



Miljøministeriet
Miljøstyrelsen

Kortlægning af tilsætningsstoffer i chlorerede opløsningsmidler

Katerina Tsitonaki¹, Signe Nielsen¹, Claus Westergaard¹,
Jan Petersen², Ida Holm Olesen², Jørn Pedersen²

1Orbicon A/S, 2Region Syddanmark

Miljøstyrelsen vil, når lejligheden gives, offentliggøre rapporter og indlæg vedrørende forsknings- og udviklingsprojekter inden for miljøsektoren, finansieret af Miljøstyrelsens undersøgelsesbevilling.

Det skal bemærkes, at en sådan offentliggørelse ikke nødvendigvis betyder, at det pågældende indlæg giver udtryk for Miljøstyrelsens synspunkter.

Offentliggørelsen betyder imidlertid, at Miljøstyrelsen finder, at indholdet udgør et væsentligt indlæg i debatten omkring den danske miljøpolitik.

Indhold

INDHOLD	3
FORORD	5
SAMMENFATNING OG KONKLUSIONER	7
SUMMARY AND CONCLUSIONS	11
1 INDLEDNING	15
1.1 BAGGRUND	15
1.2 FORMÅL OG INDHOLD	15
2 CHLOREREDE OPLØSNINGSMIDLER: ANVENDELSE OG BRANCHER	17
2.1 CHLOREREDE OPLØSNINGSMIDLER	17
2.2 BRANCHER DER ANVENDER CHLOREREDE OPLØSNINGSMIDLER	18
2.3 TILSÆTNINGSSTOFFER I CHLOREREDE OPLØSNINGSMIDLER	19
2.4 FOREKOMST AF TILSÆTNINGSSTOFFER I FORURENINGSSAGER	19
3 DATAINDSAMLING	21
3.1 OPLYSNINGER FRA BRANCHEFORENING	21
3.2 OPLYSNINGER FRA PRODUKTREGISTRET	21
3.3 OPLYSNINGER FRA PATENTDATABASER	22
4 KORTLÆGNING AF INDHOLDSSTOFFER	23
4.1 INDLEDENDE SORTERING	23
4.2 PROCEDURE FOR STOFIDENTIFIKATION	23
5 SORTERING OG RISIKOVURDERING AF TILSÆTNINGSSTOFFER	25
5.1 INDSAMLING AF VIDEN OM STOFFERNES EGENSKABER OG TOKSICITET	25
5.1.1 <i>Sorteret efter datagrundlag</i>	26
5.2 PRIORITERING AF STOFLISTEN	26
5.2.1 <i>Pointtildeling for hyppighed</i>	27
5.2.2 <i>Pointtildeling for den maksimale angivne vægtprocent</i>	28
5.2.3 <i>Pointtildeling for stoffernes toksicitet</i>	28
5.2.4 <i>Pointtildeling for persistens</i>	29
5.3 VURDERING I FORHOLD TIL SPREDNINGSVEJE	29
6 RESULTATER	31
6.1 RISIKO FOR GRUNDEVANDET	31
6.2 RISIKO FOR AFDAMPNING	33
6.3 RISIKO FOR KONTAKT MED FORURENET JORD	34
6.4 TILSÆTNINGSSTOFFER, DER MANGLER CAS NR.	35
6.5 RISIKO FRA TILSÆTNINGSSTOFFER IFT. RISIKO FRA DE CHLOREREDE OPLØSNINGSMIDLER	36
7 KONKLUSION	39
8 REFERENCER	41

BILAGSFORTEGNELSE

Bilag A Resultater for patentsøgninger

Bilag B Liste over alle 122 fundne tilsætningsstoffer

Bilag C Stofegenskaber for de 62 tilsætningsstoffer med vægtprocent $\geq 1\%$

Bilag D QSAR for stoffer med dårligt datagrundlag

Forord

Nærværende projekt er udført under Miljøstyrelsens Teknologiprogram.

Tilskudsmodtager og bygherre er Region Syddanmark, og projektet er udført i samarbejde mellem Orbicon A/S og Region Syddanmark. Følgende medarbejdere har været tilknyttet til projektet:

Fra Region Syddanmark:

Jan Petersen, projektleder, Ida Holm Olesen og Jørn Pedersen, projektmedarbejdere.

Fra Orbicon:

Katerina Tsitonaki, projektleder, Signe Nielsen, projektmedarbejder og Claus Westergaard, kvalitetssikring.

Preben Bruun, Miljøstyrelsen, har sammen med Jan Petersen og Katerina Tsitonaki udgjort projektets styregruppe.

Projektet omfatter en kortlægning af tilsætningsstoffer, der har været anvendt i chlorerede opløsningsmidler, samt en risikovurdering af disse stoffer i forhold til jord og grundvand.

Hovedparten af projektet er udført i perioden februar-december 2010. Projektet er udvidet i februar 2011 med QSAR beregninger for udvalgte stoffer.

ACD Labs, Miljøstyrelsens kemikalieenhed og DTU Food har været behjælpelige med spørgsmål og indsamling af data i forbindelse med QSAR beregninger.

Sammenfatning og konklusioner

Chlorerede opløsningsmidler er blandt de hyppigst forekommende forureningskomponenter i jord, poreluft og grundvand. Stofferne anvendes primært til kemisk tøjrensning og som affedtningsmiddel i mange industrielle processer.

Chlorerede opløsningsmidler kan indeholde en lang række tilsætningsstoffer. Formålet med tilsætningsstofferne er at stabilisere produktet ved at inhibere nedbrydningsreaktioner. Tilsætningsstoffer kan omfatte syreneutraliserende stoffer, såsom epoxider og aminer, metalinhiberende stoffer som ethere, ketoner og sulphoxider, og /eller antioxidant som heterocycliske kvælstofforbindelser og phenoler.

Der findes ikke et samlet billede af, hvilke stoffer, der er eller har været tilsat, og som herigennem kan bidrage til en risiko for jord og grundvand. Derfor inddrages stofferne ikke i forbindelse med de forureningsundersøgelser, der gennemføres i dag.

Formål

Formålet med projektet er at foretage en kortlægning af tilsætningsstoffer i chlorerede opløsningsmidler samt at vurdere om stofferne udgør en trussel for jord og grundvand.

Anvendelse

Undersøgelse af forurening med tilsætningsstoffer kan være relevant i de tilfælde, hvor der er sket store spild af opløsningsmidler, og dermed store spild af evt. tilsætningsstoffer. Dette betyder, at renserier og industriaktiviteter, hvor der har været anvendt store mængder af opløsningsmidler til affedtning, er et særligt fokusområde.

De enkelte opløsningsmidler kræver forskellige indhold og type af stabilisatorer. 1,1,1-trichlorethan (1,1,1-TCA) er ustabil og kræver derfor det højeste indhold af stabilisatorer i form af metalinhiberende stoffer og syreneutraliserende stoffer.

Brancher hvor 1,1,1-TCA er anvendt, er dermed de mest relevante at undersøge i forhold til risiko for forurening med tilsætningsstoffer.

Fremgangsmåde for kortlægning af tilsætningsstoffer

Der er benyttet en række forskellige strategier til indsamling af viden:

- a) En række brancheorganisationer er kontaktet for at få oplysninger om benyttede opløsningsmidler og producenter inden for deres branche.
- b) Produktregisteret er kontaktet med henblik på at få bestemt og kvantificeret de branchespecifikke tilsætningsstoffer.
- c) Der er gennemgået en række patenter for specifikke opløsningsmidler. Gennemgangen af patentdatabaserne vurderes at have været et effektivt redskab til at indkredse mængden af benyttede

tilsætningsstoffer i chlorerede opløsningsmidler. Metoden har dog den ulempe, at det er usikkert i hvor stort et omfang de enkelte produkter er/har været benyttet, og om de er/har været benyttet specifikt i Danmark.

Sortering af tilsætningsstofferne

Der er i alt fundet 122 tilsætningsstoffer via gennemgang af patenter. En række stoffer optræder i patenter fra flere forskellige producenter. Idet tilsætningsstoffer kun udgør en meget lille andel af en evt. forurening, er det valgt at fokusere på stoffer, hvor den maksimale indholdsprocent i produkterne er lig med eller over 1 %. Der er ikke indhentet CAS-nr., og dermed heller ikke fysiske, kemiske eller toksikologiske data for stoffer, hvor den maksimale indholdsprocent er under 1.

Fremgangsmåde for indsamling af stoffernes egenskaber

62 stoffer og stofgrupper er identificeret som tilsætningsstoffer i chlorerede opløsningsmidler i mængder lig med eller over 1 %. For alle kemiske stoffer, der blev identificeret med et CAS-nr, er der foretaget en indsamling af fysiske, kemiske og toksikologiske egenskaber.

Alle indsamlede oplysninger er vedhæftet i elektronisk form (Excel-fil) og i Bilag C.

Indledningsvis er der for alle stoffer med identificeret CAS-nr. foretaget en søgning for R-sætninger i EU's stofdatabase ESIS. For stoffer, der ikke er klassificeret af EU, er der indsamlet udvalgte fysiske og kemiske egenskaber fra følgende databaser:

1. EU stofdatabase <http://ecb.jrc.ec.europa.eu/esis/>
2. United States National Library of Medicine, Toxicological data Network <http://toxnet.nlm.nih.gov/>

Derudover er USEPAs EPISuite software brugt som et supplement til at estimere stoffernes fysiske og kemiske egenskaber, når disse ikke kunne findes i ovenstående databaser.

Prioritering af tilsætningsstoffer

Der er udført en prioritering af de fundne stoffer med henblik på at udpege de potentielt mest kritiske.

Der er tildelt "scorepoints" til hvert stof afhængigt af parametre som hyppighed, den maksimale angivne vægtprocent (%w/w) i produkter, toksicitet, og persistens. Stofferne er vurderet i forhold til potentielle spredningsveje og potentiel risiko for mennesker gennem eksponering via jord, grundvand og indeklima.

Det har været vanskeligt at finde oplysninger om stoffernes fysiske, kemiske og toksikologiske egenskaber. Mange af stofferne er tildelt scorepoint på baggrund af enkelte værdier om akut toksicitet, uden at kende til hvad effekter af en kronisk eksponering vil være. For stofferne hvor det ikke var muligt at finde eksperimentelle værdier er QSAR beregningerne anvendt til vurdering af stoffernes toksicitet. Datagrundlaget og sikkerhed i tildeling af scorepoints for de forskellige stoffer har været varierende. Det er forsøgt at isolere denne begrænsning ved at sortere stoffer afhængigt af kvaliteten af datagrundlaget.

Resultater og konklusion

Projektet har påvist 122 tilsætningsstoffer der kan være brugt i chlorerede opløsningsmidler. Heraf er 65 stoffer brugt i en maksimal vægtprocent ≥ 1 %.

Der er identificeret 9 stoffer, som ud fra det tilgængelige datagrundlag vurderes at være de mest kritiske i forhold til en potentiel risiko for mennesker. Den kritiske eksponeringsvej for disse stoffer er via grundvand og indeklime. Disse stoffer er vist i nedenstående skema. Kvaliteten af datagrundlaget for de forskellige stoffer har været varierende. Jo bedre datagrundlaget er, jo større sikkerhed er der for at det pågældende stof vil udgøre en potentiel risiko.

Datagrundlaget	CAS nr.	Stofnavn	Tilsætningsstof i					Kritisk ift.	
			PCE	TCE	1,1,1-TCA	DCA	Generelt	Grundvand	Indeklima
God	79-46-9	2-nitropropan			X			Ja	Ja
	123-91-1	1,4-dioxan		X	X			Ja	Ja
	106-89-8	epichlorohydrin	X	X	X	X	✓	Ja	Ja
	75-52-5	nitromethan			X			Ja	Ja
	75-56-9	propylenoxid	X	X			✓	Ja	Ja
Middel	26249-20-7	butylenoxid	X	X	X	X	✓	Ja	Ja
	286-20-4	cyclohexenoxid	X	X				Ja	Ja
Dårligt	290-67-5	dioxadien		X	X			Ja	Ja
	543-75-9	dioxene		X	X			Ja	Ja
Typisk indhold af tilsætningsstoffer (%)			0-0,1	0-1	0-10	ukendt	ukendt		

✓: Kemikalieproducenten har forbeholdt sig retten til at bruge stoffet i alle chlorerede opløsningsmidler, udover de produkter der er navngivet i patentet (markeret med et kryds)

Det kan overvejes at undersøge nærmere om nogle af de ovennævnte 9 stoffer optræder i forurening med chlorerede opløsningsmidler, især på 1,1,1-TCA lokaliteter, da indholdet af tilsætningsstoffer generelt er højere i 1,1,1-TCA end i de øvrige chlorerede opløsningsmidler.

De identificerede stoffer (se ovenstående skema) har en højere mobilitet i grundvand end selve de chlorerede opløsningsmidler, hvorfor det er muligt, at de vil kunne sprede sig mere end de chlorerede opløsningsmidler, og derved udgøre en risiko uafhængigt af de chlorerede opløsningsmidler. 1,4-dioxan er allerede fundet på flere forurenede lokaliteter, hvor der har været forurening med chlorerede opløsningsmidler i Danmark og i udlandet. Butylenoxid (tetrahydrofuran) er også fundet på en lokalitet i USA.

På det eksisterende vidensgrundlag er det ikke muligt at fastlægge hvorvidt tilsætningsstofferne udgør en reel risiko, men dette projekt har identificeret, hvilke stoffer, der teoretisk set kan forventes at udgøre den største risiko, og som kunne undersøges i første omgang. Dette kan evt. gøres ved udvidede analysepakker på udvalgte lokaliteter, hvor der er håndteret store mængder opløsningsmidler, og især 1,1,1-TCA, som har det højeste indhold af tilsætningsstoffer.

Summary and conclusions

Chlorinated solvents are among the most common contaminants in soil and groundwater. They are primarily used in dry cleaning agents and degreasing agents in many industrial processes.

Chlorinated solvents may contain a variety of additives. The aim of the additives is to stabilize the product by inhibiting degradation reactions. Additives may include acid neutralizers, such as epoxides and amines metal inhibitors such as ethers, ketones and sulphoxides and /or antioxidants like heterocyclic nitrogen compounds and phenols.

There is no overview of the substances that are or have been added to chlorinated solvents, and can thus contribute to pose a risk for soil and groundwater contamination. At present solvent additives are not included in contaminated site investigations.

Project aim

The project aims to conduct a survey of the use of additives of chlorinated solvents and to assess whether the substances pose a threat to soil and groundwater.

Application

Investigating contamination with additives can be relevant in cases where there have been large spills of solvents, and thus large spills of the additives. This means that dry cleaning plants and industrial activities which involve the use of large solvent quantities, such as in degreasing in solvent baths comprise a particular focus area.

Different solvents require different types and quantity of stabilizers. 1.1.1-trichlorethan (1,1,1-TCA) is quite unstable and therefore requires the highest levels of stabilizers in the form of metal inhibitors and acid neutralizers. Industries where 1.1.1-TCA is widely used are therefore more likely to involve a risk of contamination with solvent stabilizers.

Method for mapping solvent additives

Information on solvent additives was sought through different sources:

- a. Several industry organizations are contacted for information on used solvents and manufacturers in their industry.
- b. The Danish Product Registry was contacted seeking specific information on the additives used in specific industries.
- c. A review of patent databases was conducted seeking information on which additives were included in chlorinated solvents. This proved to be an effective tool for identifying the quantity of additives used in chlorinated solvents. The disadvantage that it is uncertain how large an extent the individual products are used and whether they are used specifically in Denmark.

Classification of solvent additives

In total, 122 additives were found through our literature review. A number of substances were repeatedly found in patents from several different solvent manufacturers. Since the additives will only represent a minor fraction of the contamination in a given site, it is chosen to focus on substances which are added in quantities equal to or greater than 1%. Substances for which the maximum content by weight is less than 1% have not been studied further or identified with a CAS-number.

Procedure for compiling substance properties

62 substances or groups of substances were identified as additives in chlorinated solvents at levels equal to or greater than 1%. A collection of the physical, chemical and toxicological properties of all chemicals that were identified by a CAS number was conducted.

Initially, a search for R-phrases was conducted in the European chemical Substances Information System ESIS for all 62 substances. Physical and chemical properties were collected from the following databases:

1. EU stofdatabase, European drug database
<http://ecb.jrc.ec.europa.eu/esis/>
2. United States National Library of Medicine, Toxicological data Network <http://toxnet.nlm.nih.gov/> United States National Library of Medicine, Toxicological Data Network <http://toxnet.nlm.nih.gov/>

In addition, USEPA EPISuite software was used as in order to estimate the physicochemical properties of substances that were not found in the above databases.

Prioritization of substances

A prioritization of the identified substances was performed in order to pinpoint the most likely critical substances.

Each substance is assigned score points, depending on parameters such as frequency in the patent database, the maximum weight (% w/w) in products, toxicity, and persistency. The entries are assessed against the potential pathways and potential risk of exposure to humans through soil, groundwater and indoor air.

It has been difficult to find information on the substances of physical, chemical and toxicological properties, since many of the identified substances are not classified, since they are produced in small quantities and used in special applications. Many of the substances are scored based on isolated values of acute toxicity, without any knowledge on the effects of a potential chronic exposure. In lack of better information QSAR models have been used for predicting the toxicity of some substances. The quality of available information for scoring the different substances has been very variable. An effort to minimize the effect of this bias is made, by sorting substances depending on the quality of the available information for the substances toxicological properties.

Results and conclusions

The project has identified at least 122 substances that (may) have been used as additives in chlorinated solvents. Approximately 62 substances are/have been used at a maximum weight percentage equal to or over 1%.

Nine substances have been identified as the most likely to pose a potential risk to humans through exposure via groundwater and indoor air. These substances are shown in the table below:

Quality of data	CAS nr.	Name	Additive in					Exposure route	
			PCE	TCE	1,1,1-TCA	DCA	General	Ground water	Indoor air
Good	79-46-9	2-nitropropane			X			Yes	Yes
	123-91-1	1,4-dioxane		X	X			Yes	Yes
	106-89-8	epichlorohydrine	X	X	X	X	✓	Yes	Yes
	75-52-5	nitromethane			X			Yes	Yes
	75-56-9	propylene oxide	X	X			✓	Yes	Yes
Moderat	26249-20-7	butylene oxide	X	X	X	X	✓	Yes	Yes
	286-20-4	cyclohexene oxide	X	X				Yes	Yes
Low	290-67-5	dioxadiene		X	X			Yes	Yes
	543-75-9	dioxene		X	X			Yes	Yes
Typical content of additives (%)			0-0,1	0-1	0-10	unknown	unknown		

✓: The patent owner withholds the right to use this additive in any chlorinated solvent beyond the solvents that are specifically named in the patent (marked with an X)

It is recommended to further examine whether any of the above 9 substances are present in chlorinated solvent sites, especially at sites with 1,1,1-TCA.

