

Sporstoffer til benzin, diesel- og fyringsolie

Ole Christian Hansen, Jørn Bødker, Kirsten Pommer
og Lars Vinten
Teknologisk Institut

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	7
SAMMENFATNING OG KONKLUSIONER	9
SUMMARY AND CONCLUSIONS	12
1 INTRODUKTION	15
1.1 HIDLIDIGT ARBEJDE	15
1.2 SCREENINGSRAPPORTENS KONKLUSIONER	15
1.3 PROJEKTETS FORMÅL	16
1.4 GENNEMFØRELSE	17
1.5 RAPPORTENS OPBYGNING	17
2 OLIEPRODUKTERS EGENSKABER	19
2.1 OLIEPRODUKTERS KARAKTERISTIKA	19
2.1.1 <i>Kogepunkt</i>	19
2.1.2 <i>Smeltepunkt</i>	19
2.1.3 <i>Massefylde</i>	20
2.2 BENZIN	20
2.2.1 <i>Benzins karakteristika</i>	20
2.3 DIESELOLIE	22
2.3.1 <i>Diesels karakteristika</i>	22
2.4 FYRINGSOLIE	23
2.4.1 <i>Fyringsolies karakteristika</i>	23
2.5 FORDELING AF FYSISK-KEMISKE EGENSKABER	24
2.6 BRÆNDSTOFFERS TOKSICITET	25
2.6.1 <i>Mennesker</i>	25
2.6.2 <i>Miljø</i>	26
2.7 BRÆNDSTOFFERS KLASSIFICERING	26
3 MULIGE STOFFER	30
3.1 MULIGE FARVESTOFFER	30
3.1.1 <i>Udvælgelse af farvestoffer</i>	30
3.1.2 <i>Vurdering af farvestoffer</i>	30
3.1.3 <i>Prioriterede farvestoffer</i>	32
3.2 LITTERATURSØGNING	33
3.2.1 <i>Søgning i HSDB</i>	33
3.2.2 <i>Søgning i Beilstein</i>	33
3.2.3 <i>Øvrige forslag</i>	34
3.3 SAMMENFATNING	35
4 PRIORITEREDE STOFFER	36
4.1 SOLVENT RED 111	36
4.1.1 <i>Identitet</i>	36
4.1.2 <i>Fysiske og kemiske egenskaber</i>	36
4.1.3 <i>Sundhedsmæssige egenskaber</i>	37
4.1.4 <i>Miljømæssige egenskaber</i>	38

4.2	SOLVENT VIOLET 13	38
4.2.1	<i>Identitet</i>	38
4.2.2	<i>Fysiske og kemiske egenskaber</i>	39
4.2.3	<i>Sundhedsmæssige egenskaber</i>	39
4.2.4	<i>Miljømæssige egenskaber</i>	40
4.3	2-AMINOANTHRAQUINON	40
4.3.1	<i>Identitet</i>	40
4.3.2	<i>Fysiske og kemiske egenskaber</i>	40
4.3.3	<i>Sundhedsmæssige egenskaber</i>	41
4.3.4	<i>Miljømæssige egenskaber</i>	41
4.4	PROPYL PARABEN	42
4.4.1	<i>Identitet</i>	42
4.4.2	<i>Fysiske og kemiske egenskaber</i>	42
4.4.3	<i>Sundhedsmæssige egenskaber</i>	43
4.4.4	<i>Miljømæssige egenskaber</i>	43
4.5	CYCLOHEXYL ACETAT	44
4.5.1	<i>Identitet</i>	44
4.5.2	<i>Fysiske og kemiske egenskaber</i>	44
4.5.3	<i>Sundhedsmæssige egenskaber</i>	45
4.5.4	<i>Miljømæssige egenskaber</i>	45
5	ANALYSETEKNISKE FORHOLD	47
5.1	GASCHROMATOGRAFI	47
5.2	SPEKTROFOTOMETRI.	47
5.3	TYNDSLAGSKROMATOGRAFI	48
5.4	DETEKTIONSGRÆNSER	48
5.4.1	<i>GC/MS</i>	48
5.4.2	<i>Spectrofotometri</i>	48
5.4.3	<i>Tyndtlagskromatografi</i>	48
5.5	SAMLET VURDERING	49
6	PRAKTISK ANVENDELSE	51
7	OMKOSTNINGER	53
7.1	FORBRUGE AF OLIEPRODUKTER	53
7.2	SPORSTOFMÆNGDE	54
7.3	PRISER PÅ SPORSTOFFER	54
7.4	OMKOSTNINGER	54
8	SAMLET VURDERING	57
8.1	MULIGE SPORSTOFFER	57
8.1.1	<i>Solvent Red 111</i>	57
8.1.2	<i>Solvent Violet 13</i>	57
8.1.3	<i>2-aminoanthraquinon</i>	58
8.1.4	<i>Propyl paraben</i>	58
8.1.5	<i>Cyclohexyl acetat</i>	58
8.2	ANVENDELSE OG OMKOSTNINGER	59
8.3	ANBEFALINGER	59
	REFERENCER	61
	BILAG A: DATA FOR UDVALGTE KULBRINTER	66
	BILAG B: DATA FOR FARVESTOFFER	70
	BILAG C: DATA FRA SØGNING I HSDB	104

BILAG D: DATA FRA SØGNING I BEILSTIEN	106
BILAG E: DATA FOR ØVRIGE STOFFER	108

Forord

I forbindelse med den nye jordforureningslov træder der også et objektivi-
t foruren-
neransvar i kraft. Det er derfor relevant at finde et sporstof, der kan tilsættes
benzin, diesel- og fyringsolie med henblik på at afgøre, hvornår en given for-
urening fra disse produkter har fundet sted.

I december 2000 til januar 2001 blev der gennemført en indledende screening
med det formål at foretage en indledende vurdering af mulige sporstoffer.
Resultaterne herfra er samlet i Miljøprojekt 612, 2001.

Miljøstyrelsen har ønsket dette arbejde videreført med det formål at få:

- Udpeget 2 til 3 relevante sporstoffer og afdækket deres væsentligste egen-
skaber.
- Afklaret de analysetekniske aspekter samt forhold omkring den praktiske
anvendelse og økonomiske hovedtal for de udpegede stoffer.

Projektet er baseret på den viden, der er indsamlet i forbindelse med Miljø-
projekt 612, datasøgning i relevante databaser, kontakter til producenter, leve-
randører og videncentre.

Projektet er gennemført af en arbejdsgruppe på Teknologisk Institut, Miljø-
og affaldsteknik. Projektet blev gennemført i perioden 15. november 2001 til
april 2002 efter oplæg fra Miljøstyrelsens Jordforureningskontor.

I arbejdsgruppen deltog projektleder Kirsten Pommer, Ole Christian Hansen,
Jørn Bødker og Lars Vinten.

Til projektet var knyttet en følgegruppe med deltagelse af Preben Bruun
(kontaktperson), Erik Iversen og Ib Gunnar Larsen fra Miljøstyrelsen samt
Flemming Ludvigsen fra Oliebranchens Fællesrepræsentation.

Sammenfatning og konklusioner

En metode til vurdering af en skæringsdato for en given jordforurening med olie og benzin-produkter kan foretages ved tilsætning af et sporstof (markør) til olieprodukterne. Projektet har på baggrund af en screeningsundersøgelse i 2001 vurderet de allerede anvendte mærkningsstoffer og eftersøgt nye.

Ved vurderingen af 19 kendte farvestoffer og markører viste det sig, at der kun eksisterede meget få oplysninger om stoffernes fysisk-kemiske egenskaber, deres skæbne og deres effekt på sundhed og miljø. For de 19 farvestoffer er de fundne data samlet og gennemgået. I mangel af eksperimentelle data er vurderingen baseret på QSAR estimater.

Desuden er der søgt efter andre ikke-naturligt forekommende stoffer, som havde egenskaber, der svarede til de i brændstofferne forekommende stoffers egenskaber. De fundne 19 stoffer er ligeledes vurderet for deres effekt på sundhed og miljø. Vurderingerne betød, at 5 stoffer blev udvalgt til nærmere vurdering og endelig, at 3 stoffer blev udpeget som egnede kandidater.

De 3 stoffer er:

- Solvent Red 111
- 2-Aminoanthraquinon
- Propyl paraben

For alle stofferne vurderedes, at deres egenskaber gjorde dem velegnede til formålet, samt at deres effekter på miljø og sundhed ikke bidrog til brændstofferne toksicitet eller øvrige effekter.

Analyseteknisk er det vurderet, at GC/MS var en egnet metode, som i forvejen anvendes, i tilfælde af olieforurening af jord. Denne metode kan anvendes til at detektere propyl paraben, medens solvent red 111 og 2-aminoanthraquinon, som begge er farvestoffer, vil kunne detekteres fotometrisk. Analyseteknisk er det foreslået at anvende 50 ppm for at sikre en acceptabel genfinding i jord. De nødvendige mængder af sporstof er dog meget usikre, og der bør gennemføres praktiske forsøg, for at afgøre de nødvendige sporstof niveauer. Det skal bemærkes at et niveau på 50 ppm er noget højere end det der almindeligvis tilsættes, når det gælder mærkning af olieprodukter. Dette kan være problematisk i forhold til den farvning som i EU planlægges påkrævet af brændstof som er afgiftsbegünstiget.

Baseret på udvælgelsesmetoderne er det vurderet, at stofferne alle vil opføre sig som, og nedbrydes i samme takt som brændstofferne i jordmiljøet.

Solvent Red 111 og 2-aminoanthraquinon er anthraquinon derivater, som allerede er kendt af olieindustrien og anvendes til farvnings- og mærkningsformål af olieprodukter. Disse skulle derfor ikke kunne medføre problemer hverken ved anvendelse eller håndtering.

Propyl paraben og cyclohexylacetat er monocycliske forbindelser, der ikke skulle kunne skabe problemer ved anvendelsen. Det vurderes dog, at cyclo-

hexylacetat med et rimeligt højt damptryk vil opføre sig som brændstoffernes lette fraktion, og dampe for hurtigt af.

Summary and conclusions

In a search for an applicable tracer or marker for gasoline, diesel fuel and heating fuel, 19 known colorants have been evaluated. It is recognised that only little information on the physic-chemical properties, and effects on human health and the environment of the evaluated substances exists. Because of the lack of sufficient data, QSAR estimations have been made.

A further 19 organic substances not known to be naturally occurring have been selected, based on properties equivalent to the substances contained in the fuels. These 19 organic substances were also evaluated based on their properties, and effects on human health and the environment.

Based on the evaluation procedure five substances were selected for a more thorough evaluation, and finally three substances were selected as acceptable candidates.

The three substances are

- Solvent Red 111
- 2-Aminoanthraquinon
- Propyl parabene

For all substances, it is evaluated that their properties made them fit to the purpose, and that their effect on human health and the environment would not increase the toxicity or other effects already intrinsic in fuels.

For analytical methods, it is evaluated that GC/MS would be a sufficient, valid, and reliable detection method. It is a method, which is already in use when measuring soil pollution. This method is efficient for detection of propyl parabene. Solvent Red 111 and 2-Aminoanthraquinon can be detected by photometry methods. A concentration of the tracer of 50 ppm is considered sufficient to assure an acceptable recovery from polluted soil. The concentration of tracer needed so that it can be identified in soil is very uncertain, and it is necessary to conduct practical tests in order to establish these concentrations. It has to be mentioned that a level of about 50 ppm is higher than for tracers in other situations.

On the basis of the selection methods and the assessments, it is evaluated that all the selected substances will behave, and will be degraded, at the same rate, as the fuels selected in the terrestrial environment.

Solvent Red 111 and 2-aminoanthraquinone are both anthraquinone derivates, which are already known by the petrochemical industry and are used for colouring and marking purposes. No problems in their use and handling are anticipated.

Propyl parabene and cyclohexyl acetate are monocyclic substances and no problems in their use are expected. However, cyclohexyl acetate has a high vapour pressure, which is estimated to make it behave like the lighter fractions of the fuel components. This could mean the persistence in the soil is too short for the purpose intended.

1 Introduktion

1.1 HJORTIDIGT ARBEJDE

I Miljøprojekt 612 (Hansen *et al.* 2001) blev det anbefalet at tilsætning af et farvestof vil være det mest velegnede, da der findes tilsætninger af farvestoffer til benzin og andre olieprodukter i dag.

Stoffer, der ikke forekommer normalt i olieprodukter, men som ligner de tilsætningsstoffer, der findes i olieprodukter, er ligeledes blevet overvejet.

En stofgruppe som alkoholer og ethere er ligeledes blevet overvejet, da disse er almindeligt anvendt som tilsætningsstoffer. Det var dog ikke muligt i forbindelse med Miljøprojekt 612 at pege på egnede stoffer indenfor denne gruppe.

Konklusionerne fra Miljøprojekt 612 er anført i sektion 1.2. De danner samtidig rammen for dette projekt.

1.2 SCREENINGSRAPPORTENS KONKLUSIONER

Ud fra gennemgangen af de tre typer af olieprodukter blev det antaget, at der kunne vælges ét sporstof som tilsætning til benzin og ét som tilsætning til diesel og fyringsolie, såfremt man ikke kunne finde et sporstof, der kunne tilsættes alle tre produkttyper. Dette begrundes med, at fysisk/kemiske egenskaber samt typen af tilsætningsstoffer for diesel og fyringsolie er meget lig hinanden, og noget forskellige fra benzin.

Ved litteraturgennemgangen, blev der kun fundet få oplysninger, som gik på anvendelse af farvestoffer. Andre stoftyper er ikke nævnt.

I projektet blev tilsætning af radioaktivt mærkede stoffer, svarende til stoffer, der fandtes i olieprodukterne i forvejen, overvejet. Denne type var fordelagtig ved, at den kunne tilsættes i en meget lille mængde og stadig blive detekteret med stor sikkerhed. Det blev dog valgt ikke at gå videre med denne stoftype, da der kunne forudses en række forhindringer.

En stofgruppe som alkoholer og ethere bliver almindeligt anvendt som tilsætningsstoffer, og repræsentanter for denne type blev overvejet. Det ansås ikke umiddelbart for muligt at finde et egnet sporstof blandt denne type stoffer, da tilsætningen varierer meget både med hensyn til specifikke stoffer og mængde, og dette antages også at gælde i fremtiden. En større viden om, hvilke stoffer fra denne gruppe, der har været, eller bliver anvendt, og i hvilke mængder, kunne måske have givet mulighed for udpegning af et egnet sporstof indenfor denne gruppe.

Stoffer, der ikke forekommer naturligt, men som ligner de tilsætningsstoffer, der findes i olieprodukter, er blevet overvejet. Et enkelt stof, styren, blev overvejet som et muligt sporstof. Da stoffet nedbrydes/omdannes i løbet af få må-

neder til stoffer, der allerede naturligt findes i olieprodukter, ansås styren for uegnet som sporstof.

På baggrund af den indledende vurdering blev det derfor konkluderet, at udpegning af et farvestof ville være det mest velegnede. Der findes tilsætninger af farvestoffer til benzin og andre olieprodukter i dag. Man benytter sig mest af azofarvestoffer. Da denne type stoffer allerede bliver anvendt, blev disse stoffer antaget ikke at udgøre et teknisk problem. Økonomisk ansås det ligeledes for acceptabelt at anvende disse stoffer. Ud fra en analysemæssig vinkel ville de være mulige at detektere i meget små mængder. Visse af azofarvestofferne, der anvendes i dag, er sundheds- og miljømæssigt betænkelige, men der findes stoffer, som må antages også sundheds- og miljømæssigt at være acceptable.

Det anbefales, at en opfølgning skulle omfatte en egentlig identifikation af de i dag anvendte farvestoffer samt fastlæggelse af tilsatte mængder. I nærværende projekt blev det klart, at man fra Oliebranchens (OFR) side mente at dette ikke var muligt.

Andre farvestoffer af samme type, end de i dag anvendte, burde undersøges nærmere med hensyn til økotoksiske egenskaber, nedbrydelighed samt relevante fysisk/kemiske data, med henblik på at udpege nogle få relevante stoffer, hvis miljømæssige belastning var acceptabel.

Forhold omkring håndtering af stoffet, samt påvirkning af mennesker og dyr, skulle vurderes for de udpegede stoffer.

En sikker detektionsgrænse i jord og grundvand burde fastlægges, med henblik på at identificere, hvilke mængder der som minimum skulle tilsættes.

De økonomiske forhold burde ligeledes afklares, når et eller flere specifikke stoffer var identificeret som brugbare, både for selve tilsætningen og håndteringen på raffinaderi og terminal, og for analyse af stoffet i en forureningsundersøgelse.

Sideløbende med ovenstående burde overvejes, om det var muligt at udpege andre ikke naturligt forekommende stoffer, der ligner de i dag anvendte sporstoffer.

1.3 PROJEKTETS FORMÅL

På baggrund af screeningsrapportens resultater blev formålet for en fortsættelse defineret som:

- Udpegning af 2 til 3 relevante sporstoffer og afdækning af deres væsentligste egenskaber
- Afklaring af de analysetekniske aspekter samt forhold omkring den praktiske anvendelse og økonomiske hovedtal for de udpegede stoffer.

Projektet blev afgrænset til at omfatte følgende forhold:

1. Valg af 2-3 relevante stoffer

Der tages udgangspunkt i resultaterne fra Miljøprojekt 612, og der opstilles en matrix med relevante parametre som persistens, carcinogenicitet og økotoxikologi, som grundlag for udvælgelsen.

Der sigtes mod at valget falder inden for grupperne farvestoffer og ikke-naturligt forekommende stoffer.

2. For de udvalgte stoffer indsamles tilgængelige data med hensyn til sundhedsmæssige, miljømæssige og relevante fysisk/kemiske forhold, således at de valgte stoffer kan vurderes.
3. De analysetekniske forhold for de udvalgte stoffer vurderes. Der lægges vægt på forhold som relevante og tilgængelige analysemetoder samt deres detektionsgrænser. Dette gennemføres i samarbejde med Kemiteknik, Teknologisk Institut.
4. Den praktiske anvendelse af de udpegede sporstoffer afklares gennem kontakter til motorsagkyndige på Teknologisk Institut samt Oliebranchens Fællesrepræsentation.
5. Der foretages et skøn over omkostningerne ved anvendelse af de valgte tilsætningsstoffer.

Endvidere blev det anbefalet at gennemføre en praktisk test af det, eller de anbefalede sporstoffer, med henblik på at fastlægge de nødvendige koncentrationer af de tilsatte stoffer.

1.4 GENNEMFØRELSE

Projektet er gennemført af en arbejdsgruppe på Teknologisk Institut, Miljø- og affaldsteknik. Projektet blev gennemført i perioden 15. november 2001 til april 2002.

I arbejdsgruppen deltog projektleder Kirsten Pommer, Ole Christian Hansen, Jørn Bødker og Lars Vinten.

Til projektet var knyttet en følgegruppe med deltagelse af Preben Bruun (kontaktperson), Erik Iversen og Ib Gunnar Larsen fra Miljøstyrelsen samt Flemming Ludvigsen fra Oliebranchens Fællesrepræsentation.

1.5 RAPPORTENS OPBYGNING

I rapportens kapitel 2 gives en oversigt over olieprodukters egenskaber, som baggrund for vurdering af mulige tilsætningsstoffer.

I kapitel 3 er søgningen efter mulige tilsætningsstoffer beskrevet sammen med de oplysninger, der danner grundlag for den første prioritering, - udvælgelse af mulige sporstoffer.

Kapitel 4 rummer en gennemgang af de fysisk/kemiske, sundhedsmæssige og miljømæssige forhold for 5 prioriterede sporstoffer.

I kapitel 5 findes en gennemgang af mulige analysemetoder samt disse meto-
ders krav til rimelig genfinding af sporstoffer med hensyn til tilsatte mængder,
detektionsgrænser og lignende.

I kapitel 6 er beskrevet den viden det var muligt at indsamle omkring den
praktiske betydning for olieprodukternes anvendelse som brændstoffer, når
sporstoffer bliver tilsat.

I kapitel 7 findes en opgørelse af det samlede forbrug af olieprodukter og et
estimat for omkostningerne ved tilsætning af sporstoffer.

Projektets resultater er samlet i kapitel 8.

2 Olieprodukters egenskaber

Olietyperne benzin, diesel og fyringsolier har en række fællestræk og forskelligheder. Alle tre typer er blandinger af kulbrinter med forskellige additiver. I det følgende er kort ridset op, de karakteristiske egenskaber for de tre typer i relation til overvejelserne omkring tilsætning af et sporstof.

2.1 OLIEPRODUKTERS KARAKTERISTIKA

Olieprodukterne der er produceret ud fra råolie er normalt defineret ud fra deres ekstraktionsintervaller (se benzin, diesel og fyringsolie nedenfor). Hovedbestanddelene er alkaner, aromater (monocycliske og polycycliske (PAH)) samt alkenner (olefiner).

Alkanerne, som er en af hovedingredienserne i råolie, opdeles i de raffinerede olieprodukter som:

- Lineære alkaner (n-alkaner) med C-atomerne i en ubrudt række. Den generelle formel er C_nH_{2n+2} .
- Forgrenede alkaner (isoparaffiner) med C-atomer, der forgrener sig ud fra hovedkulstofkæden. De forgrenede alkaner giver anledning til en stor mængde molekyllkonfigurationer. Den generelle formel er C_nH_{2n+2} .
- Cycloalkaner (naphthener), hvor kulstofkæderne er arrangeret i en (monocycliske) eller flere ringe (polycycliske). Den generelle formel er C_nH_{2n} .

Alkenerne (olefiner) er molekyler med en eller flere dobbeltbindinger mellem C-atomerne. Dobbeltbindingerne gør dem mere reaktive end alkanerne. Det er derfor ikke i denne gruppe, en potentiel markør skal søges.

Aromaterne indeholder en eller flere ringe med 6 kulstofatomer med tre dobbeltbindinger. Eksempler på en-ringede aromater (monoaromatiske hydrocarboner) er benzen, toluen, ethylbenzen og xylen. Eksempler på flerringede aromater (polyaromatiske hydrocarboner, PAH) er naphthalen, anthracen og pyren.

2.1.1 Kogepunkt

For stoffer i samme gruppe øges kogepunktet med antallet af kulstofatomer (carboner). For stoffer med samme antal carboner øges kogepunktet i rækkefølgen isoparaffiner, n-paraffiner, naphthener og aromater.

Forskellen i kogepunktet mellem isoparaffiner og aromater med samme antal carboner (60–80°C) er større end forskellen i kogepunkt mellem stoffer i samme gruppe, som øges med ét carbon (Tabel 2.1).

2.1.2 Smeltepunkt

Smeltepunktet (frysepunktet) øges med molekylvægten, men er stærkt påvirket af molekylets form. Molekyler, som let passer ind i en krystalstruktur, har et højere smeltepunkt end andre strukturer. Derfor har n-paraffiner og ikke-

substituerede aromater et højere smeltepunkt end isoparaffiner og naphthener med samme antal carboner (Tabel 2.1).

2.1.3 Massefylde

For stoffer i samme gruppe øges massefylden med antallet af carbonatomer. For stoffer med samme antal carbonatomer øges massefylden i rækkefølgen paraffiner, naphthener og aromater (Tabel 2.1).

TABEL 2.1: UDVALGTE HYDROCARBONERS SMELTEPUNKT, KOGEPUKNT OG MASSEFYLDE

Stof	Kemisk formel	Gruppe	Smeltepunkt, °C	Kogepunkt, °C	Massefylde, (g/cm ³ , 20°C)
Naphthalen	C ₁₀ H ₈	Aromat	80	218	1,1750
Tetralin	C ₁₀ H ₁₂	Aromat	-35	208	0,9695
cis-Decalin	C ₁₀ H ₁₈	Naphthen	-43	196	0,8965
1,3-Diethylbenzen	C ₁₀ H ₁₄	Aromat	-84	181	0,8639
n-Butylcyclohexan	C ₁₀ H ₂₀	Naphthen	-75	181	0,7992
n-Pentylcyclopentan	C ₁₀ H ₂₀	Naphthen	-83	181	0,7912
Decan	C ₁₀ H ₂₂	n-Paraffin	-30	174	0,7301
2,2-Dimethyloctane	C ₁₀ H ₂₂	Isoparaffin		142	0,7245
Anthracen	C ₁₄ H ₁₀	Aromat	215	341	1,2510
1-Pentyl-naphthalen	C ₁₅ H ₁₈	Aromat	-24	306	0,9792
n-Nonylbenzene	C ₁₅ H ₂₄	Aromat			0,8558
n-Nonylcyclohexan	C ₁₅ H ₃₀	Naphthen	-10	282	0,8160
n-Decylcyclopentan	C ₁₅ H ₃₀	Naphthen	-22	279	0,8110
n-Pentadecan	C ₁₅ H ₃₂	n-Paraffin	10	271	0,7684
2-Methyltetradecan	C ₁₅ H ₃₂	Isoparaffin	-8	265	
1-Decyl-naphthalen	C ₂₀ H ₂₈	Aromat	15	379	
n-Tetradecylbenzen	C ₂₀ H ₃₄	Aromat	16	354	0,8549
n-Tetradecylcyclohexan	C ₂₀ H ₄₀	Naphthen	25	354	0,8250
n-Tetradecylcyclopentane	C ₂₀ H ₄₀	Naphthen	17	353	0,8213
Eicosan	C ₂₀ H ₄₂	n-Paraffin	36	344	0,7843
2-Methylnonadecan	C ₂₀ H ₄₂	Isoparaffin	18	339	

2.2 BENZIN

Benzin består af en blanding af råolieprodukter, som har gennemgået forskellige processer derunder destillation og krakning. Et benzinsammensætning er variabel, idet de ønskede tekniske egenskaber kan opnås ved en række formuleringer.

2.2.1 Benzins karakteristika

Benzins destillationsinterval er lavere end for diesel og fyringsolie (Tabel 2.2). Sammensætningen mellem grupper kan variere alt efter oprindelsessted for råolien og produktionssted (raffineri) for benzinen. Desuden anvendes forskellige additiver for at gøre produktet bedst egnet til det ønskede formål (se Hansen *et al.* 2001).

TABEL 2.2: VARIATION I SPECIFIKATIONER FOR BENZINS SAMMENSETNING

Benzin	Karakteristika	Reference
Destillationsinterval	30-220°C	Andersen 1994
Alkaner (C ₄ -C ₁₂), fordeling: Isoparaffiner (forgrenede alkaner) n-alkaner (lineære alkaner) Cycloalkaner	26-43% 7-21% 2-6%	Andersen 1994
Alkener	3-9%	Andersen 1994
Aromater	20-50%	Andersen 1994

Kvaliteten af benzin til brug for motordrevne køretøjer skal overholde visse krav, som er anført i Bekendtgørelse nr. 77 af 15. januar 2001 (MEM 2001). De er anført i tabel 2.3 nedenfor.

TABEL 2.3 KRAV TIL KVALITET AF BENZIN

Parameter	Enhed	Grænseværdier ²⁾			Analyse Metode
		Kriterium	A	B ³⁾	
Research-oktant (RON)	-	min.	95 ⁴⁾	-	EN 25164
Motor-oktant (MON)	-	min.	85 ⁴⁾	-	EN 25163
RVP (1. maj - 30. september)	KPa	max.	60,0	-	prEN 13016-1 (DVPE)
Destillation: - fordampet ved 100 °C - fordampet ved 150 °C	% v/v "	min. "	46,0 75,0	- -	prEN-ISO 3405 "
Kulbrinter: - alkener ^{5) 6) 7)} - aromater ^{5) 6) 7)} - benzen ⁸⁾	% v/v " "	max. " "	18,0 ⁹⁾ 42,0 1,0	- 35,0 -	ASTM D1319 " EN 12177 EN 238
Iltindhold ¹⁰⁾	% m/m	max.	2,7	-	EN 1601 prEN 13132
Oxygenater: ¹⁰⁾ - methanol, passende stabilisator skal tilsættes - ethanol, stabilisatorer kan være nødvendige - isopropylalkohol - tertbutylalkohol - isobutylalkohol - ethere, som indeholder 5 kulstofatomer pr. molekyle eller derover - andre oxygenater ¹¹⁾	% v/v " " " " " "	max. " " " " "	3 5 10 7 10 15	- - - - - -	EN 1601 prEN13132" " " " "
Svovlindhold ¹²⁾	mg/kg	max.	150	50	EN-ISO 14596 EN ISO 8754 EN 24260
Blyindhold	g/l	max.	0,005	-	EN 237

2) De anførte værdier er "sande værdier". Opstillingen af grænseværdierne bygger på ISO 4259 "Petroleum products - determination and application of precision data in relation to methods of test", og ved fastsættelsen af en minimumsværdi er der medregnet en minimumsdifference på 2R over nul (R = reproducerbarhed). Resultaterne af de individuelle målinger skal fortolkes på grundlag af kriterierne i ISO 4259 (offentliggjort i 1995).

