

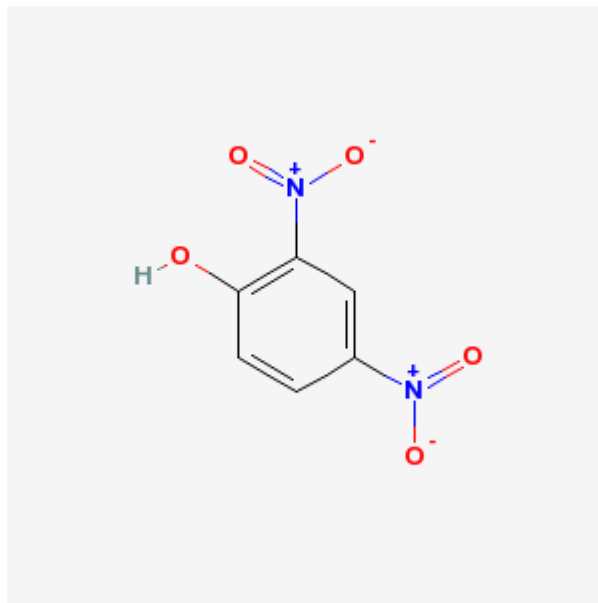
Stoffdatenblatt

2,4-Dinitrophenol

(51-28-5)

Stand: 15.03.2010

Erstellt von: AL-Luhnstedt



1 Substanz

Name:	2,4-Dinitrophenol
EG-Name:	2,4-Dinitrophenol
IUPAC-Name:	2,4-Dinitrophenol
CAS-Nummer:	51-28-5
EG-Nummer:	200-087-7
ETOX-Nummer:	129
Molgewicht:	184,11 g/mol
EG Richtlinie 67/548/EWG Annex I Index:	609-041-00-4
Summenformel:	C ₆ H ₃ (OH)(NO ₂) ₂
Stoffgruppe:	Phenole

2 Vorschlag für eine Umweltqualitätsnorm

2.1 Schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm (UQN)

Schutzgut	JD-UQN	ZHK-UQN	Anmerkung
Binnenoberflächengewässer (Flüsse und Seen)	10 µg/L	74 µg/L	Vorläufiger Wert
Sonstige Oberflächengewässer (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer)	1 µg/L	8,5 µg/L	Vorläufiger Wert

JD: Jahresdurchschnitt; ZHK: zulässige Höchstkonzentration

2.2 Spezifische Umweltqualitätsnorm (UQN)

Schutzgut	UQN	Anmerkung
Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser)	JD-UQN: 10 µg/L ZHK-UQN: 74 µg/L	Siehe 8.1
Aquatische Lebensgemeinschaften (Küsten- und Übergangsgewässer)	JD-UQN: 1 µg/L ZHK-UQN: 8,5 µg/L	Siehe 8.1
Benthische Lebensgemeinschaften	UQN _{sediment} : ---	Nicht relevant (siehe 6.2)
Secondary poisoning	UQN _{biota.Top Predators} : ---	Nicht relevant (siehe 6.3)
Fischkonsum	UQN _{biota.Human} : 120 µg/kg	RfD-Wert von zweifelhafter Validität (siehe 8.4)
Trinkwasserversorgung	UQN _{dw} : 1 µg/L	Summe Phenole gemäß EG-Richtlinie 75/440/EWG (siehe 8.5)

3 Allgemeine Stoffinformationen

3.1 Klassifikation und Kennzeichnung

R-Satz und Kennzeichnung / GHS	Quelle
R 23/24/25, R 33, R 50 T, N	N-CLASS Database [1]
H 301, H 311, H 331, H 373, H 400	http://www.ghs-konverter.de

3.2 Verfügbare Qualitätsanforderungen für Oberflächengewässer

Land	Status	Schutzgut	Bezeichnung	Wert	Bemerkung	Quelle
Australien	Guideline: freshwater moderate reliability trigger value	Süßwasser	TTV	45 µg/L		MINCOS [2]
USA	National recommended water quality criteria for priority toxic pollutants	Menschl. Konsum von Wasser und aquat. Organismen	WQC	69 µg/L		US EPA [3]
USA	National recommended water quality criteria for priority toxic pollutants	Menschl. Konsum von aquat. Organismen	WQC	5300 µg/L		US EPA [3]
USA	National recommended water quality criteria – correction 1998	Menschl. Konsum von Fischen	WQC	14000 µg/L		ETOX [4]

