

2017

## **EQS - Vorschlag des Oekotoxentrums für:** *Flufenacet*

Ersterstellung: 19.12.2017 (Stand der Datensuche)

# 1. Qualitätskriterien-Vorschläge

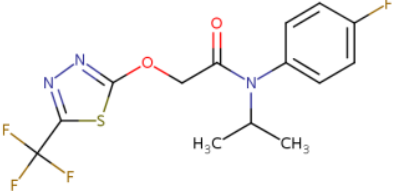
**CQK (AA-EQS): 0.048 µg/L**

**AQK (MAC-EQS): 0.75 µg/L**

Das chronische Qualitätskriterium (CQK  $\triangleq$  AA-EQS) und das akute Qualitätskriterium (AQK  $\triangleq$  MAC-EQS) wurden nach dem technischen Leitfaden der EU für die Herleitung von Qualitätskriterien (TGD for EQS) der Europäischen Kommission hergeleitet (EC 2011). Damit die Dossiers international vergleichbar sind, wird im Weiteren die Terminologie des TGD verwendet.

# 2. Physikochemische Parameter

**Tab. 1:** Geforderte und zusätzliche Identitäts- und physikochemische Parameter nach dem TGD for EQS (EC 2011) für Flufenacet. Die angegebenen Werte wurden soweit möglich zwischen experimentellen Werten (exp) und abgeschätzten, modellierten Werten (est) unterschieden. Werte aus älteren Dokumenten, welche im DRAR (2016) nicht akzeptiert wurde, sind in grau dargestellt und werden der Vergleichbarkeit wegen aufgeführt.

Eigenschaften	Wert	Referenz
IUPAC Name (Engl.)	N-(4-fluoro-phenyl)-N-isopropyl-2-(5-trifluoro-methyl-[1,3,4]thiadiazol-2-yloxy)-acetamide	Schweizer Pflanzenschutzmittel-Verzeichnis des Bundesamtes für Landwirtschaft (Stand: 04.10.2017)
Synonyme (Engl.)	Fluthiamide; Thiafluamide	www.chemspider.com
Hersteller Codes	FOE 5043, AE F133402	DRAR 2016, Vol. 3, B1 (AS), S. 4
Chemische Gruppe	Oxyacetamide-Herbizid	Wenzel und Shemotyuk (2014)
Strukturformel		Chemistry Dashboard (US-EPA)
CAS-Nummer	142459-58-3	Chemistry Dashboard (US-EPA)
EINECS-Nummer	Nicht vergeben	DRAR 2016, Vol. 3, B1 (AS), S. 4
Summenformel	C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> F <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S	Chemistry Dashboard (US-EPA)
SMILES-code	CC(C)N(C(=O)COC1=NN=C(S1)C(F)(F)F)C1=CC=C(F)C=C1	Chemistry Dashboard (US-EPA)
INCHI KEY	IANUJLZYFUDJIH-UHFFFAOYSA-N	Chemistry Dashboard (US-EPA)
Molare Masse (g·mol <sup>-1</sup> )	363.3	Chemistry Dashboard (US-EPA)
Schmelzpunkt (°C)	Partiell bei 76°C. Schmelzpunkt der neuen Kristalle bei 79 °C.	EC 2003
Siedepunkt (°C)	Nicht messbar, Zersetzung bei Temperaturen über 150 °C	EC 2003
Dampfdruck (Pa)	6.0 x 10 <sup>-2</sup> bei 20°C für das Flufenacet N-Isomer <sup>(1)</sup> :	HSDB 2007, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014

<sup>1</sup> Im DRAR 2016 wird erwähnt, dass Flufenacet eine aktive Substanz sei, die nicht in isomeren Formen vorkommt. (Vol. 1, (AS), S. 223 f.). Allerdings wird an mehreren Stellen ein N-Isomer erwähnt, zum einen als Verunreinigung von Flufenacet (Vol. 3, B.8 (AS), S. 1457), zum anderen scheint es unter bestimmten physikalischen Bedingungen zu entstehen, so dass der Dampfdruck und die Henry-Konstante sich auf das N-Isomer beziehen: Dazu die Fussnote zu den beiden Werten aus dem DRAR: „In section B.2 it was stated that Flufenacet isomerised by evaporation forming a mixture containing 10% of Flufenacet and 90% of its N-isomer; as a result, the value is that characteristic for N-isomer of Flufenacet;“. Modrcin et al. 2000 beschreibt in einer Patentschrift, dass Flufenacet (im Pflanzenschutzmittel) natürlicherweise über die Zeit chemischer Zersetzung unterliegt. Dabei ist vor allem die Temperatur entscheidend. Bei Erhitzung von 100 auf 110°C über 16 h entsteht das N-Isomer mengenmässig mit über 50%.