3) Fastsættelsen af værdier i kolonne B - bortset fra svovl og aromater - afventer beslutning i EU.

4) Dette udelukker ikke, at der kan markedsføres benzin med højere eller lavere oktantal. Der skal dog på hvert salgssted være mindst 1 stander, hvorfra der leveres benzin, der opfylder de anførte oktantalskrav.

4-12) Øvrige noter vedrører mest metoder, se bekendtgørelsen (MEM 2001).

Bekendtgørelsen indeholder bestemmelser, der gennemfører Europa-Parlamentets og Rådets direktiv 98/70/EF af 13. oktober 1998 om kvaliteten af benzin og dieselolie, jf. EFT nr. L 350/58 fra 28. december 1998, og Kommissionens direktiv nr. 2000/71/EF, EF-Tidende 2000 L287 side 46 fra 14. november 2000 (EU 1998, EU 2000).

2.3 DIESELolie

Dieselolie er en generisk betegnelse, som dækker brændstoffer til motorer med kompressionstænding, men som i daglig tale referer til brændstof til dieselmotorer.

2.3.1 Diesels karakteristika

Den kommercielle diesel er defineret ud fra massefylde og viskositet. Specifikationen efter den europæiske standard CEN 590 er vist i Tabel 2.4.

TABEL 2.4: SPECIFIKATION FOR DIESEL

Egenskab	CEN 590, grades A-F
Massefylde 15°C, g/cm ³	0,820-0,860
Kinematisk viskositet, 40°C, cSt	2,0-4,5
Svovl, % vægt, max.	0,05
Cetan-tal, min.	49
Destillations temperatur, °C	
% vol. recovered	
65	Min. 250°C
85	Max. 350°C
95	Max. 370°C

Variationen af indholdet følger destillationsintervallet, men kan variere ligesom for benzin. Tabel 2.5 gengiver resultatet fra en enkelt repræsentativ reference.

TABEL 2.5: SPECIFIKATION FOR DIESEL

Diesel	Karakteristika	Reference
Destillationsinterval	180-360°C	Andersen 1994
Alkaner (C ₁₀ -C ₁₈), fordeling	55%	Andersen 1994
Alkener		Andersen 1994
Aromater	35%	Andersen 1994

Ligesom for benzin skal kvaliteten af dieselolie til brug for motordrevne køretøjer overholde visse krav, som er anført i Bekendtgørelse nr. 77 af 15. januar 2001 (MEM 2001). De er anført nedenfor.

TABEL 2.6 KRAV TIL KVALITET AF DIESELolie

Parameter	Enhed	Grænseværdier ¹³⁾			Analyse	
		Kriterium	A	B	Metode	Offentliggørelse
Cetantal	-	min.	51,0	-	EN ISO 5165	1998
Massefylde ved 15°C ¹⁵⁾	kg/m ³	max.	845	-	EN ISO 3675 EN ISO 12185	1998 1996
Destillation: 95% kogepunkt	°C	max.	360	-	prEN ISO 3405	1998
Polycycliske aromatiske kulbrinter ¹⁶⁾	% m/m	max.	11		IP 391	1995
Svovlindhold ¹⁷⁾	mg/kg	max.	350	50	EN ISO 14596 EN ISO 8754 EN 24260	1998 1995 1994

Noter se bekendtgørelsen (MEM 2001).

Dieselolie er en kompleks blanding af flere hundrede stoffer. De fleste er hydrocarboner med carbon antal mellem 10 og 21 (C₁₀-C₂₁). De fleste tilhører paraffinerne, naphthenerne og aromaterne. Disse tre klasser har forskellige fysiske og kemiske egenskaber. De forskellige relative egenskaber i disse tre grupper er en af de faktorer, der udgør forskellen mellem dieseltyperne.

Dieselolie består hovedsageligt af C10 til C19 hydrocarboner, som inkluderer ca. 64% alifatiske hydrocarboner, 35% aromater (inkl. <5% PAH) og 1-2% olefiner (US Air Force 1989)

2.4 FYRINGSOLIE

Fyringsolie minder en del om dieselolie. Alle fyringsolier består af en kompleks blanding af alifatiske og aromatiske hydrocarboner. De alifatiske alkaner (paraffiner) og cycloalkaner (naphthener) er hydrogenmættede hydrocarboner og udgør ca. 80-90% af fyringsolien. Aromaterne (f.eks. benzen) udgør 10-20%, hvori indgår <5% PAH, og olefinerne (f.eks. styren og inden) udgør 1% af fyringsolien. Fyringsolie (f.eks. Fuel oil no. 2) er et blandet destillat med hydrocarbonantal mellem 11 og 20 (C₁₁-C₂₀).

2.4.1 Fyringsolies karakteristika

Fyringsoliers sammensætning kan som nævnt variere, men som eksempel er nedenfor (tabel 2.7) vist et eksempel sammenlignet med dieselolie.

TABEL 2.7: ANALYSE AF DIESEL OG FYRINGSOLIER EFTER API (IARC 1989 OG EPA)

Hydrocarbon type	Diesel /petroleum, %	Fyringsolie, %
Paraffin (n- og iso-)	52,4	41,3
Monocycloparaffiner	21,3	22,1
Bicycloparaffiner	5,1	9,6
Tricycloparaffiner	0,8	2,3
Total mættede hydrocarboner	79,7	75,3
Alkylbenzener	13,5	5,9
Indaner / tetraliner	3,3	4,1
Dinaphthenobenzener / indener	0,9	1,8
Naphthalener	2,8	8,2
Biphenyler / acenaphthener	0,4	2,6
Fluorener / acenaphthylene	Ingen data	1,4
Phenanthrener	Ingen data	0,7
Total aromatiske hydrocarboner	23,6	24,7
Olefiner	Ingen data	Ingen data

De fysiske kemiske egenskaber dækker over variationsbredden af enkeltkomponenter og variationer mellem typer (tabel 2.8). Det bemærkes, at vandopløseligheden er målt til 5 mg/l og octanol/vand fordelingskoefficienten varierer mellem 2000 og 11.500.000 (log Kow 3,3-7,06). Massefylden er højere end for benzin og diesel.

TABEL 2.8: FYSISK-KEMISKE EGENSKABER AF FYRINGSOLIE

Egenskab	Fuel olie nr.2	Reference
Smeltepunkt	-29°C	OHMTAD 1985
Kogepunkt	160-360 282-338	IARC 1989 US Coast Guard 1985
Massefylde v. 20°C	0,8700-0,9500	
Vandopløselighed	5 mg/l	US Air Force 1989
Log Kow	3,3-7,06	"
log Koc	3,0-6,7	"
Damptryk	2,12-26,4 mmHg	"

Fyringsolies destillationsinterval er næsten identisk med diesel; men går en anelse højere (Tabel 2.9).

TABEL 2.9: SPECIFIKATION FOR FYRINGSOLIE

Fyringsolie	Karakteristika	Reference
Destillationsinterval	180-380°C	Andersen 1994
Alkaner, fordeling: Isoparaffiner og n-alkaner Cycloalkaner	41-61% 11-32%	Andersen 1994
Alkener	0-0,7%	Andersen 1994
Aromater	19-25%	Andersen 1994

2.5 FORDELING AF FYSISK-KEMISKE EGENSKABER

Det er forsøgt ud fra de fysisk-kemiske egenskaber hos udvalgte hydrocarbo-
ner at finde en fællesnævner, der kunne danne grundlag for en søgen efter et
organisk stof (hydrocarbon), der ville ligge indenfor rammerne af de stoffer,
der allerede var i de tre brændstoftyper. Ønsket var at finde et stof, der havde
nogenlunde samme vandopløselighed og samme octanol/vand fordelingskoeffi-
cient.

Ud af 61 stoffer kunne der findes en målt vandopløselighed for de 44 stoffer.
For yderligere 17 var der tilstrækkelige oplysninger til at en kvantitativ struk-
turanalyse (QSAR), baseret på stoffernes molekylstruktur, blev udført. Det
blev fundet, at værdierne varierede fra 0,1 µg/l til 1790 mg/l. Middelværdien
var 4,8 mg/l med en standardafvigelse på 238 mg/l. Data er vedlagt i bilag A.

For octanol/vand fordelingskoefficienten kunne der kun findes målte værdier
for 35 stoffer. De blev suppleret med estimeret baseret på QSAR for yderlige-
re 26 stoffer til i alt 61 stoffer. Blandt de eksperimentelle værdier varierede de
udvalgte stoffer fra log Kow 1,8 til 7,6. Der blev beregnet en middelværdi på
log Kow 4.3 med en standardafvigelse på 1,9.

Det bemærkes at antallet er relativt lille i forhold til de mulige, men antallet
anses for tilstrækkeligt repræsentativt til dette formål. For at undgå, at en
gruppe blev overrepræsenteret, er ca. halvdelen (32) af de udvalgte aromater
og resten fordelt på alkaner inkl. 5 alkener (olefiner).

Resultatet af fordelingerne kan ses i tabel 2.10. Ud over vandopløselighed og
log Kow blev der også søgt oplysninger på smeltepunkt, kogepunkt, damptryk
og log Koc. Sidstnævnte var der ikke umiddelbart tilgængelige data for, så alle
værdier er estimerede værdier (QSAR).

TABEL 2.10: STATISTISK FORDELING AF UDVALGTE PARAMETRE PÅ UDVALGTE ALMINDELIGT FORE-
KOMMENDE HYDROCARBONER

	Molvægt g/mol	MP °C	BP °C	Massefylde g/cm ³	Damptryk Pa	Vandopløselighed mg/l	log Kow	log Koc
N total	61	61	61	19	61	61	61	58
N estimeret	0	6	7	0	13	17	26	58
Minimum	42.08	-185.2	-47.6	0.1251	1.14E-11	0.0001	1.77	1.376
Maksimum	300.26	437.3	525	0.8963	1158377	1790	10.16	6.95
Middel	152.52	1.8	208	0.7700	42889	74.94	4.53	3.66
90%-ile	252.32	168	376	0.8715	81313	162	6.63	5.90
75%-ile	206.29	97	339	0.8656	6291	48.8	5.16	4.71
Median	140.27	-21.6	181	0.8160	162.6	4.78	4.31	3.37
STDV		127.2	140	0.1750	158628	237.73	1.88	1.45
25%-ile	92.14	-95.3	95	0.7760	0.0024	0.035	3.15	2.43

På grund af stoffernes store variation og skæve fordeling, blev det besluttet at anvende medianværdier som udvalgsområde. For vandopløselighed betød det, at man ville koncentrere sig om stoffer med en vandopløselighed under 5 mg/l. For parameteren octanol/vandforholdet betød resultatet af søgningen, at man ville koncentrere sig om stoffer med en log Kow mellem 3 og 4.

De mulige ikke-farvestoffer, som kunne anvendes som sporstof (markør) i de tre brændstoftyper, er omtalt i kapitel 3.

2.6 BRÆNDSTOFFERS TOKSICITET

Til vurdering af en påvirkning af den samlede toksicitet i brændstofferne, af en markør, er der søgt oplysninger om den totale/samlede toksicitet af forskellige brændstoftyper.

2.6.1 Mennesker

På EINECS-listen er der 68 stoffer, som dækker destillationsprodukter, som kan anvendes til køretøjer og opvarmning. Mange af stofferne er optaget på listen over farlige stoffer, og nogle er klassificeret som carcinogene (kræftfremkaldende).

Toksiciteten af markedsførte brændstoffer er undersøgt af olieindustriens fællesorganisationer som f.eks. API (American Petroleum Institute) og CONCAWE (the oil companies' European organisation for environmental and health protection).

Resultaterne for diesel og fyringsolier er refereret i CONCAWE (1996). For overskuelighedens skyld er kun de væsentligste niveauer gengivet her.

Den akutte orale toksicitet i rotter ligger med LD₅₀-værdier fra >2000 til 17300 mg/kg med kliniske observationer som hyperaktivitet, ataksi, inkontinens, hårtab og blødninger/irritation i mave-tarmkanal.

Dermal LD₅₀-værdier ligger på >2000 for kaniner med tydelig hudirritation.

Inhalations LC₅₀ er fundet fra 1,8 til 7,6 mg/l med inflammation af åndedrætsveje og lunger.

De mange brændstoftyper, der blev undersøgt, medførte moderat til alvorlig hudirritation men ingen øjenirritation. Der blev ikke fundet tegn på hudsensibilisering.

I subakutte/subkroniske forsøg over 4 eller 13 uger med dermale studier observeredes signifikante alvorlige hudirritation ved alle doseringer (2-8 g/kg/dag). Reduceret kropsvægt kunne observeres ved 125 og 500 mg/kg/dag. Ved inhalation i op til 4 uger observeredes inflammation i næsevæv og lunger hos rotter ved ca. 20 mg/m³.

Carcinogeniciteten vurderedes med påføring af stofferne på huden af mus ca. 2 gange per uge i op til 2 år. Alle testede brændstoftyper medførte hudtumorer (benigne og maligne) Et fællestræk var opståen af alvorlig hudirritation og en lang latensperiode inden tumordannelse (ca. 40-90 uger).

Genotoksiciteten er undersøgt med *in vitro* bakterielle mutationstests (microbial mutation assays). Der observeredes en spredning fra inaktiv til svagt positive og positive reaktioner.

Reproduktionstoksicitet er undersøgt på dieselolier i et teratologistudium på rotter med inhalation af dampe over 5-15 graviditeter. Der observeredes ingen teratogene effekter. Ved daglig påføring på rottehud af 6 gasolier dag 0-19 i diegivningsperioden medførte med en enkelt undtagelse foetotoksiske effekter (øget resorption, reduceret ungevægt, reduceret kuldstørrelse).

Erfaringer fra human eksponering omfatter hudirritation, slimhindeirritation og effekter på centralnervesystemet.

Yderligere detaljer og referencer kan findes i Concawe (1996).

2.6.2 Miljø

Den komplekse sammensætning af brændstoftyperne betyder, at deres opførsel vil være afhængig af sammensætningen, og at enkeltstofferne vil reagere dels afhængigt og dels uafhængigt af hinanden. Størsteparten udgøres af iso- og cycloparaffiner, men indeholder også en betydelig andel af monocycliske og polycycliske aromatiske hydrocarboner.

Ved frigivelse til det ydre miljø vil de lette komponenter generelt søge at fordampe (afhængig af forholdene), men resten vil blive adsorberet til jord/sediment og spredt i vandfasen. Gasolier vil lægge sig på vandoverflader (lettere end vand) og sprede sig ud. Generelt er vandopløseligheden lav, men de mest vandopløselige komponenter vil blive opløst og spredt.

Det betyder, at med tiden vil sammensætningen ændre sig til at mindre fordampelige og mindre vandopløselige komponenter vil dominere sammensætningen.

De mindre molekyler kan forventes at blive nedbrudt relativt hurtigt under aerobe forhold, mens kulbrinter med større molekylvægt og ringstrukturer vil forventes nedbrudt væsentligt langsommere. Under anaerobe forhold, som for eksempel i iltfattigt sediment, vil nedbrydningen gå i stå.

Økotoksiciteten er som regel testet på enkeltkomponenter i brændstofferne. For de fleste er det et metodeproblem, at de fleste stoffer er lavt vandopløselige, og der derfor anvendes forskellige metoder til at udføre doseringerne i testene.

Den akutte toksicitet (LC_{50} 96 t) overfor fisk synes at samle sig om 10-100 mg/l, for dafnier ligger LC_{50} (48 t) niveauet på 1-100 mg/l, og for alger foreligger IC_{50} (72 t) resultater fra 1-10 mg/l (Concawe 1996).

2.7 BRÆNDSTOFFERS KLASSIFICERING

Klassificeringen af kul og olieafledte stoffer findes i bilag 2 til listen over farlige stoffer (MEM 2001). Listen er lang og dækker enkeltstoffer og grupper af stoffer fra definerede destillationsprocesser, såvel som slutprodukter. De fleste er klassificeret Carc1 (evidens for carcinogenitet) til Carc3 (potentiel risiko for carcinogenitet) og R40 eller R45.

I tabel 2.11 er vist nogle få eksempler på klassificeringer.

TABEL 2.11 EKSEMPLER PÅ KLASSIFICERINGER FRA LISTEN OVER FARLIGE STOFFER (MEM 2001)

Navn	CAS nr.	EF nr. (EINECS/ELINCS)	Klassificering	Mærkning
Benzin	86290-81-5	289-220-8	Carc2; R45, Xn; R65	T; R45-65, S53-45
Benzin, straight run	68606-11-1	271-727-0	Carc2; R45, Xn; R65	T; R45-65, S53-45
Brændselolie, Nr. 2	68476-30-2	270-671-4	Carc3; R40	Xn; R40, S(2) 36/37
Brændselolie, Nr. 4	68476-31-3	270-673-5	Carc3; R40	Xn; R40, S(2) 36/37
Brændselolie, Nr. 6	68553-00-4	271-384-7	Carc2; R45	T; R45, S53-65
Diesel	68334-30-5	269-822-7	Carc3; R40	Xn; R40, S(2) 36/37
Diesel, Nr. 2	68476-34-6	270-676-1	Carc3; R40	Xn; R40, S(2) 36/37
Petroleum	8008-20-6	232-366-4	Xn; R65	Xn; R65, S(2)-23-24-62
Råolie	8002-05-9	232-298-5	Carc2; R45	T; R45, S53-45

CAS nr.: Chemical Abstracts Service registry number, identificerer stoffer beskrevet i Chemical Abstract

EF nr.: Eu registrering af stoffer optaget på EINECS (European Index Number of Existing Chemical Substances, som er en europæisk liste over markedsførte kemiske stoffer) samt ELINCS (European Index Numbers of New Chemical Substances, som er listen over anmeldte kemiske stoffer efter direktiv 67/548).

3 Mulige stoffer

Med udgangspunkt i Miljøprojekt 612 er det valgt at fokusere på gruppen af farvestoffer samt ikke naturligt forekommende stoffer, der ligner stoffer som allerede tilsættes olieprodukter i dag, og på basis heraf udvælge et begrænset antal relevante mulige sporstoffer.

Dertil er der gennemført litteratursøgninger for at afdække eventuel andre relevante muligheder.

3.1 MULIGE FARVESTOFFER

3.1.1 Udvalgelse af farvestoffer

Ved den første opstilling af mulige tilsætningsstoffer, er der ikke skelnet mellem tilsætning af sporstoffer til benzin og til diesel- og fyringsolie.

De stoffer, det er valgt at gå videre med fra screeningen (Hansen *et al.* 2001), er vist i Tabel 3.1. Som det fremgår af tabellen, er der nævnt 3 forskellige farvestof-typer: anthraquinon-, azo- og fluorescerede farvestoffer .

TABEL 3.1: UDVALGTE SPORSTOFFER

Navn	CI nr.	CAS nr.	Type
Solvent Blue 35	CI 61554	17354-14-2	Antraquinon-farvestof
Solvent Blue 36		14233-37-5	Antraquinon-farvestof
Solvent Blue 79		64553-79-3 90170-70-0	Antraquinon-farvestof
Solvent Blue 98		74499-36-8	Antraquinon-farvestof
Solvent Green 3	CI 61565	128-80-3	Antraquinon-farvestof
Solvent Red 24	CI 26105	85-83-6	Azo-farvestof
Solvent Red 26	CI 26120	4477-79-6	Azo-farvestof
Solvent Red 52	CI 68210	81-39-0	Antraquinon-farvestof
Solvent Red 111	CI 60505	82-38-2	Antraquinon-farvestof
Solvent Red 164	-	92257-31-3	Azo-farvestof
Solvent Red 215		85203-90-3	Azo-farvestof
Solvent Violet 12	CI 58050	81-64-1	Antraquinon-farvestof
Solvent Violet 13	CI 60725	81-48-1	Antraquinon-farvestof
Solvent Yellow 14	CI 10255	842-07-9	Azo-farvestof
Solvent Yellow 56	CI 11021	2481-94-9	Azo-farvestof
Solvent Yellow 124		34432-92-3	Azo-farvestof
Acid Red 87	CI 45380	17372-87-1	Fluorescerende farvestof
Acid Yellow 73	CI 45350	518-47-8	Fluorescerende farvestof
Fluorol 242	CI 68410	6871-92-7	Fluorescerende farvestof

3.1.2 Vurdering af farvestoffer

For hvert af de i Tabel 3.1 nævnte mulige sporstoffer er der indsamlet tilgængelige litteraturdata. Der er lagt vægt på at indsamle data vedrørende

- Stoffets identitet
- Persistens
- Kræftfremkaldende egenskaber
- Økotoxikologiske forhold

Disse data er samlet i bilag B.

De overordnede resultater fra informationerne i bilag B giver følgende prioritering.

Farvestoffet Solvent Blue 35 er en anthraquinonforbindelse, hvorom der findes meget begrænsede data. Data vedrørende stoffet er sparsomme og usikre. Estimerede værdier indikerer en meget lav vandopløselighed, potentielt bioakkumulerbar og høj toksicitet for vandlevende organismer. Stoffet prioriteres derfor lavt.

Farvestoffet Solvent Blue 36 er en anthraquinonforbindelse, hvorom der findes meget sparsomme data. Stoffet er mistænkt for at kunne give anledning til mutationer. Der er estimeret en meget lav opløselighed, og der foreligger indikationer for at stoffet er bioakkumulerbart. På baggrund af de få oplysninger, der peger i betænkelig retning, prioriteres stoffet lavt.

Solvent Blue 79 anvendes til en række mærkningformål, og vil alene af denne årsag ikke kunne anbefales.

Solvent Blue 98 anvendes til mærkningsformål, - bl.a. som Euromarker, og vil alene af den grund ikke være egnet i denne sammenhæng.

Solvent Green 3 er et anthraquinonderivat. Der er fundet yderst begrænsede data om stoffet. Der er indikationer for lav akut giftighed og lav vandopløselighed, samt at stoffet er potentielt bioakkumulerbart. Stoffet prioriteres derfor lavt.

Solvent Red 24 er et azo-farvestof, der kan fraspalte kræftfremkaldende arylaminer. Data for de sundhedsmæssige forhold er sparsomme og usikre. Estimerer indikerer en lav vandopløselighed, og at stærk adsorption til jord er forventelig. Stoffet prioriteres lavt.

Solvent Red 26 er ligeledes et azofarvestof med egenskaber, der ligner Solvent Red 24, hvorfor dette stof også prioriteres lavt.

Solvent Red 52 er en anthraquinonforbindelse. Der er ikke fundet egentlige data om stoffet. De sundhedsmæssige forhold kunne ikke vurderes. Estimerer indikerer en lav vandopløselighed, og at stoffet er bioakkumulerbart. Stoffet prioriteres lavt.

Stoffet Solvent Red 111 er en anthraquinonforbindelse, der anvendes til en række mærknings- og advarselsformål. Stoffet har en lav akut giftighed, men er mistænkt for at kunne forårsage langtidseffekter og være allergifremkaldende. Estimerer indikerer at stoffet har en lav vandopløselighed, er økotoksisk og antagelig bioakkumulerbart. Da stoffet anvendes i en række sammenhænge, vælges det at undersøge stoffet nærmere.

Solvent Red 164 er en azoforbindelse og derfor betænkelig. Stoffet anvendes til farvning af fyringsolie i USA. Der foreligger yderst sparsomme data for stoffet, hvorfor en vurdering ikke kan foretages. Stoffet prioriteres lavt.

Solvent Red 215 er en azo-forbindelse, der bl.a. anvendes til farvning af mineralolieprodukter i Tyskland. Det har ikke været muligt at foretage en sundheds- og miljømæssig vurdering. Af disse grunde prioriteres stoffet lavt.

Solvent Violet 12 er også kendt under navnet Quinizarin. Stoffet anvendes som sporstof i England til fyrings- og dieselolie. Data indikerer lav til moderat sundhedsmæssige påvirkninger. Stoffet har en lav vandopløselighed og er potentielt bioakkumulerbart. Da stoffet allerede anvendes til mærkningformål, prioriteres det lavt.

Solvent Violet 13 er en anthraquinonforbindelse, der så vidt vides ikke anvendes til mærkningsformål. Sundhedsmæssigt har stoffet en relativ lav akut giftighed. Stoffet er mistænkt for at være allergifremkaldende. Stoffet har en meget lav vandopløselighed, og der er indikationer for at stoffet er økotoksisk. Det er valgt at vurdere stoffet nærmere.

Solvent Yellow 14 er en azo-forbindelse og derfor betænkelig. De få fundne data indikerer en lav akut giftighed og en risiko for langtidseffekter. Estimerede data tyder på en lav vandopløselighed, og at stoffet er potentielt bioakkumulerende.

Solvent Yellow 56 er en azo-forbindelse og derfor betænkelig. De få fundne data indikerer en risiko for langtidseffekter. Estimerede data tyder på en lav vandopløselighed, og at stoffet er potentielt bioakkumulerende.

Solvent Yellow 124 er en azo-forbindelse, der anvendes som Euromarker. Sundhedsmæssigt er stoffet potentielt sundhedsskadeligt ved indtagelse og allergifremkaldende. Miljømæssigt er stoffet potentielt bioakkumulerende, og kan ikke anses for let nedbrydeligt. Stoffet prioriteres lavt, da det anvendes som sporstof allerede.

Acid Red 87 er et fluoroserende farvestof. Det indeholder brom, som gør stoffet uegnet i denne forbindelse.

For Acid Yellow 73 er fundet data, der viser at stoffet er relativt vandopløseligt. Data for de sundhedsmæssige forhold indikerer at stoffet har en lav akut giftighed og muligvis kræftfremkaldende effekter. Det er vanskeligt at estimere data for en miljøvurdering, da stoffet kan dissociere. Stoffet prioriteres lavt på grund af den høje vandopløselighed.

Det har ikke været muligt at finde data for Fluorol 242 til at belyse de sundheds- og miljømæssige forhold. Stoffet prioriteres derfor lavt i denne sammenhæng.

3.1.3 Prioriterede farvestoffer

Generelt er vurderingen af de 19 farvestoffer foretaget på basis af et sparsomt datagrundlag. Azo-farvestoffer er overordnet sorteret fra, da der er risiko for fraspaltning af arylaminer. Andre farvestoffer er sorteret fra, fordi de anvendes som sporstoffer allerede. Nogle er sorteret fra på grund af fysisk/kemiske uheldige egenskaber og andre igen, fordi de ikke kunne vurderes på grund af manglende oplysninger.

De to farvestoffer det er valgt at gå videre med er:

- Solvent Red 111
- Solvent Violet 13

3.2 LITTERATURSØGNING

Der er gennemført 2 søgninger med henblik på at afdække mulighederne for relevante alternative stoffer, der ikke er farvestoffer.

3.2.1 Søgning i HSDB

Der blev gennemført en søgning i databasen Hazardous Substance Data Bank (HSDB) d. 5. december 2001. HSDB indeholder oplysninger for over 4.500 stoffer, og alle oplysninger er vurderet af National Library of Medicine.

Ved søgningen i HSDB blev der foretaget en fri-tekst-søgning med termerne "Low mobility, soil" og "low water solubility". Søgningen gav et resultat på 154 stofnavne.

For søgningen skal det bemærkes, at det kun er muligt at finde stoffer i HSDB for hvilke, der er data om log Kow og vandopløselighed. Der kan således være en række andre relevante stoffer, som ikke er blevet fundet, fordi data ikke er tilgængelige i denne database.

De 154 fundne stoffer blev gennemgået. Stoffer for hvilket det umiddelbart kunne ses, at de indeholdt chlor eller brom, eller som umiddelbart er toksiske, fordi de anvendes som bekæmpelsesmidler, blev sorteret fra. Relevante stoffer med en log Kow på mellem 3 og 4 samt en vandopløselighed på under 5 mg/liter er vist i Tabel 3.2.

TABEL 3.2: UDVALGTE STOFFER EFTER LITTERATURSØGNING I HSDB

Stof	CAS nr.
Dibutylphthalat	84-74-2
1-decene	872-05-9
2-aminoanthraquinon	117-79-3
2-ethylhexanoic acid	149-57-5

Data for disse stoffer er samlet i bilag C. Af disse data fremgår det, at dibutylphthalat har stor vandopløselighed, at 1-decene har for højt damptryk og at 2-ethylhexansyre er let bionedbrydeligt. Derfor vurderes, at disse stoffer ikke er egnede som sporstoffer.

