i>Upptag i växter</i> .....	3
<i>Upptag i fisk</i> .....	3
<b>Toxicitetsparametrar</b> .....	<b>4</b>
Övrig exponering .....	4
Cancerklassning.....	4
Hudupptag .....	4
Akuttoxicitet .....	4
TDI/Oral risk .....	4
RfC/Inhalationsrisk .....	5
<b>Skydd av grundvatten</b> .....	<b>5</b>
<b>Skydd av markmiljö</b> .....	<b>5</b>
<i>Markmiljö, känslig markanvändning</i> .....	6
<i>Markmiljö, mindre känslig markanvändning</i> .....	6
<i>Hänsyn till bioackumulering</i> .....	6
<b>Bakgrundshalter i jord</b> .....	<b>6</b>
<b>Skydd av ytvatten</b> .....	<b>7</b>
<b>Referenser</b> .....	<b>8</b>

# Inledning

Detta dokument redovisar underlaget till val av ämnesparametrar för kvintozen och pentakloranilin i modellen för beräkning av riktvärden för förorenad mark. För parameterdefinitioner och en beskrivning av hur parametrarna används vid riktvärdesberäkning hänvisas till rapporten ”Riktvärden för förorenad mark, Modellbeskrivning och vägledning” (Naturvårdsverket 2009). Databladet är framtaget av Kemakta Konsult AB och Institutet för Miljömedicin på uppdrag av Naturvårdsverket.

Parametervärdena som redovisas nedan är framtagna för användning i riktvärdesmodellen och rekommenderas inte som bedömningsgrunder för andra ändamål, t.ex. bedömning av ytvattenhalter eller bedömning av grundvattenhalter.

## Generella riktvärden för kvintozen och pentakloranilin

### Generella riktvärden för summa kvintozen och pentakloranilin i mark

	Generella riktvärden	
Känslig markanvändning (KM)	0,12	mg/kg TS
Mindre känslig markanvändning (MKM)	0,4	mg/kg TS

Riktvärdet gäller summa kvintozen och pentakloranilin.

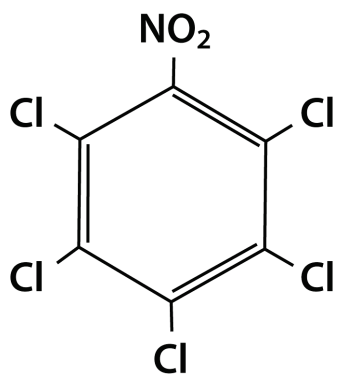
Riktvärdet för KM styrs av kravet på skydd av grundvatten som en resurs. Värdet för skydd av hälsa är 6 mg/kg och intag av växter är den dominerande exponeringsvägen. Även intag av dricksvatten är en viktig exponeringsväg. Värdet för skydd av markmiljö är 0,5 mg/kg TS.

Även riktvärdet för MKM styrs av kravet på skydd av grundvatten. Värdet för skydd av markmiljön är något högre, 5 mg/kg. Det hälsoriskbaserade riktvärdet ligger mycket högre (870 mg/kg TS).

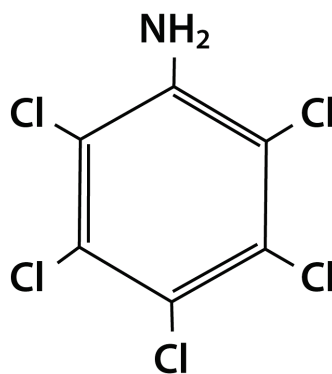
Riktvärdet för skydd av ytvatten har beräknats till 47 mg/kg TS.

## Ämnesidentifikation

Kvintozen (pentaklornitrobensen, CAS nummer 82-68-8) har varit verksamt ämne i fungicider (exempelvis Brassicol) för behandling av jord mot markburna sjukdomar i plantskolor. Ämnet förbjöds i Sverige 1985. Pentakloranilin (CAS nummer 527-20-8) är en nedbrytningsprodukt av kvintozen. Övriga nedbrytningsprodukter kan vara pentaklorbensen, pentaklortioanisol och pentaklorfenol. Hexaklorbensen och pentaklorbensen har även förekommit som föroreningar i kvintozenpreparat. Pentakloranilin har enligt olika bekämpningsmedelsdatabaser (Kemikalieinspektions bekämpningsmedelsregister) inte använts som bekämpningsmedel.



