

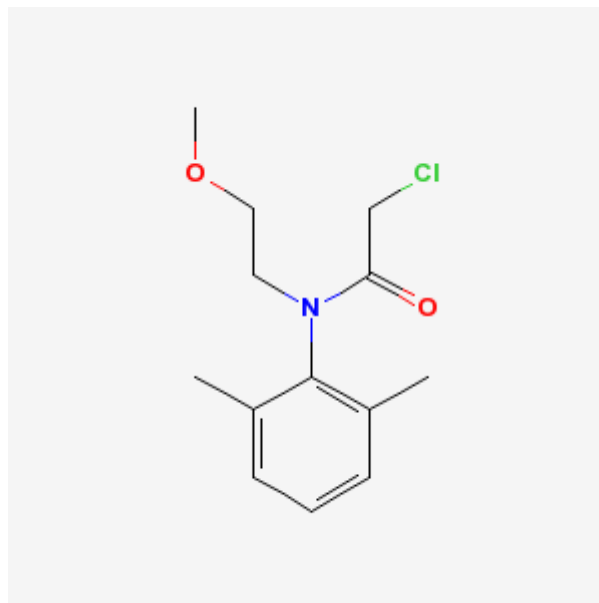
Stoffdatenblatt

Dimethachlor

(50563-36-5)

Stand: 15.03.2010

Erstellt von: AL-Luhnstedt



1 Substanz

| | |
|---|---|
| Name: | Dimethachlor |
| EG-Name: | 2-Chlor-N-(2,6-dimethylphenyl)-N-(2-methoxyethyl)acetamid |
| IUPAC-Name: | 2-Chlor-N-(2,6-dimethylphenyl)-N-(2-methoxyethyl)acetamid |
| CAS-Nummer: | 50563-36-5 |
| EG-Nummer: | 256-625-6 |
| ETOX-Nummer: | 20492 |
| Molgewicht: | 255,74 g/mol |
| EG Richtlinie 67/548/EWG Annex I Index: | 616-031-00-3 |
| Summenformel: | C ₁₃ H ₁₈ ClNO ₂ |
| Stoffgruppe: | Acetanilid |

2 Vorschlag für eine Umweltqualitätsnorm

2.1 Schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm (UQN)

| Schutzgut | JD-UQN | ZHK-UQN | Anmerkung |
|--|------------|-----------|------------------|
| Binnenoberflächengewässer (Flüsse und Seen) | 0,05 µg/L | 0,35 µg/L | Vorläufiger Wert |
| Sonstige Oberflächengewässer (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer) | 0,005 µg/L | 0,35 µg/L | Vorläufiger Wert |

JD: Jahresdurchschnitt; ZHK: zulässige Höchstkonzentration

2.2 Spezifische Umweltqualitätsnorm (UQN)

| Schutzgut | UQN | Anmerkung |
|---|--|----------------------------|
| Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) | JD-UQN: 0,05 µg/L ZHK-UQN: 0,35 µg/L | Siehe 8.1 |
| Aquatische Lebensgemeinschaften (Küsten- und Übergangsgewässer) | JD-UQN: 0,005 µg/L ZHK-UQN: 0,35 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} : 6 µg/kg | 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 |
| Xn; R22 R43 N; R50-53 | N-CLASS Database [1] |
| H 302, H 317, H 400, H 410 | http://www.ghs-konverter.de |

3.2 Verfügbare Qualitätsanforderungen für Oberflächengewässer

| Land | Status | Schutzgut | Bezeichnung | Wert | Bemerkung | Quelle |
|------|--------|-----------|-------------|------|-----------|--------|
| --- | --- | --- | --- | --- | | --- |

3.3 Wirkungsweise und Verwendung

Wirkweise: Inhibitor der Zellteilung [2]

Verwendung: Der Wirkstoff Dimethachlor ist ein Herbizid [3] und aufgenommen in Anhang I der Pflanzenschutzmittel-Richtlinie 91/414/EWG bis zum 31.12.2019 [4]. In Deutschland sind 3 Pflanzenschutzmittel mit dem Wirkstoff Dimethachlor zum Einsatz als Herbizid im Ackerbau zugelassen (Stand 26.2.2010) [5].

