

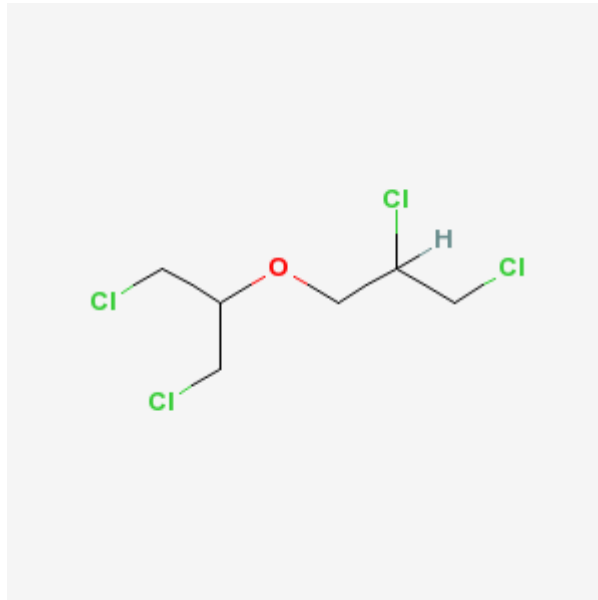
Stoffdatenblatt

1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether

(59440-90-3)

Stand: 15.03.2010

Erstellt von: AL-Luhnstedt



1 Substanz

Name:	1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether
EG-Name:	1,2-Dichlor-3-[2-chlor-1-(chlormethyl)ethoxy]propan
IUPAC-Name:	1,3-Dichlor-2-(2,3-dichlorpropoxy)propan
CAS-Nummer:	59440-90-3
EG-Nummer:	261-761-4
ETOX-Nummer:	89249
Molgewicht:	239,96 g/mol
EG Richtlinie 67/548/EWG Annex I Index:	---
Summenformel:	C ₆ H ₁₂ Cl ₂ O
Stoffgruppe:	Halogenierte Alkylether

1.1 Analytik

Chlorierte Propylether in Wasserproben werden mit n-Hexan extrahiert und mittels hoch auflösender Gaschromatographie/Massenspektrometrie bestimmt [1].

2 Vorschlag für eine Umweltqualitätsnorm

2.1 Schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm (UQN)

Schutzgut	JD-UQN	ZHK-UQN	Anmerkung
Oberflächengewässer	1 µg/L	10 µg/L	Vorläufiger Wert

JD: Jahresdurchschnitt; ZHK: zulässige Höchstkonzentration

2.2 Spezifische Umweltqualitätsnorm (UQN)

Schutzgut	UQN	Anmerkung
Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser)	JD-UQN: 1 µg/L ZHK-UQN: 10 µg/L	Vorläufige Werte, die unbedingt der experimentellen Überprüfung bedürfen; Siehe 8.1
Aquatische Lebensgemeinschaften (Küsten- und Übergangsgewässer)	JD-UQN: 0,1 µg/L ZHK-UQN: 1 µg/L	Vorläufige Werte, die unbedingt der experimentellen Überprüfung bedürfen; Siehe 8.1

Schutzgut	UQN	Anmerkung
Benthische Lebensgemeinschaften	UQN _{sediment} : 6 mg/kg OC (organischer Kohlenstoff)	Vorläufiger Wert der unbedingt der experimentellen Überprüfung bedarf; Siehe 8.2
Secondary poisoning	Mangels Daten kann ein vorläufiger UQN-Vorschlag nicht abgeleitet werden.	Siehe 8.3
Fischkonsum	Mangels Daten kann ein vorläufiger UQN-Vorschlag nicht abgeleitet werden.	Siehe 8.4
Trinkwasserversorgung	UQN _{dw} : 0,1 µg/L	Siehe 8.5

3 Allgemeine Stoffinformationen

3.1 Klassifikation und Kennzeichnung

R-Satz und Kennzeichnung / GHS	Quelle
---	N-CLASS Database [2]
---	http://www.ghs-konverter.de