Kvintozen



Pentakloranilin

Eftersom både kvintozen och pentakloranilin ofta förekommer samtidigt och har liknande toxiska verkningar togs ett riktvärde fram som uttrycks som summa kvintozen och pentakloranilin. Dataunderlaget för pentakloranilin är bristfälligt och därför är riktvärdet huvudsakligen baserat på data för kvintozen, men tillgängliga data för pentakloranilin presenteras i detta datablad.

## Fysikaliska och kemiska uppgifter

### Fördelningskoefficienten mellan jord och vatten, $K_d$

$K_d$ -värdet används inte för kvintozen och pentakloranilin i riktvärdesmodellen. Fastläggningen i jorden beräknas istället med fördelningsfaktorn mellan vatten och organiskt kol, se nedan.

### Fördelningskoefficienter för organiska och flyktiga ämnen, $K_{oc}$ , $K_{ow}$ och $H$

Vid framtagning av fysikaliska och kemiska parametrar har flera databaser använts, PPDB (2014), HSDB (2016), EpiSuite (USEPA, 2012) samt RIVM (1998). Generellt har experimentella värden använts i första hand. Beräknade värden används då inga experimentella värden finns. Valda fysikaliska och kemiska parametrar samt kommentarer på val av värdet visas i tabellen nedan.

**Parametervärden i riktvärdesmodellen, fördelningsfaktorer mellan vatten och organiskt kol ( $K_{oc}$ ), oktanol och vatten ( $K_{ow}$ ) samt Henrys konstant ( $H$ ) för kvintozen och pentakloranilin**

Parameter	Ämne	Värde	Val av värde
Kow (l/kg)	kvintozen	$4,37 \cdot 10^4$	Experimentellt värde från EpiSuite. Ligger på samma nivå som beräknade värden i EpiSuite och på samma nivå som värdet som anges av PPDB, vilket är verifierat experimentellt. Även HSDB anger ett Kow värde på samma nivå.
	pentakloranilin	$6,6 \cdot 10^4$	Experimentellt värde från EpiSuite. Ligger på samma nivå som beräknade värden i EpiSuite. PPDB anger samma värde.
Koc (l/kg)	kvintozen	$4,5 \cdot 10^3$	Värde från PPDB. Värdet klassas av PPDB avseende kvalitet som ej verifierad. Värdet är en faktor 2 högre än det som anges av EpiSuite, men en faktor 4 lägre än ett beräknat värde i HSDB.

Parameter	Ämne	Värde	Val av värde
	pentakloranilin	$1,05 \cdot 10^4$	Värde från PPDB. Värdet klassas av PPDB avseende kvalitet som ej verifierad från okänd datakälla. Värdet är en faktor 20 högre än det som anges av EpiSuite, men en faktor 4 lägre än ett beräknat värde i HSDB.
H (dimensionslös)	kvintozen	$1,8 \cdot 10^{-3}$	Experimentellt värde från EpiSuite, som ligger något högre än beräknade värden i EpiSuite.
	pentakloranilin	$4,0 \cdot 10^{-5}$	Beräknade värde från EpiSuite. Inga data finns i PPDB. Något lägre än beräknat värde från RIVM.

För beräkning av riktvärdena för summa kvintozen och pentakloranilin används de värden för Kow, Koc och Henrys konstant som gäller för kvintozen. Kvintozen har en större rörlighet i marken och förekommer vanligen i högre halter än nedbrytningsprodukten pentakloranilin.

## Frifasgräns

### Parametervärden i riktvärdesmodellen, frifasgräns för kvintozen och pentakloranilin

Cfreephase	1000	mg/kg
------------	------	-------

För kvintozen och pentakloranilin är teoretiska beräkningar av halten när fri fas kan uppkomma inte helt relevant eftersom halterna blir orimligt höga långt innan risk för frifas kan förekomma. Därför används istället de gränser som rekommenderas för farligt avfall enligt Avfall Sverige (2007). Kvintozen och pentakloranilin klassas som Bekämpningsmedel C (övriga bekämpningsmedel).

## Bioupptagsfaktorer

### Upptag i växter

#### Parametervärden i riktvärdesmodellen, upptagsfaktorer för summa kvintozen och pentakloranilin i grönsaker och rotsaker

Upptag i växter beräknas av modellen enligt ”Riktvärden för förorenad mark” (Naturvårdsverket, 2009) avsnitt 4.6.2. I beräkningarna tas hänsyn till föreningens kemiska egenskaper (fördelningen oktanol-vatten, Kow-värdet). För ämnen med mycket höga Kow-värden (exempelvis dioxiner och PCB-föreningar) har empiriska växtupptagsfaktorer använts eftersom modellen ansågs fungera sämre för mycket lipofila ämnen, men  $\log Kow > 6$ . Utredningar av upptag av PCB i växter har visat att modellen ger en bra uppskattning av växtupptagsfaktorer som har rapporterats i litteraturen. Kvintozen och pentakloranilin har  $\log Kow$ -värden i samma nivå som PCB. Därför beräknas växtupptagsfaktorn i riktvärdesmodellen utifrån Kow-värdet.