Stoffrechtliche Regelungen:

WGK: 3 [3]

4 Physikalisch-chemische Stoffeigenschaften

| Eigenschaft | | Quelle |
|-------------------|------------------------------------|-----------------------------|
| Wasserlöslichkeit | Praktisch unlöslich | Gestis [3] |
| | 308 mg/L (berechnet) | EPISuite [6] |
| | 2100 mg/L | Danish EPA [2] |
| | 2300 mg/L | PPDB [7] PhysProp-db [6] |
| | 4020 mg/L (berechnet) | SPARC [8] |
| Dichte | 1,18 g/cm ³ (berechnet) | SPARC [8] |
| Dampfdruck | 1,13E-05 mm Hg | PhysProp-db [6] |
| | 0,000021 mbar | Gestis [3] |
| | 0,64 mPa | PPDB [7] |
| | 10E-8,23 atm (berechnet) | SPARC [8] |

| Eigenschaft | | Quelle |
|-----------------|--|-----------------|
| Henry-Konstante | 1,70E-04 Pa m ³ mol ⁻¹ | PPDB [7] |
| | 1,65E-09 atm/(mol/m ³) | PhysProp-db [6] |
| | 3,74E-10 atm/(mol/m ³) (berechnet) | SPARC [8] |
| | 8,43E-10 atm/(mol/m ³) (berechnet) | EPISuite [6] |

5 Verhalten und Verbleib in der Umwelt

| Eigenschaft | | Quelle |
|---|--|---|
| Biotischer und abiotischer Abbau | | |
| Hydrolytische Stabilität (DT50) | 200 d | PPDB [7] |
| Photostabilität (DT50) | stabil | PPDB [7] |
| Leicht biologisch abbaubar (ja/nein) | nein (berechnet) | EPISuite [6] |
| | Boden DT ₅₀ : 7 d | PPDB [7] |
| | Wasser/Sediment DT ₅₀ : 14 d | PPDB [7] |
| | Wasser DT ₅₀ : 10 d | PPDB [7] |
| Metabolite | Relevante Metabolite im Boden: N-(2,6-dimethylphenyl)-N-(2-methoxyethyl)oxalamic acid (36%); [(2,6-dimethylphenyl)-2-methoxyethyl]carbamoyl]methanesulfonic acid sodium salt (16%) | PPDB [7] |
| Sorptionsverhalten | | |
| log K _{ow} | 2,17 | PhysProp-db [6] PPDB [7] Danish EPA [2] |
| | 2,33 (berechnet) | EPISuite [6] |
| | 2,4 (berechnet) | SPARC [8] |
| K _{oc} | 69 | PPDB [7] |
| K _d | --- | |
| Bioakkumulation | | |
| BCF (Biokonzentration) | 12,6 (berechnet) | EPISuite [6] |
| BAF (Bioakkumulation) | 11,4 (berechnet) | EPISuite [6] |
| BMF (Biomagnifikation) | --- | |

6 Wirkungsdaten

6.1 Aquatische Organismen

Für Dimethachlor liegen Testdaten zur akuten und chronischen Wirkung auf Fische, Kleinkrebse, Algen und Wasserpflanzen vor (Anhang 1). Dimethachlor weist eine geringe bis moderate Toxizität gegenüber Fischen und Invertebraten (akut: LC50 > 1 mg/L, chronisch: NOEC > 100 µg/L) auf [9,2,7,10]. Gemäß seinem Wirkmechanismus als Herbizid sind Algen und andere Wasserpflanzen die sensitivsten Spezies (NOEC < 5 µg/L) gegenüber Dimethachlor. Der niedrigste EC50-Wert ist mit 35 µg/l für *Lemna gibba* berichtet [9], der niedrigste NOEC-Wert beträgt 0,46 µg/L für *Lemna gibba* [9].