Eigenschaften	Wert	Referenz
	9 x 10 <sup>-5</sup> bei 20°C 2 x 10 <sup>-4</sup> bei 25°C	Krohn 1994, zitiert in DRAR 2016, Vol. 3, B2 (AS), S. 5
Henry's-Konstante (Pa·m <sup>3</sup> ·mol <sup>-1</sup> )	für das Flufenacet N-Isomer <sup>(1)</sup> : pH 4: 1.2 x 10 <sup>-3</sup> pH 7: 1.3 x 10 <sup>-3</sup> pH 9: 1.1 x 10 <sup>-3</sup>	Ziemer 2013, zitiert in DRAR 2016, Vol. 3, B2 (AS), S. 5
Wasserlöslichkeit (mg·L <sup>-1</sup> )	51 (nach OECD 105 bei pH 6.9, 20°C; Reinheit 98.65 %). Wasserlöslichkeit unabhängig vom pH im Bereich von pH 4 bis pH 9.  56 (pH 7, pH 4), 53 (pH 9); Werte wurden im DRAR aufgrund der kurzen Equilibrierungszeit von 24 h nicht akzeptiert.	Ziemer und Peschke 2012, zitiert in DRAR 2016, Vol. 3, B2 (AS), S. 11.  Krohn 1992, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014 und in DRAR 2016, Vol. 3, B2 (AS), S. 11.
pK <sub>a</sub>	Keine Dissoziation im pH-Bereich von 1 < pH < 12  12.58 (est)	Ziemer und Peschke 2012, zitiert in DRAR 2016, Vol. 3, B2 (AS), S. 11.  <a href="https://chemicalize.com">https://chemicalize.com</a>
Verteilungskoeffizient zw. dem org. Kohlenstoff im Boden/Sediment und Wasser (K <sub>oc</sub> )	202 L.kg-1 (Mittelwert) 200 L.kg-1 113–144 L.kg-1	EC 2003 BVL 2009a PMRA 2003, alle zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Verteilungskoeffizient zwischen suspendierter Materie und Wasser (K <sub>susp-water</sub> )	Es liegen keine Daten vor. Nach dem TGD for EQS kann der Wert berechnet werden aus K <sub>oc</sub> x F <sub>OC,susp, TGD</sub> = 202 x 0.1 = 20.2	EC 2011, A1.2.3.3, S. 131
n-Octanol/Wasser Verteilungskoeffizient (log K <sub>ow</sub> )	3.5 (bei 25°C und pH 4, 7 und 9; Reinheit 99.6%). ermittelt mit der HPLC-Methode nach OECD 117  3.2 (im pH Bereich von 4-10) Werte wurden im DRAR nicht akzeptiert, da der pH der mobilen Phase nicht definiert ist	Ziemer und Charter 2012, zitiert in DRAR 2016, Vol. 3, B2 (AS), S. 14.  Krohn 1992, zitiert in EC 2003, Wenzel & Shemotyuk 2014 und im DRAR 2016, Vol. 3, B2 (AS), S. 14
Biokonzentrationsfaktor (BCF)	165 (ganzer Fisch) 71.4 (ganzer Fisch)  60 (est)	- PMRA, 2003 - EC 2003 und im DRAR 2016, Vol. 3, B.9 (AS), S. 131 ff. - HSDB, 2007 zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Photolytische Abbaubarkeit (Halbwertszeit (DT50))	> 1 Jahr > 30 Tage bei pH 5 (25°C)	EC 2003 Kasper and Shadrick 1995, zitiert in Wenzel and Shemotyuk 2014
Hydrolytische Abbaubarkeit (Halbwertszeit in Tagen)	> 1000 bei pH 5-7 (exp) 655 bei pH 9 (exp)	DRAR 2016, Vol. 1, B2 (AS), S. 103 f.
Biologische Abbaubarkeit in Wasser-Sediment-Systemen (DT50 in Tagen)	<u>DT50 in der Wasserphase</u> 8.1 – 61.7 46.3 – 61.7 19.7-90.3 18.8  <u>DT50 im Gesamtsystem</u> 76.4-84.6 81 19 – 85 14.5-21.3	BVL 2011 <sup>(2)</sup> EC 2003 Bayer 2014a, S. 223 Foekema & Jak (1999), zitiert im DRAR 2016 Vol. 3, B.9 (AS), S. 343  EC 2003 PPDB <sup>(2)</sup> BVL 2011 <sup>(2)</sup> Bayer 2014a, S. 226