Det vælges derfor at gå videre med 2-aminoanthraquinon, der er et udgangsstof for fremstilling af flere farvestoffer.

3.2.2 Søgning i Beilstein

Ved hjælp af DTV (Danmarks Tekniske Videnskabelige Bibliotek), er der blevet lavet en forespørgsel på stoffer, der opfylder følgende kriterier:

- 1) Log Kow = 3-4.
- 2) Vandopløselighed under 5 mg/l i vand.

Søgning foregik i Beilstein, og de fundne stoffer er vist i tabel 3.3.

Tabel 3.3: Udvalgte stoffer fra Beilstein

Stof	CAS nr.	Log Kow	Vandopløselighed mg/l	Årsag til fravalg:
Acenaphthen	83-32-9	3,55	4,0	I råolie
Dibenzofuran	132-64-9	3,97	4,5	I råolie
1-(2,6-difluorobenzoyl)-3-(4-chlorophenyl)-urea	35367-38-5	3,83	0,09	Indeholder F og Cl
Estradiol	50-28-2	3,74	1,66	Hormon
1-Methyl-naphthalin	1321-94-4	3,49	0,45	I råolie
N-(2-(2-aminothiazol-4-yl)-1-(1-cyclohexylmethyl-2,3-dihydroxy-5-methyl-cyclohexylcarbonyl)-ethyl)-2-(morpholin-4-sulfonylamino)-3-phenyl-propionamid	135704-06-2 1135760-05-3 135819-21-5	3,0	2,0	Stor molvægt, hurtig primær nedbrydning
Progesteron	57-83-0	3,67	0,64	Hormon
Propylparaben	94-13-3	3,04	0,06	
Terbufos	13071-79-9	3,54	0,1	Organofosfate insekticid
Testosteron	58-22-0	3,31	0,04	Hormon
Warfarin	81-81-2	3,05	3,85	Biocid, rodenticid

Ud af de fremkomne stoffer kan 6 af dem umiddelbart frasorteres, da de enten er et hormon (estradiol, progesteron, testosteron) eller indeholder chlor, fluor, svovl eller fosfor (terbufos, 1-(2,6-difluorobenzoyl)-3-(4-chlorophenyl)-urea).

Næste kriterium er, at de ikke må forekomme i olieprodukter. Ud fra det, kan 3 ud af de 5 tilbageværende stoffer frasorteres, da de allerede findes i diesel (acenaphthen, dibenzofuran, methylnaphthalen).

Af de to sidste stoffer er det ene et biocid (rodenticid: rottebekæmpelsesmiddel (warfarin) og fravælges derfor. Desuden bemærkes det, at warfarin er et coumarin-derivat, og at coumarin anvendes som markør i brændstof allerede.

Tilbage er stoffet propylparaben. Propylparaben er sammen med methyl-ethyl- og butylparaben relevante stoffer. I bilag D er samlet data for disse stoffer.

Det er valgt at arbejde videre med propylparaben, da denne parabenforbindelse har en relativ lav vandopløselighed og en estimeret acceptabel toksicitet overfor vandlevende organismer.

3.2.3 Øvrige forslag

En række syntetisk fremstillede stoffer, der produceres i stor mængde, men ikke normalt findes i olieprodukter, er blevet overvejet. Af disse kan nævnes eksemplerne i Tabel 3.4.

TABEL 3.4: UDVALGTE OG VURDEREDE SYNTETISK FREMSTILLEDE STOFFER

Stof	CAS nr.	Årsag til fravalg
Caprolactam	105-60-2	log Kow, vandopløselighed
Cyclohexanol	108-93-0	log Kow, vandopløselighed
Cyclohexanon	108-94-1	log Kow, vandopløselighed
Cyclohexylacetat	622-45-7	

Data for disse stoffer er samlet i bilag E.

Det vurderes, at log Kow er for lav og vandopløseligheden for høj for caprolactam, cyclohexanol og cyclohexanon. Den høje vandopløselighed kunne

potentielt betyde, at stofferne kunne have en så høj mobilitet, at de ville udvaskes fra spildt/udsivende brændstof.

Det er valgt at gå videre med cyclohexylacetat.

3.3 SAMMENFATNING

Blandt de undersøgte og vurderede stoffer er det valgt at gå videre med følgende:

- Solvent Red 111
- Solvent Violet 13
- 2-aminoantraquinon
- propylparaben
- cyclohexylacetat

4 Prioriterede stoffer

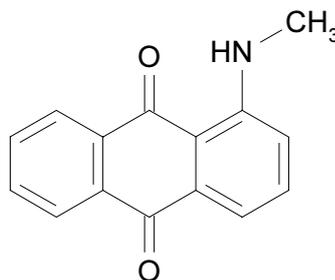
I det følgende er samlet de tilgængelige data, det har været muligt at fremskaffe, for de 5 udvalgte stoffer. Oplysningerne er indsamlet dels gennem publiceret litteratur og dels ved kontakt til leverandører og producenter.

4.1 SOLVENT RED 111

Solvent Red 111, der også er kendt under navnet Disperse Red 9 (begge er CI navne), anvendes som farvestof i flere sammenhænge. Stoffet fremtræder som et rødt fint pulver.

4.1.1 Identitet

Solvent Red 111 er et rødt pulverfarvestof af typen anthraquinon. Det har Colour Index (CI) nr. 60505 og CAS nr. 82-38-2. Det er opført på EINECS-listen med nr. 201-417-2. Solvent Red 111 har en molekylvægt på 237,3, og sumformlen C₁₅ H₁₁ O₂ N. Solvent Red 111's struktur kan ses i figur 4.1.



FIGUR 4.1 SOLVENT RED 111: 1-(METHYLAMINO)-ANTHRAQUINON

4.1.2 Fysiske og kemiske egenskaber

Smeltepunktet for Solvent Red 111 er 171°C (Physprop). Der kan opløses cirka 0,119 mg/l i vand ved 25 °C (Physprop). Solvent Red 111 har et damptryk på $9,3 \times 10^{-7}$ Pa (Baughman og Perenich 1988).

Man har målt en octanol/vand fordelingskoefficient $\log K_{ow}$ for stoffet på 4,1 (Baughman og Weber 1991), hvilket betyder, at stoffet er mere opløseligt i organiske forbindelser end i vand og er indenfor det ønskede interval på $\log K_{ow}$ 3-5.

Adsorptionen i jord er lav med en $\log K_{oc}$ estimeret til 1,6 af US-EPA og 1,9 af Miljøstyrelsen (Danish EPA, 2002). Forskellen i data er relativ lille og skyldes at de to anvendte modeller er baseret på forskelligt datagrundlag.

Henry's lov konstant er estimeret til $2,4 \times 10^{-7}$ Pa·m³/mol, hvilket viser at stoffet overvejende findes i vandfasen i forhold til luftfasen. Ved Mackay (Mackay

D, 1991) er det estimeret at stoffet hovedsagelig findes i vand, jord og sediment. Halvveringstiden ved atmosfærisk oxidation er meget kort (0,6 dage).

Ovennævnte betyder, at stoffet er fast og ikke fordamper ved de temperaturer, som kan forventes i jord. Den lave vandopløselighed indikerer, at Solvent Red 111 ikke forventes at være særlig mobil, på trods af en skønnet lav adsorptionskonstant.

4.1.3 Sundhedsmæssige egenskaber

Solvent Red 111 er blevet testet på hund og kanin. Akut oral indgivelse af 8000 mg/kg til hunde over 24 timer viste ingen tegn på forgiftning af dyrene eller tegn på væsentlige ændringer i væv eller blod. En estimeret LD₅₀ for rotter, oral giver en værdi på omkring 11.000 mg/kg (Danish EPA, 2002). Dette indikerer at der ikke er akutte giftvirkninger ved indtagelse af stoffet.

I tre forsøg blev dyrene overvåget i 14-21 dage (Martin *et al.* 1983). Metaboliseringen blev undersøgt ved oral indgift af får med 50 mg/kg. Efter 96 timer var 27% af den indgivne mængde genfundet i urin og 16% i faeces som uomdannet stof. Metabolitterne blev identificeret som demetylerede, hydroxyle-rede glucuronid conjugater (Martin *et al.* 1983). Undersøgelserne er udført for at vurdere effekten på militært personel, som bruger methylaminoanthraquinon baserede stoffer i røgsignaler (rødfarvet røg) og konkluderede, at stoffet eller dets metabolitter ikke ville udgøre væsentlig akut fare for eksponerede personer.

Øjenirritationstest med 50 mg/øje på kaniner viste ingen øjenirritation. Hudirritationstest med 2000 mg/kg på kaniner viste ingen tegn på hudsensibilisering eller anden irritation (Martin *et al.* 1983). Estimerer for sensibilisering viser, at stoffet er potentielt sensibiliserende (Danish EPA, 2002).

1-methylaminoanthraquinon kan have strukturelle ligheder med PAH'er, der er erkendt som carcinogene og mutagene og visse anthraquinoner, som har forårsaget allergisk kontakt eller fotosensibiliserende dermatitis hos mennesker. Undersøgelserne af Martin *et al.* (1983) tyder på, at anthraquinon derivater, hvorpå en methylaminogruppe er substitueret på position 1, er mindre toksiske end andre anthraquinon derivater (Sendelbach 1989). Estimerer for mutagenitet og kræftfremkaldende egenskaber giver ingen klare indikationer af, om stoffet besidder disse egenskaber (Danish EPA, 2002)

Solvent Red er opført på Miljøstyrelsens liste til selvklassificering fra 2000. Klassificeringen viser, at stoffet kan give mulighed for varig skade på helbredet og kan give overfølsomhed ved kontakt med huden (Xn, Sundhedsskadelig med R40: Mulighed for varig skade på helbred samt R43: Kan give overfølsomhed ved kontakt med huden).

I henhold til den danske klassificering skal Solvent Red 111 bruges med en vis varsomhed, mens (Martin *et al.* 1983) tilsyneladende ikke kan finde noget, der tyder på, at stoffet kan være betænkeligt at bruge. Ifølge klassificeringen skal der ved arbejde med Solvent Red 111 tages forholdsregler i brug, så der er så lidt mulig hudkontakt med stoffet. Da det samme gælder for de tre brændstoftyper, anses det ikke for et væsentligt problem.

4.1.4 Miljømæssige egenskaber

Solvent Red 111 har en høj log Kow værdi, 4,1, og kan derfor blive betegnet som potentielt bioakkumulerende. Estimat af bioakkumuleringen indikerer en BCF på 41, hvilket er forholdsvis lavt og det vil sige baseret på molekylstrukturen forventes stoffet at være lavt til moderat bioakkumulerende.

Solvent Red 111 er let nedbrydelig ved anaerobe forhold i sediment. Halveringstiden ligger på nogle få dage, mens halveringstiden for nogle af nedbrydningsprodukterne er på nogle få måneder (Baughman og Weber 1994).

Den akutte toksicitet er estimeret for stoffet (Danish EPA, 2002). De estimerede værdier er en LC_{50} for alger på 1,74 mg/liter, for daphnier på 2,46 mg/liter og for fisk på 1,99 mg/liter. Disse værdier indikerer således at toksiciteten i vandmiljøet ligger lidt under, hvad der kan findes for olieprodukter.

Solvent Red 111 giver ikke umiddelbart nogen betænkeligheder med hensyn til at blive frigivet i naturen, da det har en halveringstid under anaerobe forhold på nogle få dage. Der er dog et lille men, som går på nedbrydningsprodukterne. Der foreligger ikke dokumentationen nok på nedbrydningsprodukterne til at kunne konkludere noget entydigt. Der findes heller ingen data på, hvor giftige de er.

Det bemærkes, at der tales om let nedbrydelighed, som betyder, at molekylet hydrolyseres eller at methyl- eller aminomethylgruppen fjernes eller erstattes med anden molekyle. Den ultimative nedbrydning af grundstrukturen (ringstrukturen) foregår væsentligt langsommere, antagelig med en halveringstid på måneder, dvs. at stoffet vil kunne genfindes få år efter tilførsel til f.eks. jord.

Adsorptionen er skønnet at være lav, men tages den lave vandopløselighed i betragtning, antages stoffet at følge olie/benzinfraktionen.

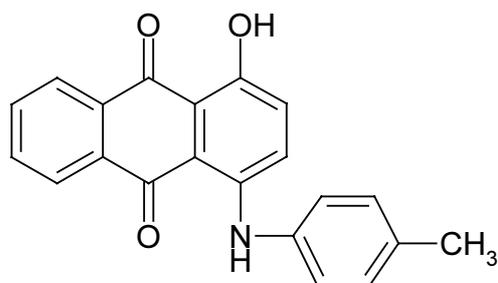
4.2 SOLVENT VIOLET 13

Solvent Violet 13 bliver brugt til at farve plast (HSDB). Endvidere anvendes det som farvestof i kosmetiske produkter (Danish EPA, 2002).

4.2.1 Identitet

Solvent Violet 13 er af stoftypen anthraquinon. Det har Colour Index nr. 60725 og CAS nr. 81-48-1. Det er opført på EINECS-listen med nr. 201-353-5.

Solvent Violet 13 har en molekylvægt på 329,4, og sumformlen $C_{21}H_{15}O_3N$. Solvent Violet 13's struktur kan ses i Figur 4.2.



FIGUR 4.2 SOLVENT VIOLET 13: 1-HYDROXY-4-((METHYLPHENYL)AMINO)-ANTHRAQUINON

4.2.2 Fysiske og kemiske egenskaber

Stoffets smeltepunkt er estimeret til 220 °C og dets kogepunkt til 516 °C (Danish EPA, 2002).

Damptrykket er estimeret til $1,4 \times 10^{-9}$ Pa og vandopløseligheden til 0,003 mg/liter. (Danish EPA, 2002).

Med hensyn til fordeling af stoffet i olie og vand viser estimatet for $\log K_{ow}$ en værdi på 6,24, hvilket viser at det meste stof vil findes i oliefasen. Adsorptionskoefficienten $\log K_{oc}$ er estimeret til 3,8, hvilket ligger tæt på den estimerede middelværdi for kulbrinter i olieprodukter, - se bilag A.

Henrys konstant er estimeret til 1×10^{-8} Pa·m³/mol, hvilket viser, at stoffet stort set ikke findes i luftfasen, men primært forventes at befinde sig i vandfasen. Halvveringstiden for atmosfærisk oxidation er meget kort, 0,05 dage. Ved Mackay er fordelingen estimeret til at fordele sig ligeligt mellem jord og sediment.

4.2.3 Sundhedsmæssige egenskaber

Der er ikke fundet akut oral eller lignende eksperimentelle data. Der er fundet en LD_{50} på 512 mg/kg i en interperitoneal test på mus (Sax 1992). Stoffet er angivet som hudsensibiliserende i HSDB. I test med *Salmonella typhimurium* er der fundet mutationer ved 25 µg/plade (Sax 1992).

Estimater for akut giftighed viser, at stoffet ikke er potentielt giftigt ved indtagelse (LD_{50} , oral rotte = 2.500 mg/kg). Estimater for længere tid påvirkning viser det samme ($LOAEL$ = 332 mg/kg) (Danish EPA, 2002).

Estimater viser ligeledes, at stoffet ikke forventes at være hudirriterende, men at det er sensibiliserende og kan forårsage allergi ved indånding. Ligeledes tyder estimaterne på, at stoffet ikke vil forårsage reprotoksiske eller teratogene effekter, mens estimaterne for mutagene og kræftfremkaldende egenskaber er uklare.

Solvent Violet 13 er klassificeret R43: Kan give overfølsomhed ved kontakt med huden, ifølge Miljøstyrelsens vejledende liste til selvklassificering fra 2000.

4.2.4 Miljømæssige egenskaber

Der er ikke fundet resultater fra økotoksikologiske tests. Den lave skønnede vandopløselighed betyder, at estimeret af økotoksiciteten er behæftet med betydelig usikkerhed. US-EPA's model ECOSAR for neutrale organiske stoffer skønner en værdi for akutte og kroniske effekter for fisk, dafnier og alger i niveauet 0,1-1 mg/l. Estimerterne er usikre pga. den høje log Kow.

En høj estimeret log Kow på 6,4 indikerer, at SV 13 er potentielt bioakkumulerende, hvilket støttes af et QSAR estimat med en BCF på 1826. Adsorption til jord er høj med en estimeret Koc 5800 svarende til log Koc 3,8.

Solvent Violet 13 er klassificeret miljøfarlig ifølge Miljøstyrelsens vejledende liste til selvklassificering fra 2000. Klassificeringen er : Giftig for organismer, der lever i vand; Kan forårsage uønskede langtidsvirkninger i vandmiljøet (N51/53).

Solvent Violet 13 giver grund til betænkelighed ved anvendelse i brændstof, da det ikke vides med sikkerhed, hvor opløseligt det er i vand kombineret med, at det er giftig for vandorganismer og kan give anledning til langtidsvirkning på vandmiljøet.

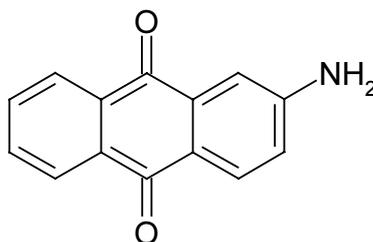
4.3 2-AMINOANTHRAQUINON

2-Aminoanthraquinon bliver brugt som farvestof, og er et mellemprodukt (intermediat) i den farmaceutiske industri. (HSDB). Stoffet fremtræder som røde eller orange-brune nåleformede krystaller.

4.3.1 Identitet

2-Aminoanthraquinon er af stoftypen anthraquinon. Det har CAS nr. 117-79-3 og EINECS-nr. 204-208-4. 2-Aminoanthraquinon har en molekylvægt på 223,2 g/mol, og sumformlen $C_{14}H_9NO_2$.

2-Aminoanthraquinon's struktur kan ses i Figur 4.3.



FIGUR 4.3 2-AMINOANTHRAQUINON

4.3.2 Fysiske og kemiske egenskaber

Smeltepunktet for 2-Aminoanthraquinon er 302°C (Lewis, 1993). Kogepunktet er estimeret til 406°C (Danish EPA, 2002).

Vandopløseligheden er bestemt til 0,16 mg/l ved 25°C (Shimizu, 1987) og stoffet har et damptryk på $6,67 \times 10^{-9}$ Pa .

Stoffet har en log Kow på 3,3 (Chemical Inspection and Testing Institute, 1992), hvilket betyder, at stoffet overvejende vil findes i organiske medier og i mindre grad i vand. Baseret på en målt log Kow er log Kow estimeret til 3,2, hvilket viser at stoffet let adsorberes til jord. Henrys konstant er estimeret på basis af målte størrelse for vandopløselighed og damptryk til 9×10^{-6} Pa·m³/mol, hvilket indikerer, at stoffet primært vil findes i væskefasen og ikke i luftfasen. Halveringstiden ved atmosfærisk oxidation er meget kort (0,25 dage, Danish EPA 2002).

Ovennævnte betyder, at stoffet er fast og ikke fordamper ved de temperaturer, som normalt forefindes i jorden. Stoffet er ikke særligt opløseligt i vand, hvilket sammen med en høj Koc indikerer, at 2-Aminoanthraquinon ikke kan forventes at være særligt mobil.

4.3.3 Sundhedsmæssige egenskaber

2-Aminoanthraquinon har en lav akut giftighed ved indtagelse. Et forsøg viser oral rotte TDL₀ 115.000 mg/kg (Sax 1992) og for mus TDL₀ 655.000 mg/kg (Sax 1992). Et estimat for LD₅₀ (oral, rotte) ligger på 3.100 mg/kg (Danish EPA, 2002), hvilket ligger på linier med de eksperimentelle data.

Stoffet virker ikke irriterende, men kan forårsage sensibilisering ved hudkontakt. Der er ingen indikationer for sensibilisering ved indånding (Danish EPA, 2002).

Det amerikanske NCI har undersøgt 2-aminoanthraquinon i et 2 årigt carcinogenicitets forsøg, hvor rotter og mus eksponeredes via føden i 78 –80 uger. Stoffet var carcinogent i både rotter og mus, og gav hepatocellulære carcinomer i begge køn og maligne lymphomer hos hunner (NCI 1978). Undersøgelse afvises dog af IARC på grund af teststoffets manglende renhed, og fordi rent 2-aminoanthraquinon ikke er mutagen overfor *Salmonella typhimurium* (IARC 1982).

Ifølge IARC er stoffer placeret i gruppe 3, hvilket betyder at der er mistanke om at stoffet kan være kræftfremkaldende, men at dokumentationen herfor er mangelfuld.

Der findes ikke epidemiologiske data for mennesker på trods af anvendelse siden 1921 i industrien. Det anbefales dog, at man behandler stoffet med forsigtighed (IARC 1982, Sendelbach 1989).

Estimerer viser, at det må forventes, at stoffet ikke har reproduktionsskadende eller teratogene effekter (Danish EPA, 2002).

Ud fra ovenstående, vurderes, at 2-aminoanthraquinon ikke forventes, at udgøre en større sundhedsrisiko end de øvrige komponenter, der indgår i de tre brændstoffer.

4.3.4 Miljømæssige egenskaber

Data for økotoksiske virkninger er begrænsede. Der er fundet akut testresultater for dafnier. 2-Aminoanthraquinon har en 48 timers EC₅₀ værdi for dafnier på >378 mg/l i et gennemstrømningsforsøg (EPA). Værdien må dog anses for tvivlsom, eftersom den er væsentlig over den målte vandopløselighed. QSAR estimerer af toksiciteten overfor vandlevende organismer antyder dog også akutte værdier over vandopløseligheden (1-10 mg/l) og kroniske værdier omkring samme niveau som vandopløseligheden. Værdierne er estimeret som

”baseline toxicity” for aromatiske aminer (ECOSAR, US-EPA), dvs. at værdierne forventes at være større end estimeret.

2-Aminoanthraquinon har en $\log K_{ow}$ værdi på 3,3 (Chemical Inspection and Testing Institute, 1992), og stoffet betegnes derfor som værende potentiel bioakkumulerende.

Under aerobe forhold forventes 2-aminoanthraquinon ikke at være let nedbrydeligt. Modelberegninger antyder, at nedbrydningshastigheden er den samme som for flertallet af øvrige indholdsstoffer i brændstoffer.

2-Aminoanthraquinon er let nedbrydelig ved anerobe forhold i sediment. Halveringstiden ligger på nogle få dage, mens halveringstiden for nogle af nedbrydningsprodukterne er på nogle få måneder (Baughman og Weber 1994).

2-Aminoanthraquinon forventes, at blive nedbrudt i samme takt som de fleste hydrocarboner selv om en enkelt undersøgelse tyder på, at stoffet er hurtigere nedbrudt under anaerobe forhold.

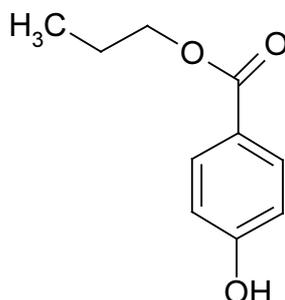
Der foreligger ikke dokumentation på nedbrydningsprodukterne til at kunne konkludere noget entydigt om deres påvirkning på miljøet.

4.4 PROPYL PARABEN

Parabenerne er estere af 4-hydroxybenzoesyre. Propyl paraben bliver brugt som konserveringsmiddel i fødevarer og kosmetiske produkter og som fungicid. Propyl paraben bruges sammen med methyl paraben i shampoo som konserveringsmiddel i koncentrationer under 0,2%.

4.4.1 Identitet

Propyl paraben har CAS nr. 94-13-3. Det er opført på EINECS-listen med nr. 202-307-7. Propyl paraben har en molekylvægt på 180,2, og sumformlen $C_{10}H_{12}O_3$. Propyl parabens struktur kan ses i Figur 4.4.



FIGUR 4.4 PROPYLPARABEN: 4-HYDROXY-BENZOEYSYRE PROPYLESTER

4.4.2 Fysiske og kemiske egenskaber

Stoffet fremtræder som hvide krystaller. Smeltepunktet for propyl paraben ligger på 96-97°C (Budavari, S.,1989). Kogepunktet er estimeret til 285°C (Danish EPA, 2002).

Vandopløseligheden er estimeret af Suzuki (1991) til 463 mg/l ved 25°C og af den danske miljøstyrelse (2002) til 529 mg/l. Damptrykket er estimeret til 0,08 Pa. Har et stof et damptryk på over 0,01 Pa betegnes det potentielt fordampeligt. Damptrykket for propylparaben ligger på niveau med andre komponenter i olieprodukter (tæt på 25% meridianen for de stoffer, der er anført i bilag A).

Med hensyn til octanol/vand fordelingskoefficienten er log K_{ow} bestemt til 3,04 (Hansch og Hoekman, 1995). Et QSAR estimat ligger på samme niveau, 2,98 (Danish EPA, 2002).

Adsorptionskoefficienten log K_{oc} er estimeret til 2,63. En adsorptionskoefficient på 2,63 indikerer en moderat adsorption til jord og en langsom udvaskning kan ikke udelukkes. En vurdering baseret på Mackay I fordelingsmodel (Mackay 1991) antyder at stoffet i en ligevægtssituation ville fordele sig med ca. 49% i jord, 50% i vand og 1% i luft. Baseret på listen over udvalgte kulbrinter (Bilag A) kan det ses at propylparaben ligger lidt over 25 percentilen, dvs. at ca. 25% af de udvalgte kulbrinter har en K_{oc} mindre end 2,6. Stoffet ligger derfor indenfor intervallet for indholdsstoffer i olie og benzin selvom en bedre adsorption kunne have været ønskelig.

Henrys konstant er estimeret til 0,001 Pa·m³/mol (Danish EPA, 2002). Halveringstiden for atmosfærisk oxidation er kort (0,7 dage).

4.4.3 Sundhedsmæssige egenskaber

Stoffet er ikke akut giftigt ved indtagelse. Af akut orale forsøg foreligger et på med LD₅₀ 6000 mg/kg for hund (Sax 1992) og LD₅₀ 6000 mg/kg for kanin (Sax 1992). I subkutane forsøg er der for mus observeret en LD₅₀ på 1650 mg/kg. Stoffet vurderes giftigt ved intraperitoneal og moderat giftigt ved subkutan indgiftning (Sax 1992). Disse eksperimentelle data støttes af en estimeret værdi for akut indtagelse på 1200 for LD₅₀ rotte (Danish EPA, 2002)

Propylparaben er erkendt som hudirriterende med et lavt sensibiliserende potentiale. Parabenerne er en generisk klasse, som erkendes at være sjældent hudsensibiliserende på intakt hud, men kan være det på skadet hud. Oral indgivelse kan udløse eksisterende hudproblemer (BIBRA 1989). Der er ingen indikationer for allergiske reaktioner ved indånding (Danish EPA, 2002).

Der er ikke fundet data på, om propylparaben er kræftfremkaldende. I orale langtidsforsøg var der ingen indikationer på carcinogenitet. Propylparaben er ikke mutagen i Ames test, men er ikke undersøgt for reproduktionsskadelige effekter (BIBRA 1989, Madsen *et al.* 2001). Estimerer indikerer, at stoffet ikke forårsager reprotoxiske eller teratogene effekter (Danish EPA, 2002).

Da Propylparaben har en lav akut giftighed, og der ikke umiddelbart er noget, der tyder på, at stoffet er mere kræftfremkaldende end de øvrige komponenter, der indgår i brændstoffer, kan det godt anbefales, som markør i brændstof.

4.4.4 Miljømæssige egenskaber

Der er kun fundet få økotox data for propylparaben. For akut dafnier (*Daphnia magna*) er LC₅₀ (48 t) 15,4 mg/l og for alger (*Pseudokichneriella subcapitata*) IC₅₀ (72 t) 15 mg/l. For fisk (*Idus idus melanotus*) er der fundet en 96

timers NOEC på 5 mg/l (Madsen *et al.* 2001). Propyl paraben må derfor anses for skadeligt for vandlevende organismer.

Propyl paraben har en log Kow værdi på 3,04 (Hansch og Hoekman, 1995), og stoffet må vurderes som værende lavt til moderat potentielt bioakkumulerende.