3.2 Verfügbare Qualitätsanforderungen für Oberflächengewässer

Land	Status	Schutzgut	Bezeichnung	Wert	Bemerkung	Quelle
USA	maximal erlaubte Summenkonzentration	aquatische Lebensgemeinschaften Süßwasser	MTC	238 ng/L	Σ Chloralkylether	ARGE Elbe[1]
CZ	Allgemeine Anforderung	Oberflächengewässer	C90	0,2 µg/L	---	[3]
D	Reduzierungsanforderung	Gewährleistung der Trinkwassersicherheit	UQN bzw. Zielvorgabe	0,01 µg/L	Bis(1,3-dichlor-2-propyl)ether + Bis(2,3-dichlor-1-propyl)ether + 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether	FGG Elbe [4]

Anmerkung: Die Ableitung der Qualitätsanforderungen ist mangels Quellenangaben nicht nachvollziehbar.

3.3 Wirkungsweise und Verwendung

Wirkweise: keine eindeutigen Angaben, mutagen (mit metabolischer Aktivierung) und evtl. endokrin wirksam (Neurath et al., zitiert in ARGE Elbe [1])

Verwendung bzw. Herkunft: Neben- bzw. Abfallprodukt im Produktionsprozess bei der Herstellung von Epichlorhydrin, einem wichtigen Ausgangsstoff für in großen Mengen produzierte Epoxidharze [1].

Stoffrechtliche Regelungen:

4 Physikalisch-chemische Stoffeigenschaften

Eigenschaft		Quelle
Wasserlöslichkeit	627 mg/L (ber.)	SPARC [5]
	89,6 mg/L (ber.)	EPISuite [6]
Dichte	1,42 g/cm ³ (ber.)	SPARC [5]
Dampfdruck	10E-4,92 atm] (ber.)	SPARC [5]
Henry-Konstante	4,61E-06 atm/(mol/m ³) (ber.)	SPARC [5]
	4,12E-05 atm/(mol/m ³) (ber.)	EPISuite [6]

5 Verhalten und Verbleib in der Umwelt

Eigenschaft		Quelle
Biotischer und abiotischer Abbau		
Hydrolytische Stabilität (DT50)	---	
Photostabilität (DT50)	---	
Leicht biologisch abbaubar (ja/nein)	nein (ber.)	EPISuite [6]
	nein	ARGE Elbe [1]
Metabolite	2,3-Dichlorpropan-1-ol und 1,3-Dichlorpropan-2-ol	ARGE Elbe [1]
Sorptionsverhalten		
log K _{ow}	2,75 (ber.)	SPARC [5]
	2,90 (ber.)	EPISuite [6]
	2,84; 2,94; 3,2	ARGE Elbe [1]
K _{oc}	log K _{oc} : 2,9 (Gemisch von 3 Isomeren)	[7]
K _d	---	

Eigenschaft		Quelle
Bioakkumulation		
BCF (Biokonzentration)	38 (berechnet)	EPISuite [6]
	60 (berechnet mit \emptyset log <i>Kow</i> -Wert von 2,91)	eq. 74 TGD [8], [9]
	780 (berechnet mit \emptyset log <i>Kow</i> -Wert von 2,91)	bilinear worst case model [10]
BAF (Bioakkumulation)	66 (berechnet)	EPISuite [6]
BMF (Biomagnifikation)	---	

6 Wirkungsdaten

6.1 Aquatische Organismen

Für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether liegen keine Testdaten zu akuten oder chronischen Wirkungen auf aquatische Organismen vor. Lediglich für ein Gemisch von drei Tetrachlordipropylether-Isomeren (59440-90-3, 59440-89-3, 7774-68-7) liegen Testdaten zu akuten Wirkungen auf Fische, Kleinkrebse, Insekten und Bakterien vor. Der niedrigste Messwert für das Isomerengemisch von 0,9 mg/L wurde für *Daphnia magna* (10d LC50) berichtet [7].