The identified "problem substances" (see table above) have a higher mobility in groundwater than the chlorinated solvents, so it is possible that they could pose a risk beyond the risk posed from the chlorinated solvents. 1,4-dioxane has already been found at several contaminated sites where there has been contamination by chlorinated solvents in Denmark and abroad. Butylene oxide (tetrahydrofuran) was also found at a site in the United States.

Based on the current knowledge, it is not possible to determine whether additives pose an actual risk, but this project has identified which substances are the most likely to pose a greater risk could be investigated as a first step. This may be done by analyzing for these substances at selected sites, where large amounts of solvents have been handled, particularly at sites with 1,1,1-TCA products that have the highest content of additives.

1 Indledning

1.1 Baggrund

Chlorerede opløsningsmidler er anvendt bredt i mange forskellige brancher, herunder renserier, maskinværksteder, autoværksteder, farve- og lakfabrikker og i metal- og elektronikindustrien. De chlorerede opløsningsmidler er giftige og flygtige, og anvendelsen af disse har i mange tilfælde resulteret i forurening af jord og grundvand.

For at forbedre opløsningsmidlernes egenskaber har stofferne i en række tilfælde været tilsat et eller flere tilsætningsstoffer. Disse stoffer har blandt andet været:

- a) stabilisatorer, som er tilsat i forbindelse med kemikalernes produktion, eller i nogle tilfælde urenheder. For eksempel er 1,4-dioxan brugt som stabilisator for 1,1,1-TCA og tilsat i en mængde på op til 8 % /1/. På grund af 1,4-dioxans carcinogenitet og store mobilitet i jord kan 1,4-dioxan udgøre en trussel for grundvandsressourcen. Andre eksempler på tilsætningsstoffer i chlorerede opløsningsmidler er epoxider, aminer og phenoler /2,3/.
- b) tilsat i forbindelse med anvendelse af chlorerede opløsningsmidler i de forskellige brancheaktiviteter (fx pletfjernere i renserier /4/).

Der findes ikke et samlet billede af, hvilke stoffer, der er eller har været tilsat, og som herigennem kan bidrage til en risiko for jord og grundvand. Derfor inddrages stofferne ikke i forbindelse med de forureningsundersøgelser, der gennemføres i dag.

1.2 Formål og indhold

Formålet med projektet var oprindeligt at foretage en branchespecifik kortlægning af anvendelsen af tilsætningsstoffer i chlorerede opløsningsmidler, herunder hvilke tilsætningsstoffer, der anvendes til hvilke formål og i hvilke mængder.

Det har dog ikke været muligt at skaffe de ønskede oplysninger for at kunne foretage en branchespecifik kortlægning af tilsætningsstoffer. Kortlægning af tilsætningsstofferne er derfor foretaget generelt. Der vurderes ikke at forekomme væsentlige forskelle mellem produkterne brugt i de forskellige brancher.

De enkelte tilsætningsstoffer, der er udpeget i kortlægningen er efterfølgende blevet rangordnet efter deres potentielle risiko for jord og grundvand. Den prioriterede liste (se kapitel 6) kan benyttes til at målrette fremtidige projekter og forureningsundersøgelser mod kritiske stoffer.

Projektet er en historisk kortlægning baseret på litteraturstudier og søgninger i kemiske databaser.

2 Chlorerede opløsningsmidler: Anvendelse og brancher

2.1 Chlorerede opløsningsmidler

Chlorerede opløsningsmidler er blandt de hyppigst forekommende forureningskomponenter i jord og grundvand /6/. Stofferne anvendes primært til kemisk tøjrensning og som affedtningsmiddel i mange industrielle processer /5/.

Begrebet "chlorerede opløsningsmidler" dækker over en lang række organiske stoffer, der indeholder et eller flere chlor-atomer i deres struktur og anvendes som opløsningsmiddel. I dette projekt er begrebet chlorerede opløsningsmidler defineret som de 18 stoffer, der jf. Videncenter for Jordforurening /5/, er de mest anvendte/fundne chlorerede opløsningsmidler i forureningsundersøgelser. En oversigt over stofferne kan ses i tabel 2.1.

Projektet er afgrænset til produkter, der sælges som chlorerede opløsningsmidler med mere end 85 % chlorerede opløsningsmidler, og har derfor ikke omfattet diverse blandingsprodukter.

Tabel 2.1: Oversigt over stoffer omfattet af betegnelsen chlorerede opløsningsmidler.

*Stoffet udfaset med bekendtgørelsen nr. 1042 af 17. december 1997, **angivet for flygtige organiske chlorforbindelser

CAS	Stof	Forkortelse	Kemisk formel	Grundvands-kvalitetskriterium (µg/l)	Afdampnings-kriterium (µg/m ³)
74-87-3	Chlormethan	CM	CH ₃ Cl	-	-
75-09-2	Dichlormethan	DCM	CH ₂ Cl ₂	1	0,6
67-66-3	*Trichlormethan	TCM	CHCl ₃	1**	20
56-23-5	*Tetrachlormethan	TeCM	CCl ₄	1	5
75-00-3	Chlorethan	CA	H ₃ C-CH ₂ Cl	-	-
75-34-3	1,1-dichlorethan	1,1-DCA	H ₃ C-CHCl ₂	1**	-
107-06-2	1,2-dichlorethan	1,2-DCA	H ₂ CIC-CH ₂ Cl	1	0,1
71-55-6	*1,1,1-trichlorethan	1,1,1-TCA	H ₃ C-CCl ₃	1	500
79-00-5	*1,1,2-trichlorethan	1,1,2-TCA	H ₂ CIC-CHCl ₂	1**	-
630-20-6	*1,1,1,2-tetrachlorethan	1,1,1,2-TeCA	HCl ₃ C-CHCl	1**	-
79-34-5	*1,1,2,2-tetrachlorethan	1,1,2,2-TeCA	H ₂ Cl ₂ C-CH ₂ Cl ₂	1**	-
76-01-7	*Pentachlorethan		Cl ₃ C-CHCl ₂	-	-
75-01-4	Chlorethylen	VC	H ₂ C=CHCl	0,2	0,04
75-34-3	*1,1-dichlorethylen	1,1-DCE	H ₂ C=CCl ₂	1	10
156-59-2	cis-1,2-dichlorethylen	cis-1,2-DCE	HCIC=CHCl	1	400
156-60-5	trans-1,2-dichlorethylen	trans-1,2-DCE	HCIC=CHCl	1	400
79-01-6	Trichlorethylen	TCE	HCIC=CCl ₂	1	1
127-18-4	Tetrachlorethylen	PCE	Cl ₂ C=CCl ₂	1	6

Siden 1997 er der indført lovgivning (Bek. 1042 af 17. december 1997), der begrænser salg og anvendelse af en række chlorerede opløsningsmidler

(markeret med stjerne i tabel 2.1) til specielt angivne formål. Dette har medført, at kemiske stoffer og produkter, som indeholder mere end 0,1 vægtprocent eller derover af de markerede stoffer ikke må sælges en detail til offentligheden eller til brug i åbne systemer såsom overfladerensning og rensning af vævede stoffer.

2.2 Brancher der anvender chlorerede opløsningsmidler

Anvendelsen af chlorerede opløsningsmidler i Danmark i forskellige brancher og virksomhedstyper er der tidligere blevet redegjort for af VJ /5/. Jf. redegørelsen har de mest anvendte chlorerede opløsningsmidler i Danmark været:

- tetrachlorethylen
- trichlorethylen
- 1,1,1-trichlorethan
- Trichlormethan
- tetrachlormethan
- dichlormethan

angivet i tilfældig rækkefølge.

Af nedenstående tabel 2.2 fremgår i hvilke brancher disse stoffer har været benyttet.

Tabel 2.2: Anvendelse af de vigtigste chlorerede opløsningsmidler i forskellige brancher

Branche	PCE	TCE	1,1,1-TCA	TCM	TeCM	DCM	Andre
Autolakerier		X	X			X	
Autoværksteder		X	X				
Elektronik	X		X				
Elværker	X	X					
Farmaceutisk industri	X			X		X	CM
Farve og lak	X	X	X			X	
Fotografi	X						
Garverier	X	X	X	X	X		
Glasfiberindustri							trichlorethylfosfat, CM
Metalliseringsvirksomheder (også galvanisering og metalforarbejdning)	X	X		X	X		
Plastvirksomheder	X	X	X			X	
Renserier	X	X	X				
Smede, maskinværksteder og maskinfabrikker	X	X	X	X	X	X	Freon 113
Sæbe, vaskemiddel og rengøringsfremstilling	X		X				
Tekstilindustri	X		X				VC
Trykkerier	X	X	X			X	1,2-DCA; 1,2-DCE
Træimprægnering (herunder møbelfremstilling)		X				X	

2.3 Tilsætningsstoffer i chlorerede opløsningsmidler

Chlorerede opløsningsmidler kan indeholde en lang række tilsætningsstoffer. Formålet med tilsætningsstofferne er at stabilisere produktet ved at inhibere nedbrydningsreaktioner /1/.

Tilsætningsstoffer kan omfatte syreneutraliserende stoffer, såsom epoxider og aminer, metalinhiberende stoffer som etherer, ketoner og sulphoxider, og /eller antioxidant som heterocycliske kvælstofsforbindelser og phenoler /1/.

De enkelte opløsningsmidler kræver forskellige indhold og type af stabilisatorer. Tabel 2.3 viser en oversigt over typen af anvendte tilsætningsstoffer, samt en typisk vægtprocent for tilsætning af disse for fire af de mest anvendte chlorerede opløsningsmidler.

Tabel 2.3: Behov for stabilisator i forskellige opløsningsmidler (udarbejdet fra /1/)

Chlorerede opløsningsmidler	Syreneutraliserende stoffer	Metalinhiberende stoffer	Antioxidanter	Vægtprocent
PCE	X			<0,1 %
TCE	X	X	X	<1 %
1,1,1-TCA	X	X		<10 %
DCM	X			<0,1 %

1,1,1-TCA er ustabil og kræver derfor det højeste indhold af stabilisatorer i form af metalinhiberende stoffer og syreneutraliserende stoffer. Derimod er indholdet af stabilisatorer i PCE og DCM som regel under 0,1 %, mens indhold af stabilisatorer i TCE oftest er under 1 %.

Brancher hvor 1,1,1-TCA er anvendt, er dermed de mest relevante at undersøge i forhold til risiko for forurening med tilsætningsstoffer.

2.4 Forekomst af tilsætningsstoffer i forureningsager

Generelt er tilsætningsstofferne i chlorerede opløsningsmidler tilsat i begrænsede mængder, oftest under 1 %. Dette betyder, at et evt. indhold af tilsætningsstoffer, i de fleste forureninger med chlorerede opløsningsmidler, vil være ubetydelig i forhold til forureningen med selve opløsningsmidlet.

Forurening af jord og grundvand med tilsætningsstoffer kan være relevant i de tilfælde, hvor der er sket store spild af opløsningsmidler, og dermed store spild af evt. tilsætningsstoffer. Dette betyder, at renserier og industriaktiviteter, hvor der har været anvendt store mængder af opløsningsmidler til affedtning, er et særligt fokusområde.

På baggrund af ovenstående vurderes følgende brancher at være særligt interessante:

- Maskinfabriker og store maskinværksteder (ikke smede)
- Garverier
- Farve- og lakfabrikker
- Fotografi (større fremstillingslaboratorier)
- Metalliseringsvirksomheder (galvanisering mv.)
- Træimprægnering (møbelfremstilling)
- Elværker (større)
- Renserier

Forurening med stabilisatorer er fundet flere steder i USA /1/. Der er især mange fund af 1,4-dioxan i grundvand på lokaliteter, hvor der har været forurening med chlorerede opløsningsmidler. Disse fund er oftest knyttet til industrielle aktiviteter som genindvindingsfaciliteter for chlorerede opløsningsmidler, metalindustrien, og industrielle lossepladser /1/.

I Danmark er der bl.a. truffet forurening med 1,4-dioxan i forureningsfanen fra Hørløkke Losseplads. Her har Region Syddanmark påvist et væsentligt indhold af 1,4-dioxan, og i et enkelt filter er der 1,4-dioxan tilstede, til trods for, at der ikke er konstateret chlorerede opløsningsmidler /7/. Det er dog usikkert om denne forurening stammer fra chlorerede opløsningsmidler, idet der kan være deponeret forskellige typer kemikalier på pladsen. På Vakopon, hvor der tidligere har ligget et petrokemisk værk, der håndterede større mængder opløsningsmidler, er der fundet op til 83 µg/l af stoffet 1,4-dioxan /12/.

Tilsætningsstofferne er som regel ikke inkluderet i undersøgelser, og derfor er det reelle billede af omfanget af evt. forurening med tilsætningsstoffer ikke kendt.

3 Dataindsamling

Formålet med projektet er at kortlægge omfanget af og risikoen ved brugen af tilsætningsstoffer i chlorerede opløsningsmidler. Der er benyttet en række forskellige strategier til indsamling af viden:

- a) En række brancheorganisationer er kontaktet for at få oplysninger om benyttede opløsningsmidler og producenter inden for deres branche.
- b) Produktregisteret er kontaktet med henblik på at få bestemt og kvantificeret de branchespecifikke tilsætningsstoffer.
- c) Der er gennemgået en række patenter for specifikke opløsningsmidler for derigennem at få et detaljekendskab til hvilke tilsætningsstoffer, der indgår i chlorerede opløsningsmidler.

Nedenfor er de benyttede metoder, afgrænsninger og resultater for de 3 strategier i dataindsamlingen beskrevet kortfattet.

3.1 Oplysninger fra brancheforening

Der er taget kontakt til Forening af Danske Overfladebehandlingsvirksomheder, Forening for Farve- og Lakindustrien, Metalforeningen og Kemikaliebranchen. Resultaterne herfra er sparsomme, idet brancheorganisationernes sekretariater ikke har detaljekendskab til de produkter, der er benyttet inden for deres branche. Endvidere er historiske data i brancheorganisationerne primært hægtet op på personer og/eller medlemsvirksomheder, der har været i branchen længe. Der er hverken taget kontakt til eller lavet interviews med de enkelte medlemsvirksomheder.

Det har ikke som planlagt været muligt at skaffe de ønskede oplysninger til en branchespecifik kortlægning. Kortlægning af tilsætningsstofferne er derfor foretaget generelt. Der vurderes dog ikke at forekomme væsentlige forskelle mellem produkter brugt i de forskellige brancher.

3.2 Oplysninger fra Produktregistret

Der har foregået en korrespondance med Produktregisteret om branchespecifik anvendelse af chlorerede opløsningsmidler og tilsætningsstoffer i disse i Danmark.

Det er dog ikke lykkedes at skaffe de ønskede resultater indenfor projektets rammer.

Produktregisteret vurderer, at det ikke er muligt at fremkomme med de efterspurgte data, af følgende årsager:

- a) Sammensætningsoplysninger (indhold af chlorerede oplysningsmidler med tilhørende stabilisatorer og urenheder) knyttet til konkrete produkter, producenter og leverandører er fortrolige, hvilket også gælder for de tilhørende mængder,
- b) Produktregisterets database PROBAS indeholder ikke pålidelige historiske data fra før år 2004.
- c) Produktregisteret indeholder kun data fra efter 1983, hvor de første regler om anmeldelse af kemiske stoffer blev indført i Danmark. Efter disse regler var det kun stoffer og materialer, der var nye på markedet, der skulle anmeldes. Det medførte i praksis, at produkter, der hovedsageligt består af et enkelt stof og handles under stofnavnet, sjældent blev anmeldt.
- d) De fleste af de stofanmeldelser af chlorerede organiske opløsningsmidler, som registret har modtaget er kun forsynet med oplysninger om det ene stof med koncentrationen 100 %. Blandinger med flere ingredienser er stort set aldrig forsynet med oplysninger om stabilisatorer og urenheder for de enkelte komponenter.

Produktregisteret vil i forbindelse med evt. uddybende arbejder om tilsætningsstoffer kunne finde nuværende og/eller udgåede produkter med indhold af de chlorerede opløsningsmidler, som bruges i specificerede brancher og opliste nogle typiske ingredienser. For udgåede produkter vil dette dog være noget upålideligt.

3.3 Oplysninger fra patentdatabaser

Der er fundet 38 relevante patenter for perioden 1932 til 1985 fra 16 kemikalieproducenter, herunder Dow Chemicals og Solvay, der af Kemikaliebranchen er oplyst at være de største leverandører af kemikalier i Danmark. Oplysninger fra de gennemgåede patenter er vedlagt som Bilag A. Patenterne er fundet via den europæiske patentdatabase Espacenet og Google Patents.

Gennemgangen af patentdatabaserne vurderes at have været et effektivt redskab til at indkredse mængden af benyttede tilsætningsstoffer i chlorerede opløsningsmidler. Metoden har dog den ulempe, at det er usikkert i hvor stort et omfang de enkelte produkter er benyttet, og om de er benyttet specifikt i Danmark. Der er fundet 122 forskellige tilsætningsstoffer, der alle er benyttet i forbindelse med et eller flere chlorerede opløsningsmidler.

4 Kortlægning af indholdsstoffer

Der er i alt fundet 122 tilsætningsstoffer via gennemgang af patenter. En række stoffer optræder i patenter fra flere forskellige producenter. Disse stoffer er vist i tabel 4.1, og må formodes at være benyttet i større udstrækning i industrien.

Alle stoffer er så vidt muligt identificeret med både navn og CAS-nr., således at der ikke kan opstå forvirring om et stofs identitet.

Tabel 4.1: De oftest forekommende tilsætningsstoffer i chlorerede opløsningsmidler, jf. antallet af patenter, hvor de indgår.

CAS nr.	Tilsætningsstof	Antal patenter	Chlorerede opløsningsmidler	Vægtprocent
75-52-5	nitromethan	5	1,1,1-TCA, 1,1,2-TCA	0,1-12 %
26249-20-7	butylenoxid	4	TCE, TCA, PCE, TeCM	0,01-5 %
123-91-1	1,4-dioxan	3	TCA, TCE	0,1-10 %
106-89-8	epichlorohydrin	3	Alle, mest TCE	0,01-5 %
-	epoxideret linolie	3	PCE, TCE, TeCM	0,02-5 %
62-53-3	anilin	3	TCE, TCA, PCE, DCA, TeCM	<0,1 %
108-95-2	phenol	3	Alle	<0,1 %
109-97-7	pyrrol	3	Alle, mest 1,1,1 TCA	<0,1 %

Bilag B indeholder en liste over alle 122 fundne tilsætningsstoffer med oplysninger om, i hvilke chlorerede opløsningsmidler, de indgår. Derudover er der i kildematerialet nævnt stofgrupper, der bruges som stabilisatorer (fx aldehyder) uden yderligere præcisering af, hvilke stoffer der er tale om.