<sup>2</sup> zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014

## 3. Allgemeines

### 3.1. Anwendung

Alle im Schweizer Pflanzenschutzmittel-Verzeichnis des BLW gelisteten Produkte enthalten neben Flufenacet mindestens einen weiteren Wirkstoff. Die meisten Produkte sind gegen einjährige Dicotyledonen (Unkräuter) und Einjährige Monocotyledonen (Ungräser) in Wintergetreide zugelassen. Die Anwendung erfolgt zumeist im Herbst. Einige Produkte sind aber auch in anderen Kulturen zugelassen und haben andere Anwendungsvorgaben (Pflanzenschutzmittelverzeichnis; Stand: 04.10.2017).

### 3.2. Wirkungsweise

Flufenacet ist ein Zellteilungshemmer und gehört zur HRAC-Gruppe K3, welche die Bildung langkettiger Fettsäuren, sogenannte VLCFAs, inhibieren (<http://hracglobal.com>). Flufenacet zeigt eine starke Wirkung auf meristematische Gewebe, interferiert mit Membranfunktionen und verändert die Permeabilität von Zellmembranen. In höheren Pflanzen ergaben sich durch Flufenacet Organ-Fusionen (e.g. verwachsene Blätter und Blüten), wie sie auch für andere VLCFA-Hemmer beschrieben wurden (Lechelt-Kunze, Meissner et al. 2003). Ferner wird Flufenacet als ein Inhibitor der Interaktion von Thyroid Hormonrezeptor und Steroidrezeptor-Koregulator 2 beschrieben (LAWA 2010). Somit könnte eine hormonelle Aktivität vermutet werden. In Bayer 2014b und im DRAR 2016 (Vol. 3, b.9, S. 130) werden populationsrelevante Effekte von Flufenacet auf Fische in Langzeituntersuchungen beschrieben. Zum einen in einem Early Life-Stage-Test (ELS) mit der Regenbogenforelle und dem Edelsteinkärpfling berichtet, zum anderen ein *Fish Full Life Cycle Test* (FFLC) mit *P. promelas*. Der niedrigste NOEC von 49 µg a.s./L, basierend auf der Länge und dem Trockengewicht, wurde für den Edelsteinkärpfling erhalten. Im ELS-Test wurde für die Regenbogenforelle ein NOEC von 334 µg/L, basierend auf dem Schwimmaufstieg und Trockengewicht bei Tag 97. In dem FFLC Test nach 279 Tagen Durchfluss-Exposition wurde ein NOEC von 138 µg a.s./L für Effekte auf das Gewicht von F0 Männchen erhalten. Für alle anderen Endpunkte, wie Überleben, Fortpflanzung und Wachstum (außer dem Gewicht des Männchen), wurden höhere NOECs von 600 oder 1211 µg a.s./L festgelegt. Da diese Effekte bei Konzentrationen weit oberhalb der kritischen Effektkonzentrationen für Primärproduzenten liegen, wird in Bayer 2014b geschlossen, dass Flufenacet kein (potenzieller) endokriner Disruptor ist. Im DRAR 2018 wird hingegen darauf hingewiesen, dass es keine definierten Kriterien für die Identifizierung von endokrinen Disruptoren gäbe, und es daher momentan nicht möglich sei den Schluss zu ziehen, dass keine Hormonaktivität auftritt.