3.3 Wirkungsweise und Verwendung

Wirkweise: Entkoppler der oxidativen Phosphorylierung, Farbstoff [5]

Verwendung: pH-Indikator (pH 2,6 – 4,4), Herstellung von Schwefelfarbstoffen, Azofarbstoffen, Schädlingsbekämpfungsmitteln, Holzschutzmitteln, Explosivstoffen [6]

Stoffrechtliche Regelungen:

WGK: 3 [6]

4 Physikalisch-chemische Stoffeigenschaften

Eigenschaft		Quelle
Wasserlöslichkeit	6 g/L	Gestis [6]
	2790 mg/L	PhysProp-db [7]
	2630 mg/L (berechnet)	SPARC [8]
	910 mg/L (berechnet)	EPISuite [7]
Dichte	1,683 g/cm ³	Gestis [6]
	1,53 g/cm ³ (berechnet)	SPARC [8]
Dampfdruck	0,00039 mm Hg	PhysProp-db [7]
	5,2E-02 Pa	Junker et al. [9]
	10E-6,7 atm (berechnet)	SPARC [8]
Henry-Konstante	8,60E-08 atm/(mol/m ³)	PhysProp-db [7]
	1,39E-08 atm/(mol/m ³) (berechnet)	SPARC [8]
	2,76E-08 atm/(mol/m ³) (berechnet)	EPISuite [7]

5 Verhalten und Verbleib in der Umwelt

Eigenschaft		Quelle
Biotischer und abiotischer Abbau		
Hydrolytische Stabilität (DT50)	6,16E-13	Junker et al. [9]
Photostabilität (DT50)	---	
Leicht biologisch abbaubar (ja/nein)	nein	Junker et al. [9]
	ja, nach Akklimat.	SRC Biodeg Summary [10]
	nein (berechnet)	EPISuite [7]
Metabolite	---	
Sorptionsverhalten		
log K _{ow}	1,67	PhysProp-db [7]
	1,73 (berechnet)	EPISuite [7]
	1,54	Gestis [6]
	2,55 (berechnet)	SPARC [8]
K _{oc}	200	Junker et al. [9]
K _d	---	
Bioakkumulation		
BCF (Biokonzentration)	< 3,7	EURAS db [11]
	3,72 (berechnet)	EPISuite [7]
	15 (max. Wert)	ECOTOX [12]
BAF (Bioakkumulation)	2,81 (berechnet)	EPISuite [7]
BMF (Biomagnifikation)	---	

6 Wirkungsdaten

6.1 Aquatische Organismen

Für 2,4-Dinitrophenol liegen Testdaten zur akuten und (teilweise) chronischen Wirkung auf Fische, Kleinkrebse, Algen, Mollusken und Insekten vor (Anhang 1). Der Wirkmechanismus von 2,4-Dinitrophenol (Entkopplung der oxidativen Phosphorylierung) weist nicht unbedingt auf eine sensitivste Art hin. Insgesamt erscheinen Fische empfindlicher zu sein als Algen und Kleinkrebse. Der niedrigste akute Wert ist mit 620 µg/L für *Lepomis machrochirus*_[s1] (4d LC50) berichtet, der niedrigste chronische Wert beträgt 500 µg/L für *Oncorhynchus mykiss* (30d NOEC, Wachstum). Zusätzlich liegt ein 2d EC10 von 1300 µg/L für Grünalgen (*Desmodesmus subspicatus*) vor.

Die vorliegenden Testdaten sind überwiegend mit Süßwasserspezies bestimmt worden. Lediglich zwei Testdaten betreffen die akute Toxizität gegenüber marinen Fischen. Diese Testergebnisse sind in der gleichen Größenordnung wie die Daten, die mit Süßwasserfischen erarbeitet wurden. Es liegen keine Hinweise auf unterschiedliche Sensitivitäten von limnischen und marinen Spezies vor.