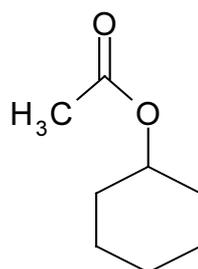
Der er fundet data på propyl parabens nedbrydelighed, som viser, at propyl paraben er let nedbrydeligt i OECD test under aerobe forhold, men lavt nedbrydeligt under anaerobe forhold. QSAR estimater indikerer også, at stoffet forventes at være let nedbrydeligt (Danish EPA 2002).

4.5 CYCLOHEXYLACETAT

Cyclohexylacetat er et organisk opløsningsmiddel, der primært anvendes i celluloseether og nitrocellulose. Det bliver desuden brugt som opløsningsmiddel for en række produkter såsom malinger, lakker, forskellige plasttyper og metalliske sæber.

4.5.1 Identitet

Cyclohexylacetat har CAS nr. 622-45-7. Det er opført på EINECS-listen med nr. 210-736-6. Cyclohexylacetat har en molekylvægt på 142,2, og med sumformlen $C_8H_{14}O_2$. Cyclohexylacetat's struktur kan ses i Figur 4.5.



FIGUR 4.5 CYCLOHEXYLACETAT

4.5.2 Fysiske og kemiske egenskaber

Smeltepunktet for Cyclohexylacetat ligger på $-65^{\circ}C$ (Flick,1991) og kogepunktet på $173^{\circ}C$ (Lide, D.R. 1995-1996).

Der er ikke fundet målte værdier for vandopløseligheden; den er estimeret til 454 mg/liter (Danish EPA, 2002). Et andet estimat angiver en vandopløselighed på 728 mg/l ved $25^{\circ}C$. Stoffet er opløseligt i alkoholer, ethere og andre organiske opløsningsmidler og er således fuldt blandbart med olieprodukter.

Der er fundet 2 ekstrapolerede værdier for damptrykket. Det ene er på 1440 Pa (Ohe 1976), og det andet ligger på 1466 Pa (Ohe, 1976) Det ligger således indenfor destillationsintervallet for benzin, men højere end for de tungere olietyper. Dette betyder, at stoffet kan fordampe, men på grund af dets evne til at binde sig til organiske overflader reduceres nedbrydeligheden væsentligt i jorden.

Stoffets fedtopløselighed er estimeret ved log Kow til 2,64 (Danish EPA, 2002), hvilket ligger på linie med de øvrige vurderede stoffer.

Adsorptionskoefficienten log Koc er estimeret til 1,86 (Danish EPA, 2002), hvilket er lidt lavere end ønsket.

Henry's konstant er estimeret til 31 Pa·m³/mol, hvilket indikerer, at stoffet i stor udstrækning vil fordampe og findes i luften.

4.5.3 Sundhedsmæssige egenskaber

Stoffet betegnes som ikke akut giftigt ved indtagelse. Den akutte toksicitet er baseret på oral LD₅₀ 6730 mg/kg for rotte (Sax 1992). Ved subkutan indgiftning er der fundet en LD₅₀ 606 mg/kg for kat (Sax 1992). Estimerede værdier ligger over 2000 mg/kg for LD₅₀, oral, rotte for akut toksicitet og over 200 mg/kg for subakut toksicitet.

Stoffet er svagt hudirriterende med en dermal LD₅₀ 10 g/kg på kanin (Sax 1992). Dette støttes af estimater, der indikerer, at stoffet kan være irriterende ved hudkontakt, men ikke forårsager sensibilisering eller allergiske reaktioner (Danish EPA, 2002).

Ved inhalation er der på mennesker fundet en TCL₀ 3000 mg/m³ (Sax 1992) med slimhindeirritation og uspecificerede ændringer i respirationsvejene, som dog forsvandt efter eksponeringens afslutning. Indånding af dampe kan give irritationer af luftvejene og har svagt nerveskadende effekter ved høje koncentrationer.

Stoffet besidder ikke reprotoksiske eller teratogene effekter baseret på estimater. Med hensyn til mutagene effekter viser de estimerede størrelser ingen klar tendens (Danish EPA, 2002).

4.5.4 Miljømæssige egenskaber

Der er fundet få eksperimentelle data for de akutte økotoksiske effekter. Cyclohexylacetat har en 24 timers LC₅₀ værdi for dafnier på 330 mg/l og en LC₅₀ (48 timer) for fisk på 70 mg/l (Aquire, US-EPA). Da disse værdier er for en kortere tids eksponering end normalt anvendt ved klassificering og vurdering, kan de ikke tages umiddelbart for pålydende. Ved en normalt anvendt eksponeringsperiode må det forventes at værdier vil være lavere og under alle omstændigheder under grænsen på 100 mg/l, der anvendes ved klassificering. Det vurderes derfor, at cyclohexylacetat er skadeligt for vandlevende organismer.

Estimerede værdier viser 96 timers LC₅₀ for fisk på 9,78 mg/liter, en 48 timers LC₅₀ for daphnier på 29,55 mg/liter og 96 timers EC₅₀ for alger på 0,8 mg/liter (Danish EPA, 2002). Som det ses er disse noget lavere end de eksperimentelle kort-tidsforsøg, hvilket bekræfter antagelsen, at stoffet er skadeligt for vandlevende organismer.

Cyclohexylacetat har en log Kow værdi, der er skønnet til 2,64, og stoffet betegnes derfor som lavt til moderat potentielt bioakkumulerende. Det støttes af, at bioakkumuleringsfaktoren BCF er estimeret til 22.

Adsorptionskoefficienten log Koc er estimeret til 1,86. Det betyder, at stoffet anses for at have en middel mobilitet. Stoffet vil dog kunne binde sig til fast

organisk stof og sediment, og derved reduceres muligheden for nedbrydende mikroorganismers adgang til stoffet.

Cyclohexylacetat er let biologisk nedbrydelig, men på grund af dets evne til at binde sig til organiske overflader reduceres nedbrydeligheden væsentligt i jorden.

5 Analysetekniske forhold

5.1 GASCHROMATOGRAFI

Jord- og grundvandsforureninger med olieprodukter analyseres oftest ved hjælp af gaskromatografi med enten Flammeionisationsdetector GC-FID eller med Massespektrometrisk detektion GC-MS.

Uanset hvilken af de to metoder, der anvendes, starter man med en ekstraktion af en jordprøve med et flygtigt organisk opløsningsmiddel som f.eks. methylenchlorid eller pentan. En prøve af ekstraktet injiceres derefter på instrumentet.

GC-MS metoden er meget velegnet til at identificere specifikke stoffer i meget lave koncentrationer medens GC-FID kun giver et ”fingeraftryk” og oplysninger om den samlede mængde kulbrinte. Enkelte stoffer er vanskelige at kvantificere i en olieblending med GC-FID metoden.

Et organisk opløsningsmiddel eller et andet relativt flygtigt organisk stof, der tilsættes brændstoffet som sporstof, vil relativt enkelt kunne genfindes ved hjælp af GC-MS. Det er ikke noget krav, at stoffet skal være et farvestof eller have andre specielle karakteristika; det skal blot være et veldefineret organisk flygtigt molekyle, som har et karakteristisk massespektrum. Dette betyder, at praktisk talt alle typiske organiske opløsningsmidler, der anvendes i industrien fx i farve- lakindustrien, og som ikke findes eller tidligere har været anvendt i brændstof, vil kunne anvendes som sporstof, set ud fra en analyseteknisk betragtning.

Mange farvestoffer derimod vil være vanskelige at identificere ved hjælp af GC/FID eller GC/MS, fordi disse stoffer som regel er relativt store og meget lidt flygtige organiske molekyler. Identifikation af farvestoffer kræver, at der anvendes en anden måleteknik, nemlig spektrofotometri.

5.2 SPEKTROFOTOMETRI.

Spektrofotometrisk identifikation af et farvestof i en jordprøve er i denne sammenhæng en smule upraktisk, idet man så skal anvende to forskellige analysemetoder for henholdsvis kulbrinterne (GC/FID eller GC/MS) og for farvestoffet (spektrofotometri).

Identifikation af et farvestof eller et andet stof med en karakteristisk lysabsorption kunne foregå ved at en jordprøve ekstraheres med et flygtigt organisk opløsningsmiddel. Herefter gennemføres en spektrofotometrisk analyse evt. efter en inddampning og yderligere oprensning af ekstraktet.

5.3 TYNDTLAGSKROMATOGRAFI

Det er muligt at adskille og identificere et farvestof fra et ekstrakt også ved hjælp af tyndtlagskromatografi, hvor en prøve af ekstraktet placeres på kromatografimediet, og farven efter kromatograferingen identificeres visuelt eller evt. under UV-lys.

5.4 DETEKTIONSGRÆNSER

I denne sammenhæng er det væsentligt at vide, hvilken koncentration stoffet skal tilsættes benzin, diesel eller fyringsolie for, at det kan identificeres i en jordprøve, der er forurenet med ovenfor nævnte olieprodukter.

Koncentration af kulbrinte i prøver af olieforurenet jord som analyseres på et miljølaboratorium er typisk op til ca. 5.000 mg/kg, men hovedvægten ligger omkring 1.000 mg olie pr kg jord. Ud fra denne typiske koncentration kan det overslagsmæssigt beregnes, hvilken koncentration sporstoffet skal tilsættes til produkterne, for at sporstoffet senere kan identificeres i jorden.

Det skal understreges, at der er tale om teoretiske beregninger, som bør eftervises ved praktiske forsøg.

5.4.1 GC/MS

I en GC/MS analyse af jordforurening vil man kunne genfinde specifikke organiske opløsningsmidler i en koncentration ned til 0,05 mg pr kg jord.

Ved en oliekoncentration på 1000 mg/kg betyder det, at sporstoffet skal findes i olieproduktet i en koncentration på mindst 50 ppm.

5.4.2 Spektrofotometri

Når man ekstraherer olie fra jord, vil man som oftest få et stærkt farvet ekstrakt, som bevirker det vil være vanskeligt eller umuligt at se tilstedeværelsen af et evt. farvestof. Farvestoffet vil dog ofte kunne identificeres på et spektrofotometer. Man vil formodentlig kunne identificere farvestof ned til en mængde omkring 0,005 mg.

Ved en ekstraktion af ca. 100 g jord med et olieindhold på 1000 mg/kg betyder det, at man skal tilsætte farvestoffet i en koncentration på omkring 50 ppm til produktet, for at kunne identificere det i jorden.

Der er adskillige usikkerhedsmomenter ved dette overslag, idet der ikke er taget hensyn til evt. absorption af farvestof på jordmatrice eller til interferens fra andet organisk materiale i jorden (tjære, humus m.m). Det er endvidere muligt at tage større prøve i anvendelse og på den måde forbedre detektionsgrænsen.

5.4.3 Tyndtlagskromatografi

Fra et farvet ekstrakt kan typiske farvestoffer udskilles ved hjælp af tyndtlagskromatografi og erkendes visuelt eller under ultraviolet lys. Detektionsgrænsen for denne analyse er meget vanskelig at estimere på grund af manglende erfaringer, men den forventes at være af en størrelsesorden på omkring 50 ppm farvestof i produktet.

Det må understreges at dette overslag er behæftet med stor usikkerhed.

5.4.4 Sporstoffer til markeringsformål

Sporstoffer til markeringsformål tilsættes almindeligvis i relativt lave koncentrationer, - 1 til 6 mg/l. Her vil man almindeligvis analysere direkte på en prøve af olieblandingen og da detektionsgrænsen ligger væsentligt under 1 mg/liter er dette acceptabelt.

Forholdene ved analyse direkte på olien kræver således en meget mindre mængde sporstof tilsat end ved olie, der skal genfindes i jord. Her må der forventes en fortynding på en faktor 1.000, da det som udgangspunkt er forudsat at jorden indeholder i størrelsesordenen 1 gram olie pr. kg jord.

5.5 SAMLET VURDERING

Den nødvendige mængde sporstof, der skal tilsættes for at sikre en fornuftig genfinding, er vanskelig at fastlægge. Ud fra antagelsen om at olieforurenet jord indeholder 1000 mg olie pr. kg jord viser overslagsberegninger at den nødvendige mængde sporstof ligger på et niveau omkring 50 ppm eller 50 mg/kg olie.

Da det er nødvendigt at tilsætte noget mere sporstof i denne sammenhæng end til almindelige markeringsformål kan det vise sig at farvestofferne er uegnede.

6 Praktisk anvendelse

I en motor er især indsprøjtningssystemet, katalysator og sonder særlig følsomme for urenheder i brændstoffet.

Tungtflygtige stoffer kan udfældes i indsprøjtningssystemet som en slags voks eller lak, og kan dermed forstyrre indsprøjtningen med dårlig brændstoføkonomi og øget forbrug til følge.

Man skal derfor have særlig fokus på tungtflygtige stoffer i høj koncentration.

Alle de foreslåede stoffer er letopløselige i benzin og diesel brændstof. De er relativt lette at tilsætte enten som rent stof eller i opløsning i et organisk opløsningsmiddel.

Anthraquinon derivaterne minder kemisk om stoffet quinizarin (Solvent Violet 12), der allerede tilsættes diesel og fyringsolie i Storbritannien (UK). Der er ikke fundet rapporterede uheldige erfaringer ved anvendelsen.

Propyl paraben og cyclohexylacetat er monocycliske forbindelser med et så højt damptryk, at der ikke forventes problemer ved anvendelsen i motorer.

7 Omkostninger

Ved en vurdering af omkostninger for tilsætning af sporstoffer til benzin, diesel og fyringsolie tages der udgangspunkt i et overslag over forbruget af de enkelte olieprodukter, den forventede mængde sporstof tilsat, samt prisen på de enkelte stoffer.

7.1 FORBRUGE AF OLIEPRODUKTER

Ifølge Energistyrelsens Energistatistik 2000 er det samlede energiforbrug til transport for år 2000 på 200.829 TJ. Af statistikken kan udtrækkes data for forbruget til vejtransport. Her er de væsentligste forbrug forbruget af motorbenzin og gas/dieselolie. Dette er vist i Tabel 7.1.

TABEL 7.1 FORBRUG AF BENZIN OG GAS/DIESELOLIE TIL VEJTRANSPORT

	Benzin	Gas/dieselolie
Forbrug i 2000 [TJ]	86.068 TJ	68.658 TJ
Brændværdi [GJ/ton]	43,5 GJ/ton	42,7 GJ/ton
Forbrug i 2000 [ton]	1.850.900 ton	1.607.900 ton
Massefylde [ton/m ³]	0,752 ton/m ³	0,833 ton/m ³
Forbrug i 2000 i m ³	2.461.000 m ³	1.930.000 m ³

Forbruget af fyringsolie fremgår ikke direkte af Energistyrelsens statistik. Statistikken er hovedopdelt på grupperne produktionserhverv, handels og serviceerhverv samt husholdninger. For disse grupper kan forbruget af gas/dieselolie og fuelolie opgøres. Gas/dieselolie anvendes til brændstof i biler, mens fyringsolie kan være både gas/dieselolie og fuelolie. Dette er vist i Tabel 7.2.

TABEL 7.2 FORBRUG AF GAS/DIESELOLIE OG FUELOLIE

	Gas/dieselolie	Fuelolie
Produktionserhverv	38.323 TJ	10.049 TJ
Handel og service	4.969 TJ	343 TJ
Husholdninger	30.275 TJ	36 TJ
Samlet forbrug i 2000 [TJ]	73.567 TJ	10.428 TJ
Brændværdi [GJ/ton]	42,7 GJ/ton	40,6 GJ/ton
Samlet forbrug i 2000 [ton]	1.722.900 ton	256.800 ton
Massefylde [ton/m ³]	0,833 ton/m ³	0,950 ton/m ³
Forbrug i 2000 i m ³	2.068.000 m ³	270.000 m ³

Af tabel 7.1 og 7.2 fremgår det således, at det samlede forbrug af benzin, gas/dieselolie og fuelolie er i størrelsesordenen:

Benzin	1,85 mio. tons svarende til 2,46 mio. m ³
Gas/dieselolie	3,33 mio. tons svarende til 4,0 mio. m ³
Fuelolie	0,26 mio. tons svarende til 0,27 mio. m ³

7.2 SPORSTOFMÆNGDE

Den mængde sporstof, der skal tilsættes olieprodukterne afhænger dels af analysemetoden for det pågældende stof for at genfinde det i olien, - men også hvilke mængder, der kræves for at genfinde det i jord.

For at genfinde sporstoffet i olien kræves det analyseteknisk, at der tilsættes i størrelsesordenen 50 mg/kg.

Om det er muligt at foretage en sikker identifikation i jord ved denne koncentration kan ikke afgøres. Dette kræver, at der udføres praktiske forsøg.

7.3 PRISER PÅ SPORSTOFFER

For hver af de 5 udvalgte farvestoffer er der taget kontakt til en række producenter, med henblik på at indhente priser på de enkelte stoffer.

Priserne afhænger betydeligt af mængde og leveringsbetingelser. Der er søgt oplysninger om levering af 1 ton af de pågældende stoffer, men ingen producenter har ønsket at opgive priser.

Ved kontakter til brugere af de respektive stoffer er der indhentet visse oplysninger.

Farvestofferne og herunder 2-aminoanthraquinon ligger på et niveau på 250-500 kr. pr kg. Da kravet til renhed ikke er afgørende, må det dog forventes, at prisen kan blive lavere.

Prisen på propylparaben ligger i størrelsesordenen på 50 kr. pr kg ved køb af 100-200 kg. Prisen for større mængder og lavere krav til renhed vil antagelig være noget lavere.

7.4 OMKOSTNINGER

I det følgende anslås at omkostninger til farvestoffer vil ligge på 250 kr/kg og for propylparaben på omkring 40 kr/kg.

Anvendes sporstoffet i en koncentration på 50 ppm, betyder det, at der i alt skal anvendes ca. 300 tons i Danmark.

Det betyder, at ud fra de givne antagelser om pris og koncentration vil omkostningerne til indkøb af farvestof være ca. 75 millioner kroner pr år. Omkostningerne pr. liter vil beløbe sig til 1,25 øre.

Omkostningerne til indkøb af methylparaben vil være omkring 12 mio. kr. pr. år. Omkostningerne pr. liter vil beløbe sig til 0,20 øre pr. liter.

Omkostninger ved tilsætning er estimeret ud fra følgende. Omkostninger til etablering af udstyr til tilsætning af sporstoffet anslås til 250.000 kr. pr. enhed (OFR, februar 2002). Forudsættes der etablering af 20 tilsætningsenheder med en levetid på 10 år og lineær afskrivning, vil omkostningerne ligge i størrelsesordenen 0,5 mio. kr.

Omkostninger til drift vil være minimale, da det forudsættes, at andre stoffer/forbindelser ligeledes skal tilsættes i lignende anlæg, og derfor passes og vedligeholdes samtidig. Omkostningerne skønnes til omkring 0,5 mio. kr. pr år.

De samlede driftsomkostninger vil derfor ligge i størrelsesordenen 1 mio. kr.

Samlet kan omkostningerne estimeres til:

- Ved tilsætning af farvestoffer som Solvent Red 111 og 2-aminoanthraquinon vil omkostningerne ligge på 50 til 100 mio. kr. pr. år.
- Ved tilsætning af et stof som propylparaben vil omkostningerne ligge på 10 til 15 mio. kr. pr. år.

Der skal gøres opmærksom på, at de givne omkostningsniveauer afhænger meget af den nødvendig tilsatte mængde samt leveringsbetingelser og kvalitet af det pågældende stof.

8 Samlet vurdering

8.1 MULIGE SPORSTOFFER

Blandt farvestofferne blev det valgt at gå videre med to anthraquinon derivater: Solvent Red 111 og Solvent Violet 13. Af ikke-farvestoffer blev udvalgt 2-aminoanthraquinon, propyl paraben og cyclohexylacetat.

8.1.1 Solvent Red 111

Solvent Red 111 (SR 111) er som navnet antyder et rødt farvepigment. Stoffets kemiske navn er 1-methylaminoanthraquinon.

De fysisk-kemiske egenskaber ligger indenfor de samme niveauer som brændstofferne. Damptrykket er lavt, så SR 111 kan ikke forventes at dampe af for tidligt. Der fandtes ikke data på nedbrydeligheden, men den estimerede nedbrydning ligger på samme niveau som for de fleste kulbrinter. En enkelt undersøgelse tyder på, at SR 111 kan nedbrydes relativt hurtigt under anaerobe forhold, men her hentydes til anoxisk sediment og relevansen kan diskuteres.

Sundhedsmæssigt er der visse ligheder med kendte carcinogene og mutagene PAH'er, men undersøgelser af det specifikke stof tyder på, at det ikke er tilfældet, når methylaminen er substitueret i position 1. De akutte data tyder på, at toksiciteten i øvrigt ligger indenfor det samme som for brændstofferne.

Der var ingen data på SR111s økotoksicitet. Den estimerede akutte toksicitet overfor vandlevende organismer ligger mellem 1 og 10 mg/l. Da der er tale om "baseline toxicity" estimerer, betyder det, at den reelle værdi kan ligge højere.

Stoffet anvendes i forvejen af militæret til farvning af røgsignaler (rød røg) under navnet Disperse Red 9. Det betyder, at der formentlig allerede er gennemført vurderinger af inhalation og andre sundhedsmæssige påvirkninger med et positivt udfald.

8.1.2 Solvent Violet 13

Solvent Violet 13 (SV 13) minder en del om Solvent Violet 12 (quinizarin), der allerede anvendes til mærkningsformål i Storbritannien (UK), blot er en hydroxyl gruppe erstattet af amino-(methylphenol).

Damptrykket er meget lille, og vandopløseligheden er meget lille (estimeret til 3 µg/l).

Oplysninger for effekter på mennesker er kun givet ved en intraperitoneal test, som tyder på moderat giftighed ved intraperitoneal indgift. Stoffet er angivet som hudirriterende, hvilket ikke adskiller SV 13 fra de fleste komponenter i brændstof. Muligheden for dannelse af benzenamin kan dog ikke udelukkes.

SV 13's giftighed overfor vandlevende organismer er estimeret til at ligge omkring 0,1-1 mg/l, hvilket er på samme niveau som visse kemiske komponenter

i brændstofferne. Værdierne er dog estimeret som minimum toxicitet ("baseline toxicity" og kan forventes at ligge højere. Det bemærkes desuden, at den estimerede toksicitet ligger over stoffets skønnede vandopløselighed ud fra en log Kow på over 6, hvilket gør estimaterne usikre.

8.1.3 2-aminoanthraquinon

2-Aminoanthraquinon har som de to forrige et lavt damptryk og en lav vandopløselighed. Stoffets adsorptionskoefficient er vurderet lav. Det kan betyde, at stoffet vil følge kulbrinterne på deres vej, da det er fuldt opløseligt i olieprodukterne.

Der fandtes ikke data på nedbrydeligheden, men den estimerede nedbrydning ligger på samme niveau som for de fleste kulbrinter. En enkelt undersøgelse tyder på, at 2-aminoanthraquinon kan nedbrydes relativt hurtigt under anaerobe forhold, men her henvises til anoxisk sediment og relevansen kan diskuteres. Molekylstrukturen minder så meget om kulbrinternes, at nedbrydningen under de fleste forhold vil forventes at være den samme.

Sundhedsmæssigt er der, på trods af et amerikansk 2 årigt rotteforsøg med indikation på carcinogene effekter, ikke noget, der tyder på, at stoffet er kræftfremkaldende. IARC har vurderet stoffet og indplaceret det i gruppe 3, hvilket betyder at stoffet er mistænkt for carcinogene effekter, men at dokumentationen er mangelfuld. Der henvises til, at stoffet har været anvendt i industrien som farvestof og som mellemprodukt i produktionen af lægemidler siden 1921.

Økotoksiciteten er lav. De fundne resultater tyder på, at toksiciteten overfor vandlevende organismer ligger over vandopløseligheden.

8.1.4 Propyl paraben

Propyl paraben er propylesteren af hydroxybenzoesyre. Stoffet har en højere vandopløselighed end ønskeligt (ca. 500 mg/l). En vurdering baseret på stoffets adsorptionskoefficient indikerer dog at stoffet vil fordele sig med ca. 49% i jord, 50% i vand og 1% i luft. Stoffets adsorptionsmæssige egenskaber ligger på linie med andre stoffer i olie og benzin, selvom en bedre adsorption kunne være ønskelig. Samlet vurderes de fysisk-kemiske egenskaber for stoffet derfor at være acceptable.

Sundhedsmæssigt har propyl paraben en lav akut toksicitet. Stoffet er hudirriterende, men der er ikke noget, der tyder på, at stoffet er mere problematisk end de øvrige komponenter, der indgår i brændstofferne.

Nye undersøgelser viser, at den akutte toksicitet overfor vandlevende organismer ligger mellem 10-20 mg/l og derfor indenfor samme niveau som brændstofferne, men dog må anses for skadelig for vandlevende organismer. Det bør bemærkes, at stoffet anvendes i hårshampooer

8.1.5 Cyclohexylacetat

Cyclohexylacetat er et almindeligt opløsningsmiddel og det eneste med et højt damptryk. Damptrykket ligger dog indenfor kulbrinternes interval. Vandopløseligheden er den højeste af de foreslåede stoffer (skønnet til 728 mg/l).

Den akutte orale toksicitet er lav. Irritation som følge af inhalation minder om de samme som ved kulbrinterne. Sundhedsmæssigt er der ingen væsentlige problemer til det foreslåede formål.

Miljømæssigt er stoffet letnedbrydeligt. Nedbrydeligheden antages dog at være lavere under naturlige forhold, hvor stoffet har en vis evne til adsorption.

8.2 ANVENDELSE OG OMKOSTNINGER

De nævnte mulige sporstoffer vil alle kunne genfindes ved almindeligt anvendt analyseteknik. Detektionsgrænsen ved den kemiske analyse ligger væsentligt under 1 mg/liter olie. Da olien i denne sammenhæng er opblandet i jord i koncentrationer på omkring 1.000 mg pr. kg er det nødvendigt at tilsætte højere koncentrationer end ved direkte analyse på olien. Det er vurderet at koncentrationer i størrelsesordenen 50 ppm er nødvendig for en sikker genfindning i jordprøver.

Omkostningerne er vurderet til ca. 250 kr. per kilo for Solvent Red 11 og 2-aminoanthraquinon, og ca. 40 kr./kg for propylparaben. Det betyder, at indkøbsprisen vil være omkring 1 øre/l brændstof for anthraquinonforbindelserne og omkring 0,2 øre pr. liter for propylparaben. De samlede omkostninger ligger i størrelsesordenen 75 mio. kr. for anthraquinonforbindelserne og i størrelsesordenen 10 mio. kr. for propylparaben.

8.3 ANBEFALINGER

De tre første stoffer er alle anthraquinon derivater. Af dem vurderes Solvent Red 111 og 2-aminoanthraquinon at være bedst egnede. Der er kun fundet få oplysninger om Solvent Violet 13 og de estimerede værdier for SV 13 er generelt dårligere end for de øvrige stoffer.

Solvent Red 111 fremhæves, fordi det allerede bruges i et omfang, der betyder, at det skulle kunne fås i tilstrækkelig mængde. Desuden er stoffet undersøgt for inhalationseffekter, som antyder at stoffet er mindre toksisk end andre anthraquinon derivater.

Det skal dog bemærkes at 2-Aminoanthraquinon er vurderet af IARC som muligt carcinogent, men at der mangler dokumentation herfor.

Begge stoffer er egnede som markører med hensyn til fysisk-kemiske egenskaber, og begge stoffer er blandbare med brændstoffer. Anthraquinon derivater anvendes i forvejen som markører, dvs. det er ikke ukendte stoffer for olieindustrien at håndtere eller anvende.

Af de to øvrige stoffer fremhæves specielt propylparaben. Propylparaben og cyclohexylacetat har en noget højere vandopløselighed end anthraquinon derivaterne, men begge er indenfor brændstoffernes niveau. Vandopløseligheden svarer nogenlunde til benzins, men er noget højere end for diesel og fyringsolie.

Propylparaben anvendes i dag i andre forbindelser, og det skønnes at være tilgængeligt i tilstrækkelige mængder til formålet.

Cyclohexylacetat har et forholdsvis højt damptryk, hvilket kan betyde, at stoffet vil opføre sig som de lette komponenter i brændstofferne. Stoffet kan derfor ikke anbefales i denne sammenhæng.

Genfinding af de 3 anførte stoffer:

- Solvent Red 111
- 2-Aminoanthraquinon
- Propyl paraben

vurderes at være gode. Farvestofferne (SR111 og 2-aminoanthraquinon) kan sandsynligvis genfindes ved hjælp af spektrofotometri, medens propyl paraben kan genfindes med samme analysemetoder som anvendes ved måling af olie/benzin i jord (GC/MS).