4.1 Indledende sortering

Idet tilsætningsstoffer kun vil udgøre en meget lille andel af en evt. forurening, er det valgt at fokusere på stoffer, der kan være tilsat i maksimale mængder på ≥ 1 %. Der er generelt ikke indhentet CAS-nr. for stoffer, hvor den maksimale indholdsprocent er under 1. I Bilag C fremgår de 62 stoffer og stofgrupper, hvis maksimale vægtindhold kan være lig med eller over 1 %.

4.2 Procedure for stofidentifikation

For at identificere de enkelte stoffer entydigt er der indhentet CAS-nr fra følgende 3 databaser:

1. EU stofdatabase <http://ecb.jrc.ec.europa.eu/esis/>
2. United States National Library of Medicine, Toxicological data Network <http://toxnet.nlm.nih.gov/>
3. Chemical Safety Information from Intergovernmental Organizations www.inchem.org

For 10 ud af de 62 stoffer, var det ikke muligt at finde CAS-nr. En overordnet vurdering af disse er udført (se afsnit 6.4)

5 Sortering og risikovurdering af tilsætningsstoffer

5.1 Indsamling af viden om stoffernes egenskaber og toksicitet

For alle 52 kemiske stoffer, der blev identificeret med et CAS-nr., er der foretaget en indsamling af yderligere oplysninger. Formålet er at vurdere, hvorvidt stofferne kan udgøre en risiko for jord og grundvand.

Indledningsvis er der for alle stoffer foretaget en søgning for R-sætninger i EU's stofdatabase ESIS. Hvis et klassificeret stof ikke har R-sætninger, der omfatter sundhedsrisici, kan det antages at stoffet ikke vil udgøre en potentiel risiko for mennesker gennem eksponering via jord, grundvand og indeklima. Dette gør sig gældende for 9 stoffer. Der er ikke indsamlet fysiske og kemiske egenskaber for disse 9 stoffer. Stofferne er dog medtaget i den videre rangering af stofferne.

For de øvrige 43 stoffer er der indsamlet udvalgte fysiske og kemiske egenskaber fra følgende databaser:

1. EU stofdatabase <http://ecb.jrc.ec.europa.eu/esis/>
2. United States National Library of Medicine, Toxicological data Network <http://toxnet.nlm.nih.gov/>

Derudover er USEPAs EPISuite software brugt som et supplement til at estimere stoffernes fysiske og kemiske egenskaber, når disse ikke kunne findes i ovenstående databaser.

Så vidt tilgængelige er følgende fysiske og kemiske egenskaber rapporteret:

- Molvægt
- Damptryk
- Vandopløselighed
- K_{oc}
- L og K_{ow}
- K_H

På baggrund af EPISuite er det endvidere beregnet om stofferne er let nedbrydelige eller persistente. Der er udelukkende fokuseret på EPISuite's kategorisering som bionedbrydeligt eller ej.

Udover de fysisk-kemiske egenskaber er der indsamlet oplysninger om stoffernes farlighed for mennesker, baseret på LC_{50}/LD_{50} -værdier for pattedyr (rotte eller mus), WHO's internationale kræftforskningscenters (IARC) oplysninger om kræftfremkaldende stoffer og Miljøstyrelsens spildevandsvejledning. LC_{50}/LD_{50} oplysningerne for pattedyr er hentet fra IUCLID databasen og dernæst Toxnet databasen.

Projektets formål har været at identificere eventuelle trusler mod grundvandet, set fra et menneske-centreret perspektiv. Da stoffernes toksicitet mod akvatiske organismer kan skyldes helt andre mekanismer end mod pattedyr, har data for akvatisk toksicitet ikke indgået i vores vurdering. Værdier fra test med akvatiske organismer kan dog for nogle stoffer ses i Bilag C.

5.1.1 Sorteret efter datagrundlag

Det har været vanskeligt at skaffe oplysninger for mange af de fundne tilsætningsstoffer, idet der er tale om stoffer, der kun bruges eller har været brugt i små mængder og i specielle applikationer.

Derudover er anmeldelse af kemikalier blevet skærpet gennem de sidste 25 år. Før 1984 blev der således ikke anmeldt kemikalier i Danmark (jf. korrespondance med Produktregisteret), hvilket betyder, at der ikke er oplysninger for kemikalier, der blev brugt i små mængder og muligvis udfaset inden midten af 1980'erne.

Denne mangel af relevante oplysninger medfører, at der ikke kan foretages en fuldkommen risikovurdering af disse stoffer.

I nærværende risikovurdering er stofferne opdelt efter kvaliteten af datagrundlaget som vist i nedenstående skema (tabel 5.1).

Tabel 5.1 Kriterier for sortering efter datagrundlag

God	Stoffet er klassificeret i ESIS med R-Sætninger
Middel	Der findes forsøg på pattedyr, stoffernes fysiske og kemiske egenskaber er fastlagt på baggrund af eksperimentelle data
Dårlig	Der findes ingen forsøg på pattedyr, stoffernes fysiske, kemiske og toksikologiske egenskaber er beregnet på baggrund af stoffets struktur, eller vurdering er foretaget for et stof i samme stofgruppe.
Intet	Stoffet / CAS-nr. ikke fundet

Denne fremgangsmåde giver mulighed for at sætte fokus på stoffer, hvis egenskaber bør undersøges nærmere og/eller stoffer, der er farlige, afhængig af datagrundlaget. Derved er det også tydeligt hvilke stoffer, der prioriteres højt på baggrund af deres farlighed og hvilke stoffer, der ikke kan rangordnes på baggrund af et usikkert eller ikke eksisterende datagrundlag.

5.2 Prioritering af stoflisten

Der er udført en prioritering af de fundne stoffer med henblik på at pege på de stoffer, som det kunne være relevant at inkludere i fremtidige undersøgelser af lokaliteter, hvor der er forurening med chlorerede opløsningsmidler.

Der er tildelt "scorepoints" til hvert stof afhængigt af følgende parametre:

1. Hyppighed (antal patenter, der nævner stoffet)
2. Den maksimale angivne vægtprocent (%w/w) i produkter
3. Toksicitet
4. Persistens

Der kan maksimum tildeles 100 point til hvert stof. Tabel 5.2 giver en oversigt over pointtildeling for hver af de ovennævnte parametre. Stofferne er

sammenlignet indbyrdes i 3 grupper baseret på hvor godt datagrundlaget for vurderingen har været (se afsnit 5.1.1).

Tabel 5.2 Protokol for pointtildeling

Hyppighed (max 20 point)		
Antal patenter	4 point pr. patent	
Maksimum angivet vægtprocent i produkter (max 20 points)		
≤ 1 %	5	
>1 men ≤ 2,5 %	10	
> 2,5 men ≤ 5 %	15	
>5 %	20	
Stoffets toksikologiske egenskaber (max 40 point)		
Ufarligt	0	Klassificerede stoffer, der ikke har R-sætninger, der omfatter sundheds-/miljørisici.
Sundhedsskadelig	10	Den mindste LD ₅₀ værdi fra pattedyrsforsøg (eller fra QSAR beregninger) for akut eksponering ligger indenfor følgende grænser: Indtagelse (rotte): 200 < LD ₅₀ ≤ 2000 mg/kg legemsvægt (=R22) Via indånding, gasser og dampe (rotte): 2 < LC ₅₀ ≤ 20 mg/l (=R20) Via hudkontakt (rotte/kanin): 400 < LD ₅₀ ≤ 2000 mg/kg legemsvægt (=R21)
Giftig	20	Stoffet er klassificeret som giftigt Den mindste LD ₅₀ værdi fra pattedyrsforsøg (eller fra QSAR beregninger) for akut eksponering ligger indenfor følgende grænser: Indtagelse (rotte): 25 < LD ₅₀ ≤ 200 mg/kg legemsvægt (=R25) Via indånding, gasser og dampe (rotte): 0,5 < LC ₅₀ ved indånding ≤ 2 mg/l (=R23) Via hudkontakt (rotte/kanin): 50 < LD ₅₀ ≤ 400 mg/kg legemsvægt (=R24)
Meget giftig	40	Stoffet er klassificeret som meget giftigt, kræftfremkaldende (=R40,45,49), mutagent (=R46, R68), eller reproduktionstoksisk (=R60-64) baseret på forsøg eller QSAR beregninger Stoffet er på A-listen i spildevandsvejledningen. Den mindste LD ₅₀ fra pattedyrsforsøg (eller fra QSAR beregninger) for akut eksponering er under følgende grænser: Indtagelse (rotte): LD ₅₀ ≤ 25 mg/kg legemsvægt (=R28) Via indånding, gasser og dampe (rotte): LC ₅₀ ≤ 0,5 mg/l (=R26) Via hudkontakt (rotte/kanin): LD ₅₀ ≤ 50 mg/kg legemsvægt (=R27)
Stoffets persistens i miljøet (max 20 point)		
Let nedbrydeligt	0	Jf. Biowin nedbrydes stoffet hurtigt
Persistent	20	Jf. Biowin nedbrydes stoffet ikke hurtigt

5.2.1 Pointtildeling for hyppighed

Points er tildelt på baggrund af, hvor ofte et tilsætningsstof er fundet i de indhentede patenter. Det antages at stoffer, som er brugt som stabilisatorer hos forskellige kemikalieproducenter med stor sandsynlighed også vil være de mest anvendte tilsætningsstoffer i Danmark.

Der gives 4 point per patent, hvor et stof indgår.

5.2.2 Pointtildeling for den maksimale angivne vægtprocent

Ved gennemgang af patenterne er der angivet et interval for stoffets vægtprocent i de forskellige produkter (se Bilag A).

Det er valgt at tildele point til hvert tilsætningsstof på basis af den maksimale angivne vægtprocent (se tabel 5.2), idet stoffer som er brugt i forholdsvis store andele vil have den største umiddelbare risiko for at udgøre en forureningstrussel for jord og grundvand.

Baggrunden for dette valg er det faktum, at tilsætningsstoffer kun vil udgøre en lille del af et angivet spild, og der vil være store vanskeligheder ved at opspore disse stoffer i miljøet, da den sammenliggende forurening kan vanskeliggøre laboratorieanalyser. Samtidigt vil forurening med tilsætningsstoffer sandsynligvis være flere størrelsesordner mindre end forurening med chlorerede opløsningsmidler, og dermed udgøre en meget lille risiko i forhold til forurening med hovedstofferne. Der skal derfor være et betydeligt indhold af tilsætningsstoffer, for at de er relevante i forbindelse med jord- og grundvandsundersøgelser.

5.2.3 Pointtildeling for stoffernes toksicitet

Stofferne er vurderet i forhold til deres toksicitet overfor mennesker. Denne vurdering er foretaget på baggrund af stoffernes klassificering (R-sætninger om akut giftighed, samt stoffernes kræftfremkaldende, mutagene eller reproduktionstoksiske potentiale), hvor disse oplysninger har været tilgængelige.

Når disse oplysninger ikke har været tilgængelige er stofferne vurderet alene på baggrund af deres akutte toksicitet fra de fundne LD_{50} eller LC_{50} værdier i forsøg med pattedyr (rotte eller kanin). Kriterierne stammer fra Miljøstyrelsens vejledning om klassificering mv. af kemiske stoffer og produkter /19/. I enkelte tilfælde, hvor der kun var udført forsøg med mus er disse værdier anvendt.

QSAR modeller er ofte brugt til at forudsige organiske stoffers toksiske egenskaber, men der kan være en stor usikkerhed knyttet til disse værdier, især for pattedyr /8/.

Når oplysninger fra forsøg ikke har været tilgængelige er QSAR beregninger anvendt. Der er anvendt følgende værktøj:

- Miljøstyrelsens vejledende liste til selvklassificering af farlige stoffer /15/
- OECDs QSAR toolbox /14/
- ACD labs ToxSuite software /17/

OECDs QSAR toolbox indeholder for nogle stoffer oplysninger om akut toksicitet i form af LC_{50}/LD_{50} værdier. Stofferne er på basis af deres strukturelle egenskaber klassificeret i tre klasser i forhold til deres toksicitet mod mennesker jf. Cramer's klassifikationsstræ, hvor klasse III er den mest farlige /16/. Dog er metoden meget konservativ således, at hvis et stof ikke kan klassificeres som klasse I eller II, bliver det automatisk klassificeret som klasse

III, uden at der nødvendigvis estimeres signifikant toksicitet /18/, dvs. at helt ufarlige stoffer kan klassificeres i den farligste klasse.

ACD/ToxSuite er en samling af software der beregner LD₅₀ ved oral indtagelse for mus og rotte baseret på validerede databaser og QSAR modeller. Værktøjet oplyser også den sikkerhed der er knyttet til de estimerede værdier.

For stoffer med et dårligt datagrundlag er der tildelt points for deres farlighed på baggrund af søgninger i de 3 ovennævnte databaser. Hvis de forskellige databaser har givet forskellige anbefalinger er den anbefaling der stemmer med 2 ud af 3 databaser anvendt. For flere detaljer henvises til bilag D.

I resultatafsnittet er stofferne delt op efter datagrundlag, således at der nemt kan skelnes mellem stoffer, der scorer lavt pga. manglende data.

Pointtildeling for toksicitet kan ses i tabel 5.2

5.2.4 Pointtildeling for persistens

Tilsætningsstofferne er vurderet i forhold til deres persistens. Det vurderes, at stoffer der er letnedbrydelige ikke vil udgøre en miljøtrussel.

Stoffernes nedbrydelighedspotentiale er vurderet ved brug af EPAs Biowin software. Det skal dog bemærkes, at nedbrydelighed afhænger af mange parametre (f.eks. redoxforhold, tilstedeværelse af de rigtige mikroorganismer, inhibering fra tilstedeværelse af andre forureningsstoffer).

Tildeling af point for persistens fremgår af tabel 5.2.

5.3 Vurdering i forhold til spredningsveje

Stofferne er vurderet i forhold til potentielle spredningsveje og potentiel risiko for eksponering. Principperne er opstillet med udgangspunkt i et lignende projekt; "Redegørelse over kemikalier på Grindstedsværket og deres potentielle trussel i forhold til miljøet"/9/ .

Stofferne er vurderet i forhold til:

- a) vandopløselighed → potentiale for spredning i grundvandet
- b) flygtighed → potentiale for indeklimalisiko
- c) mobilitet → potentiale for jordforurening, risiko ved kontakt med forurenede jord

Figur 5.1 figur viser kriterierne for kategorisering af stoffer i de tre mulige risikogrupper.



Figur 5.1: Kriterier for spredningsveje

Ved at anvende en forholdsvis konservativ grænse for hvornår et stof kan anses som mobilt ($\text{vandopløselighed} > 1 \text{ mg/l}$), flygtigt ($\text{damptryk} \geq 10 \text{ Pa}$), eller jordbundet ($\log K_{ow} \geq 3$), er det sikret, at alle mulige eksponeringsveje er taget i betragtning i vurdering af stofferne.

Desværre har manglen på data for mange af de fundne stoffer vanskeliggjort en mere fuldkommen risikovurdering. Det kan ikke afvises, at et stof hvis farlighed er beregnet vha. QSAR modeller op- eller nedprioriteres i forhold til den virkelige risiko det udgør. Derfor er det valgt at tydeliggøre datagrundlaget i resultatafsnittet, som giver mulighed for at identificere stoffer, hvis egenskaber kunne være relevante at undersøge nærmere.

6 Resultater

I dette kapitel angives resultaterne for stoffernes prioritering, som beskrevet i kapitel 4.

Stofferne er opdelt efter om de vurderes at udgøre en trussel for grundvandet, afdampning eller kontakt med forurenede jord (se afsnit 5.3). For hvert stof er det også angivet hvor godt datagrundlaget for vurderingen har været. Stofferne er tildelt scorepoint som beskrevet i tabel 5.2, således at stoffer med højeste scorepoints, anses for at udgøre den største trussel mod mennesker.

Derudover er der givet en oversigt over stoffer, som med stor sikkerhed vurderes ikke at være farlige.

En score på mindst 55 ud af 100 mulige points er valgt som kriterium for, hvornår et stof udgør en mulig risiko. En score på 55 points er tilpas lavt så at det kan betragtes som konservativ. Samtidigt er tallet så tilpas højt at det ikke kan overskrides af et evt. meget farligt stof, som kun bruges i et lille omfang og er letnedbrydeligt.

Derudover er der en række stoffer, hvor det ikke har været muligt at finde CAS-nr., og dermed fysiske, kemiske og toksikologiske data. Der er udført en indledende risikovurdering af disse stoffer ved at sammenligne dem med stoffer i samme stofgruppe. Der kan dog være stor usikkerhed ved ekstrapolering af egenskaber på den måde.

6.1 Risiko for grundvandet

Der er identificeret 5 stoffer med en score over 55 (ud af 100 mulige) som på et godt datagrundlag kan vurderes at kunne udgøre en trussel mod grundvandet. Disse stoffer er:

- 2-nitropropan
- 1,4-dioxan
- epichlorohydrin
- nitromethan
- propylenoxid

Derudover er der identificeret 2 epoxider, der på et middel datagrundlag opnår en score over 55. Disse stoffer er:

- butylenoxid
- cyclohexenoxid

Endvidere foreligger der en række stoffer, hvor der ikke kunne findes pålidelige toksicitetsoplysninger. For disse stoffer er farligheden vurderet pba. QSAR beregninger. Dioxadien og dioxene, opnår en score over 55 og tilføjes dermed listen af stoffer der kan udgøre en mulig risiko.

Tabel 6.1 viser en oversigt over stoffer med stort potentiale for spredning med grundvandet.

Tabel 6.1 Pointscore for tilsætningsstoffer der kan spredes til grundvandet. Stoffer med score over 55 points er markeret med rød. Stoffer, der jf. R-Sætninger ikke er sundhedsfarlige er markeret med grøn.

