

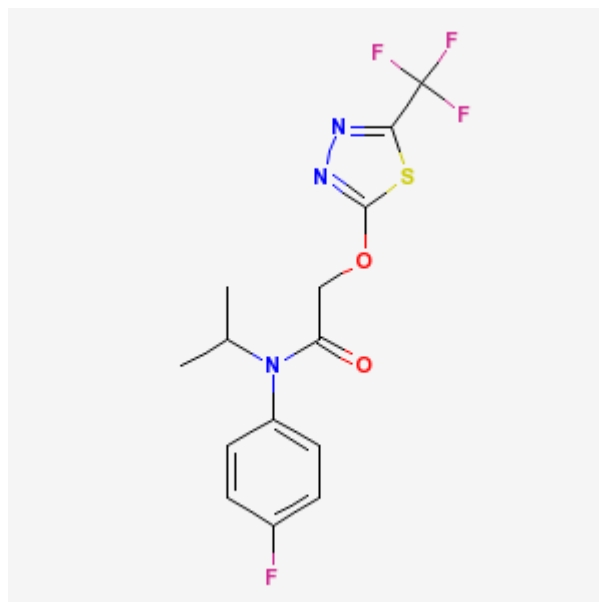
Stoffdatenblatt

Flufenacet

(142459-58-3)

Stand: 15.03.2010

Erstellt von: AL-Luhnstedt



1 Substanz

Name:	Flufenacet
EG-Name:	<i>N</i> -(4-Fluorphenyl)- <i>N</i> -isopropyl-2-(5-trifluormethyl-[1,3,4]thiadiazol-2-yloxy)acetamid
IUPAC-Name:	<i>N</i> -(4-fluorophenyl)- <i>N</i> -propan-2-yl-2-[[5-(trifluoromethyl)-1,3,4-thiadiazol-2-yl]oxy]acetamide
CAS-Nummer:	142459-58-3
EG-Nummer:	---
ETOX-Nummer:	89255
Molgewicht:	363.33 g/mol
EG Richtlinie 67/548/EWG Annex I Index:	613-164-00-9
Summenformel:	C ₁₄ H ₁₃ F ₄ N ₃ O ₂ S
Stoffgruppe:	Oxyacetamid

2 Vorschlag für eine Umweltqualitätsnorm

2.1 Schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm (UQN)

Schutzgut	JD-UQN	ZHK-UQN	Anmerkung
Binnenoberflächengewässer (Flüsse und Seen)	0,04 µg/L	0,2 µg/L	Vorläufiger Wert
Sonstige Oberflächengewässer (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer)	0,004 µg/L	0,02 µg/L	Vorläufiger Wert

JD: Jahresdurchschnitt; ZHK: zulässige Höchstkonzentration

2.2 Spezifische Umweltqualitätsnorm (UQN)

Schutzgut	UQN	Anmerkung
Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser)	JD-UQN: 0,04 µg/L ZHK-UQN: 0,2 µg/L	Siehe 8.1
Aquatische Lebensgemeinschaften (Küsten- und Übergangsgewässer)	JD-UQN: 0,004 µg/L ZHK-UQN: 0,02 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} : 300 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; R22-48/22 R43 N; R50-53	N-CLASS Database [1]
H 302, H 317, H 373, H 400, H 410	http://www.ghs-konverter.de

3.2 Verfügbare Qualitätsanforderungen für Oberflächengewässer

Land	Status	Schutzgut	Bezeichnung	Wert	Bemerkung	Quelle
USA	drinking water level of concerns	Trinkwasser	DWLOC	136 ppb		US EPA [2]

3.3 Wirkungsweise und Verwendung

Wirkweise: Flufenacet zeigt eine starke Wirkung auf meristematische Gewebe, interferiert mit Membranfunktionen und verändert die Permeabilität von Zellmembranen [3]. Flufenacet ist ein Inhibitor der Interaktion von Thyroid Hormonrezeptor und Steroidrezeptor-Koregulator 2 [4].

Verwendung: Flufenacet ist ein Wirkstoff in Pflanzenschutzmitteln (Herbizid) [5] und aufgenommen in Anhang I der Pflanzenschutzmittel-Richtlinie 91/414/EWG bis zum 31.12.2013 [6]. In Deutschland sind 8 Pflanzenschutzmittel mit dem Wirkstoff Flufenacet zum Einsatz als Herbizid im Ackerbau, Gemüsebau, Obstbau und Zierpflanzenbau zugelassen (Stand 26.2.2010) [7].