Als Ergänzung zu den unzureichenden experimentell ermittelten Wirkdaten für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether wurden QSAR-Schätzwerte berechnet. Dazu wurden zwei Grundannahmen getroffen: (1) 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether ist unspezifisch toxisch und verhält sich entsprechend log *Kow*-abhängigen Baseline-Modellen; (2) Der durchschnittliche log *Kow*-Wert von 2,91 liefert eine adäquate Beschreibung des Verteilungsverhaltens von 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether.

Auf der Basis dieser beiden Grundannahmen wurden QSAR-Modelle für Haloether aus EcoSAR [6] sowie die Baseline-Modelle zur aquatischen Toxizität des TGD [11] für die Berechnungen ausgewählt. Die jeweils niedrigsten akuten Werte liefert EcoSAR mit 21 mg/l für Fische (96h LC50, Spezies nicht angegeben), 5,7 mg/l für Daphnien (48h EC50, Effekt und Spezies nicht angegeben) und 13 mg/l für Grünalgen (96h EC50, Effekt und Spezies nicht angegeben). Der niedrigste chronische Wert wird mittels EcoSAR für Daphnien mit 0,39 mg/L (Dauer, Effekt und Spezies nicht angegeben) berechnet. Mit dem TGD-Modell wird der niedrigste chronische Wert für Fische mit 2,9 mg/L (28-32d NOEC, ELS, *Danio rerio* und *Pimephales promelas*) errechnet. Ein chronischer Wert für Algen wird nur bei EcoSAR berechnet und liegt mit 5,5 mg/L (Dauer, Effekt und Spezies nicht angegeben) im Bereich der anderen Werte.

Insgesamt lässt sich feststellen, dass die Datenlage zu Wirkungen von 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether auf aquatische Organismen unzureichend ist. Weil aber die vorhandenen Werte für Isomerengemische sowie QSAR-Schätzwerte innerhalb der gleichen Größenordnung liegen, können sie als Evidenz-Basis für einen vorläufigen Wirkwert dienen. Es wird dringend empfohlen, für diesen Stoff experimentelle Untersuchungen zur aquatischen Toxizität, z.B. Fisch-ELS unter Einbeziehung des angedeuteten endokrinen Potentials, zu veranlassen, um anhand dieser Befunde die vorläufige Bewertung zu überprüfen und, ggf., zu korrigieren.

6.2 Sedimentorganismen

Die Relevanz des Schutzguts „Sedimentorganismen“ ist für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether nicht eindeutig. Weil der Triggerwert von $\log K_{OC} \geq 3$ bzw. $\log K_{OW} \geq 3$ teilweise erreicht ist [12], kann eine Anreicherung (Sorption) im Sediment nicht ausgeschlossen werden. Der durchschnittliche $\log K_{ow}$ -Wert beträgt 2,91 (Spanne: 2,75 - 3,2) und für ein Gemisch von 3 Isomeren wurde ein $\log K_{oc}$ -Wert von 2,9 berichtet [7].

Für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether liegen keine Testdaten zu akuten oder chronischen Wirkungen auf Sedimentorganismen vor. Lediglich für ein Gemisch von drei Tetrachlordipropylether-Isomeren (59440-90-3, 59440-89-3, 7774-68-7) liegen Testdaten zu akuten Wirkungen auf Kleinkrebse und Insekten vor. Die Messwerte scheinen vom Gehalt an organischen Kohlenstoff (OC) beeinflusst zu sein und betragen 6000 bis 30000 mg/kg OC für *Hyalella azteca* (min. 10d LC50: 6900 mg/kg OC), *Chironomus tetans* (min. 10d LC50: 7600 mg/kg OC) und *Daphnia magna* (min. 10d LC50: 6200 mg/kg OC) für das Isomergemisch [7].