	CAS-nr	Navn	Hyp.	% V	Toks.	Pers.	I alt	Tilsætningsstof i					
								PCE	TCE	1,1,1 TCA	Generelt	Andre	
Godt datagrundlag	79-46-9	2-nitropropan	4	10	40	20	74		X	X			
	123-91-1	1,4 dioxan	12	20	40	0	72		X	X			
	106-89-8	epichlorohydrin	12	15	40	0	67	X	X	X	✓	DCA	
	75-52-5	nitromethan	4	20	40	0	64		X	X			
	75-56-9	propylenoxid	4	15	40	0	59	X	X				
	120-78-5	2,2 dithiobis-benzothiazol	4	5	10	20	39		X				
	71-36-3	n-butanol	4	20	10	0	34	X	X	X			
	Stoffer der jf. R-sætninger ikke har sundhedsrisici												
	75-65-0	tertiary butanol	4	15	10	0	29		X	X			
	646-06-0	1,3 dioxolan	8	20	0	0	28			X	✓	1,1,2 TCA	
	141-78-6	ethylacetat	4	20	0	0	24		X				
	503-30-0	oxacyclobutan	4	10	10	0	24	X	X				
	108-03-2	1-nitropropan	4	10	10	0	24			X			
	79-24-3	nitroethan	4	10	10	0	24		X	X			
	109-99-9	amylenoxid	8	15	0	0	23	X	X				
	563-80-4	isopropyl-methylketon	4	15	0	0	19		X				
	67-64-1	acetone	4	15	0	0	19		X				
	108-10-1	isobutyrylacetone	4	5	10	0	19		X				
	123-54-6	acetylacetone	4	5	10	0	19		X				
	78-93-3	ethyl methyl keton	4	5	0	0	9		X				
123-51-3	isoamylalcohol	4	5	0	0	9	X	X					
Middel datagrundlag	26249-20-7	butylenoxid	16	10	40	0	66	X	X	X	✓	DCA	
	286-20-4	cyclohexenoxid	8	15	40	0	63	X	X				
	78-06-8	dibutyltin mercapto-propionat	8	5	20	20	53	X	X			CBrM, TeBrE,	
	3848-24-6	butyrylacetone	16	5	10	20	51		X		✓		
	103-34-4	4,4 dithio-dimorpholin	4	5	20	20	49		X				
	77-58-7	dibutyltin dilaurat	4	5	20	20	49		X		✓	CBrM, TeBrE,	
	98-02-2	furfuryl mercaptan	4	5	20	20	49		X		✓		
	624-92-0	dimethyl disulfid	4	5	10	20	39		X				
	115-19-5	2-methyl-3 butyn-2-ol	4	20	10	0	34		X				
	60-24-2	2 mercapto-ethanol	4	5	10	0	19		X				
	59-52-9	2,3 dimercapto-1-propanol	4	5	10	0	19		X		✓		
77-75-8	3-methyl-1-pentyn 3-ol	4	5	10	0	19		X		✓			

	CAS-nr	Navn	Hyp.	% V	Toks.	Pers.	I alt	Tilsætningsstof i				
								PCE	TCE	1,1,1 TCA	Gen erelt	Andre
	3002-24-2	propionylacetone	4	5	10	0	19	X	X			
	6921-35-3	3,3 dimethyl oxacyclobutan	8	10	0	0	18		X			
Dårligt datagrundlag	290-67-5	dioxadien	4	20	40	20	84		X	X		
	543-75-9	dioxene	4	20	40	0	64		X	X		
	1436-34-6	hexylenoxid	4	10	40	0	54		X	X		
	10556-98-6	1,3,5 triisopropylhexahydrotriazin	8	10	10	20	48	X	X	X	✓	
	115-22-0	2-hydroxy-2-methyl-3-butanone	4	5	10	20	39	X	X		✓	
	1569-69-3	cyclohexyl mercaptan	4	5	10	20	39		X		✓	
	75-17-2	formaldoxim	4	5	20	0	29	X	X			
	111-88-6	octyl mercaptan	8	5	10	0	23		X			

CBrM: chlorobromomethan, TebrE: tetrabromoethan

✓: Kemikalieproducenten har forbeholdt sig retten til at bruge stoffet i alle chlorerede opløsningsmidler, udover de produkter der er navngivet i patenterne (markeret med et kryds)

6.2 Risiko for afdampning

Der er identificeret 5 stoffer, som på baggrund af et godt datagrundlag scorer over 55 points (se tabel 6.2), og dermed vurderes, at kunne udgøre en risiko for indeklimaet i forureningssager.

Alle kritiske stoffer er identiske med de stoffer, der kan udgøre en trussel for grundvandet.

Derudover er der identificeret 2 epoxider, der på baggrund af et middel datagrundlag opnår en score over 55. Disse stoffer er:

- Butylenoxid
- Cyclohexenoxid

Tabel 6.2 Pointscore for tilsætningsstoffer der kan true indeklima. Stoffer med score over 55 points er markeret med rød. Stoffer, der jf. R-Sætninger ikke er sundhedsfarlige er markeret med grøn.

	CAS-nr	Navn	Hyp.	% V	Toks.	Pers.	I alt	Tilsætningsstof i					
								PCE	TCE	1,1,1 TCA	Gen erelt	Andre	
Godt datagrundlag	79-46-9	2-nitropropan	4	10	40	20	74			X			
	123-91-1	1,4-dioxan	12	20	40	0	72		X	X			
	106-89-8	epichlorhydrin	12	15	40	0	67	X	X	X	✓	DCA, TeCM	
	75-52-5	nitromethan	4	20	40	0	64			X			
	75-56-9	propylenoxid	4	15	40	0	59	X	X		✓		
	71-36-3	n-butanol	4	20	10	0	34	X	X	X			
	Stoffer der jf. R-sætninger ikke har sundhedsrisici												
	75-65-0	tertiary butanol	4	15	10	0	29			X			
	646-06-0	1,3-dioxolan	8	20	0	0	28			X	✓	1,1,2 TCA	
	141-78-6	ethylacetat	4	20	0	0	24		X		✓		
	503-30-0	oxacyclobutan	4	10	10	0	24	X	X				
	108-03-2	1-nitropropan	4	10	10	0	24			X			
	79-24-3	nitroethan	4	10	10	0	24			X			

	CAS-nr	Navn	Hyp.	% V	Toks.	Pers.	I alt	Tilsætningsstof i				
								PCE	TCE	1,1,1 TCA	Generelt	Andre
	109-99-9	amlynoxid	8	15	0	0	23	X	X		✓	
	563-80-4	isopropyl-methylketon	4	15	0	0	19		X			
	67-64-1	acetone	4	15	0	0	19		X			
	108-10-1	isobutryl-acetone	4	5	10	0	19		X		✓	
	123-54-6	acetylacetone	4	5	10	0	19		X		✓	
	78-93-3	ethyl methyl keton	4	5	0	0	9		X			
	123-51-3	isoamylalcohol	4	5	0	0	9	X	X			
Middel datagrundlag	26249-20-7	butylenoxid	16	10	40	0	66	X	X	X	✓	DCA, TeCM
	286-20-4	cyclohexenoxid	8	15	40	0	63	X	X		✓	
	3848-24-6	butyrylacetone	16	5	10	20	51		X		✓	
	98-02-2	furfuryl mercaptan	4	5	20	20	49		X		✓	
	624-92-0	dimethyl disulfid	4	5	10	20	39		X		✓	
	115-19-5	2-methyl-3 butyn-2-ol	4	20	10	0	34		X			
	60-24-2	2 mercapto-ethanol	4	5	10	0	19		X		✓	
	77-75-8	3-methyl-1-pentyn 3-ol	4	5	10	0	19	X	X			
	3002-24-2	propionylacetone	4	5	10	0	19		X		✓	
	6921-35-3	3,3-dimethyl oxacyclobutane	8	10	0	0	18	X	X			
Dårligt datagrundlag	290-67-5	dioxadien	4	20	40	20	84			X	✓	
	543-75-9	dioxene	4	20	40	0	64			X	✓	
	1436-34-6	hexylenoxid	4	10	40	0	54			X		
	115-22-0	2-hydroxy-2-methyl-3-butanon	4	5	10	20	39	X	X		✓	
	110-06-5	di tert butyl disulfid	4	5	10	20	39		X		✓	
	1569-69-3	cyclohexyl mercaptan	4	5	10	20	39		X		✓	
	75-17-2	formaloxim	4	5	20	0	29	X	X			
	111-88-6	octyl mercaptan	8	5	10	0	23		X		✓	

✓: Kemikalieproducenten har forbeholdt sig retten til at bruge stoffet i alle chlorerede opløsningsmidler, udover de produkter der er navngivet i patentet (markeret med et kryds)

På baggrund af QSAR beregninger er der fundet yderligere to potentielle risikostoffer:

- dioxadien
- dioxene

Også her er der tale om de samme stoffer, som blev vurderet at kunne udgøre en risiko for grundvandet.

6.3 Risiko for kontakt med forurenede jord

Ingen stoffer scorer på et godt datagrundlag mere end 55 point, i forhold til risiko for kontakt med forurenede jord (se tabel 6.3). Der er en række stoffer, der scorer tæt på 50 point med middeld godt datagrundlag, bl.a. organiske tinforbindelser og zeoliter.

Tabel 6.3 Pointscore for tilsætningsstoffer, med kontaktrisiko. Stoffer med score over 55 points er markeret med rød. Stoffer, der jf. R-Sætninger ikke er sundhedsfarlige er markeret med grøn.

	CAS-nr	Navn	Hyp.	% V	Toks.	Pers.	I alt	Tilsætningsstof i					
								PCE	TCE	1,1,1 TCA	Alle	Andre	
Gott datagrundlag	120-78-5	2,2 dithiobis-benzothiazol	4	5	10	20	39		X		✓		
	Stoffer der jf. R-sætninger ikke sundhedsrisici												
	75-65-0	tertiary butanol	4	15	10	0	29			X	✓		
	646-06-0	1,3-dioxolan	8	20	0	0	28			X	✓	1,1,2 TCA	
	141-78-6	ethylacetat	4	20	0	0	24		X		✓		
	79-24-3	nitroethan	4	10	10	0	24			X	✓		
	109-99-9	amylenoxid	8	15	0	0	23	X	X		✓		
	563-80-4	isopropyl methyl keton	4	15	0	0	19		X		✓		
	67-64-1	acetone	4	15	0	0	19		X		✓		
	78-93-3	ethyl methyl keton	4	5	0	0	9		X		✓		
123-51-3	isoamylalcohol	4	5	0	0	9	X	X		✓			
Middel datagrundlag	1318-02-1	zeolite	8	15	10	20	53	X	X		✓		
	4731-77-5	dibutyltin dicaprat	8	5	20	20	53		X		✓	CBrM, TeBrE, TeCM	
	10584-97-1	dibutyltin dinonyl maleat	8	5	20	20	53		X		✓	CBrM, TeBrE, TeCM	
	77-58-7	dibutyltin dilaurat	4	5	20	20	49		X		✓	CBrM, TeBrE, TeCM	
	25168-24-5	dibutyltin diisooctylthioglycolat	8	5	10	20	43		X		✓	CBrM, TeBrE, TeCM	
	128-37-0	2,6-di-tert-butyl-p-cresol	4	5	10	20	39		X		✓		
	112-80-1	oleic acid	8	10	0	0	18	X			✓	TeCM	
Dårligt datagrundlag	1185-81-5	dibutyltin dilauryl mercaptide	8	5	10	20	43		X		✓	CBrM, TeBrE, TeCM	
	110-06-5	di tert butyl disulfid	4	5	10	20	39		X		✓		
	150-60-7	dibenzyl disulfid	4	5	10	20	39		X		✓		
	1569-69-3	cyclohexyl mercaptan	4	5	10	20	39		X		✓		
	106-83-2	bytyl epoxy stearat	8	15	0	0	23	X	X	X	✓	DCM	
	111-88-6	octyl mercaptan	8	5	10	0	23		X		✓		

CBrM: chlorobromomethan, TeBrE: tetrabromoethan

✓: Kemikalieproducenten har forbeholdt sig retten til at bruge stoffet i alle chlorerede opløsningsmidler, udover de produkter der er navngivet i patentet (markeret med et kryds)

6.4 Tilsætningsstoffer, der mangler CAS nr.

En række stoffer kunne ikke identificeres med CAS nr. og der er derfor ikke indhentet fysiske, kemiske eller toksikologiske data. Der er foretaget en indledende risikovurdering af disse stoffer på baggrund af hvilken stofgruppe de tilhører, eller sammenlignelige stoffer. Tabel 6.4 viser en liste over de fundne tilsætningsstoffer samt den tilsvarende stofgruppe.

Tablet 6.4 Pointscore for stoffer, der mangler et CAS-nr/Stofgrupper

Navn	Stofgruppe/ Sammenlignelige stoffer	Hyp- pighed	Vægt procent	Toksicitet	Persistens	I alt
epoxidised linseed oil	Planteolier	15	4	-	-	19
epoxidised soya bean oil		15	4	-	-	19
epoxidised vegetable oil		15	4	-	-	19
epoxy 2 ethyl stearate	stearates	15	4	-	-	19
epoxy cyclohexyl stearate		15	4	-	-	19
dibutyltin dinonyl thioglycollate	Organotin komponenter	5	8	-	-	13
organic phosphorus compounds		10	8	-	-	18
Aldehydes		10	4	-	-	14
2,2 dimethylacetylacetone	3,3 dimethyl acetylacetone	8	5	10 (QSAR)	20	43
alkali metal soap		5	4	-	-	9

Planteolier vurderes at være ufarlige og nemt omsættelige.

Stearater og organotin komponenter er ikke flygtige, ikke vandopløselige komponenter, der dog kan have en høj toksicitet for mennesker.

Derudover er der i litteraturen nævnt en række uspecificerede stoffer fra forskellige stofgrupper, der kan have været brugt som stabilisatorer; herunder aldehyder, organiske phosphorforbindelser og sæbestoffer af alkalimetaller.

Organiske phosphorforbindelser indeholder C-P bindinger og er generelt letnedbrydelige. Det er mest sandsynligt, at der er tale om fosphonater pga. deres metalinhiberende egenskaber. Fosphonater er letopløselige, ikke flygtige stoffer og har en forholdsvis lav toksicitet. Stofferne kan dog nedbrydes til mere farlige komponenter /11/.

Aldehyder er flygtige vandopløselige komponenter, og kan derfor udgøre en trussel for grundvandet og indeklima. Formaldehyder er klassificeret som kræftfremkaldende for mennesker, og acetaldehyd som muligvis kræftfremkaldende /10/. Andre aldehyder er også fundet at være muligvis kræftfremkaldende (malonal- og glycidaldehyd). Stofferne er dog letnedbrydelige jf. Biowin.

2,2-dimethylacetone er vurderet pba af et strukturlignende stof og QSAR beregninger som ikke kritisk.

Sæbestoffer af alkalimetaller, primært natrium og kalium, vurderes ikke at kunne udgøre en betydelig trussel pga. deres lave toksicitet.

6.5 Risiko fra tilsætningsstoffer ift. risiko fra de chlorerede opløsningsmidler

Der i alt udpeget 9 tilsætningsstoffer (5 baseret på et godt datagrundlag og 2 på et middel datagrundlag og 2 på et usikkert datagrundlag), der vurderes at kunne udgøre den største risiko for grundvand og indeklimaet.

Som tidligere nævnt vil de identificerede stoffer kun udgøre en lille andel af en evt. forurening med chlorerede opløsningsmidler. Det er derfor mest relevant at fokusere de tilfælde, hvor der er sket store spild af opløsningsmidler, og dermed store spild af evt. tilsætningsstoffer. Derudover ser det ud til at risikoen generelt er større på lokaliteter med 1,1,1-TCA, da indhold af tilsætningsstoffer i dette produkt generelt har været højere. Dette bekræftes af konkrete fund på lokaliteter med 1,1,1-TCA /1,13/.

Fra et risikovurderingsperspektiv er det vigtigt at vurdere, om de udvalgte tilsætningsstoffer er mere kritiske end selve forureningen med chlorerede opløsningsmidler. De udvalgte tilsætningsstoffer er generelt lige så giftige som de chlorerede opløsningsmidler. Derudover bør egenskaber som flygtighed og mobilitet af stofferne indgå i overvejelser om tilsætningsstofferne risikobidrag ift. den "primære" forurening. Tabel 6.5 sammenligner stoffernes flygtighed og mobilitet i forhold til de forskellige chlorerede opløsningsmidler de kan indgå i. Det ses, at stoffernes flygtighedsniveau og dermed risiko for afdampning varierer, mens stoffernes mobilitet for alle stoffer er større end de chlorerede opløsningsmidlers. Dette betyder, at fronten af tilsætningsstofferne i en forureningsfane teoretisk set kan konstateres længere væk fra kildeområdet end de chlorerede opløsningsmidler.

Derudover indeholder tabellen oplysninger om stoffernes nedbrydelighed under aerobe og anaerobe forhold. De chlorerede opløsningsmidler kan nedbrydes under anaerobe forhold, mens nogle af tilsætningsstofferne (f.eks. 1,4-dioxan, butylenoxid) ikke kan. Det betyder, at afhængigt af redoxforholdene på en lokalitet, kan tilsætningsstofferne være mere persistente end chlorerede opløsningsmidler.

Tabel 6.5. De udvalgte stoffers egenskaber ift. chlorerede opløsningsmidler

Datagrundlag	Stof	Flygtighed	Mobilitet	Nedbrydelighed	
		i forhold til chlorerede		aerob	anaerob
Godt	2-nitropropan	mindre	større	nej	ja
	1,4-dioxan	≈	større	ja	nej
	Epichlorohydrin	mindre	større	ja	ja
	Nitromethan	≈	større	ja	ja
	Propylenoxid	større	større	ja	nej
Middel	Butylenoxid	≈ / større	større	ja	nej
	Cyclohexenoxid	mindre	større	ja	nej
Dårligt	Dioxadien	≈	større	nej	nej
	Dioxene	≈	større	ja	nej

7 Konklusion

Projektet har vist, at der er flere tilsætningsstoffer i chlorerede opløsningsmidler, der kan udgøre en teoretisk risiko i forbindelse med jord- og grundvandsforurening.

Der er identificeret 122 stoffer, som potentielt kan være anvendt som tilsætningsstoffer i chlorerede opløsningsmidler. De er tilsat i forholdsvis små koncentrationer - typisk under 1 %, men enkelte er potentielt tilsat i højere koncentrationer.

Idet tilsætningsstoffer kun udgør en meget lille andel af en evt. forurening, er det valgt at fokusere på stoffer, hvor den maksimale indholdsprocent i produkterne er ≥ 1 %, svarende til 62 stoffer.

Mange af disse er vandopløselige og/eller flygtige, samtidig med at de er forholdsvis toksiske. De kan derfor teoretisk set udgøre et problem i forhold til grundvandsforurening og eksponering via afdampning til luften.