### Upptag i fisk

Beräknas av modellen enligt ”Riktvärden för förorenad mark” (Naturvårdsverket, 2009), avsnitt 4.7.

# Toxicitetsparametrar

Underlaget för bedömning av hälsoeffekter av kvintozen bedöms som relativt stort. De värden som anges för kvintozen bedöms också vara skyddande för pentakloranilin som bildas som en nedbrytningsprodukt i kroppen. I djurexperiment orsakar kvintozen effekter på levern vid långtidsexponering. Tumörer i lever och sköldkörteln, samt utvecklingseffekter har också rapporterats i djurstudier efter långtidsexponering för höga doser (WHO, 1995).

## Övrig exponering

Inga data har hittats angående bakgrundsexponering av kvintozen eller pentakloranilin. Riktvärdena baserar sig på att 50 procent av det tolerabla dagliga intaget (TDI) kan tas i anspråk av det förorenade området.

## Cancerklassning

Kvintozen är klassificerat som en grupp 3 carcinogen (inte klassificerbart) av International Agency for Research on Cancer (IARC, 1987). USEPA (2006a) klassar kvintozen som en grupp C carcinogen (möjlig cancerframkallande för människa).

Pentakloranilin har inte klassificerats med avseende på cancerframkallande egenskaper (IARC, 2016).

## Hudupptag

### Parametervärdet i riktvärdesmodellen, hudupptagsfaktor för kvintozen

$f_{du}$	0,1	Dimensionslös
----------	-----	---------------

Kvintozen kan tas upp via huden (HSDB, 2016), men inga ämnesspecifika data för hudupptag har påträffats och istället används det värde på 0,1 som anges generellt för pesticider av USEPA (2015).

## Akuttoxicitet

Oralt LD50 för råttor anges till 265-12 000 mg/kg (siffror från flera studier), dermalt LD50 anges till 5000 mg/kg (råttor) (HSDB, 2016). Kvintozen är inte så akuttoxiskt att förgiftning kan orsakas av enstaka intag av förorenad jord.

## TDI/Oral risk

### Parametervärdet i riktvärdesmodellen, TDI-värdet för kvintozen

TDI	0,01	mg/kg kroppsvikt och dag
-----	------	--------------------------

Värdet för TDI (0,01 mg/kg kroppsvikt/dag) bygger på WHO (1995), som även EFSA (2013) refererar till. Detta Acceptabla Dagliga Intag (ADI, används för bl a bekämpningsmedel på samma sätt som TDI) baseras på NOAEL från en långtidsstudie i råttor där sköldkörteltoxicitet, cancer och utvecklingseffekter studerades.

USEPA anger ett lägre värde (0,003 mg/kg kroppsvikt/dag) som bygger på beräkningar för kvintozen från 1987 och baseras på en 2-årsstudie på toxicitet i lever hos hundar. En osäkerhetsfaktor på 300 användes, vilket tar hänsyn till bland annat osäkerheten i data gällande kronisk toxicitet (USEPA, 1987). USEPA anger kvaliteten och därmed säkerheten i ADI från den kritiska studien som medelgod. Även om detta värde är lägre så var testsubstanten i detta fall kontaminerad med hexaklorbensen och därför används istället WHO's värde.

## **RfC/Inhalationsrisk**

Referenskoncentrationer för kvintozen och pentakloranilin i luft saknas. I stället beräknas envägs-koncentrationen för exponeringsvägen ”Inandning av damm” med det orala TDI-värdet utifrån antaganden om andningshastighet och lungretention, se avsnitt 3.6.2 i rapporten ”Riktvärden för förorenad mark, modellbeskrivning och vägledning” (Naturvårdsverket, 2009).

# **Skydd av grundvatten**

## **Parametervärdet i riktvärdesmodellen, haltkriterium för kvintozen och pentakloranilin i grundvatten**

Ccrit_gw	0,0001	mg/l
----------	--------	------

Det finns inga specifika gränsvärden för kvintozen eller pentakloranilin i dricksvatten. Eftersom kvintozen är ett bekämpningsmedel gäller enligt EU Direktiv 98/83/EC och Livsmedelsverket (2015) ett generellt gränsvärde för dricksvatten på 0,1 µg/l.