6.3 Nahrungskette Fisch – Vogel oder Säugetier (Secondary poisoning)

Die Relevanz des Schutzguts „Anreicherung entlang von Nahrungsketten“ ist für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether nicht eindeutig. Weil der Triggerwert von $BCF \geq 100$ bzw. $\log K_{OW} \geq 3$ teilweise erreicht ist [12], kann eine Anreicherung entlang von Nahrungsketten Fisch – Vogel oder Säugetier (secondary poisoning) nicht ausgeschlossen werden. Der durchschnittliche $\log K_{ow}$ -Wert beträgt 2,91 (Spanne: 2,75 - 3,2) und berechnete BCF-Werte sind zumeist < 100 , doch als worst-case wird 780 berechnet [10].

Weil notwendige Wirkdaten nicht vorliegen, ist eine abschließende Bewertung nicht möglich.

7 Wirkung auf die menschliche Gesundheit

Es liegen keine humantoxikologisch relevanten Wirkdaten für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether vor. Es gibt allerdings Hinweise auf mutagene (mit metabolischer Aktivierung) und endokrine Wirkungen [1]. Dieser Verdacht sollte überprüft und bei einer abschließenden Bewertung berücksichtigt werden.

8 Berechnung der Umweltqualitätsnormen

8.1 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz der aquatischen Organismen

Es liegen keine Wirkdaten für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether für die Ableitung eines Qualitätsnorm-Vorschlags vor.

Binnenoberflächengewässer (Flüsse und Seen): Auf der Basis von Daten für Isomergemische und QSAR-Schätzwerten lassen sich lediglich vorläufige UQN-Vorschläge berechnen, die aber unbedingt und zeitnah mit geeigneten experimentellen Wirkdaten zu überprüfen und, ggf., zu korrigieren sind. Es wird empfohlen, die entsprechenden Untersuchungen, z.B. Fisch ELS unter Berücksichtigung möglicher endokriner Effekte, zu veranlassen.

Die Berechnung des vorläufigen JD-UQN-Vorschlags für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether basiert einerseits auf einem 10d LC50-Wert für *Daphnia magna* von 0,9 mg/L für das Gemisch von drei Isomeren und einem Sicherheitsfaktor von 1000 und andererseits auf dem niedrigsten QSAR-Schätzwert von 0,4 mg/L zur chronischen Wirkung auf Daphnien und einem Sicherheitsfaktor von 50 (Faktor 50 aufgrund des Vorliegens von chronischen NOEC-/EC10-Werten, die mindestens zwei trophische Ebenen darstellen sowie ein zusätzli-

cher Faktor von 10 aufgrund der Verwendung eines QSAR-Schätzwerts). In beiden Fällen errechnet sich ein vorläufiger JD-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) von ungefähr 1 µg/L 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether. Die Übereinstimmung der Ergebnisse der beiden Ableitungen bestärkt diesen JD-UQV-Vorschlag, entbindet aber nicht von der Notwendigkeit einer experimentellen Überprüfung.

Ein vorläufiger ZHK-UQN-Vorschlag kann konventionell um Faktor 10 höher sein als der vorläufige JD-UQN-Vorschlag [12]. Der vorläufige ZHK-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) beträgt somit 10 µg/L 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether, bedarf aber ebenfalls der experimentellen Überprüfung.

Sonstige Oberflächengewässer (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer): Weil die wenigen verfügbaren Testdaten für Isomerengemische auch für marine Spezies bestimmt wurden und keine Hinweise auf unterschiedliche Sensitivitäten von limnischen und marinen Spezies liefern, wurde die gleiche Datenbasis wie zur Ableitung der UQN-Vorschläge für limnische Lebensgemeinschaften verwendet.

Gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [12] sind die Sicherheitsfaktoren für den marinen Bereich grundsätzlich um einen Faktor 10 größer als für limnische Systeme. Damit berechnet sich aus dem JD-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) von 1 µg/L unter Verwendung eines zusätzlichen Sicherheitsfaktors von 10 ein vorläufiger JD-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) von 0,1 µg/L 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether.

In analoger Weise berechnet sich aus dem ZHK-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) von 10 µg/L unter Verwendung eines zusätzlichen Sicherheitsfaktors von 10 ein vorläufiger ZHK-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) von 1 µg/L 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether.

8.2 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz der Sedimentorganismen

Obwohl die Relevanz des Schutzguts „Sedimentorganismen“ für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether nicht eindeutig ist und keine Wirkdaten für die Ableitung eines Qualitätsnorm-Vorschlags vorliegen, wird die vorhandene Evidenz genutzt, um einen vorläufigen UQN-Vorschlag für Sedimentorganismen abzuleiten. Dazu werden Testergebnisse mit Isomerengemischen herangezogen (siehe 6.2). Unter Verwendung eines 10d LC50 von 6900 mg/kg OC für *Hyalella azteca* oder eines 10d LC50 von 6200 mg/kg OC für *Daphnia magna* für das Isomerengemisch [7] und eines Sicherheitsfaktors von 1000 ergibt die Berechnung einen UQN-Vorschlag für Sedimentorganismen (Süßwasser) von 6 mg/kg OC 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether. Dieser vorläufige UQN-Vorschlag für Sedimentorganismen bedarf unbedingt und zeitnah der experimentellen Überprüfung für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether.

8.3 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz von „fischfressenden“ Tierarten

Auf einen Vorschlag für eine Umweltqualitätsnorm zum Schutz von „fischfressenden“ Tierarten muss mangels Daten verzichtet werden.

Für weitere Maßnahmen ist zu beachten, dass 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether mutagen und potentiell endokrin wirksam sein kann. Es wird empfohlen diese Verdachtsmomente vor einer abschließenden Bewertung experimentell zu überprüfen.

8.4 Berechnung der Umweltqualitätsnorm für den Fischkonsum

Auf einen Vorschlag für eine Umweltqualitätsnorm für den Fischkonsum muss mangels Daten verzichtet werden.

Für weitere Maßnahmen ist zu beachten, dass 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether mutagen und potentiell endokrin wirksam sein kann. Es wird empfohlen diese Verdachts-Momente experimentell zu überprüfen, bevor eine abschließende Bewertung erfolgt.

8.5 Umweltqualitätsnorm zum Schutz der Trinkwasserversorgung und des Trinkwassers

Für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether liegen keine deutschen oder europäischen Richtwerte zum Schutz der Trinkwasserversorgung vor. Weil die zugängliche Datenbasis zum Schutz der Trinkwasserversorgung bisher keinen spezifisch für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether festgelegten Höchstwert erlaubt, wird der pragmatische gesundheitliche Orientierungswert (GOW) des Umweltbundesamtes für schwach genotoxische Stoffe von 0,1 µg/L [13] empfohlen. Für das weitere Vorgehen ist zu beachten, dass 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether mutagen und potentiell endokrin wirksam sein kann. Es wird empfohlen, diese Verdachts-Momente experimentell zu überprüfen, bevor eine abschließende Bewertung erfolgt.

Von der FGG Elbe gibt es eine Reduzierungsanforderung zur Gewährleistung der Trinkwassersicherheit von 0,01 µg/L für die Summe von Bis(1,3-dichlor-2-propyl)ether, Bis(2,3-dichlor-1-propyl)ether und 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether [4], allerdings ohne Angabe der Ableitungsbasis.

8.6 Schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm

Die Vorschläge für Umweltqualitätsnormen für 1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether sind aufgrund der mangelhaften Datenbasis als vorläufig zu betrachten. Weil die Vorschläge für Umweltqualitätsnormen zum Schutz aquatischer Organismen in Binnenoberflächengewässern (Flüsse und Seen) über die vergleichsweise breitere Datenbasis im Sinne einer Evidenz-basierten Bewertung verfügen, werden diese auch als schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm empfohlen.