Om tilstedeværelsen af disse stoffer reelt har miljø/sundhedsmæssig betydning er uvist, da de findes i små koncentrationer i forhold til hovedproduktet (opløsningsmidlet).

Projektet har identificeret de tilsætningsstoffer, som er potentiel mest kritiske i forhold til mennesker gennem eksponering via jord og grundvand og indeklima (afdampning fra jord/grundvand), forudsat at et forholdsvis stort spild af kemikalier har fundet sted, se tabel 7.1.

Tabel 7.1 Tilsætningsstoffer der kan udgøre et problem for grundvand og indeklima i forbindelse med forurening der stammer fra chlorerede opløsningsmidler

Datagrundlaget	CAS nr.	Stofnavn	Tilsætningsstof i					Kritisk ift.	
			PCE	TCE	1,1,1-TCA	DCA	Generelt	Grundvand	Indeklima
God	79-46-9	2-nitropropan			X			Ja	Ja
	123-91-1	1,4-dioxan		X	X			Ja	Ja
	106-89-8	epichlorohydrin	X	X	X	X	✓	Ja	Ja
	75-52-5	nitromethan			X			Ja	Ja
	75-56-9	propylenoxid	X	X			✓	Ja	Ja
Middel	26249-20-7	butylenoxid	X	X	X	X	✓	Ja	Ja
	286-20-4	cyclohexenoxid	X	X				Ja	Ja
Dårligt	290-67-5	dioxadien		X	X			Ja	Ja
	543-75-9	dioxene		X	X			Ja	Ja
Typisk indhold af tilsætningsstoffer (%)			0-0,1	0-1	0-10	ukendt	ukendt		

✓: Kemikalieproducenten har forbeholdt sig retten til at bruge stoffet i alle chlorerede opløsningsmidler, udover de produkter der er navngivet i patentet (markeret med et kryds)

Kvaliteten af datagrundlaget for de forskellige stoffer har været svingende. Jo bedre datagrundlag, jo større sikkerhed er der ved vurderingen af den potentielle risiko.

1,4-dioxan er fundet på flere forurenede lokaliteter, hvor der har været forurening med chlorerede opløsningsmidler, bl.a. 1,1,1-TCA, i Danmark /12/ og i udlandet /1/. Butylenoxid (tetrahydrofuran) er også fundet på en 1,1,1-TCA forurennet lokalitet i USA /13/.

De problematiske tilsætningsstoffer (tabel 7.1) har alle en højere mobilitet i grundvandet end selve de chlorerede opløsningsmidler, hvorfor det er muligt, at de vil kunne sprede sig mere end de chlorerede opløsningsmidler, og derved udgøre en risiko uafhængigt af de chlorerede opløsningsmidler.

I forhold til indeklima vil der i de fleste tilfælde være størst risiko på grund af de chlorerede stoffer, men enkelte stoffer med meget høj flygtighed, dvs. propylen- og butylenoxid kan være mere kritiske.

Det kan overvejes at undersøge nærmere om nogle af de ovennævnte 9 stoffer optræder i forurening med chlorerede opløsningsmidler, især på 1,1,1-TCA lokaliteter.

8 Referencer

- /1/ Mohr, TKG (2001) "Solvent Stabilizers White Paper Prepublication Copy". Santa Clara Valley Water District of California.
- /2/ INCHEM Environmental Health Criteria, Tetrachloroethylene, Trichloroethylene <http://www.inchem.org/documents/ehc/ehc/ehc31>
- /3/ INCHEM Org Environmental Health Criteria, Trichloroethylene <http://www.inchem.org/documents/ehc/ehc/ehc50.htm>
- /4/ Miljøprojekt Nr. 1216 2008. "Kortlægning af hjælpe- og tilsætningsstoffer i danske renserier før og nu"
- /5/ Kortlægning af brancher der anvender chlorerede opløsningsmidler, Teknik og Administration Nr. 4. 2002, Videncenter for jordforurening
- /6/ Redegørelse om jordforurening 2008, Depotrådet Redegørelse nr. 1 2010 Miljøstyrelsen
- /7/ Personlig korrespondance med Jørn Pedersen, Region Syddanmark
- /8/ Cronin, M.T.D & Dearden J.C. (1994) QSAR in Toxicology. 2. Prediction of Acute Mammalian Toxicity and Interspecies Correlations Quantitative Structure-Activity Relationships, Volume 14, Issue 2
- /9/ Redegørelse over anvendte kemikalier på Grindstedværket og deres potentielle trussel i forhold til miljøet, Region Syddanmark, november 2009, udarbejdet af NIRAS A/S
- /10/ Agents classified by the IARC monographs, Volumes 1-100, International agency for Research on Cancer, World Health Organisation
- /11/ <http://en.wikipedia.org/wiki/Phosphonate>
- /12/ Personlig korrespondance med Claus Westergaard, Orbicon | Leif Hansen
- /13/ Isaacson et al, (2006), "Quantitative Determination of 1,4-Dioxane and Tetrahydrofuran in Groundwater by Solid Phase Extraction GC/MS/MS" Environ. Sci. Technol., 2006, 40 (23), pp 7305-7311
- /14/ OECDs QSAR Toolbox, Version 2.1
- /15/ Miljøstyrelsens QSAR database http://www.mst.dk/Virksomhed_og_myndighed/Kemikalier/Stoflister+og+databaser/Vejledende+liste+til+selvklassificering+af+farlige+stoffer/SoegefunktionVejledendelisteselvklassificeringfarligestoffer.htm

/16/

Toxic hazard classification by Cramer (with extensions) jf. Cramer G. M., R. A. Ford, R. L. Hall, Estimation of Toxic Hazard - A Decision Tree Approach, J. Cosmet. Toxicol., Vol.16, pp. 255-276, Pergamon Press, 1978) and betterments proposed in: G.Patlewicz, N. Jeliaskova, R.J. Safford, A.P. Worth, B. Aleksiev, In evaluation of implementation of the Cramer classification scheme in the Toxtree software, SAR and QSAR in Enviromental Research, Vol.19(3), pp. 1-30, 2008.

/17/

ACD Labs ToxSuite

http://www.acdlabs.com/products/pc_admet/tox/tox/

/18/

Email korrespondance med CLP helpdesk d .14. marts 2011

/19/

Vejledning om klassificering m.v. af kemiske stoffer og produkter, Miljøstyrelsen, nr. 3, 2004

Resultater for patentsøgninger

Bilag A

Patent nr.	Opfinder	Firma	Land	Dato	Stof	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Formål
2.371.644	Petering et al	Westvaco Chlorine products corporation	USA	20-03-1945	TCE	n-butyl alcohol	1 %	affedtning af metalemner især aluminium
					PCE	isoamylalcohol	1 %	
2.371.646	Petering et al	Westvaco Chlorine products corporation	USA	20-03-1945	TCE	formaldoxim	1 %	affedtning af metalemner især aluminium
					PCE			
2.517.894	Larchar Arthur	DuPont	USA	08-08-1950	TCE	cyclohexen	0,02-0,25%	affedtning, tekstil
2.517.895	Larchar Arthur	DuPont	USA	08-08-1950	TCE	acetylacetone	0,02-1 %	affedtning, tekstil
					Flygtige chlorerede hydrocarboner	propionylacetone	0,02-1 %	
						butyrylacetone	0,02-1 %	
						isobutyrylacetone	0,02-1 %	
						2,2dimethylacetylacetone	0,02-1 %	
2.719.181	Cole et al	Air Reduction Company	USA	27-09-1955	TCE	2-hydroxy-2methyl-3-butanon	0,01-1 %	-
					PCE			
2.838.458	Bachtel et al	Dow	USA	30-09-1955	1,1,1-TCA	1,4-dioxan	2,5-10 %	affedtning af metaller
							2-methyl-3 butyn-2-ol	
2.906.783	Monroe et al	Dow	USA	29-09-1955	TCE	acetal azin	0,05-0,5 %	affedtning af metaller
					1,1,1-TCA			
					DCE			
					PCE			
					DCM			
carbon tetrachlorid								
2.944.088	Kauder et al	Argus	USA	05-07-1960	TCE	1,3,5 trimethylhexahydrotriazin	0,01-2 %	Ikke angivet
					PCE			
					1,1,1-TCA			
					Chlorerede alifatiske opløsningsmidler			
2.945.895	Burch et al	Air Reduction Company	USA	19-07-1960	TCE	2,6 di tert butyl para cresol	0,1-1 %	affedtning, renseri, kaffeekstraktion

Patent nr.	Opfinder	Firma	Land	Dato	Stof	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Formål
					PCE Chlorerede alifatiske opløsningsmidler	3 methyl 1 pentyn 3 ol	0,1-1 %	
2.981.759	Cole et al	Air Reduction Company	USA	25-04-1961	TCE	1,4-dioxan	0,10 %	Ikke angivet
						3 methyl 1 pentyn 3 ol	0,20 %	
3.049.571	Brown et al	Dow	USA	14-08-1962	1,1,1 TCA	1,4-dioxane	4 %	Ikke angivet
						nitromethan	0,1-1,5 %	
						butylen oxid	0,1-1,5 %	
						hexylen oxid	0,1-1,5 %	
3.113.155	Sims et al	Ethyl Corporation	USA	03-12-1963	1,1,1 TCA	1,3-dioxolan	0,3-12 %	affedtning af metaller
					1,1,2 TCA	nitromethan	0,3-12 %	
					Chlorerede alifatiske opløsningsmidler	ethylacetat	0,3-12 %	
3.113.156	Sims et al	Ethyl Corporation	USA	03-12-1963	1,1,1 TCA	1,3-dioxolan	0,3-12 %	affedtning af metaller
					1,1,2 TCA	nitromethan	0,3-12 %	
AU2703071 (A)	Tipping	ICI LTD	UK	28-09-1972	1,1,1 TCA	nitromethan	0,1-10 %	Ikke angivet
						pyriden	0,001-0,5 %	
						quinolin	0,001-0,5 %	
						pyrrol	0,001-0,5 %	
						pyrazin	0,001-0,5 %	
						pyridazin	0,001-0,5 %	
						pyrimidin	0,001-0,5 %	
CA718054 (A)	Moakes J	ICI LTD	UK	14-09-1965	1,1 DCE	paraethoxy phenol	0,004-0,025 %	Ikke angivet
						paramethoxy phenol	0,004-0,025 %	
						ammonium	0,001-0,01 %	
						phenol	Ikke angivet	
CA1126299 (A1)	Allen C,S,	ICI PLC	UK	22-06-1982	1,1,1 TCA	octyl epoxy stearat	0,0025-5%	metal affedtning
						bytyl epoxy stearat	0,0025-5%	
						epoxy 2 ethyl stearat	0,025-5%	
						epoxy cyclohexyl stearat	0,025-5 %	

Patent nr.	Opfinder	Firma	Land	Dato	Stof	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Formål
						Epoxy vegetabilsk olie	0,025-5 %	
						Epoxy sojabønne olie	0,025-5 %	
						Epoxy linolie	0,025-5%	
CA1150736 (A1)	Bain et al	ICI PLC	UK	26-07-1983	1,1,1 TCA	tertiær butanol	0,5-5%	metal rensning
						nitromethan	0,5-2,5 %	
						1-nitropropan	0,5-1,5 %	
						2-nitropropan	0,5-1,5 %	
						nitroethan	0,5-1,5 %	
EP0101047 (A1)	Blum et al	WACKER CHEMIE GMBH	D	22-02-1984	PCE TCE	Zeolit	0,001-5 %	transformatorer
GB378084 (A)	Savage et al	ICI LTD	UK	08-08-1932	TCE TeCM chlorerede alifatiske hydrocarboner	oleic syre	2 %	metal affedtning og andre
						alcali metal sæbe	1 %	
GB397914 (A)	Ikke angivet	ROESSLER & HASSLACHER CHEMICAL	USA	04-09-1933	DCM PCE tetrachlorethane	amylene	0,0001-0,1 %	Ikke angivet
GB397915 (A)		ROESSLER & HASSLACHER CHEMICAL		04-09-1933	DCM DCE TCE PCE tetrachlorethane	anilin	0,0001-0,1 %	Ikke angivet
						orthotoluidin	0,0001-0,1 %	
						paratoluidin	0,0001-0,1 %	
						diphenyl-guanidin	0,0001-0,1 %	
						phenol	0,0001-0,1 %	
						cresol	0,0001-0,1 %	
						catechol	0,0001-0,1 %	
						thymol	0,0001-0,1 %	
						hydroquinon	0,0001-0,1 %	
						pyrogallol	0,0001-0,1 %	
						resorcinol	0,0001-0,1 %	
						orthoaminopehnlol	0,0001-0,1 %	
						alpha naphthol	0,0001-0,1 %	
GB493875 (A)	Crawford et al	ICI LTD	UK	17-10-1938	PCE	methyl pyrider	0,001-0,05 %	Ikke angivet

Patent nr.	Opfinder	Firma	Land	Dato	Stof	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Formål
GB794700 (A)	Copelin H.B.	DU PONT	USA	07-05-1958	TCE chlorerede hydrocarbon opløsningsmidler	butylen oxid	0,01-5 %	Ikke angivet
						propylen oxid	0,01-5 %	
						amylene oxid	0,01-5 %	
						cyclohexen oxid	0,01-5 %	
						epichlorhydrin	0,01-5 %	
						triethylamin	0,001-0,2 %	
						β-picolin	0,001-0,2 %	
						pyriden	0,001-0,2 %	
						diisopropylamin	0,001-0,2 %	
						anilin	0,001-0,2 %	
GB799287 (A)	Starks F.W.	DU PONT	USA	06-08-1958	PCE TCE chlorerede hydrocarbon opløsningsmidler	butylenoxid	0,2-0,6 %	affedtning af metaller
						propylenoxid	0,2-0,6 %	
						amyleneoxid	0,2-0,6 %	
						cyclohexen oxid	0,2-0,6 %	
						epichlorhydrin	0,2-0,6 %	
						ethyl acetat	0,2-0,6 %	
						methyl acetat	0,2-0,6 %	
						propyl acetat	0,2-0,6 %	
						ethyl propionat	0,2-0,6 %	
						methyl propionat	0,2-0,6 %	
						propyl propionat	0,2-0,6 %	
GB871036 (A)	Dutton et al	ICI LTD	UK	21-06-1961	TCE	oxacyclobutan	0,1-2 %	affedtning af metaller
					PCE	3,3 dimethyl oxacyclobutan	0,40 %	
GB884823 (A)	Dutton et al	ICI LTD	UK	20-12-1961	TCE	Acetone	0,01-5 %	affedtning af metaller
						ethyl methyl keton	0,1-0,4 %	
						isopropyl methyl keton	0,1-0,4 %	

Patent nr.	Opfinder	Firma	Land	Dato	Stof	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Formål
GB891242 (A)	-	COLUMBIA SOUTHERN CHEM CORP	USA	14-03-1962	TCE	diisopropylammonium acetat	0,01-0,3 %	metal, renserier
						diisobutylammonium acetat	0,01-0,3 %	
						di-n-propylammonium acetat	0,01-0,3 %	
						diisopropylammonium format	0,01-0,3 %	
						diisopropylammonium nitrit	0,01-0,3 %	
						dicyclohexylammonium nitrit	0,01-0,3 %	
						m-methylmorpholinium acetat	0,01-0,3 %	
						diisopropylammonium 2-chlorperoxyd	0,01-0,3 %	
GB994167 (A)	JAMES JOHN EDWARD	ALBRIGHT & WILSON MFG LTD		02-06-1965	chlorbromometan	dibutyltin dilaurat	0,2-1 %	renserier
					TeCM	dibutyltin dinonyl maleat	0,2-1 %	
					TCE	dibutyltin dinonyl thioglycollat	0,2-1 %	
					tetrabromoethan	dibutyltin diisooctylthioglycollat	0,2-1 %	
						dibutyltin mercaptopropionat	0,2-1 %	
						dibutyltin dilauryl mercaptid	0,2-1 %	
						dibutyltin dicaprat	0,2-1 %	
GB1036841		Hooker Chemical Corporation	USA	20-07-1966	TCE	n,n, diethylthiourea	0,0001-0,2 %	metal affedtning phosphatisering
					PCE	Fosforsyre	0,1-2 %	
					1,1,1-TCA	n-butanol	3-12 %	
GB1133060 (A)		SOLVAY	Belgien	06-11-1968	PCE	Diaziridine	0,0025-0,05 %	Storage/usage
					TCE	1,2 diethyldiaziridine	0,0025-0,05 %	
GB1174.669	Brown W,E,	Dow	USA	17-12-1969	1,1,1-TCA	Dioxen	0,01-15 v/v %	Ikke angivet
					Chlorerede mættede alifatiske hydrocarboner	Dioxadien	1,5-7 %	
GB1194660 (A)	Ryckaert et al	SOLVAY	Belgien	10-06-1970	1,1,1-TCA	Diaziridin	0,01 %	Ikke angivet
					TeCM	1,2 diethyl diaziridin	0,01 %	
					TCE	Pyrrrole	0,0025-0,05 %	
					PCE	n-methylpyrrrole	0,0025-0,05 %	
					DCA	n-ethyl pyrrrole	0,0025-0,05 %	

Patent nr.	Opfinder	Firma	Land	Dato	Stof	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Formål
GB1213041	Crabb & McDonald	DOW Chemical company	USA	18-11-1970	TCE chlorerede hydrocarbon opløsningsmidler	Epoxid		Ikke angivet
						4,4-dithiodimorpholin	0,001-1 %	
						dimethyl disulfid	0,001-1 %	
						dibenzyl disulfid	0,001-1 %	
						di tert butyl disulfid	0,001-1 %	
						2,2-dithiobisbenzothiazol	0,001-1 %	
						octyl mercaptan	0,001-1 %	
						furfuryl mercaptan	0,001-1 %	
						cyclohexyl mercaptan	0,001-1 %	
						2 mercaptoethanol	0,001-1 %	
						2,3-dimercapto-1-propanol	0,001-1 %	
GB1284367	Correia & Clair	Chimique Pechiney-St Gobain	Frankrig	09-08-1972	1,1,1,2-tetrachlorethan	Organiske fosforforbindelser	0,5-2 %	Ikke angivet
						Aldehyder	0,5-2 %	
GB1299553	Dahlberg & Christiansen	Uddeholms aktiebolag	Sverige	13-12-1972	PCE	hydrazine hydrat	0,1-5 %	affedning/reenserier
						TCE	dimethyl hydrazin	
					chlorerede alifatiske hydrocarboner	ethylene diamin	0,1-5 %	
						hexamehtylene diamin	0,1-5 %	
						Triethylamin	0,1-5 %	
						diidopropyl amin	0,1-5 %	
GB20002371	Allen C,S,	ICI LTD	UK	21-02-1979	chlorerede ethaner	diethylene glycol monomethyl ether	0,006-0,08 %	Ikke angivet
					1,1,1-TCA	diethylene glycol monoethylether	0,006-0,08 %	
					1,2,2-TCA	polyethylene glycol	0,006-0,08 %	
					1,1-DCA			
					1,2-DCA			
					Tetrachlorethener			

Patent nr.	Opfinder	Firma	Land	Dato	Stof	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Formål
IE48775 (B1)		ICI LTD [GB]	UK	15-05-1985	PCE	octyl epoxy stearat	0,05-5 %	Ikke angivet
					TCE	bytyl epoxy stearat	0,05-5 %	
					DCM	epoxy 2 ethyl stearat	0,05-5 %	
						epoxy cyclohexyl stearat	0,05-5 %	
					Epoxideret vegetabilsk olie	0,05-5 %		
					Epoxideret linolie	0,05-5 %		
					Epoxideret linolie	0,05-5 %		
US2935537 (A)	NESTOR DARAS	SOLVAY	Belgien	03-05-1960	TCE	phenol	0,003-0,03 %	Ikke angivet
					PCE	epichlorhydrin	0,03-0,6 %	
					TeCM	butylenoxid	0,03-0,6 %	
					DCA	anilin	0,003-0,03 %	
					TCA	pyrrol	0,003-0,03 %	

Liste over alle 122 fundne tilsætningsstoffer

BILAG B

✓ stoffet har været brugt som tilsætningsstof i alle chlorerede opløsningsmidler, men i særlig høj grad i de produkter hvor der også er lagt kryds: f.eks er 1,2-diethyl diaziridin brugt som tilsætningsstof i alle produkter med chlorerede opløsningsmidler men i særlig stor grad i PCE, TCE og DCA.