En beräkning utgående från TDI-värdet enligt den metod som används av WHO (konsumtion 2 l/d, kroppsvikt 70 kg och 10 % av TDI från dricksvattnet) skulle ge en dricksvattennorm på ca 10 µg/l.

För beräkning av riktvärden används 0,1 µg/l som haltkriterium.

# **Skydd av markmiljö**

RIVM har tagit fram riktvärden för pentakloranilin i jord (RIVM, 1998). Kroniska data fanns för en växt (sallad) och akuta data för två arter av dagmask. Det lägsta kroniska värdet (NOEC-värde) var 50 mg/kg. Baserat på dessa data beräknades ett HC50-värde på 106 mg/kg. Ett HC50-värde beräknades även utifrån akvatiska data, där ett HC50 för effekter i ytvatten på 10 µg/l motsvarar ett HC50 för jord på 5,9 mg/kg TS. Inget MPC-värde beräknades

I USA togs ett riktvärde (Soil screening benchmarks) på 100 mg/kg TS fram för pentakloranilin för skydd av marklevande djur (ORNL, 1997), men detta värde bedömdes av ORNL vara mycket osäkert.

Inga riktvärden har påträffats för kvintozen i jord. I datasammanställning från RIVM (1994) rapporteras att inga data för marklevande organismer finns för kvintozen. Ett MPC-värde (0,33 mg/kg TS) för marklevande organismer beräknades istället från akvatiska data.

RIVM gjorde även en bedömning av om MPC-värdet för direkta effekter även ger ett skydd för djur högre upp i näringskedjan. Eftersom NOEC-värdet för fåglar dividerat med biokonzentrationsfaktorn för kvintozen gav ett högre värde (5 mg/kg) bedömdes MPC-värdet för direkta effekter vara tillräckligt skyddande för djur högre i näringskedjan.

För kvintozen har toxicitetsdata för akvatiska organismer sammanställts av USEPA (2006b) (se avsnittet om skydd av ytvatten). Observerade NOEC-värden för vattenorganismer ligger i nivå med RIVM:s HC50-värde för pentakloranilin, vilket indikerar att toxiciteten av pentakloranilin och kvintozen ligger på samma nivå.

## Markmiljö, känslig markanvändning

**Parametervärdet i riktvärdesmodellen, miljöriskbaserade riktvärden för summa kvintozen och pentakloranilin vid känslig markanvändning**

$E_{KM}$	0,5	mg/kg TS
----------	-----	----------

RIVM (1998) redovisar inget MPC-värde, men dataunderlaget indikerar att ett riktvärde för summa kvintozen och pentakloranilin i mark med känslig användning bör ligga under 5 mg/kg TS, beräknat som lägsta NOEC (50 mg/kg) med en osäkerhetsfaktor på 10 enligt metodbeskrivning i RIVM (2001a). Dock består underlaget av data för endast tre arter och det beräknade MPC-värdet är på samma nivå som det HC50-värde som baseras på akvatiska data. Därför har vi använt en extra osäkerhetsfaktor av 10, och riktvärdet för mark sätts till 0,5 mg/kg. Detta värde ligger i samma nivå som värdet för kvintozen beräknat utifrån akvatiska data (0,33 mg/kg TS).

## Markmiljö, mindre känslig markanvändning

**Parametervärdet i riktvärdesmodellen, miljöriskbaserade riktvärden för summa kvintozen och pentakloranilin vid mindre känslig markanvändning**

$E_{MKM}$	5	mg/kg TS
-----------	---	----------

Detta värde motsvarar RIVM:s HC50-värde för pentakloranilin beräknat från akvatiska data.

## Hänsyn till bioackumulering

Utvärderingen som gjordes av RIVM (1994) indikerar att riktvärdet för  $E_{KM}$  skyddar mot sekundära effekter på djur högre upp i näringskedjan. NOEC-värdet för fåglar dividerat med biokoncentrationsfaktorn för kvintozen gav ett värde av (5 mg/kg). Även riktvärdet för MKM bedöms ge ett skydd för sekundära effekter.

## Bakgrundshalter i jord

Bakgrundshalter används inte för beräkning av riktvärden för organiska ämnen, inklusive kvintozen och pentakloranilin.