### 3.3. Stabilität

Studien zum abiotischen Abbau zeigen, dass Flufenacet stabil gegenüber photolytischen und hydrolytischen Abbau ist. Lediglich indirekte Photolyse wird als relevanter abiotischer Abbaupfad beschrieben (DRAR, Vol. 1, Level 3, S. 111). Flufenacet ist ebenfalls kaum biologisch abbaubar. In Biotests zeigte sich Flufenacet entsprechend stabil. So verringerte sich in einem Algentest die gemessene Konzentration von initial 102 % auf lediglich 98% der nominalen Konzentration nach 216 Stunden (DRAR 2016, Vol. 3, B.9, S. 228). Flufenacet ist mässig gut Wasserlöslich (51 mg/L). Aufgrund der Koc-Werte zwischen 100 und 200 kann davon ausgegangen werden, dass Flufenacet im Gewässer zu einem gewissen Teil an Sedimentpartikel bindet. In Wasser-Sediment Studien zeigt sich Flufenacet aber sowohl in der Wasserphase als auch im Gesamtsystem als stabil, mit Halbwertszeiten zwischen 8.1 – 61.7 und 14.5 – 85 Tagen, respektive (Tabelle 1). Dennoch schlussfolgert der RMS, dass die Dissipation von Flufenacet von der Wasserphase in natürlichen Gewässern hauptsächlich durch Migration ins Sediment geschieht (DRAR 2016, Vol. 3, B.9, S. 228).

Aufgrund der oben aufgeführten Befunde soll für die Validität einer Studie eine begleitende chemische Analyse der Testkonzentrationen nicht zwingend sein, es sei denn es handelt sich um längerfristige Experimente in Wasser-Sediment-Systemen.

Die Stabilität der Testsubstanz ist nur ein Einflussfaktor auf die tatsächliche Testkonzentration, wenn auch ein sehr wichtiger. Andere Einflussfaktoren sind die Löslichkeit der Testsubstanz im Testmedium und das korrekte Einwiegen der Testsubstanz. Während sich die Löslichkeit anhand der Wasserlöslichkeit und den eingesetzten Testkonzentrationen plausibilisieren lässt, kann es beim Einwiegen zu nicht-systematischen Unterschieden kommen, die anhand der Angaben im jeweiligen Testbericht nicht ersichtlich sind. Daher werden alle Effektwerte, die auf nominalen Konzentrationen beruhen, gekennzeichnet. Bei deutlichen Unterschieden (Unterschied grösser als Faktor 10) zwischen nominalen und analytisch validierten Werten, sollen letztere bevorzugt werden.

### 3.4. Transformationsprodukte

Im DRAR (2016, Vol. 1, S. 118) werden für Oberflächengewässer folgende relevante Transformationsprodukte aufgeführt: Flufenacet-Oxalat (M1), Flufenacet-Sulfonsäure (M2), Flufenacet-Methylsulfid, Flufenacet-Methylsulfon, Flufenacet-Thiadone (M09), Flufenacet-Trifluoethansulfonsäure (M44) und Trifluoressigsäure (TFA) (M45). Alle gelisteten Metaboliten werden als nicht genotoxisch und humantoxikologisch unbedenklich eingestuft (DRAR 2016, Vol. 1, S. 40). Wenzel & Shemotyuk (2014) beschreiben M1 und M2 als weder toxikologisch noch ökotoxikologisch relevant. Die herbizide Wirkung von M44, M45 und Flufenacet-Methylsulfid liegt ebenfalls weit unterhalb jener der Muttersubstanz liegt (DRAR 2016, Vol. 1, Tab. 2.9.2-2:).

Angesichts der Tatsache, dass die Kohlenstoff-Fluorbindung extrem stabil ist, ist es nicht verwunderlich, dass einige der Abbauprodukte von Flufenacet, darunter Flufenacetoxalat und Flufenacetsulfonsäure, persistent sind (siehe z.B. Bayer 2014b, S. 42-43).