6.2 Sedimentorganismen

Für 2,4-Dinitrophenol liegen keine Testdaten zu Wirkungen auf Sedimentorganismen vor. Das Schutzgut „Sedimentorganismen“ ist für 2,4-Dinitrophenol nicht relevant, weil der Triggerwert von $\log K_{OC} \geq 3$ bzw. $\log K_{OW} \geq 3$ nicht erreicht ist [13]. Es besteht nur eine sehr geringe Wahrscheinlichkeit, dass eine relevant Anreicherung (Sorption) von 2,4-Dinitrophenol im Sediment stattfindet.

6.3 Nahrungskette Fisch – Vogel oder Säugetier (Secondary poisoning)

Das Schutzgut „Anreicherung entlang von Nahrungsketten“ ist für 2,4-Dinitrophenol nicht relevant, weil der Triggerwert von $BCF \geq 100$ bzw. $\log K_{OW} \geq 3$ nicht erreicht ist [13]. Es besteht nur eine sehr geringe Wahrscheinlichkeit, dass eine relevante Anreicherung von 2,4-Dinitrophenol entlang von Nahrungsketten Fisch – Vogel oder Säugetier (secondary poisoning) stattfindet.

7 Wirkung auf die menschliche Gesundheit

Die Klassifizierung und Kennzeichnung von 2,4-Dinitrophenol (R 23/24/25 (Giftig beim Einatmen, Verschlucken und Berührung mit der Haut), R 33 (Gefahr kumulativer Wirkungen), R 50 (Sehr giftig für Wasserorganismen)) liefert deutliche Hinweise auf erhebliche Wirkungen auf die menschliche Gesundheit. Dennoch liegen für 2,4-Dinitrophenol keine europäischen ADI-Werte, Nahrungsmittelgrenzwerte (Fisch), Trinkwassergrenzwerte, etc. vor. Von der US EPA gibt es eine Referenz-Dosis für chronische orale Exposition (RfD) von 2 µg/kg/d auf der Basis historischer Daten zur Katarakt-Bildung und zur Embryotoxizität, ausdrücklich nicht Teratogenität, bei Mäusen [14]. Die Qualität der Daten wird als gering bewertet, doch bisher liegen der US EPA keine neueren Erkenntnisse vor.

8 Berechnung der Umweltqualitätsnormen

8.1 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz der aquatischen Organismen

Binnenoberflächengewässer (Flüsse und Seen): Bei der Ableitung der Jahresdurchschnitts-Umweltqualitätsnorm (JD-UQN) für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) sollten, bei Vorliegen genügender Daten, drei verschiedene Verfahren zum Einsatz kommen [13]:

1. Deterministisches Verfahren (Sicherheitsfaktor);
2. Probabilistisches Verfahren (SSD);
3. Feldstudien und Mesokosmen.

Die Datenlage erlaubt für 2,4-Dinitrophenol nur die Anwendung der deterministischen Methode. Bei der Ableitung der JD-UQN gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [13] ist aufgrund des Vorliegens von chronischen NOEC-/EC10-Werten, die mindestens zwei trophische Ebenen darstellen, ein Sicherheitsfaktor von 50 auf den niedrigsten Wert anzuwenden. Bei Verwendung des niedrigsten NOEC-Werts von 500 µg/L für Fische (*Oncorhynchus mykiss*) und eines Sicherheitsfaktors von 50 ergibt die Berechnung des JD-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) 10 µg/L 2,4-Dinitrophenol.

Für die Ableitung des ZHK-UQN-Vorschlags wird aufgrund der umfangreichen Datenlage zur akuten Toxizität das probabilistische Verfahren gewählt. Unter Verwendung der 12 Datenpunkte zur akuten Toxizität gegenüber Süßwasserspezies (Anhang 1) wurde ein HC5-Wert (5% Perzentil, 50% Vertrauensbereich) mittels des Programms ETX [15] von 742 µg/L berechnet (Abb.1, Anhang 2a). Gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [13] ist darauf ein Sicherheitsfaktor von 10 anzuwenden. Bei Verwendung des HC5-Werts von 742 µg/L und eines Sicherheitsfaktors von 10 ergibt die Berechnung des ZHK-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) 74 µg/L 2,4-Dinitrophenol.