Ein Abgleich mit Umweltqualitätsnormen für Oberflächengewässer in USA und Tschechien von 0,2 bis 0,3 µg/L (deren Ableitung mangels Quellenangaben nicht nachvollziehbar ist) ergibt eine Übereinstimmung innerhalb einer Größenordnung.

9. Literatur

- [1] Arbeitsgemeinschaft für die Reinhaltung der Elbe (2002). Chlorierte Ether in Wasser- und Fischgewebeprobe der Elbe und ihrer Nebenflüsse (1992-2000).
- [2] Nordic Council of Ministers in collaboration with European Chemicals Bureau (2009). The N-CLASS Database 6.3. <http://apps.kemi.se/nclass/default.asp>.
- [3] Anonymus (2003). Imisní standardy ukazatelù pøípustného zneèištiní povrchových vod. http://portal.gov.cz/wps/portal/_s.155/701/.cmd/ad/.c/313/.ce/10821/.p/8411/_s.155/701?PC_8411_number1=61/2003&PC_8411_p=P%C5%99%C3%AD.3&PC_8411_l=61/2003&PC_8411_ps=10#10821.
- [4] FGG ELBE (2009). Hintergrundpapier zur Ableitung der überregionalen Bewirtschaftungsziele für die Oberflächengewässer im deutschen Teil der Flussgebietseinheit Elbe für den Belastungsschwerpunkt Schadstoffe.
- [5] SPARC (2002). SPARC on-line calculator. <http://ibmlc2.chem.uga.edu/sparc/>.
- [6] U.S.EPA (2009). EPI Suite v4.0. <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedi.htm>. U.S.Environmental Protection Agency, Washington, DC.
- [7] Meyer, C. L., Suedel, B. C., Rodgers, J. H. J., Dorn, P. B. (1993). Bioavailability of sediment-sorbed chlorinated ethers. Environ. Toxicol. Chem., 12, 493-505.

- [8] European Communities (2003). Technical guidance document on risk assessment in support of Commission Directive 93/67/EEC on risk assessment for new notified substances, Commission Regulation (EC) No 1488/94 on risk assessment for existing substances, Directive 98/8/EC of the European Parliament and of the Council concerning the placing of biocidal products on the market. European Commission, Joint Research Centre, Ispra, Italy.
- [9] Veith, G. D., Defoe, D. L., Bergstedt, B. V. (1979). Measuring and estimating the bioconcentration factor of chemicals in fish. J. Fish. Board Can., 36, 1040-1048.
- [10] Nendza, M. (1991). QSARs of bioconcentration: validity assessment of log P_{ow} /log BCF correlations. 43-66. VCH, Weinheim.
- [11] European Communities (2003). Technical guidance document on risk assessment in support of Commission Directive 93/67/EEC on risk assessment for new notified substances, Commission Regulation (EC) No 1488/94 on risk assessment for existing substances, Directive 98/8/EC of the European Parliament and of the Council concerning the placing of biocidal products on the market. European Commission, Joint Research Centre, Ispra, Italy.
- [12] Anonymus (2009). Chemicals and the water framework directive: Draft technical guidance for deriving environmental quality standards.
- [13] UBA (2003). Bewertung der Anwesenheit teil- oder nicht bewertbarer Stoffe im Trinkwasser aus gesundheitlicher Sicht. Empfehlung des Umweltbundesamtes nach Anhörung der Trinkwasserkommission des Bundesministeriums für Gesundheit. Bundesgesundheitsbl - Gesundheitsforsch - Gesundheitsschutz, 46, 249-251.
www.umweltbundesamt.de/wasser/themen/downloads/trinkwasser/Empfehlung-Nicht-bewertbare-Stoffe.pdf.