Det skal bemærkes at den nødvendige tilsætning af farvestof på i størrelsesordenen 50 ppm er væsentligt højere end man almindeligvis anvender til mærkeringsformål. Derfor kan det vise sig problematisk at anvende farvestoffer.

Det anbefales dog at foretage et praktisk forsøg til vurdering af genfindingen af det/de udvalgte sporstoffer.

Forsøget tænkes udført ved tilsætning af jord med 1000 ppm olie/benzin, som er en typisk koncentration ved olieforurenede jorde. Olien/benzinen er forinden tilsat mærkningsstoffet i koncentrationer på 10, 25, 50, 75 og 100 ppm. Prøveudtagningen foretages efter et passende tidsrum.

Et sådant forsøg vil kunne efterprøve detektionsgrænserne men også anvendes til fastlæggelse af den præcise koncentration, der er nødvendig for at genfinde stoffet i jord.

Referencer

American Petroleum Institute (1994): Transport and fate of non-BTEX petroleum chemicals in soil and groundwater. Washington, DC: API Publ No 4593.

Andersen (1994): Deponering af lettere forurenede jord. 1. Vurdering af olie og benzinfurenede jord. Arbejdsrapport fra Miljøstyrelsen nr. 48. Miljøstyrelsen, København.

Ashford, R.D (1994): Ashford's Dictionary of Industrial Chemicals. London, England: Wavelength Publications Ltd.

ASTDR (2001): Agency for Toxic Substances and Disease Registry, U.S. Department of Health and Human Services. (www.atsdr.cdc.gov). Internet database, november og december 2001:
<http://atsdr1.atsdr.cdc.gov:8080/gsql/sitecontam.script>

AT (2000): Grænseværdier for stoffer og materialer. At-vejledning, C.0.1, Oktober 2000. Arbejdstilsynet, København.

BASF (1996): Sikkerhedsdatablad for Sudan Marker 455, Flüssig, dateret 20/3-96. BASF

BASF (1997): Sikkerhedsdatablad for Sudan Blue 673, dateret 4/6-97, version 11.00. BASF

BASF (1998): Sikkerhedsdatablad for Sudan Blue 670, dateret 23/3-98, version 4.01. BASF

Baughman GL og Perenich TA (1988): Fate of dyes in aquatic systems: I. solubility and partitioning of some hydrophobic dyes and related compounds. Environ. Tox. Chem. 7: 183-199.

Baughman GL og Weber EJ (1994). Transformation of dyes and related compounds in anoxic sediment: Kinetics and products. Environ. Sci. Technol, 23: 267-276.

Beilstein (2001): Databasesøgning med hjælp fra Danmarks Teknisk Videnskabelige Bibliotek (DTV), Lundtofte København.

BIBRA (1989): Propylparaben. Toxicity profile. The British Industrial Biological Research Association PG:8 p
RISKLINE/1990100082

Budavari, S.(ed.) (1989): The Merck Index - Encyclopedia of Chemicals, Drugs and Biologicals. Rahway, NJ: Merck and Co., Inc.

Budavari, S. (ed.) (1996): The Merck Index - An Encyclopedia of Chemicals, Drugs, and Biologicals. Whitehouse Station, NJ: Merck and Co., Inc.. 261

Chemicals Inspection and Testing Institute. Japan Chemical Industry Ecology - Toxicology and Information Center. ISBN 4-89074-101-1 (1992)

CONCAWE (1996): Gas oils (diesel fuels/heating oils). Concaawe product dossier no. 95/107. Concaawe, Brussels.

CSTEE (1999): Opinion of the Scientific Committee on Toxicity, Ecotoxicity and the Environment (CSTEE) on Selection of a Community-wide mineral oils marking system ("Euromarker"): Safety of the preferred candidate, adopted at the 11th CSTEE plenary meeting on 28 September 1999.

Danish EPA (2002):- Chemical Structure Estimation System. QSAR estimator udført af Jay Niemela, Miljøstyrelsen.

Daubert, T.E., R.P. Danner. (1989): Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals Data Compilation. Washington, D.C.: Taylor and Francis.

Donovan SF (1996): J. Chromatogr A 749: 123-129

ECDIN (1993): Environmental Chemicals Data and Information Network, Joint Research Centre, Ispra, Italien. CD-rom database

ECOTOX (2001): EPA (Environmental Protection Agency) Internet database, november og december 2001 (<http://www.epa.gov/ecotox>)

EU (1998): Directive 98/70/EC of the European Parliament and of the Council of 13 October 1998 relating to the quality of petrol and diesel fuels and amending Council Directive 93/12/EEC. Official Journal L350, 28/12/1998, p. 58-68.

EU (2000): Commission Directive 2000/71/EC of 7 November 2000 to adapt the measuring methods as laid down in annexes I, II, III, and IV to Directive 98/70/EC of the European Parliament and of the Council to technical progress as foreseen in article 10 of that directive. Official Journal L287, 14/11/2000, p. 46-50.

Fischer T and Bjarnason B (1996): Sensitizing and irritant properties of 3 environmental classes of diesel oil and their indicator dyes. Contact Dermatitis 34; 309-315.

Flick, E.W. (ed.) (1991): Industrial Solvents Handbook 4 th ed. Noyes Data Corporation., Park Ridge, NJ.

Francis AJ (1982); Environmental Migration of Long-lived Radionuclides, Vienna, Austria: Inter Atomic Energy Agency IAEA-SM-257/72 pp. 415-29

Grön diesel (1995): Grön diesel – miljö och hälsorisker. Betänkande av Utredningen om märkningssystemet för vissa olieprodukter. Finansdepartementet, Statens Offentliga Utredningar. SOU 1995:3. Stockholm.

Hansch, C., Leo, A., D. Hoekman. (1995): Exploring QSAR - Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants. Washington, DC: American Chemical Society.

- Hansen OC, Pommer K, Lassen P (2001): Sporstoffer til benzin, diesel og fyringsolie – indledende screening. Miljøprojekt nr. 612. Miljøstyrelsen.
- Holliday (1994): Sikkerhedsdatablad for ”Quinizarine”. Holliday Dyes and Chemicals Ltd.
- HSDB (2001): Hazardous Substances Data Bank. Internet database, november og december 2001: <http://toxnet.nlm.nih.gov>
- IARC (1982): 2-aminoanthraquinone. IARC Monographs on the evaluation of the carcinogenic risk of chemicals to humans. 27, pp. 191-198.
- IARC (1987) Monographs on the evaluation of the carcinogenic risk of chemicals to man. P. S7 56
- IARC (1989): IARC monographs on the evaluation of carcinogenic risks to humans. Occupational exposures in petroleum refining, crude oil and major petroleum fuels. Vol 45. International Agency for Research on Cancer, Lyon.
- IUCLID (2000): International Uniform Chemical Information Database. CD-rom Version 2000. European Commission, European Chemicals Bureau, Joint Research Centre, Institute for Health and Consumer Protection. Ispra Italien.
- John Hogg (1998): Sikkerhedsdatablad for Dyeguard Blue 79, dateret 3/2-1998. John Hogg Technical Solutions Ltd.
- Kobayashi N, Taniguchi N, Sako F og Takakuwa E (1977): A screening method for the toxicity of food dyes using *Artemisia salina* larvae. J. Toxicol. Sci. 2: 383-390
- Lefaux, R (1968): Practical Toxicology of Plastics. Cleveland: CRC Press Inc., 1968. 137
- Lewis, R.J., Sr (Ed.) (1993): Hawley's Condensed Chemical Dictionary. 12th ed. New York, NY: Van Nostrand Reinhold Co., 1993 53
- Lide, D.R. (ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. 79th ed. Boca Raton, FL: CRC Press Inc., 1998-1999.,p. 3-141
- Mackay D (1991): Multimedia Environmental Models. Lewis Publ., Chelsea, MI, USA
- Madsen T, Boyd HB, Nylén D, Pedersen AR, Petersen GI, Simonsen F (2001): Environmental and health assessment of substances in household detergents and cosmetic detergent products. Miljøprojekt 615. Miljøstyrelsen.
- Martin BV, Ivie GW, Bailey EM (1983): The acute toxicity of 1-methylaminoanthraquinone in dogs and rabbits and its metabolism in sheep. Arch. Environ. Contam. Toxicol. 12: 499-507.
- MEM (2000): Bekendtgørelse om listen over farlige stoffer. Bekendtgørelse nr. 733 af 31. juli 2000. Miljø- og Energiministeriet.

- MEM (2000b): Bekendtgørelsen om klassificering, emballering, mærkning, salg og opbevaring af kemiske stoffer og produkter. Bekendtgørelse nr. 1065 af 30. november 2000. Miljø- og Energiministeriet.
- MEM (2001): Bekendtgørelse om Kvaliteten af benzin og diesellole til brug i motorkøretøjer. Bekendtgørelse nr. 77 af 15. januar 2001. Miljø- og Energi- ministeriet.
- MERCK (1996): Merck Indeks. 12th. Ed. Merck Research Laboratories
- Meylan WM, Howard PH; (1995): J Pharm Sci 84: 83-92
- Miljøstyrelsen 2000. Vejledende liste til selvklassificering.
- Morton (1994): Sikkerhedsdatablad for "Oilsol Quinizarine", dateret 7/7-1994. Morton International Ltd.
- Morton (1995): Sikkerhedsdatablad for Automate Blue 8GHF. dateret 15/11-1995. Morton International Ltd.
- NCI (1978): Bioassay of 2-aminoanthraquinone for possible carcinogenicity. National Cancer Institute Carcinogenesis Technical Report Series IP: VI:144 pp.:49 p
- OFR, Oliebranchen Fællesrepræsentation ved Flemming Ludvigsen, februar 2002.
- Ohe S; Computer Aided Data Book of Vapor Pressure. Data Book Publ Co, Tokyo, Japan (1976)
- PhysProp (2001): Syracuse Research Corporation, Syracuse, NY. Database Demo: <http://esc.syrres.com/interkow/webprop.exe>
- Roy WR (1994); pp. 411-46 in Adriano DC *et al.* (eds): Contaminated Groundwaters.. Northwood,UK: Sci Rev
- Sax NI and Lewis RJ, Sr. (1992): Dangerous Properties of Industrial Materi- als. 8th Ed. Van Nostrand Reinhold. New York.
- Sendelbach LE (1989): A review of the toxicity and carcinogenicity of an- thraquinone derivatives. Toxicology 57 (3): 227-240.
- Shaw DG (1989); International Union of Pure and Applied Chemistry. Solu- bility Data Series 38: 561
- Shimizu T *et al* (1987); J Soc Dyers Colour 103: 132-37
- Suzuki T;(1991) J Computer-aided Molecular Design 5:149-66
- Tonogai Y, Ito Y, Iwaida M, Tati M, Ose Y og Sato T (1979): Studies on the toxicity of coal-tar dyes. I. Photodecomposed products of four xanthene dyes and their acute toxicity to fish. J. Toxicol Sci. 4: 115-125.

Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. 5th Ed. 1993. VCH Verlagsgesellschaft.

USEPA/ECAO; Phthalate Atlas Report p.I-3 (1980)

Yap MGS *et al* (1992); Bioresour Technol 41: 45-51

Øllgaard H, Frost L, Galster J, Hansen OC (1999): Survey of azo-colorants in Denmark - Consumption, use, health and environmental aspects. Miljøprojekt nr. 509. Miljøstyrelsen

Bilag A: Data for udvalgte kulbrinter

Stof	B	D	F	Gruppe	Formel	CAS nr	MW g/mol	MP, °C	BP, °C	Masse- Fylde (g/cm ³ v. 20°C)
Eicosan				n-Paraffin	C20 H42	112-95-8	282,56	36,8	343,9	0,7842
n-Pentadecan				n-Paraffin	C15 H32	629-62-9	212,42	9,9	270,6	0,7684
n-Butylcyclohexan				Naphthen	C10 H20	1678-93-9	140,27	-74,7	180,9	0,7992
cis-Decalin				Naphthen	C10 H18	91-17-8	138,25	-30,6	187,3	0,8963
n-Pentylcyclopentan				Naphthen	C10 H20	3741-00-2	140,27	-82,8	181,1	0,7912
n-Decylcyclopentan				Naphthen	C15 H30	1795-21-7	210,41	-22,2	278,9	0,8110
n-Nonylcyclohexan				Naphthen	C15 H30	2883-02-5	210,41	-10,0	282,2	0,8160
n-Tetradecylcyclohexan				Naphthen	C20 H40	1795-18-2	280,54	24,0	360,0	0,8250
Butan	b			n-Alkan	C4 H10	106-97-8	58,12	-138,2	-0,5	
Pentan	b			n-Alkan	C5 H12	109-66-0	72,15	-129,7	36,0	
Hexan	b			n-Alkan	C6 H14	110-54-3	86,18	-95,3	68,7	
Buten	b			Mono-olefiner	C4 H8	25167-67-3	56,11	-145,0	-1,3	
2-Penten	b			Mono-olefiner	C5 H10	109-68-2	70,14	-140,2	36,3	
Propylen	b			Mono-olefiner	C3 H6	115-07-1	42,08	-185,2	-47,6	0,5193
1-Penten	b			Mono-olefiner	C5 H10	109-67-1	70,14	-180,0	35	
Methylbuten	b			Mono-olefiner	C5 H10	563-46-2	70,14	-137,5	31,2	
2,2-Dimethyloctane				Isoparaffin	C10 H22	15869-87-1	142,29	-49,3	155,0	0,7245
2-Methylnonadecan				Isoparaffin	C20 H42	1560-86-7	282,56	17,8	338,9	
Isobutan	b			Isoalkan	C4 H10	75-28-5	58,12	-138,3	-11,7	
Isopentan	b			Isoalkan	C5 H12	78-78-4	72,15	-159,9	27,8	
2,3-Dimethylbutan	b			Isoalkan	C6 H14	79-29-8	86,18	-128,8	57,9	0,6616
Dimethylhexan	b			Isoalkan	C8 H18	28777-67-5	114,23	-121,1	106,8	
Cyclopentan	b			Cycloalkan	C5 H10	287-92-3	70,14	-93,8	49,3	
Cyclohexan	b			Cycloalkan	C6 H12	110-82-7	84,16	6,6	80,7	
Methylcyclopentan	b			Cycloalkan	C6 H12	96-37-7	84,16	-142,5	71,8	
Dimethylcyclopentan	b			Cycloalkan	C7 H14	28729-52-4	98,19	-54,0	99,5	
Ethylcyclopentan	b			Cycloalkan	C7 H14	1640-89-7	98,19	-138,4	103,5	
Methylcyclohexan	b			Cycloalkan	C7 H14	108-87-2	98,19	-126,6	100,9	
Trimethylcyclopentan	b			Cycloalkan	C8 H16	30498-64-7	112,22	-21,6	114	
Benzen	b			Aromat	C6 H6	71-43-2	78,11	5,5	80	
Toluen	b	d		Aromat	C7 H8	108-88-3	92,14	-94,9	110,6	0,8669
Ethylbenzen	b			Aromat	C8 H10	100-41-4	106,17	-94,9	136,1	0,867
p-Xylen	b	d		Aromat	C8 H10	106-42-3	106,17	13,2	138,3	0,8611
m-Xylen	b	d		Aromat	C8 H10	108-38-3	106,17	-47,9	139,1	0,8642
o-Xylen	b	d		Aromat	C8 H10	95-47-6	106,17	-25,2	138,5	0,8802
n-Propylbenzen	b			Aromat	C9 H12	103-65-1	120,20	-99,5	159,2	
Trimethylbenzen	b	d		Aromat	C9 H12	25551-13-7	120,20	-44,7	164,7	
Methylnaphthalen			d	Aromat	C11 H10	1321-94-4	142,20	34	240	
1,3-Diethylbenzen	b			Aromat	C10 H14	141-93-5	134,22	-83,9	181,1	0,8693
Dimethylnaphthalen			d	Aromat	C12 H12	28804-88-8	156,23	1,6	265	
Biphenyl			d	Aromat	C12 H10	92-52-4	154,21	69	256,1	
Trimethylnaphthalen			d	Aromat	C13 H14	28652-77-9	170,26	100	263	
Dibenzothiophen				Aromat	C12 H8 S	132-65-0	184,26	97	332,5	
Phenanthren			d	Aromat	C14 H10	85-01-8	178,24	99,2	340	
Methylfluoren			d	Aromat	C14 H11	26914-17-0	179,24	84	325	
Methyldibenzothiophen			d	Aromat	C13 H10 S	30995-64-3	198,28	112	346	
Methylphenanthren			d	Aromat	C15 H12	31711-53-2	192,26	53,5	340	
Fluoranthren	b	d		Aromat	C16 H10	206-44-0	202,26	107,8	384	
Pyren	b	d		Aromat	C16 H10	129-00-0	202,26	151,2	404	
Dimethylphenanthren			d	Aromat	C16 H14	29062-98-4	206,29	109	351	
Anthracen	b			Aromat	C14 H10	120-12-7	178,24	215,0	339,9	0,1251
n-Nonylbenzene				Aromat	C15 H24	1081-77-2	204,36	-24,0	280,5	0,8551
Trimethylphenanthren			d	Aromat	C17 H16	30232-26-9	220,32	116	363	
Benz(a)anthracen	b	d		Aromat	C18 H12	56-55-3	228,30	84	437,6	
Benzo(e)pyren	b	d		Aromat	C20 H12	192-97-2	252,32	177,5	310	
Tetramethylphenanthren			d	Aromat	C18 H18	4466-77-7	234,34	128	375	

Stof	B	D	F	Gruppe	Formel	CAS nr	MW g/mol	MP, °C	BP, °C	Masse- Fylde (g/cm ³ v. 20°C)
Chrysen	b	d		Aromat	C18 H12	218-01-9	228,30	258,2	448	
Benzo(a)pyren	b	d		Aromat	C20 H12	50-32-8	252,32	176,5	311	
Benzo(b)fluoranthen	b			Aromat	C20 H12	205-99-2	252,32	168	443	
Benzo(ghi)perylene	b	d		Aromat	C22 H12	191-24-2	276,34	278	>500	
Coronen	b			Aromat	C24 H12	191-07-1	300,26	437,3	525	
N	38	23	0		61	61	61	61	61	19
Minimum							42,08	-185,2	-47,6	0,1251
Maksimum							300,26	437,3	525	0,8963
Middel							152,5	1,8	207,7	0,77
90%-ile							252,32	168	375,9	0,8715
75%-ile							206,29	97	339,15	0,8655
Median							140,27	-21,6	181,1	0,8160
STDV								127,2	140,3	0,1750
25%-ile							92,14	-95,3	94,8	0,7760

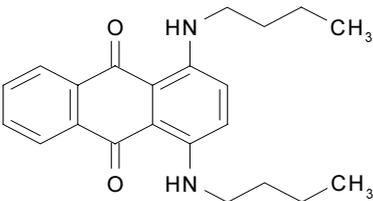
Tabel forsat:
(est.: QSAR estimeret værdi)

Stof	Gruppe	Damptryk Pa	Vandopl. Mg/l	Opl. est.	log Kow	Kow est.	log Koc	Koc Est.
Eicosan	n-Paraffin	0,00061		0,0019		10,16 est		5,895 Est
n-Pentadecan	n-Paraffin	0,4572		0,000076		4,57 est		4,566 Est
n-Butylcyclohexan	Naphthen	174,623		1,143 est		5,07 est		3,246 Est,
cis-Decalin	Naphthen	162,626		0,899		4,20 est		3,264 Est
n-Pentylcyclopentan	Naphthen	176 est		0,115		5,07 est		3,246 Est
n-Decylcyclopentan	Naphthen	1,3 est		0,00432 est		4,58 est		4,575 Est
n-Nonylcyclohexan	Naphthen	0,330584		0,00423 est		7,52 est		4,575 Est
n-Tetradecylcyclohexan	Naphthen	0,00016 est		0,0000139 est		9,98 est		5,904 Est
Butan	n-Alkan	242606		61,2		2,89		1,641 Est
Pentan	n-Alkan	68516,2		38		1,91 est		
Hexan	n-Alkan	20128,3		9,5		2,17 est		
Buten	Mono-olefiner	299925		221		2,40		1,641 Est
2-Penten	Mono-olefiner	67449,8		203		2,58 est		1,907 Est
Propylen	Mono-olefiner	1158377		200		1,77		1,376 Est
1-Penten	Mono-olefiner	84645,5		148		2,66 est		1,907 Est
Methylbuten	Mono-olefiner	81313		130		2,72 est		1,831 Est
2,2-Dimethyloctane	Isoparaffin	548 est		0,968 est		5,14 est		3,049 E
2-Methylnonadecan	Isoparaffin	0,0007 est		0,00001087 est		10,09 est		5,818 Est
Isobutan	Isoalkan	347913		48,8		2,76		1,545 Est
Isopentan	Isoalkan	91843,7		48		2,72 est		1,831 Est
2,3-Dimethylbutan	Isoalkan	31325,5		22,5		3,42		2,029 Est
Dimethylhexan	Isoalkan	4532,2		0,2		4,16 est		2,517 Est
Cyclopentan	Cycloalkan	42389,4		156		3,00		
Cyclohexan	Cycloalkan	12916,8		55		3,44		2,219 Est
Methylcyclopentan	Cycloalkan	18395,4		42		3,37		2,162 Est
Dimethylcyclopentan	Cycloalkan	6291,8		33,9 est		3,52 est		2,381 Est
Ethylcyclopentan	Cycloalkan	5305,3		29,4 est		3,59 est		2,448 Est
Methylcyclohexan	Cycloalkan	6131,8		14		3,61		2,428 Est
Trimethylcyclopentan	Cycloalkan	3226 est		12,6 est		3,97 est		2,553 Est
Benzen	Aromat	12636,8		1790		2,13		2,219 Est
Toluen	Aromat	3785,7		526		2,73		2,428 Est
Ethylbenzen	Aromat	1279,7		169		3,15		2,714 Est
p-Xylen	Aromat	1178,4		162		3,15		2,638 Est
m-Xylen	Aromat	1105,1		161		3,20		2,638 Est
o-Xylen	Aromat	1065,1		106		3,12		2,646 Est
n-Propylbenzen	Aromat	455,9		52,2		3,69		2,980 Est
Trimethylbenzen	Aromat	279,9		48,2		3,42		2,847 Est
Methylnaphthalen	Aromat	8,9		25,8		3,87		3,483 Est
1,3-Diethylbenzen	Aromat	150,6		24		4,57		3,210 Est
Dimethylnaphthalen	Aromat	1,69		14,85 est		4,31		3,701 Est
Biphenyl	Aromat	1,19		6,94		3,98		3,796 Est
Trimethylnaphthalen	Aromat	0,34 est		4,78 est		4,81 est		3,910 Est
Dibenzothiophen	Aromat	0,027		1,47		4,38		4,053 Est
Phenanthren	Aromat	0,015		1,15		4,46		4,319 Est
Methylfluoren	Aromat	0,018 est		0,51 est		4,60 est		4,262 Est
Methyldibenzothiophen	Aromat	0,003 est		0,3276 est		4,71 est		4,262 Est
Methylphenanthren	Aromat	0,016 est		0,269		5,08		4,537 Est
Fluoranthren	Aromat	0,00123		0,26		5,16		4,850 Est
Pyren	Aromat	0,00060		0,135		4,88		4,841 Est
Dimethylphenanthren	Aromat	0,00243 est		0,0713 est		5,44 est		4,755 Est
Anthracen	Aromat	0,00036		0,0434		4,45		4,310 Est
n-Nonylbenzene	Aromat	0,761		0,03521 est		7,11		4,575 Est
Trimethylphenanthren	Aromat	0,0011 est		0,02053 est		5,99 est		4,974 Est
Benz(a)anthracen	Aromat	0,00025327		0,0094		5,76		5,364 Est
Benzo(e)pyren	Aromat	0,00000076		0,0063		6,44		5,905 Est
Tetramethylphenanthren	Aromat	0,00042 est		0,00588 est		6,53 est		5,201 Est
Chrysen	Aromat	0,00000083		0,00345		5,81		5,373 Est
Benzo(a)pyren	Aromat	0,00000073		0,00162		6,13		5,896 Est
Benzo(b)fluoranthren	Aromat	0,00006665		0,0015		5,78		5,905 Est
Benzo(ghi)perylen	Aromat	0,000000013		0,00026		6,63		6,428 Est
Coronen	Aromat	1,13E-11		0,00014		7,64		6,950 Est

Stof	Gruppe	Damptryk Pa	Vandopl. Mg/l	Opl. est.	log Kow	Kow est.	log Koc	Koc Est.		
N		61	61	13	61	17	61	26	58	58
Min		1,13705E-11	0,00001087		1,77		1,376			
Max		1158377	1790		10,16		6,95			
Middel		42889,26	74,94		4,53		3,66			
90%-ile		81313	162		6,63		5,90			
75%-ile		6291,76	48,8		5,16		4,71			
Median		162,63	4,78		4,31		3,37			
STDV		158628,62	237,73		1,88		1,45			
25%-ile		0,0024	0,035		3,15		2,43			

Bilag B: Data for farvestoffer

SOLVENT BLUE 35

Solvent Blue 35		
Farvestofgruppe: Anthraquinon derivater.		
1,4-bis(butylamino)-anthraquinon		
CI nr. 61554		
CAS nr. 17354-14-2		
EINECS. 241-379-4		
FYSISK-KEMISKE EGENSKABER	Data	Bemærkning
Molvægt	350,5 g/mol	
Smeltepunkt	213°C (estimeret)	QSAR estimat (US-EPA)
Kogepunkt	500°C (estimeret)	QSAR estimat (US-EPA)
Damptryk	3,8 E-08 Pa (estimeret)	QSAR estimat (US-EPA)
Vandopløselighed	0,00034 mg/l (estimeret)	QSAR estimat (US-EPA)
Log K _{ow}	7,2 (estimeret)	Physprop
Nedbrydelighed	Ingen data	
ØKOTOX		
LC ₅₀	Ingen data	QSAR estimater - se tabel nedenfor
HUMANTOX		
LC ₅₀	Oral, rotte: >5000 mg/kg Inh., rotte: >4000 mg/l/t	BASF 1998
CARCINOGENITET		
Test resultater	Ingen data	
Andet	Klassificering: Mut3, Carc3 R40 (vejledende liste, MST)	

Solvent Blue 35 markedsføres af BASF under handelsnavnet Sudan Blue 670. Produktet forhandles i pulverform.

Sundhedsvurdering

BASFs sikkerhedsdatablad angiver for akut toksicitet: Oral, rotter >5000 mg/kg, Inhalation i rotter til > 4000 mg/l per time. Farvestoffet er ikke fundet hudirriterende i en intern BASF test på kaniner. Der er ikke fundet øjenirritation eller primær påvirkning af slimhindemembranen hos kaniner (BASF Sudan Blue 670, 1998).

Miljøvurdering

Der er ikke fundet resultater fra økotoxikologiske tests. Den lave vandopløselighed (skønnet til 0,3 µg/l) og høje log K_{ow} betyder, at estimater af økotoxiciteten er behæftet med betydelig usikkerhed. US-EPAs model ECOSAR for neutrale organiske stoffer skønner en værdi for akutte og kroniske effekter for fisk, dafnier og alger i niveauet 1-10 µg/l, dvs. over den estimerede vandopløselighed.

ECOSAR estimat af økotoxicitet

	Organisme	Varighed	Effekt	Estimeret niveau
Akut	Fisk	96 timer	LC50	0,003 mg/l
	Dafnier	48 timer	EC50	0,005 mg/l
	Alger	96 timer	IC50	0,004 mg/l
Kronisk	Fisk	30 dage	NOEC	0,001 mg/l
	Dafnier	16 dage	EC50	0,003 mg/l

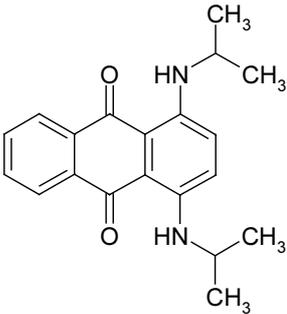
En høj estimeret log Kow indikerer, at SB 35 er potentielt bioakkumulerende, og at en stærk adsorption til jord er forventelig estimeret Koc 7000.

SB 35s datablad angiver en klassificering med risikosætningen: R 53: Kan forårsage uønskede langtidsvirkninger i vandmiljøet.