6.2 Sedimentorganismen

Für Dimethachlor liegt ein chronischer (28 d) NOEC-Wert von 25 mg/kg zu Wirkungen auf Sedimentorganismen (*Chironomus riparius*) vor [9]. Dieser Wert wird nicht weiter verwendet, da das Schutzgut „Sedimentorganismen“ für Dimethachlor nicht relevant ist, weil der Triggerwert von $\log K_{OC} \geq 3$ nicht erreicht ist [11]. Es besteht nur eine geringe Wahrscheinlichkeit, dass eine relevante Anreicherung (Sorption) von Dimethachlor im Sediment stattfindet.

6.3 Nahrungskette Fisch – Vogel oder Säugetier (Secondary poisoning)

Das Schutzgut „Anreicherung entlang von Nahrungsketten“ ist für Dimethachlor nicht relevant, weil der Triggerwert von $BCF \geq 100$ nicht erreicht ist [11]. Es besteht nur eine geringe Wahrscheinlichkeit, dass eine relevante Anreicherung von Dimethachlor entlang von Nahrungsketten Fisch – Vogel oder Säugetier (secondary poisoning) stattfindet.

7 Wirkung auf die menschliche Gesundheit

Die Klassifizierung und Kennzeichnung von Dimethachlor (R 22 (Gesundheitsschädlich beim Verschlucken), R 43 (Sensibilisierung durch Hautkontakt möglich), R 50-53 (Sehr giftig für Wasserorganismen)) liefert Hinweise auf Wirkungen auf die menschliche Gesundheit. Für Dimethachlor gibt es einen ADI von 0,1 µg/kg/d, maximale Rückstandswerte, z.B. von 0,05 mg/kg in Rapssaat, und einen ZHK-Wert für Trinkwasser von 0,1 µg/L [7].

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 [11]:

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

Die Datenlage erlaubt für Dimethachlor nur die Anwendung der deterministischen Methode. Bei der Ableitung der JD-UQN gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [11] ist aufgrund des Vorliegens von chronischen NOEC-/EC10-Werten,

die mindestens drei trophische Ebenen darstellen, ein Sicherheitsfaktor von 10 auf den niedrigsten Wert anzuwenden, wenn dieser mit besonders sensitiven Spezies bestimmt wurde. Für das Herbizid Dimethachlor liegen Daten zur chronischen Wirkung auf Algen und andere Pflanzen vor, die besonders sensitive aquatische Spezies repräsentieren, sodass die Verwendung des Sicherheitsfaktors von 10 gerechtfertigt ist. Bei Verwendung des niedrigsten NOEC-Werts von 0,464 µg/L für *Lemna gibba* und eines Sicherheitsfaktors von 10 ergibt die Berechnung des JD-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) 0,05 µg/L Dimethachlor.

Lediglich zu Vergleichszwecken wurde mit den 6 verfügbaren NOEC-Werten der sensitiven Spezies (Algen und Wasserpflanzen) auch das probabilistische Verfahren angewandt. Mittels des Programms ETX [12] wurde ein HC5-Wert (5% Perzentil, 50% Vertrauensbereich) von 0,05 µg/L berechnet (Abb.1, Anhang 2). Weil das probabilistische Verfahren mit dieser kleinen Datenbasis nicht aussagekräftig ist, wird dieser Wert nicht verwendet.