Stofnavn	PCE	TCE	1,1,1 - TCA	DCE	DCM	TeCM	Alle	Andre	Vægt Procent %
1,2-diethyl diaziridin	X	X	X			X		DCA	0,0025-0,05
1,3-dioxolan			X				✓	1,1,2 TCA	0,3-12
1,3,5-triisopropyl hexahydro-triazin	X	X	X				✓		0,01-2
1,4-dioxan		X	X						0,1-10
1-nitro-propan			X						0,5-1,5
2 - mercapto-ethanol		X					✓		0,001-1
2,2-dimethyl-acetylaceton e		X					✓		0,02-1
2,2-dithio-bisbenzothiazol		X					✓		0,001-1
2,3-dimercapto-1-propanol		X					✓		0,001-1
2,6-di-tert butyl para cresol	X	X					✓		0,1-1
2-hydroxy-2methyl-3-butanon	X	X					✓		0,01-1
2-methyl-3 butyn-2-ol		X							0,01-10
2-nitro-propan			X						0,5-1,5
3- methyl-1 pentyn-3-ol	X	X							0,1-1
3,3-dimethyl oxacyclobutan	X	X							0,40
4,4 dithiodimorpholin		X					✓		0,001-1
acetal azin	X	X	X	X	X	X			0,05-0,5
acetone		X							0,01-5
acetylaceton e		X					✓		0,02-1
alcali metal sæbe	X					X	✓		1
aldehyder								1,1,1,2 TeCA	0,5-2
alpha naphthol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
ammonium				X					0,001-0,01

Stofnavn	PCE	TCE	1,1,1 - TCA	DCE	DCM	TeCM	Alle	Andre	Vægt Procent %
amylen	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
amylene oxid	X	X					✓		0,01-5
anilin	X	X	X	X	X			1,1,1,2 TeCA, DCA	0,0001-0,1
Butylen oxid	X	X	X			X	✓	DCA	0,01-5
butyryl-acetone		X					✓		0,02-1
bytyl epoxy stearat	X	X	X		X				0,025-5
catechol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
cresol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
cyclohexen		X							0,02-0,25
cyclohexen oxid	X	X					✓		0,01-5
cyclohexyl mercaptan		X					✓		0,001-1
di -n-propyl-ammonium acetat		X							0,01-0,3
di tert butyl disulfid		X					✓		0,001-1
diaziridin	X	X	X			X		DCA	0,0025-0,05
dibenzyl disulfid		X					✓		0,001-1
dibutyltin dicaprat		X				X		1)	0,2-1
dibutyltin diisooctylthioglycollat		X				X		1)	0,2-1
dibutyltin dilaurate		X				X		1)	0,2-1
dibutyltin dilauryl mercaptid		X				X		1)	0,2-1
dibutyltin dinonyl maleat		X				X		1)	0,2-1
dibutyltin dinonyl thio-glycollat		X				X		1)	0,2-1
dibutyltin mercaptopropionat		X				X		1)	0,2-1
dicycklohexylammonium nitrit		X							0,01-0,3
diethylene glycol mono-ethylether			X					tri/di tert chlor, Ethaner	0,006-0,08
diisopropyl amin	X	X					✓		
diisobutylammonium		X							0,01-0,3

Stofnavn	PCE	TCE	1,1,1 - TCA	DCE	DCM	TeCM	Alle	Andre	Vægt Procent %
acetat									
diisopropylamin		X					✓		0,001-0,02
diisopropylammonium 2-chloropgenoxid		X							0,01-0,3
diisopropylammonium acetat		X							0,01-0,3
diisopropylammonium format		X							0,01-0,3
diisopropylammonium nitrit		X							0,01-0,3
dimethyl disulfid		X					✓		0,001-1
dimethyl hydrazin	X	X					✓		
dioxadien			X				✓		1,5-7
dioxen			X				✓		0,01-15 v/v
diphenylguanidin	X	X		X	X			tetrachloroethane	0,0001-0,1
epichlorohydrin	X	X	X			X	✓	DCA	0,01-5
epoxid		X					✓		ukendt
epoxisided linolie	X	X	X		X				0,05-5
epoxisided vegetabilsk olie	X	X	X		X				0,025-5
epoxy 2 ethyl stearat	X	X	X		X				0,025-5
epoxy cyclohexyl stearat	X	X	X		X				0,025-5
ethyl acetat	X	X	X				✓	1,1,2 TCA	0,2-12
ethyl methyl keton		X							0,1-0,4
ethyl propionat		X					✓		0,2-0,6
ethylene diamin	X	X					✓		
formaldoxim	X	X							1
furfuryl mercaptan		X					✓		0,001-1
hexamethylen diamin	X	X					✓		
hexylene oxid			X						0,1-1,5
hydrazine hydrat	X	X					✓		
Hydroquinon	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
Isoamyl-	X	X							1

Stofnavn	PCE	TCE	1,1,1 - TCA	DCE	DCM	TeCM	Alle	Andre	Vægt Procent %
Alkohol									
Isobutyrylac etone		X					✓		0,02-1
isopropyl methyl keton		X							0,1-0,4
methyl acetate	X	X						X	0,2-0,6
methyl propionat	X	X					✓		0,2-0,6
methyl pyridin	X								0,001-0,05
m-methyl-morpholiniur acetat		X							0,01-0,3
n,n, diethyl-thiourea	X	X	X						0,0001-0,2
n-butanol	X	X	X						3-12
n-ethyl pyrrol nitroethan	X	X	X			X		DCA	0,0025-0,05
Nitro-methan		X	X			X		1,1,2 TCA	0,1-1,2
n-methyl-pyrrol	X	X	X			X			0,025-0,5
octyl epoxy stearat	X	X	X		X				0,025-5
octyl mercaptan		X					✓		0,001-1
oleic syre	X					X	✓		2
organiske fosforforbindelser								1,1,1,2 TeCA	0,5-2
Orthoamino phenol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
Ortho-toluidin	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
Oxacyclobutan	X	X							0,1-2
paraethoxy phenol				X					0,004-0,025
paramethoxy phenol				X					0,004-0,025
paratoluidin	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
phenol	X	X	X	X	X	X		DCA, TeCA	0,001-0,03
fosforsyre	X	X	X						0,1-2
polyethyleneglycol			X					Chl, ethanes	0,006-0,08
Propionyl-acetone		X					✓		0,02-1
propyl acetat	X	X					✓		0,2-0,6
propyl propionat	X	X					✓		0,0025-0,05
propylene oxid	X	X					✓		0,01-5
pyrazin			X						0,001-0,005

Stofnavn	PCE	TCE	1,1,1 - TCA	DCE	DCM	TeCM	Alle	Andre	Vægt Procent %
pyridazin			X						0,001-0,005
pyriden		X	X				✓		0,001-0,5
pyrimidin			X						0,001-0,005
pyrogallol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
pyrrol	X	X	X			X	✓	DCA	0,001-0,05
quinolin			X						0,001-0,005
resorcinol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
tertiær butanol			X						0,5-5
thymol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
triethylamin	X	X					✓		0,001-0,02
Zeolit	X	X							0,001-5
β-picolin		X						X	0,001-0,02
1,2-diethyl diaziridin	X	X	X			X		DCA	0,0025-0,05
1,3-dioxolan			X				✓	1,1,2 TCA	0,3-12
1,3,5-triisopropyl hexahydro-triazin	X	X	X				✓		0,01-2
1,4-dioxan		X	X						0,1-10
1-nitro-propan			X						0,5-1,5
2-mercapto-ethanol		X					✓		0,001-1
2,2-dimethyl-acetylaceton e		X					✓		0,02-1
2,2-dithio-bisbenzothiazol		X					✓		0,001-1
2,3-dimercapto-1-propanol		X					✓		0,001-1
2,6-di-tert butyl para cresol	X	X					✓		0,1-1
2-hydroxy-2methyl-3-butanon	X	X					✓		0,01-1
2-methyl-3 butyn-2-ol		X							0,01-10
2-nitro-propan			X						0,5-1,5
3- methyl-1 pentyn-3-ol	X	X							0,1-1
3,3-dimethyl oxacyclobutan	X	X							0,40

Stofnavn	PCE	TCE	1,1,1 - TCA	DCE	DCM	TeCM	Alle	Andre	Vægt Procent %
4,4 dithiodi-morpholin		X					✓		0,001-1
acetal azin	X	X	X	X	X	X			0,05-0,5
acetone		X							0,01-5
acetylaceton e		X					✓		0,02-1
alkali metal sæbe	X					X	✓		1
aldehyder								1,1,1,2 TeCA	0,5-2
alpha naphthol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
ammonium				X					0,001-0,01
amylen	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
amylene oxid	X	X					✓		0,01-5
anilin	X	X	X	X	X			1,1,1,2 TeCA, DCA	0,0001-0,1
Butylen oxid	X	X	X			X	✓	DCA	0,01-5
butyryl-acetone		X					✓		0,02-1
bytyl epoxy stearat	X	X	X		X				0,025-5
catechol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
cresol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
cyclohexen		X							0,02-0,25
cyclohexen oxid	X	X					✓		0,01-5
cyclohexyl mercaptan		X					✓		0,001-1
di -n- propyl- ammonium acetat		X							0,01-0,3
di tert butyl disulfid		X					✓		0,001-1
diaziridin	X	X	X			X		DCA	0,0025-0,05
dibenzyl disulfid		X					✓		0,001-1
dibutyltin dicaprat		X				X		1)	0,2-1
dibutyltin diisooctylthi oglycollat		X				X		1)	0,2-1
dibutyltin dilaurate		X				X		1)	0,2-1
dibutyltin dilauryl mercaptid		X				X		1)	0,2-1
dibutyltin dinonyl maleat		X				X		1)	0,2-1
dibutyltin dinonyl thio-		X				X		1)	0,2-1

Stofnavn	PCE	TCE	1,1,1 - TCA	DCE	DCM	TeCM	Alle	Andre	Vægt Procent %
glycollat									
dibutyltin mercaptopropionat		X				X		1)	0,2-1
dicyklohexylammonium nitrit		X							0,01-0,3
diethylene glycol monoethylether			X					tri/di tert chlor, Ethaner	0,006-0,08
diisopropylamin	X	X					✓		
diisobutylammonium acetat		X							0,01-0,3
diisopropylamin		X					✓		0,001-0,02
diisopropylammonium 2-chloropgenoxid		X							0,01-0,3
diisopropylammonium acetat		X							0,01-0,3
diisopropylammonium format		X							0,01-0,3
diisopropylammonium nitrit		X							0,01-0,3
dimethyl disulfid		X					✓		0,001-1
dimethylhydrazin	X	X					✓		
dioxadien			X				✓		1,5-7
dioxen			X				✓		0,01-15 v/v
diphenylguanidin	X	X		X	X			tetrachloroethane	0,0001-0,1
epichlorohydrin	X	X	X			X	✓	DCA	0,01-5
epoxid		X					✓		ukendt
epoxisided linolie	X	X	X		X				0,05-5
epoxisided vegetabilsk olie	X	X	X		X				0,025-5
epoxy 2 ethyl stearat	X	X	X		X				0,025-5
epoxy cyclohexyl stearat	X	X	X		X				0,025-5
ethyl acetat	X	X	X				✓	1,1,2 TCA	0,2-12
ethyl methyl keton		X							0,1-0,4
ethyl propionat		X					✓		0,2-0,6

Stofnavn	PCE	TCE	1,1,1 - TCA	DCE	DCM	TeCM	Alle	Andre	Vægt Procent %
ethylene diamin	X	X					✓		
formaldoxim	X	X							1
furfuryl mercaptan		X					✓		0,001-1
hexamethyl ene diamin	X	X					✓		
hexylene oxid			X						0,1-1,5
hydrazine hydrat	X	X					✓		
Hydro-quinon	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
Isoamyl-Alkohol	X	X							1
Isobutyrylac etone		X					✓		0,02-1
isopropyl methyl keton		X							0,1-0,4
methyl acetate	X	X						X	0,2-0,6
methyl propionat	X	X					✓		0,2-0,6
methyl pyridin	X								0,001-0,05
m-methyl-morpholiniur acetat		X							0,01-0,3
n,n, diethyl-thiourea	X	X	X						0,0001-0,2
n-butanol	X	X	X						3-12
n-ethyl pyrrol	X	X	X			X		DCA	0,0025-0,05
nitroethan			X						0,5-1,5
Nitro-methan		X	X			X		1,1,2 TCA	0,1-12
n-methyl-pyrrol	X	X	X			X			0,025-0,5
octyl epoxy stearat	X	X	X		X				0,025-5
octyl mercaptan		X					✓		0,001-1
oleic syre	X					X	✓		2
organiske fosforforbin delse								1,1,1,2 TeCA	0,5-2
Orthoamino phenol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
Ortho-toluidin	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
Oxacyclo-butan	X	X							0,1-2
paraethoxy phenol				X					0,004-0,025
paramethoxy phenol				X					0,004-0,025
paratoluidin	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
phenol	X	X	X	X	X	X		DCA, TeCA	0,001-0,03

Stofnavn	PCE	TCE	1,1,1 - TCA	DCE	DCM	TeCM	Alle	Andre	Vægt Procent %
fosforsyre	X	X	X						0,1-2
polyethylen e glycol			X					Chl, ethanes	0,006-0,08
Propionyl- acetone		X					✓		0,02-1
propyl acetat	X	X					✓		0,2-0,6
propyl propionat	X	X					✓		0,0025- 0,05
propylene oxid	X	X					✓		0,01-5
pyrazin			X						0,001- 0,005
pyridazin			X						0,001- 0,005
pyriden		X	X				✓		0,001-0,5
pyrimidin			X						0,001- 0,005
pyrogallol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
pyrrol	X	X	X			X	✓	DCA	0,001-0,05
quinolin			X						0,001- 0,005
resorcinol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
tertiær butanol			X						0,5-5
thymol	X	X		X	X			1,1,1,2 TeCA	0,0001-0,1
triethylamin	X	X					✓		0,001-0,02
Zeolit	X	X							0,001-5
β-picolin		X						X	0,001-0,02

Oplysninger om farlighed og miljørisiko for de 62 udvalgte tilsætningsstoffer

s, 3-9, Oplysninger om fysisk-kemiske data s, 10-14, Der henvises til bilag D for QSAR-baseret værdier

i.r. angiver at oplysningerne ikke er søgt, primært da stofferne er klassificerede som ufarlige og uden relevant miljørisiko. Grå felter angiver at der ikke er tilgængelig information, Legemesvægt er forkortet Lgm. Grå felter indikerer, at der ikke er fundet relevante oplysninger.

CAS nr.	Tilsætningsstof	Vægt-procent	Klassificering	IARC	Spildevands-vejledning	LD50 (oral indtagelse)		LD50 (hudkontakt)		LC50 (indånding)	
						mg/kg lgv		mg/kg lgv		mg/l	
646-06-0	1,3 dioxolan	0,3-12 %	F; 11	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.
563-80-4	isopropyl methyl keton	0,01-5 %	F; R11	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.
67-64-1	acetone	0,01-5 %	F; R11 - Xi; R36 - R66 - R67	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.
78-93-3	ethyl methyl keton	0,1-0,4 %	F; R11 - Xi; R36 - R66 - R67	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.
141-78-6	ethylacetat	0,3-12 %	F; R11 - Xi; R36 - R66 - R67	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.
75-65-0	tertiær butanol	0,5-5 %	F; R11 - Xn; R20 - Xi; R36/37		C	>2000	rotte	>2000	rotte	>20	
108-10-1	isobutyrylaceton	0,02-1 %	F; R11 - Xn; R20 - Xi; R36/37 - R66		C	>2000	rotte			8,2-16,4	
503-30-0	oxacyclobutan	0,1-2 %	F; R11 - Xn; R20/21/22					500	subcutaneous		
123-91-1	1,4-dioxan	2,5-10 %	F; R11, 19 - Carc, Cat, 3; R40 - Xi; R36/37 - R66	2B	A	>2000	rotte	>2000		>20	
109-99-9	amylen oxid	0,01-5 %	F; R11-19 - Xi; R36/37	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.	i.r.