Samlet vurdering

Farvestoffet Solvent Blue 35 er en anthraquinonforbindelse, hvorom der findes meget begrænsede data. Data vedrørende er sparsomme og usikre. Estimerede værdier indikerer en meget lav vandopløselighed, potentielt bioakkumulerbar og høj toksicitet for vandlevende organismer. Stoffet prioriteres derfor lavt.

SOLVENT BLUE 36

Solvent Blue 36		
Farvestofgruppe: Anthraquinon derivater.		
Navn: 1,4-bis((1-methylethyl)amino)-anthraquinon		
Synonym: 1,4-bis(isopropylamino)anthraquinon		
CI nr.		
CAS nr. 14233-37-5		
EINECS. 238-101-9		
FYSISK-KEMISKE EGENSKABER	Data	Bemærkning
Molvægt	322,4 g/mol	
Smeltepunkt	195°C	QSAR estimat (US-EPA)
Kogepunkt	462°C	QSAR estimat (US-EPA)
Damptryk	5,2E-7 Pa	QSAR estimat (US-EPA)
Vandopløselighed	0,00046 mg/l	QSAR estimat (US-EPA)
Log K _{ow}	6,07	Physprop: Estimeret data
Nedbrydelighed	Ingen data	
ØKOTOX		
LC ₅₀	Ingen data	QSAR estimater - se tabel nedenfor
HUMANTOX		
LC ₅₀	Ingen data	
CARCINOGENITET		
Test resultater	Ingen data	
ANDET	Klassificering: Mut3, R40 (vejledende liste, MST)	

Sundhedsvurdering

Indenfor projektets rammer har det ikke været muligt at finde relevante data.

Miljøvurdering

Der er ikke fundet resultater fra økotoxikologiske tests. Den lave vandopløselighed (skønnet til 0,5 µg/l) og høje log Kow betyder, at estimater af økotoxiciteten er behæftet med betydelig usikkerhed. US-EPAs model ECOSAR for neutrale organiske stoffer skønner en værdi for akutte og kroniske effekter for fisk, dafnier og alger i niveauet 1-10 µg/l, dvs. over den estimerede vandopløselighed.

ECOSAR estimat af økotoxicitet

	Organisme	Varighed	Effekt	Estimeret niveau
Akut	Fisk	96 timer	LC ₅₀	0,036 mg/l
	Dafnier	48 timer	EC ₅₀	0,051 mg/l
	Alger	96 timer	IC ₅₀	0,040 mg/l
Kronisk	Fisk	30 dage	NOEC	0,009 mg/l
	Dafnier	16 dage	EC ₅₀	0,015 mg/l

En høj estimeret log K_{ow} indikerer, at SB 36 er potentielt bioakkumulerende, og at en stærk adsorption til jord er forventelig (estimeret K_{oc} 1454).

Samlet vurdering

Farvestoffet Solvent Blue 36 er en anthraquinonforbindelse, hvorom der findes meget sparsomme data. Stoffet er mistænkt for at kunne give anledning til mutationer. Der er estimeret en meget lav opløselighed, og der foreligger indikationer for at stoffet er bioakkumulerbart. På baggrund af de få oplysninger, der peger i betænkelig retning, prioriteres stoffet lavt.

SOLVENT BLUE 79

Solvent Blue 79		
Farvestofgruppe: Anthraquinon derivater.		
Navn: Blandingsprodukt af		
1,4-di(2-ethylhexyl)amino-anthraquinon,		
1,4-di(3-((2-ethylhexyl)oxy)propyl)amino-anthraquinon og		
1,4-di(3-methoxypropyl)amino-anthraquinon		
CI nr.		
CAS nr. 64553-79-3 og 90170-70-0		
EINECS. 290-505-4		
FYSISK-KEMISKE EGENSKABER	Data	Bemærkning
Molvægt	Blanding	
Smeltepunkt	Ingen data	
Kogepunkt	Ingen data	
Damptryk	Ingen data	
Vandopløselighed	Ingen data	QSAR kan ikke udføres på blandinger
Log K _{ow}	4,5	Grön diesel 1995
Nedbrydelighed	Ingen data	
ØKOTOX		
LC ₅₀	Fisk (96 t): 2,6 mg/l Dafnier (48 t): 0,16 mg/l	Zebrafisk (<i>Brachydanio rerio</i>), Grön diesel 1995 Grön diesel 1995
HUMANTOX		
LC ₅₀	Oral, rotte: >5000 mg/kg Oral, rotte: >10000 mg/kg	BASF, John Hogg (analogislutning) "Grön diesel"
CARCINOGENITET		
Test resultater	Ingen data	
Andet	Klassificering: Xi, R36/38	

Solvent Blue 79 forhandles af BASF som en 35-40% opløsning i solvent-naphtha (CAS nr. 64742-95-4) under handelsnavnet Sudan Blue 673.

Solvent Blue 79 forhandles af John Hogg Technical Solutions Ltd som en 60% opløsning i solventnaphtha under handelsnavnet Dyegard Blue 79.

Solvent Blue 79 (SB 79) er et blandingsprodukt af anthraquinon derivater.

Solvent Blue 79 er den officielle mærkningsfarve for gasolie i Irland.
Solvent Blue 79 indgår i den svenske farvetrio (Grön diesel) sammen med Solvent Blue 98 og Solvent Yellow 124.

Sundhedsvurdering

Begge forhandlers datablade (BASF 1997 og John Hogg 1998) angiver, at SB 79 ikke er testet for toksiske effekter, men baserer deres oplysninger på analoge stoffer.

SB 79 indgår i den svenske farvning sammen med Solvent Yellow 124 og Solvent Blue 98 (Grön diesel 1995). BASF og John Hogg vurderer baseret på

analogislutninger, at akut oral rotte LD₅₀ ligger på >5000 mg/kg, men rapporten ”Grön diesel angiver en LD₅₀ for oral rotte til >10000 mg/kg.

En moderat hudirritation var angivet i Grön diesel, men en nyere undersøgelse fandt ingen positive resultater og konkluderede, at diesellole i sig selv var mere hudirriterende end farvestoffet (Fischer og Bjarnason 1996).

Øjenirritation er moderat i følge Grön diesel (1995).

I hvert fald et af de indgående farvekomponenter er fundet positiv i Ames test. Grön diesel (1995) angiver, at der blev fundet frame-shift mutationer efter metabolsk aktivering uden yderligere oplysninger. Det vil sige, at SB98 har givet anledning til mutationer i Ames test. Det kan derfor ikke udelukkes, at SB98 kan være kræftfremkaldende i mennesker.

Miljøvurdering

Der er ikke fundet data om opløselighed og bioakkumulerbarhed. Da der er tale om et blandingsprodukt kan QSAR ikke anvendes til estimering af disse værdier. Baseret på analogislutninger til de andre anthraquinon-derivater forventes vandopløseligheden dog at være meget lav. Bioakkumuleringspotentialet kan ligeledes skønnes at være lavt til moderat. LC₅₀-værdier for fisk og daphnier indikerer en relativ høj toksicitet for vandlevende organismer med akutte værdier i området 0,1-10 mg/l.

Samlet vurdering

Solvent Blue 79 anvendes til en række mærkningformål og vil alene af denne årsag ikke kunne anbefales.

SOLVENT BLUE 98

Solvent Blue 98		
Farvestofgruppe: Anthraquinon derivater.		
Navn: Blandingsprodukt af 1,4-di(2-ethylhexyl)amino-anthraquinon og 1,4-di(propyl-2-methyl)amino-anthraquinon		
CI nr.		
CAS nr. 74499-36-8		
EINECS.		
FYSISK/KEMISKE EGENSKABER	Data	Bemærkning
Molvægt	Blanding	
Smeltepunkt	Ingen data	
Kogepunkt	Ingen data	
Vandopløselighed	Ingen data	
Log K _{ow}	Ingen data	
Nedbrydelighed	Ingen data	
Damptryk	Ingen data	
ØKOTOX		
LC ₅₀	Ingen data	
HUMANTOX		
LC ₅₀	Oral rotte: >5000 mg/kg	Morton 1996
CARCINOGENITET		kan ikke udelukkes, se nedenfor
Test resultater	Ingen data	
ANDET		

Solvent Blue 98 er en blanding af anthraquinon derivater. SB 98 indgår i den svenske ”Grön diesel”.

Solvent Blue 98 forhandles af Morton International under handelsnavnet Automate Blue 8GHF, hvor Solvent Blue 98 indgår med 40% og resten er aromatiske kulbrinter og 10% dipropylenglycolmethylether.

Solvent Blue 98 indgår i den svenske farvetrio (Grön diesel) sammen med Solvent Blue 79 og Solvent Yellow 124.

Sundhedsvurdering

Sundhedsvurderingen er baseret på Morton datablad for Automate Blue 8 GHF, 1996.

LD₅₀ værdien for akut oral rotte angivet til > 5000 mg/kg

Solvent blue er angivet som ikke-hudirriterende (Grön diesel 1995) til let hudirriterende (Morton 1996).

For mutagenicitet er SB98 fundet positiv i Ames test (med metabolisk aktivering). Testorganismerne var *Salmonella typhimurium* TA 1538 (25-200 µG) og TA 98 (250-750 µg) ifølge Morton (1996). Grön dielse (1995) angiver, at der blev fundet frame-shift mutationer efter metabolisk aktivering uden yderligere oplysninger. Det vil sige, at SB98 har givet anledning til mutationer i Ames test. Det kan derfor ikke udelukkes, at SB98 kan være kræftfremkaldende i mennesker

Miljøvurdering

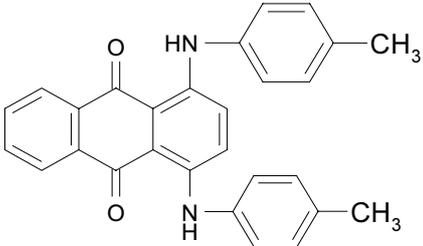
Det var ikke muligt at fremskaffe relevante data indenfor projektets rammer.

Da der er tale om en blanding, er der ikke foretaget QSAR estimater. Baseret på analogislutninger til de andre anthraquinon-derivater forventes vandopløseligheden dog at være meget lav. Bioakkumuleringspotentialet kan ligeledes skønnes at være lavt til moderat. Økotoksiciteten vurderes at være relativt høj for vandlevende organismer med akutte værdier i området 0,1-10 mg/l.

Samlet vurdering

Solvent Blue 98 anvendes til mærkningsformål, - bl.a som Euromarker, og vil alene af den grund ikke være egnet i denne sammenhæng.

SOLVENT GREEN 3

Solvent Green 3 Farvestofgruppe: Anthraquinon derivater. Navn: 1,4-bis[(4-methylphenyl)-amino]-anthraquinon		
CI nr. 61565 CAS nr. 128-80-3 EINECS. 204-909-5		
FYSISK-KEMISKE EGENSKABER	Data	Bemærkning
Molvægt	418,5 g/mol	Physprop, Sax 1992, Chemfinder, Merck 1996
Smeltepunkt	218 °C 220-221 °C	Merck 1996 Chemfinder
Kogepunkt	598°C	QSAR estimat (US-EPA)
Damptryk	9,4 E-11 Pa	QSAR estimat (US-EPA)
Vandopløselighed	7,0 E-6 mg/l	QSAR estimat (US-EPA)
Log K _{ow}	8,69	Physprop:Estimeret
Nedbrydelighed	Ingen data	
ØKOTOX		
LC ₅₀	Ingen data	
HUMANTOX		
	Eye-rbt 20 mg, 24 h	Sax 1992
LD ₅₀	Orl-rat 3660 mg/kg	Sax 1992
CARCINOGENITET		
Test resultater	Ingen data	
ANDET	Reported in EPA TSCA Inventory. Moderat giftigt ved indtagelse. Giver øjn irritation. Ved forbrænding dannes toksiske dampe af NO _x . (Sax 1992)	

EYE= ØJENIRRITATION

ORL = AKUT ORAL

RAT = ROTTE

RBT = KANIN

Sundhedsvurdering

Akut toksicitet er testet i akut oral rottetest, hvor der blev observeret en LD₅₀ på 3660 mg/kg (Sax 1992). I øjenirritationstest på kaniner er fundet øjenirritation ved 20 mg/øje (Sax 1992).

De sparsomme data indikerer en relativ lav akut giftighed samt at stoffet forårsager øjenirritationer. Der foreligger ingen data om langtidseffekter.

Miljøvurdering

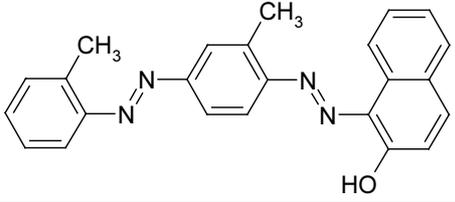
Der var ingen tilgængelige data på økotoksicitet. Den lave vandopløselighed (skønnet til 7 ng/l) og høje log Kow betyder, at estimater af økotoksiciteten er behæftet med betydelig usikkerhed. US-EPAs model ECOSAR for neutrale organiske stoffer skønner en værdi for akutte og kroniske effekter for fisk, dafnier og alger i niveauet <1 µg/l, dvs. over den estimerede vandopløselighed. Log Kow ligger desuden udenfor det område hvor modellerne er vurderet acceptable.

En høj estimeret log K_{ow} indikerer, at SG 3 er potentielt bioakkumulerende, og at en stærk adsorption til jord er forventelig (estimeret K_{oc} 395000, log K_{oc} 5,6).

Samlet vurdering

Solvent Green 3 er et anthraquinonderivat. Der er fundet yderst begrænsede data om stoffet. Der er indikationer for lav akut giftighed og lav vandopløselighed, samt at stoffet er potentielt bioakkumulerbart.

SOLVENT RED 24

Solvent Red 24 Farvestofgruppe: Alkylderivater af azobenzen-4-azo-2-naphthol Navn: (1-[[2-methyl-4-[(2-methylphenyl)azo]-phenyl]azo]-2-naphthalenol)		
CI nr. 26105 CAS nr. 85-83-6 EINECS. 201-635-8		
FYSISK-KEMISKE EGENSKABER	Data	Bemærkning
Molvægt	380,4 g/mol	
Smeltepunkt	199 °C 186 °C 181-188 °C	Chemfinder Physprop Merck
Kogepunkt	260 °C	Chemfinder
Damptryk	6,1 E-10 Pa	QSAR estimat (US-EPA)
Vandopløselighed	Ikke vandopløselig Lavt vandopløselig 0,0002 mg/l	Ullmann Merck QSAR estimat (US-EPA)
Log K _{ow}	8,72	Physprop: Estimeret
Nedbrydelighed	Ingen data	
ØKOTOX		
LC ₅₀	> 100 ppm	Fisk. Øllgaard <i>et al.</i> 1999
HUMANTOX		
LC ₅₀	Ingen data	
TDL ₀	scu-rat 512 mg/kg	Sax :Scu = Subcutaneous
CARCINOGENITET		
Test resultater	Mma-sat100 µg/plade	Sax: Mutations data rapporteret. IARC Cancer Review: Group 3 IMEMDT 7,56,87. Reported in EPA TSCA Inventory. Måske carcinogen ved eksperimentel tumor forsøg. Mma = microsomal mutagenicity assay
Andet	Ved forbrænding dannes toksisk dampe af NO _x . (Sax) Har været brugt til at stimulere sår heling. (Merck) 2-Naphthol er moderat giftigt. (Ullmann)]	

Solvent Red 24 anvendes til mærkning af fyringsolie i Storbritanien (Hansen *et al.* 2001).

Sundhedsvurdering

Af tox-data er der kun fundet et subcutant rotteforsøg, hvori man fandt en TDLo på 512 mg/kg (Sax 1992).

Mutageniciteten er undersøgt i en microsomal mutagenicitet assay med *Salmonella typhimurium*. Positiv i 100 µg/plade. Det kan derfor ikke udelukkes, at SR24 er kræftfremkaldende.

Miljøvurdering

Der var ingen tilgængelige data på økotoxicitet. Den lave vandopløselighed (skønnet til 0,2 µg/l) og høje log Kow betyder, at estimater af økotoxiciteten er behæftet med betydelig usikkerhed. US-EPAs model ECOSAR for neutrale

organiske stoffer skønner en værdi for akutte effekter i 4-40 µg/l niveauet og kroniske effekter for fisk, dafnier og alger i niveauet <1 µg/l, dvs. over den estimerede vandopløselighed. Log Kow ligger desuden udenfor det område, hvor modellerne er vurderet acceptable.

En høj estimeret log Kow indikerer, at SR24 er potentielt bioakkumulerende, og at en stærk adsorption til jord er forventelig (estimeret log Koc 6,1).

Samlet vurdering

Solvent Red 24 er et azo-farvestof, der kan fraspalte kræftfremkaldende arylaminer. Data for de sundhedsmæssige forhold er sparsomme og usikre. Estimater indikerer en lav vandopløselighed og at stærk adsorption til jord er forventelig. Stoffet prioriteres lavt.

SOLVENT RED 26

Solvent Red 26		
Farvestofgruppe: Alkylderivater af azobenzen-4-azo-2-naphthol		
Navn: (1-[[2,5-Dimethyl-4-[(2-methylphenyl)azo]-phenyl]azo]-2-naphthol)		
CI nr. 26120		
CAS nr. 4477-79-6		
EINECS. 224-757-3		
FYSISK-KEMISKE EGENSKABER	Data	Bemærkning
Molvægt	394,5 g/mol	
Smeltepunkt	238°C	QSAR estimat (US-EPA)
Kogepunkt	555 ^o V	QSAR estimat (US-EPA)
Damptryk	7 E-11 Pa	QSAR estimat (US-EPA)
Vandopløselighed	0,057 µg/l	QSAR estimat (US-EPA)
Log K _{ow}	9,27	Physprop:Estimeret
Nedbrydelighed	Ingen data	
ØKOTOX		
LC ₅₀	Ingen data	QSAR estimater: se tekst nedenfor
HUMANTOX		
LC ₅₀	Ingen data	
CARCINOGENITET		
Test resultater	Ingen data	
Andet	2-Naphthol er moderat giftigt (Ullmann 1993)	

Solvent Red 26 anvendes som standard rødt farvestof til diesel med højt svovlindhold i USA. Stoffet erstattes dog ofte af Solvent Red 164, som er mere opløseligt i olieprodukter (Hansen *et al.* 2001).

Sundhedsvurdering

SR 26 er et azofarvestof med potentiel mulighed for dannelse af kræftfremkaldende stoffer. Stofgruppen er optaget på listen over uønskede stoffer.

Miljøvurdering

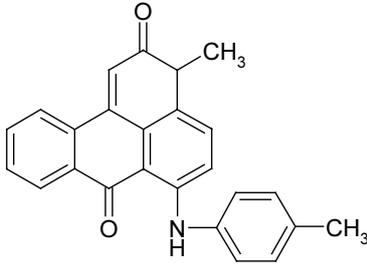
Der var ingen tilgængelige data på økotoksicitet. Den lave vandopløselighed (skønnet til 0,057 µg/l) og høje log Kow (estimeret til 9,27) betyder, at estimater af økotoksiciteten er behæftet med betydelig usikkerhed. US-EPAs model ECOSAR for neutrale organiske stoffer skønner en værdi for akutte effekter i 2-20 µg/l niveauet og kroniske effekter for fisk, dafnier og alger i niveauet 0,2 µg/l, dvs. over den estimerede vandopløselighed. Log Kow ligger desuden udenfor det område, hvor modellerne er vurderet acceptable.

En høj estimeret log Kow indikerer, at SR26 er potentielt bioakkumulerende, og at en stærk adsorption til jord er forventelig (estimeret log Koc 6,3).

Samlet vurdering

Solvent Red 26 er ligeledes et azofarvestof med egenskaber der ligner Solvent Red 24, hvorfor dette stof også prioriteres lavt.

SOLVENT RED 52

Solvent Red 52		
Farvestofgruppe: Alkylamim-anthraquinon derivat		
NAVN: 3-METHYL-6-[(4-METHYLPHENYL)-AMINO]-DIBENZ(F,I,)ISOQUINOLIN-2,7-DION		
CI nr. 68210		
CAS nr. 81-39-0		
EINECS. 201-346-7		
FYSISK-KEMISKE EGENSKABER	Data	Bemærkning
Molvægt	366,4 g/mol	
Smeltepunkt	241°C	QSAR estimat (US-EPA)
Kogepunkt	561°C	QSAR estimat (US-EPA)
Damptryk	4,8 E-10 Pa	QSAR estimat (US-EPA)
Vandopløselighed	0,054 mg/l	QSAR estimat (US-EPA)
Log K _{ow}	4,51	Physprop: Estimeret data
Nedbrydelighed	Ingen data	
ØKOTOX		
LC ₅₀	Ingen data	QSAR estimeret: se tekst nedenfor
HUMANTOX		
LC ₅₀	Ingen data	
CARCINOGENITET		
Test resultater	Ingen data	
Andet		

Sundhedsvurdering

Indenfor projektets rammer var det ikke muligt at finde relevante data.

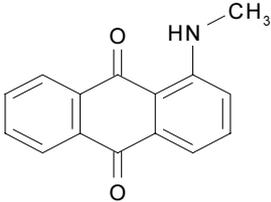
Miljøvurdering

Der var ingen tilgængelige data på økotoxicitet. Den lave vandopløselighed (skønnet til 0,054 mg/l) og høje log K_{ow} (estimeret til 4,5) betyder, at estimeret af økotoxiciteten er behæftet med betydelig usikkerhed. US-EPAs model ECOSAR for neutrale organiske stoffer i gruppen acrylamider skønner en værdi for akutte langtidseffekter (LC₅₀, 14 dage) for fisk på 3,2 mg/l, dvs. over den estimerede vandopløselighed.

En høj estimeret log K_{ow} indikerer, at SR 52 er potentielt bioakkumulerende, og at en stærk adsorption til jord er forventelig (estimeret 73100, svarende til log K_{oc} 4,9).

Samlet vurdering

Solvent Red 52 er en anthraquinonforbindelse. Der er ikke fundet egentlige data om stoffet. De sundhedsmæssige forhold kunne ikke vurderes. Estimeret indikerer en lav vandopløselighed, og at stoffet er bioakkumulerbart. Stoffet prioriteres lavt.

Solvent Red 111		
Farvestofgruppe: Alkylamin-anthraquinon derivat		
Navn: (1-(methylamino)-anthraquinon)		
CI nr. 60505		
CAS nr. 82-38-2		
EINECS. 201-417-2		
Synonym: Disperse Red 9		
Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	237,3 g/mol	
Smeltepunkt	171°C	Physprop, Baughman og Perenich 1988, eksperimentel værdi
Kogepunkt	397°C	QSAR estimat (US-EPA)
Damptryk	9,3E-7 Pa	Physprop: Ekstrapolerede data ved 25°C Baughman og Perenich 1988
Vandopløselighed	0,119 mg/l (0,285 v. 90°C)	Physprop: Ekstrapolerede data ved 25°C Baughman og Weber 1991 Baughman og Perenich 1988 (Exp.)
Log K _{ow}	4,1 2,87	Physprop: Exp. Baughman og Weber 1991 Baughman og Perenich 1988 (estimeret værdi)
Nedbrydelighed	anaerob let nedbrydelig, T½ 1-2 dage	Baughman og Weber 1994, sedimentforsøg
Økotox		
LC ₅₀	Ingen data	QSAR estimater: se tekst nedenfor
Humantox		
LC ₅₀	Akut oral, hund 8000 mg/kg	Martin 1983: over 24 t, obs. 14 d.: ingen effekt
	Eye-rabt 50 mg	Martin 1983: obs. 21 d.: ingen effekt
	Skn-rabt 2000 mg/kg	Martin 1983: obs. 14 d.: ingen effekt
Carcinogenitet		
Test resultater	Ingen data	
Andet	Klassificering: Mut3, R40-43 (Vejledende liste, MST)	

Exp.: Eksperimentel værdi
 Eye rabt: øjenirritationstest på kanin.
 Skn-rabt: hudirritationstest på kanin

Stoffet har gennem en årrække været anvendt til røgsignaler og farvning til forskellige sikringsformål. Det må derfor forventes, at stoffet vil være tilgængeligt i betydelige mængder.

Sundhedsvurdering

Akut toksicitet er testet på hund ved indgift af 3 hunde med 4000 mg/kg over 8 timer eller 2 hunde med 8000 mg/kg over 24 timer. Der var ingen observerbare effekter i en 14 dages observationsperiode (Martin *et al.*, 1983).

Øjenirritationstest efter Draize metoden er udført på 6 kaniner med 50 mg i det ene øje og det andet øje var kontrol. Ingen effekter blev observeret i 21 dages observationsperiode (Martin *et al.*, 1983).

Hudirritationstest er udført på 10 kaniner med 2000 mg/kg på barberet hud efter Draize metoden. Ingen effekter blev observeret over 14 dage (Martin *et al.*, 1983).

Ifølge Miljøstyrelsens vejledende klassificering er stoffet mistænkt for at være mutagent og allergifremkaldende.

Miljøvurdering

Der er ikke fundet resultater fra økotoxikologiske tests. Den lave vandopløselighed betyder, at estimeret af økotoxiciteten er behæftet med nogen usikkerhed. US-EPAs model ECOSAR for neutrale organiske stoffer skønner en værdi for akutte og kroniske effekter for fisk, dafnier og alger i niveauet 0,1-10 mg/l, dvs. over den målte vandopløselighed.

ECOSAR estimeret økotoxicitet

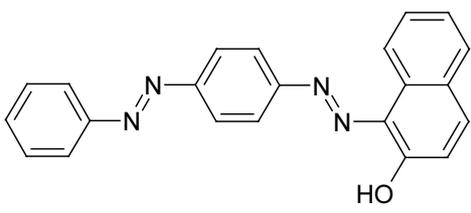
	Organisme	Varighed	Effekt	Estimeret niveau
Akut	Fisk	96 timer	LC ₅₀	1,99 mg/l
	Dafnier	48 timer	EC ₅₀	2,46 mg/l
	Alger	96 timer	IC ₅₀	1,73 mg/l
Kronisk	Fisk	30 dage	NOEC	0,36 mg/l
	Dafnier	16 dage	EC ₅₀	0,31 mg/l

En høj estimeret log K_{ow} indikerer, at SR 111 er potentielt bioakkumulerende, men baseret på QSAR estimat skønnes en BCF på 41. Adsorption til jord er lav med en estimeret K_{oc} 75 svarende til log K_{oc} 1,6.

Samlet vurdering

Stoffet Solvent Red 111 er en anthraquinonforbindelse, der anvendes til en række mærknings- og advarselsformål. Stoffet har en lav akut giftighed, men er mistænkt for at kunne forårsage langtidseffekter og være allergifremkaldende. Estimeret indikerer, at stoffet har en lav vandopløselighed, er økotoxisk og antagelig lavt bioakkumulerbart. Da stoffet anvendes i en række sammenhænge, vælges det at undersøge stoffet nærmere.

SOLVENT RED 164

Solvent Red 164		
Farvestofgruppe: Alkylderivater af azobenzen-4-azo-2-naphthol		
Navn: (1-[[4-(phenylazo)phenyl]azo]-2-naphthalenol)		
CI nr. Ingen data		
CAS nr. 92257-31-3		
EINECS. 296-120-8		
FYSISK-KEMISKE EGENSKABER	Data	Bemærkning
Molvægt	352,4	
Smeltepunkt	195°C	eksperimentel (US-EPA)
Kogepunkt	500°C	QSAR estimat (US-EPA)
Vandopløselighed	0,0026 mg/l	QSAR estimat (US-EPA)
Log K _{ow}	7,6	QSAR estimat (US-EPA)
Nedbrydelighed		
Damptryk	5 E-9 Pa	QSAR estimat (US-EPA)
ØKOTOX		
LC ₅₀	Ingen data	QSAR estimat (US-EPA) se tekst
HUMANTOX		
LC ₅₀	Ingen data	
CARCINOGENITET		
Test resultater	Ingen data	
ANDET	2-Naphthol er moderat giftigt. (Ullmann 1993)	

Bemærk: samme molekylstruktur og kemisk navn optræder også som CI Solvent Red 23, CI 26100, CAS no 85-86-9 (Merck) til farvning af olie og lak.

Solvent Red 164 anvendes til farvning af fyringsolie i USA (Hansen *et al.*, 2001).

Sundhedsvurdering

Der er ingen data til vurdering af sundhedseffekter, og der er ikke udført QSAR estimater.