# Skydd av ytvatten

## Parametervärdet i riktvärdesmodellen, haltkriterium för summa kvintozen och pentakloranilin i ytvatten

Ccrit_sw	0,13	µg/l
----------	------	------

Inga miljö kvalitetsnormer finns för kvintozen eller pentakloranilin. Toxicitetsdata för akvatiska organismer har sammanställts av USEPA (2006b) för kvintozen. LC50 data finns för två fiskarter och för Daphnia (kräftdjur). Det lägsta LC50-värdet var 100 µg/l. Kroniska data finns för en fisk (NOEC = 13 µg/l) och Daphnia (NOEC = 18 µg/l). En säkerhetsfaktor 50 (enligt ECB (2003) på det lägsta NOEC värdet skulle ge ett vattenkvalitetskriterium på 0,26 µg/l för kvintozen/pentakloranilin, och halva detta kriterium antas som värdet för Ccrit\_sw i riktvärdesmodellen.

# Referenser

- Avfall Sverige (2007). *Uppdaterade bedömningsgrunder för förorenade massor*. Rapport 2007:01, Avfall Sverige.
- ECB (2003). *Technical Guidance Document on Risk assessment, Part II*. European Commission Joint Research Centre. EUR 20418
- EFSA (2013). The 2010 European Union report on pesticide residues in food. European Food Safety Authority (EFSA). The EFSA Journal 11 (3).
- HSDB (2016). Hazardous Substances Data Bank. Kvintozen. Sökning 2016.  
<http://toxnet.nlm.nih.gov/newtoxnet/hsdb.htm>
- IARC (1987). *IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans*. vol 5 suppl. 7. [http://monographs.iarc.fr/ENG/Classification/latest\\_classif.php](http://monographs.iarc.fr/ENG/Classification/latest_classif.php)
- Naturvårdsverket (2009). *Riktvärden för förorenad mark. Modellbeskrivning och vägledning*, Naturvårdsverket Rapport 5976.
- Livsmedelsverket (2015). *Livsmedelsverkets föreskrifter om dricksvatten*. SLVFS 2001:30, Innehåller ändringar tom LIVSFS 2015:3.
- ORNL (1997). *Toxicological Benchmarks for Contaminants of Potential Concern for Effects on Soil and Litter Invertebrates and Heterotrophic Processes*. 1997 Revision. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge TN.
- PPDB (2014). Pesticide Properties DataBase. University of Hertfordshire.  
<http://www.herts.ac.uk/aeru> (sökning december 2014)
- RIVM (1994): *Towards Integrated Environmental Quality Objectives for several compounds with a potential for secondary poisoning*. Report no. 679101 012. EJ van de Plassche. National Institute of Public Health and the Environment. Bilthoven, Netherlands
- RIVM (1998): *Ecotoxicological Serious Soil Contamination Concentrations: Fourth series of compounds*. Report no. 711701 003. R. Posthumus, T. Crommentuijn and E.J. van de Plassche. National Institute of Public Health and the Environment. Bilthoven, Netherlands.
- RIVM (2001a): *Ecotoxicological Serious Risk Concentrations for soil, sediment and (ground)water: updated proposals for first series of compounds*. RIVM report 711701 020. E.M.J. Verbruggen, R. Posthumus and A.P. van Wezel. National Institute of Public Health and the Environment, Netherlands.
- USEPA (1987) IRIS database, Integrated Risk Information System. Quintozene.  
[http://cfpub.epa.gov/ncea/iris/iris\\_documents/documents/subst/0254\\_summary.pdf](http://cfpub.epa.gov/ncea/iris/iris_documents/documents/subst/0254_summary.pdf)
- USEPA (2006a) Chemicals Evaluated for Carcinogenic Potential. USEPA Office of Pesticide Programs, Health Effects Division, Science Information Management Branch: (April 2006)]
- USEPA (2006b): Reregistration Eligibility Decision for Pentachloronitrobenzene. List A. Case No. 0128.

USEPA (2012). Estimation Program Interface, (EPI Suite), version 4.11. US EPA Office of Pollution Prevention.

USEPA (2015). Assessing Dermal Exposure from Soil. Region 3 Technical Guidance Manual, Risk Assessment, United States Environmental Protection Agency, Region 3, Hazardous Waste Management Division, .Office of Superfund Programs.  
<https://www.epa.gov/risk/assessing-dermal-exposure-soil>

WHO 1995 Pesticide residues in food, report of the 1995 joint FAO/WHO meeting of experts.  
[http://www.fao.org/fileadmin/templates/agphome/documents/Pests\\_Pesticides/JMPR/Reports\\_1991-2006/Report1995.pdf](http://www.fao.org/fileadmin/templates/agphome/documents/Pests_Pesticides/JMPR/Reports_1991-2006/Report1995.pdf)