Stoffrechtliche Regelungen:

WGK: ---

4 Physikalisch-chemische Stoffeigenschaften

Eigenschaft		Quelle
Wasserlöslichkeit	56 mg/L	US EPA [2] PhysProp-db [8]
	55,91 mg/L	Health Canada [3]
	204 mg/L (berechnet)	SPARC [9]
	9,52 mg/L (berechnet)	EPISuite [8]
Dichte	1.312 g/mL	US EPA [2]
	1,39 g/cm ³ (berechnet)	SPARC [9]
Dampfdruck	6,75E-07 mm Hg	PhysProp-db [8]
	2 x 10 ⁻⁶ hPa at 25°C	US EPA [2]
	10E-9,27 atm (berechnet)	SPARC [9]
Henry-Konstante	5,76E-09 atm/(mol/m ³)	PhysProp-db [8]
	9 x 10 ⁻⁴ Pa m ³ mol	Health Canada [3]
	3,36E-10 atm/(mol/m ³) (berechnet)	SPARC [9]
	2,00E-11 atm/(mol/m ³) (berechnet)	EPISuite [8]

5 Verhalten und Verbleib in der Umwelt

Eigenschaft		Quelle
Biotischer und abiotischer Abbau		
Hydrolytische Stabilität (DT50)	Keine Hydrolyse	US EPA [2]
	pH 5 : 14835 d	EU [10]
	pH 7 : 1547 d pH 9 : 654 d	
Photostabilität (DT50)	Keine Photolyse	US EPA [2] EU [10]
Leicht biologisch abbaubar (ja/nein)	nein (berechnet)	EPISuite [8]
	Boden DT50: 23-39 d Wasser DT50: 458 d	Health Canada [3]
Metabolite	---	
Sorptionsverhalten		
log K _{ow}	2,39 (berechnet)	EPISuite [8]
	3,19	Gestis [5]
	3,20	US EPA [2] PhysProp-db [8]
	3,21	SPARC [9]
K _{oc}	202	EU [10]
K _d	---	

Eigenschaft		Quelle
Bioakkumulation		
BCF (Biokonzentration)	60,3 (berechnet)	EPISuite [8]
	71,4	EU [10]
	165	Health Canada [3]
BAF (Bioakkumulation)	95,3 (berechnet)	EPISuite [8]
BMF (Biomagnifikation)	---	

6 Wirkungsdaten

6.1 Aquatische Organismen

Für Flufenacet liegen Testdaten zur akuten und chronischen Wirkung auf Fische, Kleinkrebse, Algen und Wasserpflanzen vor (Anhang 1). Flufenacet weist eine geringe bis moderate Toxizität gegenüber limnischen und marinen Fischen und Invertebraten (akut: LC50 > 1 mg/L, chronisch: NOEC > 0,1 mg/L) auf [3,2]. Gemäß seinem Wirkmechanismus als Herbizid sind Algen und andere Wasserpflanzen die sensitivsten Spezies (NOEC < 5 µg/L) gegenüber Flufenacet. Der niedrigste akute Wert (72 h EC50) ist mit 2,04 µg/l für *Selenastrum capricornutum* berichtet [10], der niedrigste chronische Wert (14d NOEC) beträgt 0,44 µg/L für *Lemna gibba* [3]. Zusätzlich liegt ein NOEC von 12 µg/L für einen Labor-Mikrokosmos mit Makrophyten, Entengras und Periphyton vor [10].

6.2 Sedimentorganismen

Für Flufenacet liegen keine Testdaten zu Wirkungen auf Sedimentorganismen vor. Das Schutzgut „Sedimentorganismen“ ist für Flufenacet nicht relevant, weil der Triggerwert von $\log K_{oc} \geq 3$ nicht erreicht ist [11]. Es besteht nur eine geringe Wahrscheinlichkeit, dass eine relevant Anreicherung (Sorption) von Flufenacet im Sediment stattfindet.

6.3 Nahrungskette Fisch – Vogel oder Säugetier (Secondary poisoning)

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

7 Wirkung auf die menschliche Gesundheit

Die Klassifizierung und Kennzeichnung von Flufenacet (R 22, R48/22 (Gesundheitsschädlich: Gefahr ernster Gesundheitsschäden bei längerer Exposition durch Verschlucken), R 43 (Sensibilisierung durch Hautkontakt möglich), R 50-53 (Sehr giftig für Wasserorganismen)) liefert Hinweise auf mögliche Wirkungen auf die menschliche Gesundheit.