CAS nr.	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Klassificering	IARC	Spildevandsvejledning	LD50 (oral indtagelse) mg/kg lgv		LD50 (hudkontakt) mg/kg lgv		LC50 (indånding) mg/l	
75-56-9	propylene oxide	0,01-5 %	F+; R12 - Carc, Cat, 2; R45 - Muta, Cat, 2; R46 - Xn; R20/21/22 - Xi; R36/37/38	2B		520	rotte	1244	kanin	9,4	
10556-98-6	1,3,5 triisopropylhexahydrotriazine	0,01-2 %									
60-24-2	2 mercaptoethanol	0,001-1%				244	rotte	nd			
128-37-0	2,6-Di-tert-butyl-p-cresol	0,1-1%		3		1700	rotte	nd			
59-52-9	2,3 dimercapto-1-propanol	0,001-1%				217	mus				
115-22-0	2-hydroxy-2-methyl-3-butanone	0,01-1%									
115-19-5	2-methyl-3-butyn-2-ol	0,01-10%				1420		>2000		>20	
77-75-8	3 methyl 1 pentyn 3 ol	0,1-1%				525	mus				

CAS nr.	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Klassificering	IARC	Spildevandsvejledning	LD50 (oral indtagelse) mg/kg lgv		LD50 (hudkontakt) mg/kg lgv		LC50 (indånding) mg/l	
103-34-4	4,4 dithiodimorpholin	0,001-1 %				4300				1,64	
26249-20-7	butylene oxid	0,1-1,5 %				1,41 ml/kg					
106-83-2	bytyl epoxy stearat	0,025-5 %									
286-20-4	cyclohexene oxid	0,01-5 %				1,057	rotte	0,6	kanin	8	
1569-69-3	cyclohexyl mercaptan	0,001-1 %									
110-06-5	di tert butyl disulfid	0,001-1 %									
150-60-7	dibenzyl disulfid	0,001-1 %									
77-58-7	dibutyltin dilaurat	0,2-1 %			A	175	rotte			2,4	
624-92-0	dimethyl disulfid	0,001-1 %				290				3	
75-17-2	formaloxim	1 %									

CAS nr.	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Klassificering	IARC	Spildevandsvejledning	LD50 (oral indtagelse) mg/kg lgv		LD50 (hudkontakt) mg/kg lgv		LC50 (indånding) mg/l	
98-02-2	furfuryl mercaptan	0,001-1%				100	mus, intraperitoneal				
1436-34-6	hexylene oxide	0,1-1,5 %									
123-51-3	isoamylalcohol	1%				>5000		>5000			
111-88-6	octyl mercaptan	0,001-1%									
112-80-1	oleic acid	2%				25000	rotte				
3002-24-2	propionylacetone	0,02-1%				500	mus, intraperitoneal				
1318-02-1	Zeolit	0,001-5%		3		>2000		>5,3 mg/l		>2000	
290-67-5	dioxadien	0,01-15%									
543-75-9	dioxen	0,01-15%									
106-89-8	epichlorohydrin	0,01-5 %	R10 - Carc, Cat, 2; R45 - T; R23/24/25 - C; R34 - R43	2A	A	90		250		1,8	
79-46-9	2-nitropropan	0,5-1,5 %	R10 - Carc, Cat, 2; R45 - Xn; R20/22	2B		168		>2000	kanin	13,25	

CAS nr.	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Klassificering	IARC	Spildevandsvejledning	LD50 (oral indtagelse) mg/kg lgv	LD50 (hudkontakt) mg/kg lgv	LC50 (indånding) mg/l
108-03-2	1-nitro-propan	0,5-1,5 %	R10 - Xn; R20/21/22			484		11
79-24-3	nitroethan	0,5-1,5 %	R10 - Xn; R20/22					
123-54-6	acetylacetone	0,02-1 %	R10 - Xn; R22			760	1370 kanin	5
71-36-3	n-butanol	3-12 %	R10 - Xn; R22 - Xi; R37/38-41 - R67		C	790	>2000 kanin	24
120-78-5	2,2 dithiobisbenzotiazole	0,001-1%	R31 - R43 - N; R50-53			>2000	>2000 kanin	
75-52-5	nitromethan	0,3-12 %	R5-10 - Xn; R22	2B	i.r.	1478	>2000	
not found	2,2 dimethylacetyl acetone	0,02-1 %						
6921-35-3	3,3 dimethyl oxacyclobutane	0,1-2 %				2000	mus, Intraperitoneal	
i.r.	alkali metal sæbe	1 %						
i.r.	aldehyder	0,5-2 %						
3848-24-6	butyrylacetone	0,02-1 %				>5000		

CAS nr.	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Klassificering	IARC	Spildevandsvejledning	LD50 (oral indtagelse) mg/kg lgv	LD50 (hudkontakt) mg/kg lgv	LD50 (indånding) mg/l	LD50 (indånding) mg/l	LD50 (indånding) mg/l
4731-77-5	dibutyltin dicaprat	0,2-1 %				130				
25168-24-5	dibutyltin diisooctylthioglycollat	0,2-1 %				500				
1185-81-5	dibutyltin dilauryl mercaptid	0,2-1 %								
10584-97-1	dibutyltin dinonyl maleat	0,2-1 %				170				
	dibutyltin dinonyl thioglycollat	0,2-1 %								
78-06-8	dibutyltin mercaptopropionat	0,2-1 %				100	mus, intravenøs			
	Epoxisideret linolie	0,05-5 %								

CAS nr.	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Klassificering	IARC	Spildevandsvejledning	LD50 (oral indtagelse) mg/kg lgv		LD50 (hudkontakt) mg/kg lgv		LC50 (indånding) mg/l	
	Epoxideret sojabønne olie	0,025-5 %									
	Epoxideret vegetabilsk olie	0,025-5 %									
	epoxy 2 ethyl stearat	0,025-5 %									
	epoxy cyclohexyl stearat	0,025-5 %									
i.r.	Organiske fosforforbindelser	0,5-2 %									

CAS nr.	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Damptryk (mm Hg)	LogKow	Vandopløselighed ved 25 C (mg/l)	Koc	Kh (atm-m ³ /mol)	Nedbrydes hurtigt (jf, BIOWIN)
646-06-0	1,3 dioxolan	0,3-12 %				1,44		ja
563-80-4	isopropyl methyl keton	0,01-5 %				7,05		ja
67-64-1	acetone	0,01-5 %				2,36		ja
78-93-3	ethyl methyl keton	0,1-0,4 %				4,51		ja
141-78-6	ethylacetat	0,3-12 %				5,58		ja
75-65-0	tertiary butanol	0,5-5 %				2,11		ja
108-10-1	isobutyrylacetone	0,02-1 %	16,13	1,19	20000	12,60		ja
503-30-0	oxacyclobutan	0,1-2 %	324,00	-0,14	1,00E6	5,80		ja
123-91-1	1,4-dioxan	2,5-10 %	36,97	-0,43	opløseligt	2,63		ja
109-99-9	amylene oxid	0,01-5 %				10,75		ja
75-56-9	propylene oxid	0,01-5 %	529,00	-0,27	370000	5,19		ja
10556-98-6	1,3,5-triisopropylhexahydrotriazine	0,01-2 %	0,00	1,19	36420	28,00		nej
60-24-2	2 mercapto-ethanol	0,001-1 %	0,57	-0,06	opløseligt	1,90		ja
128-37-0	2,6-Di-tert-butyl-p-cresol	0,1-1 %	0,01	4,17	0,6	8183,00		nej

Bilag C

CAS nr.	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Damptryk (mm Hg)	LogKow	Vandopløselighed ved 25 C (mg/l)	Koc	Kh (atm-m ³ /mol)	Nedbrydes hurtigt (jf, BIOWIN)
59-52-9	2,3 dimercapto-1-propanol	0,001-1 %	0,01	0,16	87000	5,56	9,39E-09	ja
115-22-0	2-hydroxy-2-methyl-3-butanon	0,01-1 %	6,19	0,09	3,13E+05	1,00	1,36E-05	nej
115-19-5	2-methyl-3 butyn-2-ol	0,01-10 %	12,90	0,32	opløseligt	4,10		ja
77-75-8	3 methyl 1 pentyn 3 ol	0,1-1 %	5,25	0,94	99000	8,11		ja
103-34-4	4,4 dithiodimorpholin	0,001-1 %	0,00	1,47	5,07E+05	0,60		nej
26249-20-7	butylene oxid	0,1-1,5 %	180,00	0,86	95000	9,90		ja
106-83-2	bytyl epoxy stearat	0,025-5 %	0,00	8,19	0,0005913	>10000		ja
286-20-4	cyclohexene oxid	0,01-5 %	11,50	1,66	4530	56,00		ja
1569-69-3	cyclohexyl mercaptan	0,001-1 %	3,97	3,05	260	233,00	4,75E+03	nej
110-06-5	di tert butyl disulfid	0,001-1 %	0,35	4,60		620-9816		nej
150-60-7	dibenzyl disulfid	0,001-1 %	0,00	5,29	0,7537	>10000		nej
77-58-7	dibutyltin dilaurat	0,2-1 %	0,00	3,12	3	>10000		nej
624-92-0	dimethyl disulfid	0,001-1 %	28,50	1,77	2500	39,60		nej
75-17-2	formaloxim	1 %	43,10	0,68	1,70E+05	3,00		ja
98-02-2	furfuryl mercaptan	0,001-1 %	2,89	1,96	2216	50,00		nej
1436-34-6	hexylene oxid	0,1-1,5 %	6,83	1,95	2525	32,90	3,73E+04	ja

CAS nr.	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Damptryk (mm Hg)	LogKow	Vandopløselighed ved 25 C (mg/l)	Koc	Kh (atm-m ³ /mole)	Nedbrydes hurtigt (jf, BIOWIN)
123-51-3	isoamylalcohol	1 %				5,30		ja
111-88-6	octyl mercaptan	0,001-1 %	0,43	4,21	19,84	796,00	0,023	ja
112-80-1	oleic acid	2 %	0,00	7,73	0,012	>10000	4,48E-05	ja
3002-24-2	propionylacetone	0,02-1 %	3,29	0,54	3,62E+04	1,75		ja
1318-02-1	Zeolit	0,001-5 %			1000			nd
290-67-5	dioxadien	0,01-15 %	29,8	1,06	1,50E+04			nej
543-75-9	dioxen	0,01-15 %	57,5	-0,53	3,64E+08	2,60		ja
106-89-8	epichlorohydrin	0,01-5 %	12,75	0,30	66000	9,90		ja
79-46-9	2-nitropropan	0,5-1,5 %	16,42	0,93	17000	30,80		nej
108-03-2	1-nitro-propan	0,5-1,5 %	9,98	0,85	15000	35,80		ja
79-24-3	nitroethan	0,5-1,5 %				19,69		ja
123-54-6	acetylacetone	0,02-1 %	6,38	0,34	1,66E+05	1,00		ja
71-36-3	n-butanol	3-12 %	6,70	0,84	63200	3,40		ja
120-78-5	2,2 dithiobisbenzothiazole	0,001-1 %	0,00	4,66	10	>10000		nej
75-52-5	nitromethan	0,3-12 %	36,00	0,17	105000	10,32		ja
not found	2,2 dimethylacetylacetone	0,02-1 %	1,82	0,92	15210	2,30		nd

CAS nr.	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Damptryk (mm Hg)	LogKow	Vandopløselighed ved 25 C (mg/l)	Koc	Kh (atm- m ³ /mole)	Nedbrydes hurtigt (jf, BIOWIN)
6921-35-3	3,3 dimethyl oxacyclobutane	0,1-2 %	94,30	1,32	9540	13,70		ja
i.r.	alcali metal soap	1%						
i.r.	aldehydes	0,5-2 %						
3848-24-6	butyrylacetone	0,02-1 %	2.93	-0.35	2.13E+05	1		nej
4731-77-5	dibutyltin dicaprato	0,2-1 %	0,00	6,71	0,001006	>10000		nej
25168-24-5	dibutyltin diisooctylthioglycollat	0,2-1 %	2.34E-09	11.00	2.27E-06	>10000		nej
1185-81-5	dibutyltin dilauryl mercaptid	0,2-1 %	0,00	16,74	8,00E-13	567,00		nej
10584-97-1	dibutyltin dinonyl maleat	0,2-1 %	2.34E-09	11.43	2.27E-06	>10000		nej
	dibutyltin dinonyl thioglycollat	0,2-1 %						
78-06-8	dibutyltin mercaptopropionat	0,2-1 %	0,00	0,19	5103	>10000		nej
	Epoxyderet linolie	0,05-5 %						

CAS nr.	Tilsætningsstof	Vægtprocent	Damptryk (mm Hg)	LogKow	Vandopløselighed ved 25 C (mg/l)	Koc	Kh (atm-m ³ /mol)	Nedbrydes hurtigt (jf, BIOWIN)
	Epoxideret sojabønne olie	0,025-5 %						
	Epoxideret vegetabilsk olie	0,025-5 %						
	epoxy 2 ethyl stearat	0,025-5 %						
	epoxy cyclohexyl stearat	0,025-5 %						
i.r.	Organiske fosforforbindelser	0,5-2 %						

QSAR beregninger

Tildeling af scorepoints for toksicitet baseret på QSAR beregninger

Den valgte score er baseret på enighed mellem mindst 2 databaser. I de tilfælde hvor der kun findes data fra 2 databaser, skelnes der til sikkerheden for ACD prognosen (tal i parentes). Hvis sikkerhedsniveauet er moderat eller lavere (<0.75) er den højeste (mest konservative) score valgt.


CAS-nr.	Navn	MST	OECD	ACDtoxsuite	Valgte score
290-67-5	dioxadien	Ingen data	40	10(0,55)	40
10556-98-6	1,3,5-triisopropylhexahydrotriazin	10	40	10 (0,78)	10
3142-58-3	3,3 dimethylacetylacetone	10	40	10 (0,55)	10
115-22-0	2-hydroxy-2-methyl-3-butanone	10	10	10 (0,58)	10
1569-69-3	cyclohexyl mercaptan	10	10	10 (0,56)	10
111-88-6	Octyl mercaptan	10	10	-	10
543-75-9	dioxen	Ingen data	40	10 (0,55)	40
1436-34-6	hexylenoxid	40	40	10 (0,52)	40 pga. kræftfremkaldende egenskaber
75-17-2	Formaloxim	Ingen data	40	20 (1,00)	20
106-83-2	butyl 8-(3-octyloxiran-2-yl)octanoate	0	40	0 (0,67)	0
110-06-5	Disulfid, bis(1,1-dimethylethyl)	10	40	10 (0,56)	10
1185-81-5	Stannane, dibutylbis(dodecylthio)-	Ingen data	40	10 (0,76)	10
150-60-7	Dibenzyl disulfid	10	40	10 (0,64)	10

Formaloxim

ACD/Tox Suite
⏏


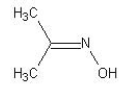
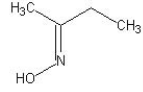
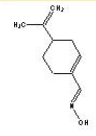

- Ionization
- Solubility
- Genotoxicity
- Aquatic Toxicity
- Batch Calculations
- Endocrine Disruption
- Irritation
- Databases
- Health Effects
- hERG Inhibitors
- Trainable Models
- P450 Inhibitors
- PhysChem
- Acute Toxicity
- LD50
- Categories
- Hazards

Predicted Values - Lethal Dose (LD50, mg/kg)



Species/Administration route	LD50 (mg/kg)	Reliability (RI)
Mouse/Intraperitoneal	440	Borderline(0.37)
Mouse/Oral	1300	Moderate(0.63)
Mouse/Intravenous	170	Borderline(0.49)
Mouse/Subcutaneous	490	Borderline(0.41)
Rat/Intraperitoneal	390	Borderline(0.48)
Rat/Oral	320	Moderate(0.5)

Experimental Values for Similar Structures

Mouse/Intraperitoneal	Mouse/Oral	Mouse/Intravenous	Mouse/Subcutaneous	Rat/Intraperitoneal	Rat/Oral
					
<p>Formaldehyde, oxime.. CAS: 3473-11-8 LD50: 30 mg/kg Similarity index: 1.00</p>	<p>2-Propanone, oxime, .. CAS: 7640-13-3 LD50: 664 mg/kg Similarity index: 0.95</p>	<p>2-Butanone, oxime CAS: 96-29-7 LD50: 930 mg/kg Similarity index: 0.95</p>	<p>1-Cyclohexene-1-car.. CAS: 30950-27-7 LD50: 2500 mg/kg Similarity index: 0.94</p>	<p>Glyoxal, dioxime CAS: 557-30-2 LD50: 119 mg/kg Similarity index: 0.94</p>	

Hexylenoxid

ACD/Tox Suite

Ionization
Solubility
Genotoxicity
Aquatic Toxicity
Batch Calculations
Endocrine Disruption
Irritation
Databases
Health Effects
hERG Inhibitors
Trainable Models
P450 Inhibitors
PhysChem
Acute Toxicity
LD50
Categories
Hazards

Predicted Values - Lethal Dose (LD50, mg/kg)

Species/Administration route	LD50 (mg/kg)	Reliability (RI)
Mouse/Intraperitoneal	180	Moderate(0.54)
Mouse/Oral	960	Moderate(0.7)
Mouse/Intravenous	150	High(0.77)
Mouse/Subcutaneous	400	Borderline(0.47)
Rat/Intraperitoneal	250	Moderate(0.59)
Rat/Oral	700	Moderate(0.52)

Experimental Values for Similar Structures

Mouse/Intraperitoneal	Mouse/Oral	Mouse/Intravenous	Mouse/Subcutaneous	Rat/Intraperitoneal	Rat/Oral
Butane, 1,2-epoxy- CAS: 106-88-7 LD50: 500 mg/kg Similarity index: 0.96	Ethylene oxide CAS: 75-21-8 LD50: 72 mg/kg Similarity index: 0.95	Propane, 1,2-epoxy- CAS: 75-56-9 LD50: 380 mg/kg Similarity index: 0.95	Propane, 1,2-epoxy-3.. CAS: 4016-14-2 LD50: 4200 mg/kg Similarity index: 0.94	Propane, 1-butoxy-2,3.. CAS: 2426-08-6 LD50: 1660 mg/kg Similarity index: 0.94	

Dioxen

ACD/Tox Suite

Ionization
Solubility
Genotoxicity
Aquatic Toxicity
Batch Calculations
Endocrine Disruption
Irritation
Databases
Health Effects
hERG Inhibitors
Trainable Models
P450 Inhibitors
PhysChem
Acute Toxicity
LD50
Categories
Hazards

Predicted Values - Lethal Dose (LD50, mg/kg)

Species/Administration route	LD50 (mg/kg)	Reliability (RI)
Mouse/Intraperitoneal	780	Borderline(0.46)
Mouse/Oral	1900	Moderate(0.61)
Mouse/Intravenous	170	Moderate(0.58)
Mouse/Subcutaneous	790	Moderate(0.65)
Rat/Intraperitoneal	400	Moderate(0.63)
Rat/Oral	1600	Moderate(0.55)