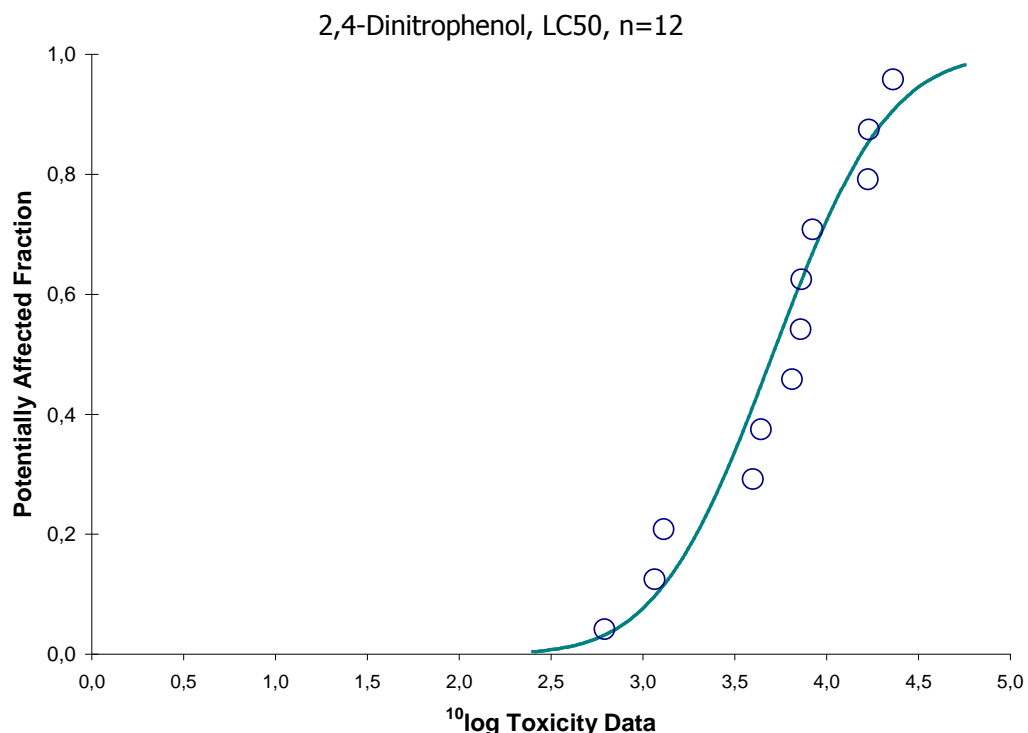


Abb 1. Häufigkeitsverteilung der LC50-Werte (n=12) aus Untersuchungen zur akuten Toxizität [µg/L] von 2,4-Dinitrophenol gegenüber Süßwasser-Spezies.

Sonstige Oberflächengewässer (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer): Bei der Ableitung der Jahresdurchschnitts-Umweltqualitätsnorm (JD-UQN) für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) können ebenfalls die drei oben genannten Verfahren zum Einsatz kommen [13]. Weil nur wenige Testdaten für marine Spezies bestimmt wurden und keine Hinweise auf unterschiedliche Sensitivitäten von limnischen und marinen Spezies vorlie-

gen, wurden die gleichen Daten wie zur Ableitung der UQN-Vorschläge für limnische Lebensgemeinschaften verwendet.

Bei der Ableitung der JD-UQN für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [13] ist aufgrund des Vorliegens von chronischen NOEC-/EC10-Werten, die mindestens zwei trophische Ebenen darstellen, ein Sicherheitsfaktor von 500 auf den niedrigsten Wert anzuwenden. Bei Verwendung des niedrigsten NOEC-Werts von 500 µg/L für Fische (*Oncorhynchus mykiss*) und eines Sicherheitsfaktors von 500 ergibt die Berechnung des JD-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) 1 µg/L 2,4-Dinitrophenol.

Für die Ableitung des ZHK-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) wurde der oben beschriebene HC5-Wert um die zwei Datenpunkte zur akuten Fischtoxizität gegenüber marinen Spezies erweitert und zu 850 µg/L berechnet (Abb.2, Anhang 2b). Gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [13] ist darauf ein Sicherheitsfaktor von 100 anzuwenden. Bei Verwendung des HC5-Werts von 850 µg/L und eines Sicherheitsfaktors von 100 ergibt die Berechnung des ZHK-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) 8,5 µg/L 2,4-Dinitrophenol.