Miljøvurdering

Det eksperimentelle smeltepunkt er taget fra den homologe molekylstruktur SR 23. Den estimerede vandopløselighed er lav: 2,6 µg/l. log K_{ow} skønnes høj med en log K_{ow} på 7,6. Damptrykket estimeres lavt med 5×10^{-9} Pa Bioak-kumuleringen vurderes at være lille med en BCF på 10. Økotoksiciteten er estimeret med akutte værdier for fisk, dafnier og alger <0,1 mg/l, men der gøres opmærksom på en lav estimeret vandopløselighed og en K_{ow} udenfor det område, hvor estimaterne er gældende.

Samlet vurdering

Solvent Red 164 er en azo-forbindelse og derfor betænkelig. Stoffet anvendes til farvning af fyringsolie i USA. Der foreligger yderst sparsomme data for stoffet, hvorfor en vurdering ikke kan foretages. Stoffet prioriteres lavt.

SOLVENT RED 215

Solvent Red 215		
Farvestofgruppe: Alkylderivater af azobenzen-4-azo-2-naphthol		
Navn: (1-[[2-methyl-4-[(2-methylphenyl)azo]-phenyl]azo]-2-naphthalenol), ar-styreneret		
CI nr. Ingen data		
CAS nr. 85203-90-3		
EINECS. 286-282-8		
Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	Ingen data	
Smeltepunkt	Ingen data	
Kogepunkt	Ingen data	
Vandopløselighed	Ingen data	
Log K _{ow}	Ingen data	
Nedbrydelighed	Ingen data	
Damptryk	Ingen data	
Økotox		
LC ₅₀	Ingen data	
Humantox		
LC ₅₀	Ingen data	
Carcinogenitet		
Test resultater	Ingen data	
Andet	2-Naphthol er moderat giftigt. (Ullmann 1993)	

Solvent Red 215 anvendes i Tyskland i mineralolieprodukter (Hansen *et al.*, 2001).

Sundhedsvurdering

Det har ikke været muligt at finde relevante data indenfor projektets rammer.

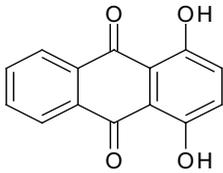
Miljøvurdering

Det har ikke været muligt at fremskaffe relevante data indenfor projektets rammer.

Samlet vurdering

Solvent Red er en azo-forbindelse, der bl.a. anvendes til farvning af mineralolieprodukter i Tyskland. Det har ikke været muligt at fortage en sundheds- og miljømæssig vurdering. Af disse grunde prioriteres stoffet lavt.

SOLVENT VIOLET 12

Solvent Violet 12		
Farvestofgruppe: Anthraquinon derivater.		
Navn : 1,4-Dihydroxyanthraquinon		
Synonym: Quinizarin		
CI nr. 58050		
CAS nr. 81-64-1		
EINECS. 201-368-6		
Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	240,2 g/mol	
Smeltepunkt	200 °C 194 °C 191-193 °C 196 °C 200-203 °C 187-195 °C	Physprop Sax 1992 Chemfinder HSDB Merck 1996 IUCLID 2000
Kogepunkt	450 °C	Sax, Chemfinder, IUCLID 2000
Damptryk	3,2 E-6 Pa 1,3E-11 Pa	Physprop: Ekstrapoleret ved 25°C IUCLID: ved 25 °C
Vandopløselighed	0,961 mg/l Opløseligt i varmt vand < 1000 mg/l 0,096 mg/l	Physprop: Ekstrapoleret ved 25°C HSDB: IUCLID: ved 20 oC Baughman og Perenich 1988
Log K _{ow}	3,94 2,34	Physprop: Estimeret IUCLID: Beregnet
Nedbrydelighed	52 % efter 20 dage	IUCLID: Aerob
Økotox		
LC ₅₀	Ingen data	
Humantox		
	Eye-rbt 500 mg/24 h	Sax 1992
LD ₅₀	Orl-rat > 2000 mg/kg	IUCLID
LC ₅₀	Ihl-rat > 1 mg/l	IUCLID: 4 timer
LD ₅₀	ivn-mus 320 mg/kg	Sax 1992
LD ₅₀	lpr-rat 2100 mg/kg	Sax 1992
Carcinogenitet		
Test resultater	Mma-sat100 µg/plade	Sax: Mutations data rapporteret. Reported in EPA TSCA Inventory. [2] Er formentligt carcinogen for mennesker (gruppe 2). [4]
Andet	Giftig ved intravenøs indtagelse. Moderat giftigt ved intraperitoneal indtagelse. Øjn irritation. Svag allergifremkaldende. Ved forbrænding dannes der kradsende røg og irriterende dampe. (Sax 1992) Klassificering : R43 [Mst, Vejledende liste]	

Orl = oral.

Eye = administration into eye.

Ivn = intravenøs.

Ipr = intraperitoneal.

Ihl = inhalation.

rbt = kanin

Solvent Violet 12 er bedre kendt under navnet Quinizarin. Quinizarin anvendes som officiel markør i England i fyrings- og dieselolie.

Sundhedsvurdering

Akut oral toksicitet for rotte (LD_{50}) er >2000 mg/kg (IUCLID 2000), >5000 mg/kg (Holliday 1994, Morton 1994). For mus er der fundet en akut oral LD_{50} på >10000 mg/kg (RTECS).

Ved en inhalationstest er LD_{50} fundet >1 mg/l for rotte (IUCLID).

Øjenirritationstests er angivet med lidt varierende resultater. For kanin er der fundet mild irritation ved 500 mg/24 timer (RTECS, Sax og Lewis 1992), Quinizarin er omtalt som øjenirriterende i "Grön diesel" (1995), mens Holiday (1994) angiver stoffet som ikke- øjenirriterende.

Hudirritationstest er også vurderet lidt forskelligt til både at være hudirriterende og ikke hudirriterende.

Der er fundet både positive og negative resultater i Ames test (Grön diesel 1995), mens quinizarin er positivt i salmonella test (HSDB).

Miljøvurdering

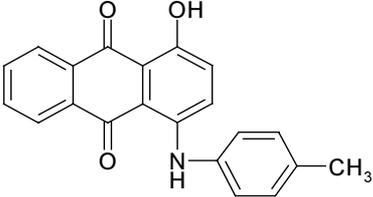
Der er ikke fundet resultater fra økotoksikologiske tests. Den lave vandopløselighed betyder, at estimeret af økotoksiciteten er behæftet med nogen usikkerhed. US-EPAs model ECOSAR for neutrale organiske stoffer skønner en værdi for akutte og kroniske effekter for fisk, dafnier og alger i niveauet 0,1-10 mg/l,

En høj estimeret log Kow indikerer, at SV 12 er potentielt bioakkumulerende, men baseret på QSAR estimat skønnes en BCF på 31. Adsorption til jord er lav med en estimeret Koc 507 svarende til log Koc 2,7.

Samlet vurdering

Solvent Violet 12 er også kendt under navnet Quinizarin. Stoffet anvendes som sporstof i England til fyrings- og dieselolie. Data indikerer lav til moderat sundhedsmæssige påvirkninger. Stoffet har en lav vandopløselighed og er potentielt bioakkumulerbart. Da stoffet allerede anvendes til mærkningformål prioriteres det lavt.

SOLVENT VIOLET 13

Solvent Violet 13		
Farvestofgruppe: Anthraquinon derivater.		
Navn: 1-hydroxy-4-[(methylphenyl)amino]-anthraquinon		
CI nr. 60725		
CAS nr. 81-48-1		
EINECS. 201-353-5		
Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	329,4 g/mol	Physprop, Sax, Chemfinder, HSDB
Smeltepunkt	220°	QSAR estimat (US-EPA)
Kogepunkt	516°	QSAR estimat (US-EPA)
Damptryk	1,4 E-9 Pa	QSAR estimat (US-EPA)
Vandopløselighed	0,003 mg/l	QSAR estimat (US-EPA)
Log K _{ow}	6,24	Physprop: Estimeret
Nedbryde-lighed	Ingen data	
Økotox		
LC ₅₀	Ingen data	QSAR estimater: se tekst nedenfor
Humantox		
LD ₅₀	Ingen data	
LDLo	Ipr-mus 512 mg/kg	Sax 1992
Carcinogenitet		
Test resultater	Mmo-sat 25 µg/plade	Sax 1992: Reported in EPA TSCA Inventory. Mutations data reportret.
Andet	Moderat giftigt ved intraperitoneal vej. (Sax 1992) Ved forbrænding dannes toksiske dampe af NO _x . (Sax 1992) Lidt systemisk toksisk. Kan irritere hud. (HSDB) Klassificering: R 43, N 51/53 (Vejledende liste, MST)	

Ipr = intraperitoneal.

Mmo = mutation i mikroorganisme

Sat = Salmonella typhimurium.

Sundhedsvurdering

Der er ikke fundet data for akut oral indtagelse eller lignende tilgængelige data. Der er fundet LDLo på 512 mg/kg i en interperitoneal test på mus (Sax 1992), dvs. moderat giftigt ved peritoneal indgiftning. Stoffet er angivet som hudirriterende i HSDB.

I test med *Salmonella typhimurium* er der fundet mutationer ved 25 µg/plade (Sax 1992).

Miljøvurdering

Der er ikke fundet resultater fra økotoksikologiske tests. Den lave vandopløselighed og høje Kow betyder, at estimater af økotoksiciteten er behæftet med betydelig usikkerhed. US-EPAs model ECOSAR for neutrale organiske stoffer skønner en værdi for akutte effekter for fisk, dafnier og alger i niveauet 0,1-1 mg/l.

En høj estimeret log Kow indikerer, at SV 13 er potentielt bioakkumulerende, og baseret på QSAR estimat skønnes en BCF på 1826. Adsorption til jord er høj med en estimeret Koc 5800 svarende til log Koc 3,8.

Stoffet klassificeres N51/53 i følge Miljøstyrelsens Vejledende liste.

Samlet vurdering

Solvent Violet 13 er en anthraquinonforbindelse, der så vidt vides ikke anvendes til mærkningsformål. Sundhedsmæssigt har stoffet en relativ lav akut giftighed og er mistænkt for at være allergifremkaldende. Stoffet har en meget lav vandopløselighed, og der er indikationer for, at stoffet er økotoksisk. Det er valgt at vurdere stoffet nærmere.

SOLVENT YELLOW 14

Solvent Yellow 14		
Farvestofgruppe: Benzen-azo-2-naphthol derivater.		
Navn: 1-Benzen-1-azo-2-naphthol		
CI nr. 12055		
CAS nr. 842-07-9		
EINECS. 212-668-2		
Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	248,3 g/mol	Chemfinder, HSDB
Smeltepunkt	134 °C 131-133 °C	HSDB (eksperimentel værdi) Chemfinder
Kogepunkt	406°C	QSAR estimat (US-EPA)
Damptryk	8,7 E-6 Pa	Physprop: Estimeret ved 25°C
Vandopløselighed	0,674 mg/l <100 mg/l Ikke vandopløselig	Physprop: Estimeret ved 25°C Chemfinder: Ved 18°C Ullmann, HSDB
Log K _{ow}	5,51	Physprop: Estimeret
Nedbrydelighed	Ingen data	
Økotox		
LC ₅₀	Ingen data	QSAR estimater: se tekst nedenfor
Humantox		
TDLo	Orl-rat 10815 mg/kg	Sax 1992 (Orl=akut oral)
TDLo	scu-rat 6000 mg/kg	Sax 1992 (scu= subcutan)
LC ₅₀	Ingen data	
Carcinogenitet		
Test resultater		
TDLo	Imp-mus 80 mg/kg	Sax 1992 (Imp=implant.)
TD	Imp-mus 96 mg/kg	Sax 1992 (Imp=implant.)
		Consensus rapport. IARC Cancer Review: Group 3 IMEMDT 7,56,87. Animal Sufficient Evidence IMEMDT 8,225,75. NTP Carcinogenesis Bioassay (feed); Clear Evidence: rat NTPTR* NTP-TR-226,82. Community Right-To-Know List. Reported in EPA TSCA Inventory. EPA Genetic Toxicology Program.
Andet	Ved forbrænding dannes toksisk dampe af NO _x . (Sax 1992) 2-Naphthol er moderat giftigt. (Ullmann 1993) Begrænset bevis på carcinogenitet i dyr, ingen data på mennesker. (HSDB) Klassificering : Carc3, R40 (Vejledende liste, MST)	

Scu = Subcutaneous. Orl = Oral. Imp = Implant.

Sundhedsvurdering

I akut oral rotte forsøg er der fundet en TDLo på 10815 mg/kg (Sax 1992) og subcutant en TDLo 6000 mg/kg for rotte.

Miljøvurdering

Der er ikke fundet resultater fra økotoxikologiske tests. Den lave vandopløselighed betyder, at estimater af økotoxiciteten er behæftet med nogen usikkerhed. US-EPAs model ECOSAR for neutrale organiske stoffer skønner en værdi for akutte effekter for fisk, dafnier og alger i niveauet 0,1-1 mg/l, dvs. i niveau med den skønnede vandopløselighed.

ECOSAR estimeret økotoksicitet

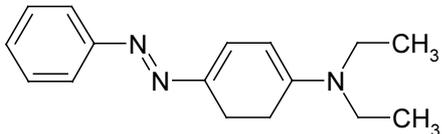
	Organisme	Varighed	Effekt	Estimeret niveau
Akut	Fisk	96 timer	LC ₅₀	0,251 mg/l
	Dafnier	48 timer	EC ₅₀	0,490 mg/l
	Alger	96 timer	IC ₅₀	0,097 mg/l
Kronisk	Fisk	90 dage	NOEC	0,008 mg/l
	Dafnier	21 dage	NOEC	0,073 mg/l

En høj estimeret log K_{ow} indikerer, at SY 14 er potentielt bioakkumulerende, men baseret på QSAR estimat skønnes en BCF på 10. Adsorption til jord er høj med en estimeret K_{oc} 36600 svarende til log K_{oc} 4,6.

Samlet vurdering

Solvent Yellow 14 er en azo-forbindelse og derfor betænkelig. De få fundne data indikerer en lav akut giftighed og en risiko for langtidseffekter. Estimerede data tyder på en lav vandopløselighed, og at stoffet er potentielt bioakkumulerende.

SOLVENT YELLOW 56

Solvent Yellow 56		
Farvestofgruppe: para-Diethylamino-azo-benzen derivater.		
Navn: N,N-diethyl-4-(phenylazo)-benzenamin		
CI nr. 11021		
CAS nr. 2481-94-9		
EINECS. 219-616-8		
Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	253,3 g/mol	
Smeltepunkt	97-98 °C	Physprop (eksperimentel værdi)
Kogepunkt	358°C	QSAR estimat (US-EPA)
Damptryk	1,1E-5 Pa	Physprop: Ekstrapoleret til 25°C fra målte værdier
Vandopløselighed	0,264 mg/l Ikke vandopløselig	Physprop: Estimeret data ved 25°C Ullmann
Log K _{ow}	5,27	Physprop: Estimeret data
Nedbrydelighed	Ingen data	
Økotox		
LC ₅₀	Ingen data	QSAR estimater: se tekst nedenfor
Humantox		
LC ₅₀	Ingen data	
Carcinogenitet		
Test resultater	Mma-sat 1 µg/plade otr-ham:kdy 250 µg/l	Sax 1992 (mma-sat= microsomal mutagenicity assay med <i>Salmonella typhimurium</i>) Sax 1992 (otr-ham:kdyo oncogenic transformation in hamster kidney) Sax: Mutations data rapporteret. Reported in EPA TSCA Inventory. EPA Genetic Toxicology Program.
Andet	Ved forbrænding dannes toksisk dampe af NO _x . (Sax 1992) Klassificering : Xn, R22 (Vejledende liste, MST)	

Mma = microsomal mutagenicity assay.
 Sat = Salmonella typhimurium.
 Otr = oncogenic transformation.
 Ham = hamster.
 Kdy = kidney.

Sundhedsvurdering

I en microsomal mutagenicitets test med *Salmonella typhimurium* er der fundet mutationer ved 1 µg/plade (Sax 1992). Der er observeret carcinogene transformationer i hamster nyrer ved 250 µg/l (Sax 1992).

Miljøvurdering

Der er ikke fundet resultater fra økotoksikologiske tests. Den lave vandopløselighed (skønnet til 0,26 mg/l) betyder, at estimater af økotoksiciteten er behæftet med nogen usikkerhed. US-EPAs model ECOSAR for neutrale organiske stoffer skønner en værdi for akutte og kroniske effekter for fisk, dafnier og alger i niveauet 0,1-1 mg/l, dvs. i niveau med den skønnede vandopløselighed.

ECOSAR estimeret økotoksicitet

	Organisme	Varighed	Effekt	Estimeret niveau
Akut	Fisk	96 timer	LC50	0,158 mg/l
	Dafnier	48 timer	EC50	0,213 mg/l
	Alger	96 timer	IC50	0,161 mg/l
Kronisk	Fisk	30 dage	NOEC	0,035 mg/l
	Dafnier	16 dage	EC50	0,046 mg/l

En høj estimeret log Kow indikerer, at SY 56 er potentielt bioakkumulerende, men baseret på QSAR estimat skønnes en BCF på 10. Adsorption til jord er høj med en estimeret Koc 3400 svarende til en log Koc 3,5.

Samlet vurdering

Solvent Yellow 56 er en azo-forbindelse og derfor betænkelig. De få fundne data indikerer en risiko for langtidseffekter. Estimerede data tyder på en lav vandopløselighed, og at stoffet er potentielt bioakkumulerende.

SOLVENT YELLOW 124

Solvent Yellow 124		
Farvestofgruppe: para-Diethylamino-azo-benzen derivater.		
Navn: N-ethyl-N-[2-[1-(2-methylpropoxy)ethoxy]-ethyl]-4-(phenylazo)-benzenamin		
CI nr.		
CAS nr. 34432-92-3		
EINECS. 252-021-1		
Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	369,5 g/mol	
Smeltepunkt	159°C	QSAR estimeret (US-EPA)
Kogepunkt	438°C	QSAR estimeret (US-EPA)
Damptryk	5,4 E-6 Pa	QSAR estimeret (US-EPA)
Vandopløselighed	0,012 mg/l	QSAR estimeret (US-EPA)
Log K _{ow}	6,06	Physprop: Estimeret data
Nedbrydelighed	Ingen data	
Økotox		
LC ₅₀	0,32 mg/l	<i>Brachidanio rerio</i> , 96 t, Zebrafisk, (Grön diesel 1995)
EC ₅₀	0,003 mg/l	<i>Daphnia magna</i> , 48 t, (Grön diesel 1995)
Humantox		
LD ₅₀	Orl-rat 7,5 ml/kg	Cirka værdi. Fundet i CSTE (Euromarker)
Carcinogenitet		
Test resultater	Ingen data	
Andet	Klassificering : Xn, R22-43 (Vejledende liste, MST)	

ORL-RAT: AKUT ORAL, ROTTE

Solvent Yellow 124 anvendes i ”Euromarker”. Solvent yellow 124 anvendes i den svenske ”Grön diesel sammen med Solvent Blue 79 og Solvent Blue 98.

Solvent Yellow 124 forhandles af flere leverandører.

Solvent Yellow 124 er vurderet af EU Kommissionens videnskabelige komité (CSTEE 1999).

Sundhedsvurdering

Solvent Yellow 124's (SY 124) akutte toksicitet er fundet til >7500 mg/kg i rotte (Grön diesel, 1995, BASF, 1996). SY 124 er vurderet at være lavt akut toksisk ved indtagelse og beskrives som ikke-irriterende (kanin) til svagt irriterende på hud og øjne. Stoffet er påvist at give ”frameshift” mutationer ved metabolisk aktivering i mutagenitetstest, men en undersøgelse af kromosomaberration er fundet negativ (CSTEE 1999).

Miljøvurdering

Der er kun fundet få økotoxicitets data: LC₅₀ (96 t) 0,32 mg/l for zebrafisk og EC₅₀ (48 t) 0,003 mg/l for dafnier. Den lave vandopløselighed (skønnet til 0,012 mg/l) betyder, at estimeret af økotoxiciteten er behæftet med nogen usikkerhed. US-EPAs model ECOSAR for neutrale organiske stoffer skønner

en værdi for akutte og kroniske effekter for fisk, dafnier og alger i niveauet 0,1-1 mg/l, dvs. i niveau med eller over den skønnede vandopløselighed.

ECOSAR estimeret økotoksicitet

	Organisme	Varighed	Effekt	Estimeret niveau
Akut	Fisk	96 timer	LC50	0,042 mg/l
	Dafnier	48 timer	EC50	0,059 mg/l
	Alger	96 timer	IC50	0,047 mg/l
Kronisk	Fisk	30 dage	NOEC	0,010 mg/l
	Dafnier	16 dage	EC50	0,018 mg/l

En høj estimeret log Kow indikerer, at SY 124 er potentielt bioakkumulerende, men baseret på QSAR estimat skønnes en BCF på 10 baseret på, at det er en aromatisk azo-forbindelse. Adsorption til jord er vurderet til middel med en estimeret Koc 992 svarende til en log Koc 3,0. SY 124 kan ikke anses for let nedbrydeligt.

Samlet vurdering

Solvent Yellow 124 er en azo-forbindelse, der anvendes som Euromarker. Sundhedsmæssigt er stoffet potentielt sundhedsskadelig ved indtagelse og allergifremkaldende. Miljømæssigt er stoffet potentielt bioakkumulerende og kan ikke anses for let nedbrydeligt. Stoffet prioriteres lavt, da det allerede anvendes som sporstof.

ACID RED 87

Acid Red 87

Farvestofgruppe: Fluorescerende.

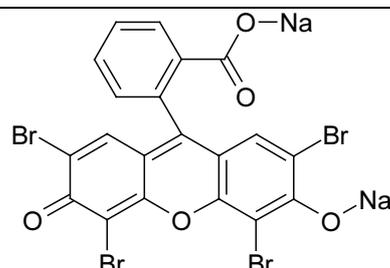
Navn: disodium-2-(2,4,5,7-tetrabromo-6-oxido-3-oxoxanthen-9-yl)benzoat

Synonym: Natrium tetrabromofluorescein

CI nr. 45380

CAS nr. 17372-87-1

EINECS. 241-409-6



Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	691,9 g/mol	Sax 1992, Chemfinder
Smeltepunkt	295°C 300°C	Physprop Chemfinder
Kogepunkt	840°C	QSAR estimeret (US-EPA)
Damptryk	6,8 E-19 Pa	QSAR estimeret (US-EPA)
Vandopløselighed	>=1000000 mg/l 1090 mg/l	Ved 21 oC QSAR estimeret (US-EPA), 25°C
Log K _{ow}	4,8 -1,7	Physprop: Estimeret QSAR estimeret (US-EPA)
Nedbrydelighed	Ingen data	
Økotox		
LC ₅₀	Fish, Medaka 1800 mg/l Brine shrimp 0,0014 mg/l	48 timer EC ₅₀ <i>Oryzias latipes</i> (Tonogai <i>et al.</i> 1979) 48 timer. <i>Artemia salina</i> (Kobayashi <i>et al.</i> 1977)
Humantox		
LD ₅₀	Ivn-mus 550 mg/kg	Sax
LD ₅₀	Orl-mus 2344 mg/kg	Sax
TDLo	Scu-rat 13000 mg/kg	Sax
LDLo	Ivn-rbt 300 mg/kg	Sax
LDLo	Ipr-rat 500 mg/kg	Sax
LDLo	Scu-rat 1500 mg/kg	Sax
Carcinogenitet		
Test resultater	Dnr-bcs 2 mg/disc	Sax: Consensus rapport. IARC Cancer Review: Animal Inadequate Evidence IMEMDT 15,183,77. Reported in EPA TSCA Inventory. EPA Genetic Toxicology Program.
Andet	Giftig ved intravenøs indtagelse. Moderat giftigt ved intraperitoneal, oral og subcutaneous indtagelse. (Sax) Eksperimentel reproduktion effekt (Sax). Tvivlsom carcinogen ved eksperimenter med tumor data (Sax). Ved forbrænding dannes meget toksiske dampe af Br ⁻ og Na ₂ O (Sax).	

Orl = oral .

Ivn = intravenøs.

Ipr = intraperitoneal.

Scu = Subcutaneous.

Dnr = nNA repair.

Bcs = Bacillus Subtilis.

Alene indholdet af brom og natrium gør stoffet uegnet til anvendelse i denne forbindelse.

Sundhed

Data omkring akut giftighed indikerer en lav akutgiftighed; data er dog noget usikre. Der foreligger oplysninger, som indikerer mulighed for kræftfremkaldende effekter.

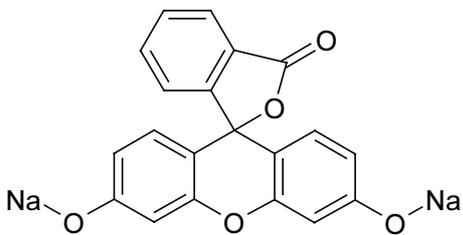
Miljø

Modellerne er ikke gode på dissocierbare stoffer, men der er ikke noget, der tyder på, at stoffet er særlig giftigt. Der er fundet et enkelt 48 timers forsøg med fisk som tyder på lav toksicitet i ferskvan. Stoffet kan være mere toksisk i saltvand baseret på forsøget med krebsdyret *Artemia salina*. QSAR estimater med ECOSAR indikerer en økotoksicitet for vandlevende organismer på mere end 100 mg/l, dvs. stoffet er ikke akut toksisk for vandlevende organismer.

Samlet vurdering

Acid Red 87 er et fluoroserende farvestof. Det indeholder brom, som gør stoffet uegnet i denne forbindelse.

ACID YELLOW 73

Acid Yellow 73 Farvestofgruppe: Fluorescerende. Navn: disodium-2-(3-oxo-6-oxidoxanthen-9-yl)benzoat Synonym: Fluorescein sodium		
Cl nr. 45350 CAS nr. 518-47-8 EINECS. 208-353-0		
Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	376,3 g/mol	Sax, Chemfinder
Smeltepunkt	315-395°C	Chemfinder
Kogepunkt	726°C	QSAR estimeret (US-EPA)
Damptryk	726°C	QSAR estimeret (US-EPA)
Vandopløselighed	>=100000 mg/l 1247 mg/l	Ved 20 oC QSAR estimeret ved 25°C (US-EPA)
Log K _{ow}	-0,67	Physprop: Estimeret
Nedbrydelighed	Ingen data	
Økotox		
LC ₅₀	Dafnie: 200 mg/l	EPA: 10 dage. Daphnia pulex
Humantox		
LD ₅₀	Orl-rat 6721 mg/kg	Sax 1992
LD ₅₀	Orl-mus 4738 mg/kg	Sax 1992
LD ₅₀	Ipr-mus 1800 mg/kg	Sax 1992
TDLo	Ivn-rbt 933 mg/kg	Sax 1992
TDLo	Scu-rat 19000 mg/kg	Sax 1992
TDLo	Ivn-man 14 mg/kg	Sax 1992
TDLo	Ivn-man 7142 µg/kg	Sax 1992
Carcinogenitet		
Test resultater	Dnd-esc 15 µmol/l	Sax 1992: Reported in EPA TSCA Inventory. Mutations data rapporteret.
Andet	Moderat giftigt ved intraperitoneal vej. Mildt giftigt ved oral indtagelse[2]. Eksperimentel reproduktion effekt. (Sax) Systemisk toksisk overfor mennesker ved intravenøs indtagelse. (Sax) Tvivlsom carcinogen ved eksperimenter med tumor data. (Sax) Ved forbrænding dannes toksiske dampe af NO _x . (Sax) Ved forbrænding dannes giftigt dampe af Na ₂ O. (Sax)	

Scu = Subcutaneous.
 Orl = oral.
 Ivn = intravenøs.
 Ipr = intraperitoneal.
 Dnd = DNA skade.
 Esc = Escherichia coli.

Acid Yellow 73 er et fluorescerende farvestof også kendt under navnet natrium fluorescein.

Sundhedsvurdering

Den akutte toksicitet er lav. Der er fundet en akut oral LD₅₀ på 6721 mg/kg for rotte og en akut oral LD₅₀ 4738 på mus. Ved intraperitoneal indgift er der fundet en LD₅₀ på 1800 mg/kg for mus. Ved intravenøs indgift er der fundet en TDLo på 933 mg/kg for kanin, men subcutan på rotte havde en TDLo på

19 g/kg. Der er desuden fundet intravenøse TDL₀ værdier for mennesker på henholdsvis 7 og 14 mg/kg (Sax 1992).