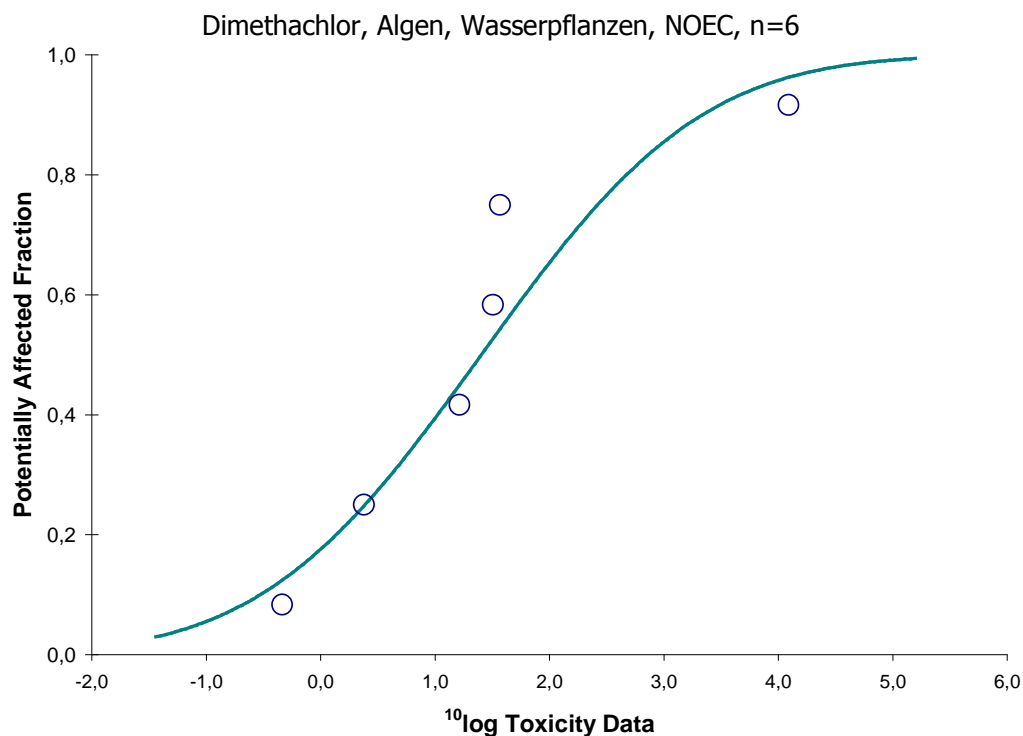


Abb 1. Häufigkeitsverteilung der NOEC-Werte (n=6) aus Untersuchungen zur chronischen Toxizität [µg/L] von Dimethachlor gegenüber Algen und Wasserpflanzen.

Für die Ableitung des ZHK-UQN-Vorschlags wird aufgrund der Datenlage zur akuten Toxizität ebenfalls das deterministische Verfahren gewählt. Bei der Ableitung der ZHK-UQN gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [11] ist aufgrund des Vorliegens von akuten L(E)C50-Werten, die mindestens drei trophische Ebenen darstellen, ein Sicherheitsfaktor von 100 auf den niedrigsten Wert anzuwenden. Für das Herbizid Dimethachlor liegen Daten zur akuten Wirkung auf Algen und andere Pflanzen vor die besonders sensitive aquatische Spezies repräsentieren, sodass die Absenkung des Sicherheitsfaktors auf 10 möglich erscheint. Bei Verwendung des niedrigsten EC50-Werts von 35 µg/l für *Lemna gibba* in 7 Tagetest und eines Sicherheitsfaktors von 10 würde die Berechnung des ZHK-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) 3,5 µg/L Dimethachlor ergeben. Dieser Wert liegt jedoch oberhalb des EC50-Werts von 2,17 µg/l für *Lemna gibba* im 14 Tagetest. Daher wird der Sicherheitsfaktor von 100 beibehalten und eine ZHK-UQN von 0,35 µg/L vorgeschlagen.

Sonstige Oberflächengewässer (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer): Bei der Ableitung der Jahresdurchschnitts-Umweltqualitätsnorm (JD-UQN) für aquatische Lebens-

gemeinschaften (Salzwasser) können ebenfalls die drei oben genannten Verfahren zum Einsatz kommen [11]. Weil keine Testdaten für marine Spezies bestimmt wurden, 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 [11] ist aufgrund des Vorliegens von chronischen NOEC-/EC10-Werten, die mindestens drei trophische Ebenen darstellen, ein Sicherheitsfaktor von 100 auf den niedrigsten Wert anzuwenden. Bei Verwendung des niedrigsten NOEC-Werts von 0,464 µg/L für *Lemna gibba* und eines Sicherheitsfaktors von 100 ergibt die Berechnung des JD-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) 0,005 µg/L Dimethachlor.