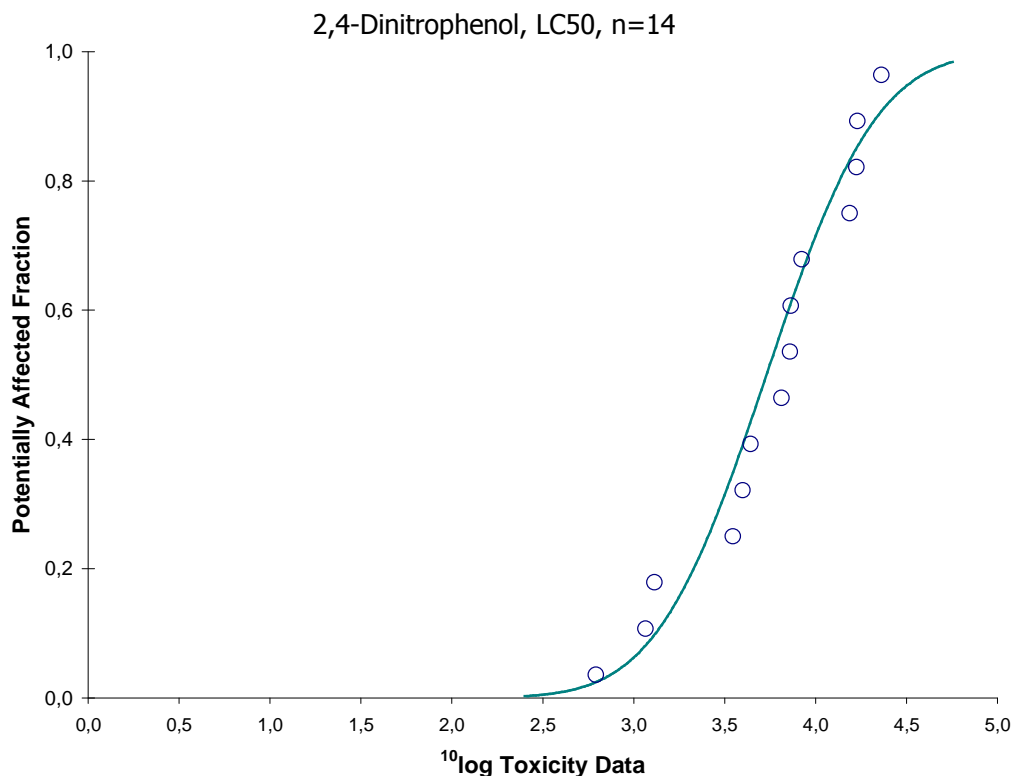


Abb 2. Häufigkeitsverteilung der LC50-Werte (n=14) aus Untersuchungen zur akuten Toxizität von 2,4-Dinitrophenol gegenüber Süßwasser- und Salzwasser-Spezies.

8.2 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz der Sedimentorganismen

Nicht relevant (siehe 6.2)

8.3 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz von „fischfressenden“ Tierarten

Nicht relevant (siehe 6.3)

8.4 Berechnung der Umweltqualitätsnorm für den Fischkonsum

Gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [13] kann die $UQN_{\text{biota.Human}}$ anhand der folgenden Formel berechnet werden:

$$QS_{\text{biota.Humans}} = \frac{0.1 \cdot TL \cdot 70}{0.115}$$

Dabei wird angenommen, dass (1) 10% des relevanten Schwellenwertes (z.B. ADI) nicht überschritten werden sollen, (2) ein durchschnittlicher Erwachsener 70 kg wiegt und (3) $0,115 \text{ kg} \cdot \text{d}^{-1}$ Fisch(producte) verzehrt. Weil kein zuverlässiger ADI vorliegt, wird der RfD-Wert der US EPA von $2 \mu\text{g}/\text{kg}/\text{d}$ zum Schutz der menschlichen Gesundheit trotz zweifelhafter Validität (siehe 7) zur vorläufigen Verwendung empfohlen, und gleichzeitig die Bereitstellung relevanter Studienergebnisse angeregt. Bei Verwendung des RfD von $2 \mu\text{g}/\text{kg}/\text{d}$ [14] ergibt sich ein UQN-Vorschlag für den Fischkonsum von $120 \mu\text{g}/\text{kg}$ 2,4-Dinitrophenol. Für die $UQN_{\text{biota.Human}}$ von $120 \mu\text{g}/\text{kg}$ kann mit einem maximal angegebenen BCF von $15 \text{ L}/\text{kg}$ eine korrespondierende Wasserkonzentration von etwa $8 \mu\text{g}/\text{L}$ berechnet werden.