AY 73 vurderes på basis heraf at være mildt giftigt ved oral indtagelse, moderat giftigt ved intraperitoneal indgivelse og systemisk toksisk overfor mennesker ved intravenøs indgivelse. Der er fundet en eksperimentel reproduktionstoksisk effekt med DNA skader ved 15 µmol/l (5,6 mg/l), selv om stoffet anses for en tvivlsom carcinogen ved eksperimenter med tumor data (Sax 1992).

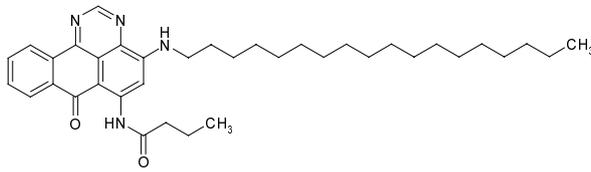
Miljøvurdering

Modelvurderinger er upålidelige for dissocierbare stoffer. Det kan forventes, at natrium dissocieres ved kontakt med vand. En estimeret log Kow for hele molekylet vil derfor blive lav: -0,67. Udelades natrium estimeres log Kow til 3,35. Gøres det samme ved skøn af adsorptionskoefficienten Koc, vil log Koc kunne estimeres til 5,1.

Økotoksiciteten kan forventes lav. Efter modellerne over 100 mg/l, hvilket dog støttes af det ene dafnierresultat, der har kunnet findes.

Samlet vurdering

For Acid Yellow 73 er fundet data, der viser, at stoffet er relativt vandopløseligt. Data for de sundhedsmæssige forhold indikerer, at stoffet har en lav akut giftighed og muligvis kræftfremkaldende effekter. Det er vanskeligt at estimere data for en miljøvurdering, da stoffet kan dissocieres. Stoffet prioriteres lavt på grund af den høje vandopløselighed.

Fluorol 242 Farvestofgruppe: Fluorescerende. Navn:		
Cl nr. 68410 CAS nr. 6871-92-7 EINECS. nr.		
Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	584,8 g/mol	
Smeltepunkt	347°C	QSAR estimeret (US-EPA)
Kogepunkt	787°C	QSAR estimeret (US-EPA)
Damptryk	2,1 E-17 Pa	QSAR estimeret (US-EPA)
Vandopløselighed	2,8 E-10 mg/l	QSAR estimeret (US-EPA)
Log K _{ow}	12,6	QSAR estimeret (US-EPA)
Nedbrydelighed	Ingen data	
Økotox		estimeret over vandopl.
LC ₅₀	Ingen data	
Humantox		
LC ₅₀	Ingen data	
Carcinogenitet		
Test resultater	Ingen data	
Andet	log Koc estimeret til 8,7.	

Indenfor projektets rammer har det ikke været muligt at finde data til at belyse de sundheds- og miljømæssige forhold. Stoffet prioriteres derfor lavt i denne sammenhæng.

Stoffet er skønnet at have en ekstrem lav vandopløselighed. Økotoksiciteten kan ikke vurderes med QSAR for et stof med så høj log Kow med bare nogenlunde sikkerhed. Modellens beregninger antyder dog værdier, der er højere end vandopløseligheden.

Bilag C: Data fra søgning i HSDB

DIBUTYLPHTHALAT

Dibutylphthalat har CAS-nr. 84-74-2. Stoffet anvendes primært som blødgør i plastprodukter.

Stoffet har en molvægt på 278.35, et smeltepunkt på -35°C og et kogepunkt på 340°C .

Stoffet er let opløseligt i organiske opløsningsmidler (Budavari S, 1996) og i olieprodukter (Lefaux R, 1968). Opløselighed i vand er angivet af Lefaux til 10 mg/liter ved 30°C og af USEPA til 13 mg /liter ved 25°C .

Stoffet har et damptryk på 2×10^{-5} mm Hg (27 mPa) ved 25°C (Donovan SF, 1996) Henry konstant er anført til $4,5 \times 10^{-6}$ atm * m³/mol (Roy WR, 1994). Dette betyder, at en vis fordampning vil ske. I luft er halveringstiden omkring 42 dage (HSDB).

I vand er halveringstiden oplyst til fra 14 til 125 dage (HSDB). Nedbrydning antages både at ske under aerobe og anaerobe forhold.

For stoffet er angivet en log Kow= 4.9 (Hansch C *et al*, 1995). Endvidere har stoffet en BCF på mellem 12 til 117 (estimeret, HSDB).

Ovenstående data viser, at stoffet alene på baggrund af sine fysiske og kemiske egenskaber ikke er velegnet som sporstof, da vandopløseligheden er for stor, og at nedbrydningen er for hurtig.

1-DECEN

Stoffet 1-decen anvendes til fremstilling af parfumer, smagsstoffer, farmaceutiske produkter, farvestoffer, olier og andet.

Stoffet 1-decen har CAS-nr. 872-05-9. Stoffet er en farveløs væske med molvægt på 140,27, et smeltepunkt på $-66,3^{\circ}\text{C}$ og et kogepunkt på $170,56^{\circ}\text{C}$ ved 760 mm Hg (Lide, D.R. 1998) og en massefylde på 0.7408 ved 20°C (Lide, D.R., 1998).

Stoffet har en lav opløselighed i vand. Den er bestemt til 0,115 mg/l ved 25°C (Shaw DG1989) og et damptryk på 1,67 mm Hg (220 Pa) ved 25°C (Daubert T.E.*et al.*, 1989).

For stoffet er angivet, at log Kow = 5,70 (American Petroleum Institute, 1994), en estimeret Koc på 1720 og BCF på 488. Henrys konstant er angivet til 2,68 atm m³/mol.

Ovenstående data indikerer, at stoffet primært vil findes på dampform, og at det derfor ikke vil være egnet som sporstof.

2-AMINOANTHRAQUINON

Stoffet 2-aminoanthraquinon har CAS-nummer 117-79-3 og EINECS 204-208-4. Stoffet anvendes som udgangspunkt for fremstilling af en række farvestoffer og farmaceutiske produkter.

Stoffet har en molvægt på 223,2 g/mol og et smeltepunkt på 302°C (Lewis, R.J, 1993).

Stoffet er opløseligt i alkoholer og en række andre hydrocarboner. Opløseligheden i vand er bestemt til 0.16 mg/l ved 25°C og et damptryk på $5,0 \times 10^{-11}$ mm Hg ved 25°C (Shimizu T *et al.*, 1987). Kogepunktet er der ikke fundet oplysninger om, men der findes oplysninger fra Shimizu om at stoffet sublimerer, dog uden angivelse af ved hvilken temperatur, dette sker.

Stoffet har en log Kow på 3,3 (Chemicals Inspection and Testing Institute, 1992). Henrys konstant er bestemt til $9,2 \times 10^{-11}$ atm- m³/mol og BCF er bestemt til at ligge mellem 18 og 46.

På basis af de ovenstående data vil det antages, at stoffet ikke fordamper, at det vil bindes til opløst stof og sediment i vand, og at ophobningen i vandlevende organismer vil være relativ lav. Stoffet er relativt stabilt. Test viser en biologisk nedbrydning på 4% over 4 uger (Chemicals Inspection and Testing Institute, 1992).

Stoffet vil således på baggrund af sine fysiske og kemiske egenskaber være velegnet som sporstof.

2-ETHYLHEXANSYRE

Stoffet ethyl-hexansyre bruges i en række malinger og som mellemprodukt for fremstilling af en række kemiske produkter.

Stoffets CAS-nr. er 149-57-5 og det har en molvægt på 144,22 g/mol.

Stoffet har et kogepunkt på 228°C (Lide, D.R., 1995) men ingen angivelse af smeltepunkt.

Stoffet er opløseligt i organiske forbindelser. I vand er opløseligheden bestemt til 1,4 g/l ved 25°C (Ashford, R.D., 1994) og med et damptryk på 0,03 mm Hg ved 20°C (Flick, E.W., 1991).

Hvis stoffet kommer i jord, er det forventet at have en lav mobilitet baseret på en estimeret Koc på 650. Det forventes, at stoffet vil fordampe fra fugtig jord baseret på en estimeret Henrys konstant på $2,9 \times 10^{-6}$ atm m³/mol. Fordampning fra tør jord er ikke forventet på grund af stoffets lave damptryk (HSDB).

Det forventes, at stoffet vil nedbrydes i jord, både under aerobe og anaerobe forhold (Yap MGS *et al.*; 1992 og Francis AJ, 1982) i løbet af nogle dage.

Da stoffet således ikke er stabilt, kan det ikke anvendes som sporstof.

Bilag D: Data fra søgning i Beilstien

Parabener er estere af 4-hydroxy-benzosyre. Der findes 4 almindelige forbindelser af estertypen: methyl-, ethyl-, propyl og butyl-hydroxy-benzosyre.

I nedenstående skema er de væsentligste fysiske og kemiske data vist.

TABEL D1: FYSISK/KEMISKE DATA FOR PARABENER

	Methyl-hydroxy-benzosyre	Ethyl-hydroxy-benzosyre	Propyl-hydroxy-benzosyre	Butyl-hydroxy-benzosyre
CAS-nr.	99-76-3	120-47-8	94-13-3	94-26-8
Molvægt [g/mol]	152	166	180	194
Kogepunkt	275	298	285	300
Smeltepunkt	131	117	97	68,5
Vandopløselighed	3000 mg/liter	885 mg/liter	463 mg/liter	207 mg/liter
Log K_{ow}	1,96	2,47	3,04	3,57
Log K_{oc}	2,10	2,36	2,63	2,90

Data er hentet fra søgning i HSDB.

I tabel D1 ses, at parabenerne med stigende molvægt har de mest egnede egenskaber med hensyn til vandopløselighed og Log K_{ow} .

En adsorptionskoefficient for propyl paraben log K_{oc} på 2,63 indikerer en moderat adsorption til jord og en langsom udvaskning kan ikke udelukkes. En vurdering baseret på Mackay I fordelingsmodel (Mackay 1991) antyder at stoffet i en ligevægtssituation ville fordele sig med ca. 49% i jord, 50% i vand og 1% i luft. Baseret på listen over udvalgte kulbrinter (Bilag A) kan det ses at propylparaben ligger lidt over 25 percentilen, dvs. at ca. 25% af de udvalgte kulbrinter har en K_{oc} mindre end 2,6. Stoffet ligger derfor indenfor intervallet for indholdsstoffer i olie og benzin selvom en bedre adsorption kunne have været ønskelig.

Da der er yderst begrænsede økotoxiske data tilgængelige for de aktuelle stoffer, er det valgt at foretage estimater ved hjælp af ECOSAR v0.99f. Estimaterne er baseret på data fra tabel D1, og de estimerede størrelser er vist i tabel D2.

TABEL D2: ESTIMEREDE LC50 VÆRDIER FOR PARABENER (ECOSAR)

LC ₅₀ mg/liter	Methyl-hydroxy-benzosyre	Ethyl-hydroxy-benzosyre	Propyl-hydroxy-benzosyre	Butyl-hydroxy-benzosyre
Estimat ud fra ester-delen				
Fisk, 96 timer	23,0	13,8	8,2	4,8
Daphnier, 48 timer	120,8	47,3	18,4	7,1
Grøn alge, 96 timer	1,8	1,1	0,7	0,4
Estimat ud fra phenol-delen				
Fisk, 96 timer	22,4	12,2	6,6	3,5
Daphnier, 48 timer	8,2	5,6	3,9	2,6
Grøn alge, 96 timer	75,6	30,4	12,1	4,8

Af tabel D2 ses, at der er en stigende giftighed med stigende molvægt.

Da en lav vandopløselighed, en log Kow mellem 3 og 4 samt en relativ lav giftighed er ønskelig er propylparabenen valgt. Denne er nærmere beskrevet i rapportens kapitel 4.

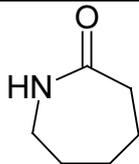
Bilag E: Data for øvrige stoffer

Det er valgt at vurdere de 4 syntetisk fremstillede stoffer

- Caprolactam
- Cyclohexanol
- Cyclohexanon
- Cyclohexylacetat

Til brug for vurderingen er der samlet en række oplysninger, der er vist i det følgende.

CAPROLACTAM

Caprolactam		
Navn: 1-Aza-2-cycloheptanone		
CAS nr. 105-60-2		
EINECS. 203-313-2		
Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	113,2 g/mol	
Smeltepunkt	69 °C	Sax 1992, Chemfinder, IUCLID 2000.
Kogepunkt	270 °C 270,8 °C 268,5 °C	HSDB. (eksperimentel værdi) IUCLID 2000. Ullmann 1993, IUCLID 2000.
Damptryk	0,21 Pa 0,25 Pa 140 Pa 250 Pa	Physprop: ekstrapoleret ved 25 °C. HSDB. IUCLID 2000: ved 20 °C. Ullmann 1993: ved 105 °C.
Vandopløselighed	772000 mg/l 5250000 mg/l let opløseligt i vand 82 wt%	Physprop: ekstrapoleret ved 10 °C fra målte IUCLID 2000, HSDB: ved 25 °C. Merck 1996. IUCLID 2000: ved 25 °C. Ullmann 1993: ved 20 °C.
Log K _{ow}	0,12	IUCLID 2000: OECD guide-line 107.
Nedbrydelighed	40 mg/l 85-100 % nedbrudt efter 31 dage	IUCLID 2000. Modificeret OECD model (TOC, bzw. CSB). Aerob.
Økotox		
EC ₅₀	>500 mg/l	Fundet i drikkevand i USA og Tyskland (HSDB). IUCLID 2000: Directive 84/449/EEC, C.2. 24 og 48 timer. <i>Daphnia magna</i>
LC ₅₀	500-1000 mg/l	IUCLID 2000: OECD TG 203. Statisk 96 timer. <i>Salmo gairdneri</i> (fisk).
LC ₅₀	Flow 1450 mg/l	EPA: <i>Leuciscus idus</i>
Humantox		
NOEC (hoste)	1hl-pig 118-261 mg/m ³	Ullmann 1993: 7 timer. Guineapig.
LD ₅₀	Orl-rat 1155 mg/kg	Ullmann 1993.
LD ₅₀	Orl-mus (male) 2100 mg/kg	HSDB.
LD ₅₀	Orl-mus (female) 2500 mg/kg	HSDB.

Caprolactam		
Navn: 1-Aza-2-cycloheptanone		
LD ₅₀	Orl-rat(male) 1600 mg/kg	HSDB.
LD ₅₀	Orl-rat(female) 1200 mg/kg	HSDB.
Carcinogenicitet		
Test resultater	Negativ Ikke klassificeret som carcinogen.	Ullmann 1993. HSDB: Ames test, CHO test, celle transformation test.
Grænseværdier	Dampe 5 ppm/25 mg/m ³ Støv/pulver 1 mg/m ³	Arbejdstilsynet 2000, HSDB, EPA. Arbejdstilsynet 2000.
Andet		

Caprolactam bliver fremstillet og brugt ved produktion af kunstige fibre (polyamid typen) og som opløsningsmiddel for tunge polymere.

Identitet

Caprolactam har CAS-nr. 105-60-2. Det er opført på EINECS-listen med nr. 203-313-2. Caprolactam har en molekylvægt på 113,2 og sumformlen C₆-H₁₁-N-O.

Fysisk-kemiske egenskaber

Smeltepunktet for caprolactam ligger på 69°C (IUCLID 2000) og kogepunktet på omkring 268,5-270,8°C ved 1 atm (IUCLID 2000). Caprolactam er letopløseligt i vand >1 kg/l ved 20°C. Caprolactam har et damptryk på 140 Pa (IUCLID 2000).

Ovennævnte betyder, at stoffet er fast og fordamper meget langsomt på niveau med en række af de komponenter, der findes i benzin, olie og dieselprodukter ved normale temperature i jorden. Caprolactam er meget let opløseligt i vand og vil derfor potentielt være meget mobilt i jorden.

Sundhedsmæssige egenskaber

Caprolactam er blevet testet på rotter, og følgende LD₅₀ værdier er fundet: Akut oral rotte (hanner) 1600 mg/kg og for hunner 1200 mg/kg (Sax 1992).

Ud fra de ovenstående LD₅₀ værdier skal caprolactam klassificeres som sundhedsskadeligt.

Indånding af dampe kan give irritationer af luftvejene og har svagt nerveskadende effekter (HSDB). Ved påvirkning af dampe og støv i koncentrationer omkring eller under grænseværdien på henholdsvis 25 mg/m³ (5 ppm), og 1 mg/m³ (At-vejledningen), forventes de nævnte skader ikke.

Det antages, at caprolactam ikke er kræftfremkaldende, da ingen test har vist kræftfremkaldende effekter (IARC).

Miljømæssige egenskaber

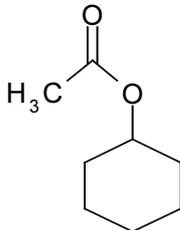
Stoffets forventes at have lav akut økotoksicitet. Caprolactam har en 96 timers LC₅₀ værdi for fisk på 1450 mg/l (EPA).

Caprolactam har en log Kow værdi på 0,12 (IUCLID 2000), og stoffet vurderes derfor som værende ikke potentielt bioakkumulerbart.

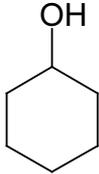
Caprolactam er nedbrydelig i aerob jord (HSDB). Det har derimod ikke været muligt at finde data for anaerob nedbrydning i jord. Det forventes, at stoffet langsomt vil fordampe fra en tør jord, mens caprolactam i en våd jord vil blive ført med vandet (HSDB).

Da caprolactam tilsyneladende vil forsvinde hurtigere end brændstofferne (for høj vandopløselighed), er det ikke egnet som markør.

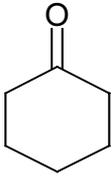
CYCLOHEXYL ACETAT

Cyclohexyl acetat		
CAS nr. 622-45-7 EINECS. 210-736-6		
Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	142,2 g/mol	
Smeltepunkt	-65 °C	Physprop, HSDB.
Kogepunkt	172-173°C 177°C	Physprop, Chemfinder, HSDB. Sax 1992.
Damptryk	1439,9 Pa 1466,5 Pa	Physprop: ekstrapoleret data ved 25 °C. HSDB: ved 25 °C.
Vandopløselighed	728,4 mg/l Opløseligt i ethyl ether og ethanol Ikke opløseligt i vand	Physprop: estimeret data ved 25 °C. HSDB. ECDIN.
Log K _{ow}	2,64	Physprop: estimeret data.
Nedbrydelighed	12 timer / 7,4 dage	HSDB: halveringstid i vand (flod/sø).
Økotox		
LC ₅₀	Dafnier: 330 mg/l	24 timer, statisk. <i>Daphnia magna</i> . (Aquire, EPA)
LC ₅₀	Fisk: 70 mg/l	48 t, <i>Leuciscus idus melanotus</i> , (Aquire, EPA)
Humantox		
LD ₅₀	Orl-rat 6730 mg/kg	Sax 1992, HSDB.
LD ₅₀	Skn-rbt 10000 mg/kg	Sax 1992.
LDLo	Scu-cat 606 mg/kg	Sax 1992.
Carcinogenitet		
Test resultater		
Grænseværdier		
Andet	Cyclohexyl acetat er klassificeret som brandbar og eksplosiv væske; Mærkat: Brandbar væske (Sax 1992). Systemisk effekt og irritation af lungerne ved inhalering (Sax 1992). Ved forbrænding dannes syre røg og irriterende dampe (Sax 1992).	

CYCLOHEXANOL

Cyklohexanol		
CAS nr. 108-93-0 EINECS. 203-630-6		
Fysisk/kemiske egenskaber	Data	Bemærkning
Molvægt	100,2 g/mol	Physprop, Sax 1992, Chemfinder, HSDB, Merck 1996, Ullmann 1993.
Smeltepunkt	25,4°C 23-25°C 24°C 25,15°C	Physprop, HSDB. Chemfinder, Merck 1996. Sax 1992, IUCLID 2000. Physprop, Ullmann 1993.
Kogepunkt	160,8°C 161,5°C 161°C 161,08°C 160-162°C 161,1°C	Physprop. Sax 1992. Chemfinder, Merck 1996. HSDB. IUCLID 2000. Ullmann 1993.
Vandopløselighed	42000 mg/l 36000 mg/l 40000 mg/l 3,6 g/100 g vand	Physprop: eksperimentelle data ved 10°C. Chemfinder. IUCLID 2000: ved 20°C. Ullmann 1993: ved 20°C.
Log K _{ow}	1,23 1,25	Physprop, HSDB: eksperimentelle data. IUCLID 2000: OECD Guide-line 107.
Nedbrydelighed	100 mg/l 94-99 % efter 28 dage 213 mg/l < 5 % efter 23 dage	IUCLID 2000: MITI-test. Aerob. IUCLID 2000.
Damptryk	106,7 Pa 3500 Pa 130000 Pa 150 Pa	Physprop: ekstrapoleret ved 25°C. Chemfinder. IUCLID 2000: ved 20°C. Ullmann 1993: ved 20°C.
Økotox		HSDB: Cyklohexanol forventes at forsvinde fra jorden meget hurtig på grund af sin flygtighed. Hvis der er vand til stede i jorden forventes det ikke, at der sker nogen sorption til sedimentet.
LC ₅₀	Flow 705 mg/l	IUCLID 2000: 96 timer. <i>Pimephales promelas</i>
LC ₅₀	> 500 mg/l	IUCLID 2000: 24 timer. <i>Daphnia magna</i>
Humantox		
LD ₅₀	Ivn-mus 272 mg/kg	Sax 1992.
LD ₅₀	Orl-rat 2060 mg/kg	Sax 1992.
LDLo	Orl-rbt 2200 mg/kg	Sax 1992.
LDLo	Skn-rbt 12000 mg/kg	Sax 1992.
LDLo	Scu-rat 315 mg/kg	Sax 1992.
Carcinogenitet		
Test resultater		Sax 1992: Human mutation rapporteret. EPA Genetic Toxicology Program. Reported in EPA TSCA Inventory.
Grænseværdier	50 ppm / 200 mg/m ³	HSDB, Arbejdstilsynet 2000.
Andet	Giftig ved intravenøs indtagelse. Moderat giftigt ved oral, subcutaneous og intramuscular indtagelse. Mild giftig ved hudkontakt. Systemisk effekt ved inhalering (Sax 1992). Klassificering Xn, R20/22-37/38 (BEK nr. 733, 2000).	

CYCLOHEXANON

Cyklohexanon			
CAS nr. 108-94-1 EINECS. 203-631-1			
Fysisk-kemiske egenskaber	Data	Ref	Bemærkning
Molvægt	98,1 g/mol	Physprop, Sax 1992, Chemfinder, HSDB, Merck 1996, Ullmann 1993.	
Smeltepunkt	-31°C -45°C -32,1°C -47°C	Physprop, HSDB, IUCLID 2000. Sax 1992. Merck 1996. Chemfinder, Ullmann 1993.	
Kogepunkt	155,4°C 115,6°C 155,6°C 156,4°C	Physprop, IUCLID 2000. Sax 1992. Chemfinder, HSDB, Merck 1996. Ullmann 1993.	
Vandopløselighed	25000 mg/l 50000-100000 mg/l 150000 mg/l	Physprop: eksperimentelle data ved 25°C. Chemfinder: ved 18°C. HSDB, Merck 1996, IUCLID 2000: ved 10°C..	
Log K _{ow}	0,81 0,86	Physprop, HSDB: eksperimentelle data. IUCLID 2000: OECD guide-line 107 ved 25°C.	
Nedbrydelighed		HSDB, IUCLID 2000: aerob nedbrydelig i jord ifølge screenings test.	
Damptryk	577,3 Pa 2000 Pa 666,6 Pa 450000 Pa 520 Pa	Physprop: eksperimentelle data ved 25°C. Chemfinder. HSDB: ved 26,4°C. IUCLID 2000: ved 20°C. Ullmann 1993: ved 20 °C.	
Økotox			
LC ₅₀	527 mg/l	HSDB, IUCLID 2000: 96 timer. <i>Pimephales promelas</i> Fathead minnow.	
LC ₅₀	800 mg/l	EPA: 24 timer. <i>Daphnia magna</i> .	
Humantox			
LD ₅₀	Scu-rat 2170 mg/kg	Sax 1992.	
LDLo	Scu-mus 1300 mg/kg	Sax 1992.	
LD ₅₀	Orl-rat 1,62 ml/kg	Sax 1992.	
LD ₅₀	Orl-rat 1535 mg/kg	Sax 1992, IUCLID 2000.	
LD ₅₀	Orl-mus 1400 mg/kg	Sax 1992.	
LDLo	Orl-rbt 1600 mg/kg	Sax 1992.	
LD ₅₀	Skn-rbt 948 mg/kg	Sax 1992.	
Carcinogenitet			
Test resultater		HSDB: Ikke klassificeret som carcinogen.	
Grænsevær-dier	10 ppm / 40 mg/m ³	Arbejdstilsynet 2000.	
Andet	Cyklohexanon er estimeret til at have høj mobilitet i jord. Cyklohexanon forventes at være meget flygtig fra jordoverfladen HSDB. Moderat giftigt. Rapporteret i EPA TSCA inventory (Sax 1992). Klassificering: Xn, R10-20 (BEK nr. 733, 2000).		

Mma = microsomal mutagenicity assay.

Otr = oncogenic transformation.

Kdy = kidney.

Imp = Implant.

Eye = administration into eye.

Ipr = intraperitoneal.

Mmo = mutation i mikroorganisme.

Esc = Escherichia coli.

Sat = Salmonella typhimurium.

Ham = hamster.

Scu = Subcutaneous.

Orl = oral .

Ivn = intravenøs.

Ihl = inhalation.

Dnd = DNA skade.

Cyclohexanon er et organisk opløsningsmiddel, der primært anvendes til fremstilling af malinger, lakker, forskellige plasttyper og bekæmpelsesmidler. Stoffet fremstilles og forbruges derfor i meget store mængder på verdensmarkedet.

Identitet

Cyclohexanon har CAS nr. 108-94-1. Det er opført på EINECS-listen med nr. 203-631-1. Cyclohexanon har en molekylvægt på 98,14 g/mol, og sumformlen $C_6H_{10}O$.

Fysisk- kemiske egenskaber

Smeltepunktet for cyclohexanon ligger på $-31^{\circ}C$ (IUCLID) og kogepunktet på omkring $155^{\circ}C$ ved 1 atm (IUCLID). Cyclohexanon er opløseligt i vand med 25 g/l ved $25^{\circ}C$ (Physprop) og 150 g/l ved $10^{\circ}C$ (IUCLID). Cyclohexanon er opløseligt i alkoholer, ethere og andre organiske opløsningsmidler (HSDB) og er således fuldt blandbare med olieprodukter. Cyclohexanon har et højt damptryk på >500 Pa ved $20^{\circ}C$.

Cyclohexanon fordamper, men flygtigheden er på niveau med en række af de komponenter, der findes i benzin, olie og dieselprodukter, men da det er relativt let opløseligt vand, vil det være mere mobilt end benzin, olie og dieselprodukter.

Sundhedsmæssige egenskaber

Akut oral giftighed LD_{50} for rotte er 1535 mg/kg. Cyclohexanon kan virke affedtende ved hudkontakt og kan i visse tilfælde medføre hudirritationer (HSDB). Indånding af dampe kan give irritationer af luftvejene og har svagt nerveskadende effekter (HSDB). Ved påvirkning af dampe i koncentrationer omkring eller under grænseværdien på 10 ppm (40 mg/m^3) (Grænseværdier 2000) forventes de nævnte skader ikke.

Det antages, at cyclohexanon ikke er kræftfremkaldende, da ingen test har vist kræftfremkaldende effekter (IARC). Cyclohexanon er klassificeret sundhedsskadeligt. Følgende ved indånding (MEM, 2000).

Miljø-mæssige egenskaber

Den akutte økotoksiske effekt er lav. Cyclohexanon har en 96 timers LC_{50} værdi for fisk på 527 mg/l (IUCLID).

Cyclohexanon har en log K_{ow} værdi på 0,8 (IUCLID), og stoffet anses derfor som værende ikke bioakkumulerbart.

Cyclohexanon er nedbrydelig i aerob jord (IUCLID). Det har derimod ikke været muligt at finde data for anaerob nedbrydning i jord. Det forventes, at stoffet vil fordampe fra jordoverflader.

Med en høj fordampningsrate og høj vandopløselighed som kan betyde, at cyclohexanon vil forsvinde hurtigere end brændstofferne, er det ikke egnet i denne sammenhæng.