Für die Ableitung des ZHK-UQN-Vorschlags wird aufgrund der Datenlage zur akuten Toxizität ebenfalls das deterministische Verfahren gewählt. Bei der Ableitung der ZHK-UQN gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [11] ist aufgrund des Vorliegens von akuten L(E)C50-Werten, die mindestens drei trophische Ebenen darstellen, ein Sicherheitsfaktor von 1000 auf den niedrigsten Wert anzuwenden. Wenn dieser mit besonders sensiblen Spezies bestimmt wurde, kann der Sicherheitsfaktor auf 100 abgesenkt werden. Für das Herbizid Dimethachlor liegen Daten zur akuten Wirkung auf Algen und andere Pflanzen vor die besonders sensitive aquatische Spezies repräsentieren, sodass die Verwendung des Sicherheitsfaktors von 100 gerechtfertigt ist. Bei Verwendung des niedrigsten EC50-Werts von 35 µg/l für *Lemna gibba* und eines Sicherheitsfaktors von 100 ergibt die Berechnung des ZHK-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) 0,35 µg/L Dimethachlor.

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 [11] kann die $UQN_{biota.Human}$ anhand der folgenden Formel berechnet werden:

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

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(erzeugnisse) verzehrt. Bei Verwendung des ADI von $0,1 \text{ µg/kg/d}$ [7] ergibt sich ein UQN-Vorschlag für den Fischkonsum von 6 µg/kg Dimethachlor. Für die $UQN_{biota.Human}$ von 6 µg/kg kann mit einem berechneten BCF von 12 L/kg eine korrespondierende Wasserkonzentration von etwa $0,5 \text{ µg/L}$ berechnet werden.

8.5 Umweltqualitätsnorm zum Schutz der Trinkwasserversorgung und des Trinkwassers

Zum Schutz der Trinkwasserversorgung ist der nach der EG-Trinkwasser-Richtlinie 98/83/EG (vormals 80/778/EWG) festgelegte Höchstwert von 0,1 µg/L (gilt nicht spezifisch für Dimethachlor, sondern für einzelne Pestizide) anzusetzen. Bei Verwendung des Höchstwerts von 0,1 µg/L ergibt sich gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [11], soweit kein substanzspezifischer Reduktionsfaktor der Aufbereitungsprozesse berücksichtigt wird, ein UQN-Vorschlag zum Schutz der Trinkwasserversorgung von 0,1 µg/L Dimethachlor.

8.6 Schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm

Die Vorschläge für Umweltqualitätsnormen zum Schutz aquatischer Organismen in Binnenoberflächengewässern (Flüsse und Seen) und sonstigen Oberflächengewässern (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer) sind die niedrigsten abgeleiteten Werte und werden daher gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [11] auch als schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm empfohlen.

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] Hansen, O. C. (2004). Quantitative structure-activity relationships (QSAR) and pesticides. Pesticides Research No. 94, Danish Environmental Protection Agency,
- [3] DGUV (2009). GESTIS Stoffdatenbank. <http://www.dguv.de/bgia/stoffdatenbank>.
- [4] EU (2010). Pesticides Database. http://ec.europa.eu/sanco_pesticides/public/index.cfm.
- [5] Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit (2010). Online Pflanzenschutzmittelverzeichnis des Bundesamtes für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit. http://www.bvl.bund.de/cln_027/nn_492012/DE/04_Pflanzenschutzmittel/02_ZugelassenePflanzenschutzmittel/02_OnlineDatenbank/onlineDB_node.html.
- [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] PPDB (2009). Dimethachlor (Ref: CGA 17020). <http://sitem.herts.ac.uk/aeru/iupac/Reports/239.htm>.
- [8] SPARC (2002). SPARC on-line calculator. <http://ibmlc2.chem.uga.edu/sparc/>.
- [9] Umweltbundesamt (2009). ICS.
- [10] Junghans, M. (2004). Studies on combination effects of environmentally relevant toxicants. Bremen University,
- [11] Anonymus (2009). Chemicals and the water framework directive: Draft technical guidance for deriving environmental quality standards.
- [12] 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.