8.5 Umweltqualitätsnorm zum Schutz der Trinkwasserversorgung und des Trinkwassers

Zum Schutz der Trinkwasserversorgung ist nach der EG-Richtlinie 98/83/EG (vormals 80/778/EWG) weder für 2,4-Dinitrophenol noch für die Summe aller phenolischen Verbindungen ein Höchstwert festgelegt. Zum Schutz der Oberflächengewässer, die der Entnahme von Wasser für den menschlichen Gebrauch dienen, ist nach der EG-Richtlinie 75/440/EWG ein Höchstwert von $0,001 \text{ mg}/\text{L}$ (für Summe Phenole) festgelegt. Aktuelle europäische Richtwerte liegen nicht vor. Bei Verwendung des Höchstwerts von $0,001 \text{ mg}/\text{L}$ ergibt sich gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [13] ein UQN-Vorschlag zum Schutz der Trinkwasserversorgung von $0,001 \text{ mg}/\text{L}$ 2,4-Dinitrophenol.

8.6 Schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm

Im Hinblick auf die zweifelhafte Validität der verfügbaren Umweltqualitätsnorm zum Schutz der menschlichen Gesundheit bei Fischkonsum und der fehlenden Aktualität der Umweltqualitätsnorm zum Schutz der Trinkwasserversorgung und des Trinkwassers wird die Verwendung der Umweltqualitätsnorm-Vorschläge für limnische und marine Lebensgemeinschaften auch als schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm empfohlen.

Ein Abgleich dieser Daten mit den verfügbaren Umweltqualitätsnormen für Oberflächengewässer in Australien und den USA (siehe 3.2) ergibt übereinstimmende Werte innerhalb einer Größenordnung.

9. Literatur

- [1] Nordic Council of Ministers in collaboration with European Chemicals Bureau (2009). The N-CLASS Database 6.3. <http://apps.kemi.se/nclass/default.asp>.
- [2] MINCOS (2000). National Water Quality Management Strategy Guideline. <http://www.mincos.gov.au/>. Australien.
- [3] U.S.EPA (2009). National Recommended Water Quality Criteria. <http://www.epa.gov/ost/criteria/wqctable/>.
- [4] UBA (2009). ETOX. <http://webetox.uba.de/webETOX/index.do>. Umweltbundesamt, Berlin, Germany.
- [5] NCBI (2009). PubChem Compound. <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>.

- [6] DGUV (2009). GESTIS Stoffdatenbank. <http://www.dguv.de/bgia/stoffdatenbank>.
- [7] U.S.EPA (2009). EPI Suite v4.0. <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedi.htm>. U.S.Environmental Protection Agency, Washington, DC.
- [8] SPARC (2002). SPARC on-line calculator. <http://ibmlc2.chem.uga.edu/sparc/>.
- [9] Junker, T., Elste, C., Knacker, T., Meller, M. (2006). NOMIRACLE: D.2.3.2 Report on experimental biodegradation kinetics for some model compounds in water and sediment. <http://nomiracle.jrc.ec.europa.eu/Documents/PublicDeliverables/D.2.3.2%20Report%20on%20Experimental%20biodegradation%20kinetics%20for%20some%20model%20compounds%20in%20water%20and%20sediment.pdf>.
- [10] SRC (2009). Biodeg Summary. <http://srcinc.com/what-we-do/efdb.aspx>.
- [11] EURAS (2007). CEFIC LRI Goldstandard Database. <http://ambit.acad.bg/ambit/php/euras.php>.
- [12] U.S.EPA (2009). ECOTOX. <http://www.epa.gov/ecotox/>. U.S.Environmental Protection Agency, Washington, DC.
- [13] Anonymus (2009). Chemicals and the water framework directive: Draft technical guidance for deriving environmental quality standards.
- [14] U.S.EPA (2009). IRIS: 2,4-Dinitrophenol (CASRN 51-28-5). <http://www.epa.gov/iris/subst/0152.htm>.
- [15] van Vlaardingen, P., Traas, T. P. (2001). ETX-temporary 1.4 (02) Normal distribution based hazardous concentration and potentially affected fraction. RIVM, Bilthoven, The Netherlands.