Experimental Values for Similar Structures

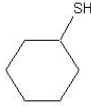
Mouse/Intraperitoneal	Mouse/Oral	Mouse/Intravenous	Mouse/Subcutaneous	Rat/Intraperitoneal	Rat/Oral
3-Hexen-1-ol, (Z)- CAS: 928-96-1 LD50: 4700 mg/kg Similarity index: 0.88	2-Hexen-1-ol, (E)- CAS: 928-95-0 LD50: 3500 mg/kg Similarity index: 0.88	2-Buten-1-ol CAS: 6117-91-5 LD50: 793 mg/kg Similarity index: 0.86	7-Dodecen-1-ol, (Z)- CAS: 20056-92-2 LD50: 11730 mg/kg Similarity index: 0.77	1,3-Cyclopentadiene CAS: 542-92-7 LD50: 113 mg/kg Similarity index: 0.77	

Cyclohexyl mercaptan

ACD/Tox Suite


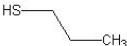

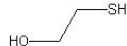

Ionization
Solubility
Genotoxicity
Aquatic Toxicity
Batch Calculations
Endocrine Disruption
Irritation
Databases
Health Effects
hERG Inhibitors
Trainable Models
P450 Inhibitors
PhysChem
Acute Toxicity
LD50
Categories
Hazards

Predicted Values - Lethal Dose (LD50, mg/kg)



Species/Administration route	LD50 (mg/kg)	Reliability (RI)
Mouse/Intraperitoneal	350	Borderline(0.43)
Mouse/Oral	1300	Moderate(0.6)
Mouse/Intravenous	54	Moderate(0.56)
Mouse/Subcutaneous	210	Moderate(0.68)
Rat/Intraperitoneal	440	Moderate(0.73)
Rat/Oral	630	Moderate(0.56)

Experimental Values for Similar Structures

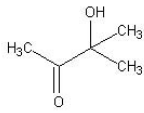
Mouse/Intraperitoneal	Mouse/Oral	Mouse/Intravenous	Mouse/Subcutaneous	Rat/Intraperitoneal	Rat/Oral
					
n-Butanethiol CAS: 109-79-5 LD50: 1500 mg/kg Similarity index: 0.96	1-Propanethiol CAS: 107-03-9 LD50: 1790 mg/kg Similarity index: 0.96	1-Propanol, 3-merca.. CAS: 19721-22-3 LD50: 134 mg/kg Similarity index: 0.95	Ethanol, 2-mercapto- CAS: 60-24-2 LD50: 244 mg/kg Similarity index: 0.95	Ethanethiol CAS: 75-08-1 LD50: 682 mg/kg Similarity index: 0.95	

2-hydroxy-2-methyl-3-butanone

ACD/Tox Suite

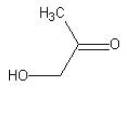
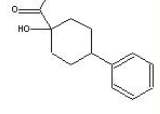
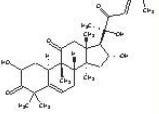
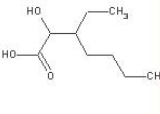
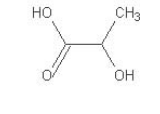
Ionization
Solubility
Genotoxicity
Aquatic Toxicity
Batch Calculations
Endocrine Disruption
Irritation
Databases
Health Effects
hERG Inhibitors
Trainable Models
P450 Inhibitors
PhysChem
Acute Toxicity
LD50
Categories
Hazards

Predicted Values - Lethal Dose (LD50, mg/kg)



Species/Administration route	LD50 (mg/kg)	Reliability (RI)
Mouse/Intraperitoneal	440	Moderate(0.62)
Mouse/Oral	1200	Borderline(0.44)
Mouse/Intravenous	240	Borderline(0.45)
Mouse/Subcutaneous	660	Moderate(0.68)
Rat/Intraperitoneal	400	Moderate(0.6)
Rat/Oral	1600	Moderate(0.58)

Experimental Values for Similar Structures

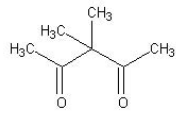
Mouse/Intraperitoneal	Mouse/Oral	Mouse/Intravenous	Mouse/Subcutaneous	Rat/Intraperitoneal	Rat/Oral
					
2-Propanone, 1-hydr.. CAS: 116-09-6 LD50: 2200 mg/kg Similarity index: 0.95	Ethanone, 1-(1-hydr.. CAS: 60593-65-5 LD50: 8000 mg/kg Similarity index: 0.84	19-Nor-9-beta,10-al.. CAS: 3877-86-9 LD50: 6.2 mg/kg Similarity index: 0.76	Heptanoic acid, 3-eth.. CAS: 63834-30-0 LD50: 3400 mg/kg Similarity index: 0.69	Lactic acid CAS: 50-21-5 LD50: 3543 mg/kg Similarity index: 0.68	

3,3 dimethylacetyl acetone

ACD/Tox Suite

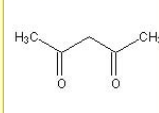
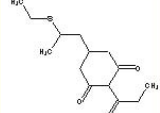
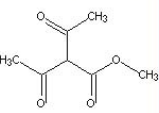
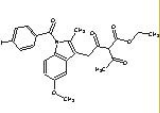
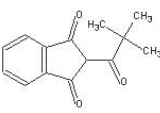
Ionization
Solubility
Genotoxicity
Aquatic Toxicity
Batch Calculations
Endocrine Disruption
Irritation
Databases
Health Effects
hERG Inhibitors
Trainable Models
P450 Inhibitors
PhysChem
Acute Toxicity
LD50
Categories
Hazards

Predicted Values - Lethal Dose (LD50, mg/kg)



Species/Administration route	LD50 (mg/kg)	Reliability (RI)
Mouse/Intraperitoneal	530	Moderate(0.63)
Mouse/Oral	470	Moderate(0.52)
Mouse/Intravenous	65	Moderate(0.69)
Mouse/Subcutaneous	260	Moderate(0.57)
Rat/Intraperitoneal	34	Not Reliable(0.29)
Rat/Oral	280	Moderate(0.55)

Experimental Values for Similar Structures

Mouse/Intraperitoneal	Mouse/Oral	Mouse/Intravenous	Mouse/Subcutaneous	Rat/Intraperitoneal	Rat/Oral
					
2,4-Pentanedione CAS: 123-54-6 LD50: 55 mg/kg Similarity index: 0.97	1,3-Cyclohexanedione.. CAS: 99422-01-2 LD50: 170 mg/kg Similarity index: 0.95	Acetoacetic acid, 2-a... CAS: 4619-66-3 LD50: 1700 mg/kg Similarity index: 0.95	Butyric acid, 2-acetyl.. CAS: 57846-36-3 LD50: 175 mg/kg Similarity index: 0.82	1,3-Indandione, 2-piva.. CAS: 83-26-1 LD50: 280 mg/kg Similarity index: 0.74	

Dioxadien

ACD/Tox Suite

Ionization
Solubility
Genotoxicity
Aquatic Toxicity
Batch Calculations
Endocrine Disruption
Irritation
Databases
Health Effects
hERG Inhibitors
Trainable Models
P450 Inhibitors
PhysChem
Acute Toxicity
LD50
Categories
Hazards

Predicted Values - Lethal Dose (LD50, mg/kg)

Species/Administration route	LD50 (mg/kg)	Reliability (RI)
Mouse/Intraperitoneal	260	Borderline(0.32)
Mouse/Oral	600	Moderate(0.58)
Mouse/Intravenous	160	Moderate(0.51)
Mouse/Subcutaneous	790	Moderate(0.6)
Rat/Intraperitoneal	750	Borderline(0.31)
Rat/Oral	660	Moderate(0.7)

Experimental Values for Similar Structures

Mouse/Intraperitoneal	Mouse/Oral	Mouse/Intravenous	Mouse/Subcutaneous	Rat/Intraperitoneal	Rat/Oral
1,3-Cyclopentadiene CAS: 542-92-7 LD50: 113 mg/kg Similarity index: 0.95	1,5,9-Cyclododecatri.. CAS: 4904-61-4 LD50: 1780 mg/kg Similarity index: 0.87	9,11,13-Octadecatrie.. CAS: 16195-77-0 LD50: 5000 mg/kg Similarity index: 0.78	2-Buten-1-ol CAS: 6117-91-5 LD50: 793 mg/kg Similarity index: 0.78	2-Buten-1-ol CAS: 6117-91-5 LD50: 793 mg/kg Similarity index: 0.78	Propanoic acid, 2-meth.. CAS: 16491-24-0 LD50: 5000 mg/kg Similarity index: 0.75

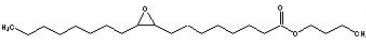
Octyl mercaptan

ACD/Tox Suite



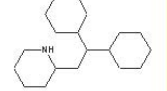
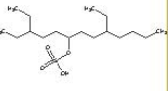
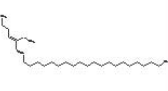
Ionization
 Solubility
 Genotoxicity
 Aquatic Toxicity
 Batch Calculations
 Endocrine Disruption
 Irritation
 Databases
 Health Effects
 hERG Inhibitors
 Trainable Models
 P450 Inhibitors
 PhysChem
 Acute Toxicity
 LD50
 Categories
 Hazards

Predicted Values - Lethal Dose (LD50, mg/kg)

Species/Administration route	LD50 (mg/kg)	Reliability (RI)
Mouse/Intraperitoneal	110	Borderline(0.34)
Mouse/Oral	1200	Borderline(0.49)
Mouse/Intravenous	27	Borderline(0.37)
Mouse/Subcutaneous	110	Not Reliable(0.26)
Rat/Intraperitoneal	230	Not Reliable(0.1)
Rat/Oral	8800	Moderate(0.67)



Experimental Values for Similar Structures

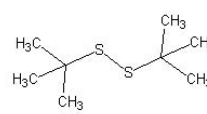
Mouse/Intraperitoneal	Mouse/Oral	Mouse/Intravenous	Mouse/Subcutaneous	Rat/Intraperitoneal	Rat/Oral
					
Octadecanoic acid, 9-oxo-18:1 CAS: 1876-02-4 LD50: 39000 mg/kg Similarity index: 0.97	Octadecanoic acid, 9-oxo-18:1 CAS: 63907-12-0 LD50: 45000 mg/kg Similarity index: 0.76	Piperidine, 2-(2,2-dimethyl-1,3-dioxane-5-yl) CAS: 6724-53-4 LD50: 2150 mg/kg Similarity index: 0.73	6-Tridecanol, 3,9-diepoxy CAS: 3282-85-7 LD50: 1430 mg/kg Similarity index: 0.71	1-Heneicosanamine, N-ethyl CAS: 101023-74-9 LD50: 5320 mg/kg Similarity index: 0.70	

Disulfide, bis(1,1-dimethylethyl)

ACD/Tox Suite

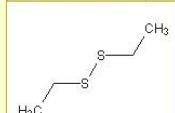
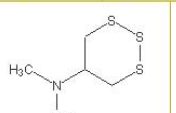
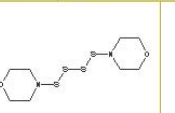
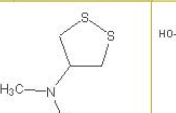
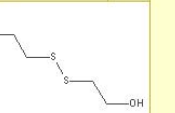
Ionization
Solubility
Genotoxicity
Aquatic Toxicity
Batch Calculations
Endocrine Disruption
Irritation
Databases
Health Effects
hERG Inhibitors
Trainable Models
P450 Inhibitors
PhysChem
Acute Toxicity
LD50
Categories
Hazards

Predicted Values - Lethal Dose (LD50, mg/kg)



Species/Administration route	LD50 (mg/kg)	Reliability (RI)
Mouse/Intraperitoneal	170	Not Reliable(0.28)
Mouse/Oral	360	Borderline(0.41)
Mouse/Intravenous	24	Not Reliable(0.2)
Mouse/Subcutaneous	62	High(0.84)
Rat/Intraperitoneal	62	Moderate(0.71)
Rat/Oral	900	Moderate(0.56)

Experimental Values for Similar Structures

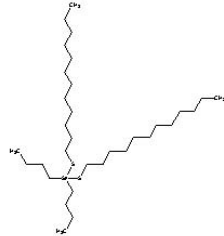
Mouse/Intraperitoneal	Mouse/Oral	Mouse/Intravenous	Mouse/Subcutaneous	Rat/Intraperitoneal	Rat/Oral
					
Disulfide, diethyl CAS: 110-81-6 LD50: 2030 mg/kg Similarity index: 0.82	v-Trithiane, 5-(dimet.. CAS: 31895-22-4 LD50: 195 mg/kg Similarity index: 0.71	Morpholine, 4,4'-tetra.. CAS: 16131-53-6 LD50: 4800 mg/kg Similarity index: 0.71	1,2-Dithiolan-4-amine.. CAS: 1631-52-3 LD50: 420 mg/kg Similarity index: 0.66	Ethanol, 2,2'-dithiodi- CAS: 1892-29-1 LD50: 173 mg/kg Similarity index: 0.65	

Stannane, dibutylbis(dodecylthio)-

ACD/Tox Suite




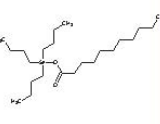

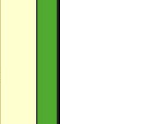
Ionization
Solubility
Genotoxicity
Aquatic Toxicity
Batch Calculations
Endocrine Disruption
Irritation
Databases
Health Effects
hERG Inhibitors
Trainable Models
P450 Inhibitors
PhysChem
Acute Toxicity
LD50
Categories
Hazards

Predicted Values - Lethal Dose (LD50, mg/kg)



Species/Administration route	LD50 (mg/kg)	Reliability (RI)
Mouse/Intraperitoneal	18	Borderline(0.47)
Mouse/Oral	130	Moderate(0.71)
Mouse/Intravenous	20	Moderate(0.58)
Mouse/Subcutaneous	430	Borderline(0.37)
Rat/Intraperitoneal	12	Borderline(0.4)
Rat/Oral	500	High(0.76)

Experimental Values for Similar Structures

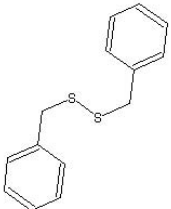
Mouse/Intraperitoneal	Mouse/Oral	Mouse/Intravenous	Mouse/Subcutaneous	Rat/Intraperitoneal	Rat/Oral
					
Stannane, bis(dodecylthio)- CAS: 51287-84-4 LD50: 8500 mg/kg Similarity index: 0.99	Stannane, dibutylbis(dodecylthio)- CAS: 77-58-7 LD50: 175 mg/kg Similarity index: 0.86	Stannane, bis(decylthio)- CAS: 3465-75-6 LD50: 153 mg/kg Similarity index: 0.82	Stannane, tributyl(thio)- CAS: 69226-47-7 LD50: 205 mg/kg Similarity index: 0.79	Ammonium, didecylthio)- CAS: 7173-51-5 LD50: 84 mg/kg Similarity index: 0.66	

Dibenzyl disulfid

ACD/Tox Suite

Ionization
Solubility
Genotoxicity
Aquatic Toxicity
Batch Calculations
Endocrine Disruption
Irritation
Databases
Health Effects
hERG Inhibitors
Trainable Models
P450 Inhibitors
PhysChem
Acute Toxicity
LD50
Categories
Hazards

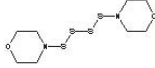
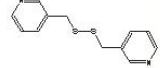
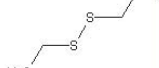
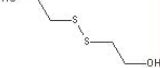
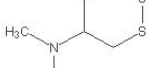
Predicted Values - Lethal Dose (LD50, mg/kg)



Dibenzyl Disulfide

Species/Administration route	LD50 (mg/kg)	Reliability (RI)
Mouse/Intraperitoneal	120	Borderline(0.49)
Mouse/Oral	570	Moderate(0.6)
Mouse/Intravenous	22	Not Reliable(0.19)
Mouse/Subcutaneous	100	Moderate(0.57)
Rat/Intraperitoneal	180	Moderate(0.63)
Rat/Oral	1900	Moderate(0.64)

Experimental Values for Similar Structures

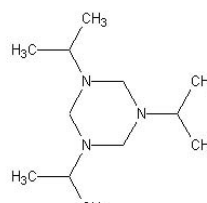
Mouse/Intraperitoneal	Mouse/Oral	Mouse/Intravenous	Mouse/Subcutaneous	Rat/Intraperitoneal	Rat/Oral
					
Morpholine, 4,4'-tetra.. CAS: 16131-53-6 LD50: 4800 mg/kg Similarity index: 0.83	Pyridine, 3,3'-dithiod.. CAS: 74037-49-3 LD50: 2150 mg/kg Similarity index: 0.82	Disulfide, diethyl CAS: 110-81-6 LD50: 2030 mg/kg Similarity index: 0.78	Ethanol, 2,2'-dithiodi- CAS: 1892-29-1 LD50: 173 mg/kg Similarity index: 0.69	v-Trithiane, 5-(dimeth.. CAS: 31895-22-4 LD50: 195 mg/kg Similarity index: 0.67	

1,3,5
triisopropylhexahydrotriazin

ACD/Tox Suite

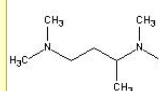
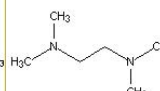
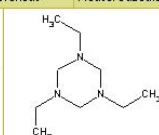
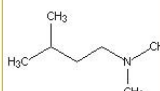
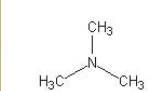
Ionization
Batch Calculations
hERG Inhibitors
Trainable Models
PhysChem
Acute Toxicity
LD50
Categories
Hazards

Predicted Values - Lethal Dose (LD50, mg/kg)



Species/Administration route	LD50 (mg/kg)	Reliability (RI)
Mouse/Intraperitoneal	170	High(0,75)
Mouse/Oral	360	High(0,77)
Mouse/Intravenous	87	High(0,86)
Mouse/Subcutaneous	660	Moderate(0,68)
Rat/Intraperitoneal	130	Borderline(0,42)
Rat/Oral	380	High(0,78)

Experimental Values for Similar Structures

Mouse/Intraperitoneal	Mouse/Oral	Mouse/Intravenous	Mouse/Subcutaneous	Rat/Intraperitoneal	Rat/Oral
					
1,3-Butanediamine, N,N-dimethyl CAS: 97-84-7 LD50: 750 mg/kg Similarity index: 0,98	Ethylenediamine, N,N-dimethyl CAS: 110-18-9 LD50: 268 mg/kg Similarity index: 0,95	s-Triazine, hexahydro CAS: 7779-27-3 LD50: 316 mg/kg Similarity index: 0,93	1-Butanamine, N,N,3-trimethyl CAS: 2315-43-7 LD50: 225 mg/kg Similarity index: 0,87	Methanamine, N,N-dimethyl CAS: 75-50-3 LD50: 500 mg/kg Similarity index: 0,85	