Für Flufenacet gibt es von der US EPA eine Referenz-Dosis für chronische orale Exposition (RfD) von 4 µg/kg/d auf der Basis einer Studie zur chronischen Toxizität bei Ratten [2]. Health Canada verwendet einen ADI-Wert von 4 µg/kg/d auf der Basis einer Studie zur chronischen Toxizität bei Hunden [3]. Aus der Rattenstudie differenziert Health Canada folgende akute Referenz-Dosen (ARfD):

ARfD = 0.75 mg/kg bw/d (Bevölkerung allgemein)

ARfD = 0.024 mg/kg bw/d (13–50 jährige Frauen)

ARfD = 0.008 mg/kg bw/d (Kinder unter 13 Jahren)

Die EU extrahiert aus der Rattenstudie einen ADI von 5 µg/kg/d und aus der Hundestudie einen ARfD von 17 µg/kg/d [10]. Europäische Nahrungsmittelgrenzwerte (Fisch) liegen für Flufenacet nicht 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 [11]:

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

Die Datenlage erlaubt für Flufenacet 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 Flufenacet 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 0,44 µg/L für *Lemna gibba* und eines Sicherheitsfaktors von 10 ergibt die Berechnung einen JD-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) von 0,04 µg/L Flufenacet.

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 Flufenacet liegen Daten zur akuten Wirkung auf Algen und andere Pflanzen vor die besonders sensitive aquatische Spezies repräsentieren, sodass die Absenkung des Sicherheitsfaktors auf von 100 auf 10 gerechtfertigt ist. Bei Verwendung des niedrigsten EC50-Werts von 2,04 µg/l für *Selenastrum capricornutum* und eines Sicherheitsfaktors von 10 ergibt die Berechnung einen ZHK-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) von 0,2 µg/L Flufenacet.

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 [11]. Weil nur wenige Testdaten für marine Spezies bestimmt wurden und keine Hinweise auf unterschiedliche Sensitivitäten von limnischen und marinen Spezies vorliegen, wurden das deterministische Verfahren und 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 0,44 µg/L für *Lemna gibba* und eines Sicher-

heitsfaktors von 100 ergibt die Berechnung des JD-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) 0,004 µg/L Flufenacet.

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 sensitiven Spezies bestimmt wurde, kann der Sicherheitsfaktor auf 100 abgesenkt werden. Für das Herbizid Flufenacet liegen Daten zur akuten Wirkung auf Algen und andere Pflanzen vor die besonders sensitive aquatische Spezies repräsentieren, sodass die Absenkung des Sicherheitsfaktors auf 100 gerechtfertigt ist. Bei Verwendung des niedrigsten EC50-Werts von 2,04 µg/l für *Selenastrum capricornutum* und eines Sicherheitsfaktors von 100 ergibt die Berechnung des ZHK-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) 0,02 µg/L Flufenacet.

8.2 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz der Sedimentorganismen

Nicht relevant (siehe 6.2)

8.3 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz von „fischfressenden“ Tierarten

Wahrscheinlich nicht relevant (siehe 6.3), da der Triggerwert für BCF von 100 nur gemäß den Angaben in einer Quelle gering überschritten wird.

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 kg·d⁻¹ Fisch(producte) verzehrt. Bei Verwendung des ADI von 5 µg/kg/d [10] ergibt sich ein UQN-Vorschlag für den Fischkonsum von 300 µg/kg Flufenacet. Für die $UQN_{biota.Human}$ von 300 µg/kg kann mit einem maximal angegebenen BCF von 165 L/kg eine korrespondierende Wasserkonzentration von etwa 2 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 Flufenacet, 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 Flufenacet.

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] U.S.EPA (1998). Pesticide Fact Sheet: Flufenacet.
- [3] Health Canada (2003). Regulatory Decision Document: Flufenacet. www.hc-sc.gc.ca/pmra-arla/.
- [4] NCBI (2009). PubChem Compound. <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>.
- [5] DGUV (2009). GESTIS Stoffdatenbank. <http://www.dguv.de/bgja/stoffdatenbank>.
- [6] EU (2010). Pesticides Database. http://ec.europa.eu/sanco_pesticides/public/index.cfm.
- [7] Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit (2010). Online Pflanzenschutzmittelverzeichnis des Bundesamtes für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit. http://www.bvl.bund.de/clin_027/nn_492012/DE/04_Pflanzenschutzmittel/02_ZugelassenePflanzenschutzmittel/02_OnlineDatenbank/onlineDB_node.html.
- [8] U.S.EPA (2009). EPI Suite v4.0. <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedi.htm>. U.S.Environmental Protection Agency, Washington, DC.
- [9] SPARC (2002). SPARC on-line calculator. <http://ibmlc2.chem.uga.edu/sparc/>.
- [10] European Commission (2003). Review report for the active substance flufenacet.
- [11] Anonymus (2009). Chemicals and the water framework directive: Draft technical guidance for deriving environmental quality standards.