### 3.5. Analytik

**Tab. 2:** Übersicht analytischer Methoden für Flufenacet und relevanter Metaboliten mit ihren Bestimmungsgrenzen.

Substanz	Methode	Matrix	LOQ [µg/L]	Referenz
Flufenacet	GC-ECD	Trinkwasser	<b>0.05</b>	König, 1996, zitiert im DRAR (2016), Vol. 3, B.5, S. 86 ff.
Flufenacet	HPLC-MS/MS	Grundwasser	<b>0.10</b>	Bethem et al. 1995, zitiert im DRAR (2016), Vol. 3, B.5, S. 86 ff.
Flufenacet	HPLC-MS/MS	Grund- und Oberflächenwasser	<b>0.05</b>	Krebber und Braune 2013, zitiert im DRAR (2016), Vol. 3, B.5, S. 89 ff.
Flufenacet	SPME/GC-MS-MS	Natürliches Oberflächenwasser	<b>0.05</b>	Perreau and Einhorn 2006.
M1	ESI-MS/MS	Natürliches Oberflächenwasser	<b>0.014</b>	Kowal et al. 2013
M2	ESI-MS/MS	Natürliches Oberflächenwasser	<b>0.029</b>	Kowal et al. 2013

Die Zusammenstellung in Tabelle 2 zeigt, dass bestehende analytische Methoden zur Bestimmung von Flufenacet im Rahmen eines möglichen Monitorings ausreichend sein sollten, um die vorgeschlagenen Umweltqualitätskriterien zu überprüfen.

### 3.6. Bestehende EQS:

**Tab. 3:** Übersicht über bestehende Qualitätskriterien

Land/Entität	Chronisches Qualitätskriterium <sup>3</sup> [µg/L]	Akutes Qualitätskriterium <sup>3</sup> [µg/L]	Referenzen
Deutschland, Umweltbundesamt (UBA)	<b>0.04</b> (AA-QS <sub>freshwater, eco</sub> )	<b>0.2</b> (MAC <sub>freshwater, eco</sub> )	Wenzel und Shemotyuk 2014
Deutschland, LAWA Expertenkreis "Stoffe"	<b>0.04</b> (JD-UQN)	<b>0.2</b> (ZHK-UQN)	LAWA 2010
Frankreich (INERIS)	<b>0.04</b> (VGE <sub>EAU-DOUCE</sub> )	<b>0.16</b> (MAC <sub>EAU-DOUCE</sub> )	INERIS (2015)
Niederlande (RIVM)	<b>0.137</b> (JG-MKN)	<b>0.61</b> (MAC-MKN)	Rijkswaterstaat 2008, Smit 2013

### 3.7. Allgemeines Vorgehen

In **Tabelle 4** sind alle Effektdaten für Flufenacet aufgeführt. Literaturdaten die in grau dargestellt wurden können nach dem TGD for EQS (EC, 2011) nicht direkt zur EQS-Herleitung verwendet werden, sollen aber als zusätzliche Information genannt werden.

Für Flufenacet liegen mehrere Quellen für ökotoxikologische Daten vor. Generell sollen nur verlässliche und relevante Daten zur EQS-Herleitung verwendet werden (EC 2011). Diese Daten werden oftmals auch als „valide“ bezeichnet. Es existieren verschiedene Ansätze zur Bewertung und Klassifizierung (öko)toxikologischer Daten (Klimisch *et al.* 1997; Moermond *et al.* 2016). Basierend auf der etablierten Methodik von Klimisch *et al.* (1997) werden vier Validitätsklassen vergeben: (1) verlässlich, (2) verlässlich mit Einschränkung, (3) nicht verlässlich, (4) nicht bewertbar. Die CRED-Methode bietet zusätzlich eine vergleichbare Klassifizierung für die Relevanz von Testergebnissen. Studien, welche von einer kompetenten Stelle (e.g. einer Behörde im Zulassungsverfahren) bewertet wurden, können laut TGD for EQS ohne eigenen Prüfung („face value“) übernommen werden (EC, 2011). Die wichtigsten Datenquellen und die Verwendung der darin enthaltenen Daten ist im Folgenden genauer beschrieben:

Der original *Draft Assessment Report* (DAR) aus dem Jahr 1997 ist nicht öffentlich verfügbar. Es liegt dazu lediglich der *Review report for the active substance flufenacet* der Europäischen Kommission (**EC 2003**) vor, der jedoch keine gesonderten Studienbewertungen und kaum Details zu den aufgeführten Effektdaten enthält. Seit August 2016 ist der „*Draft Renewal Assessment Report*“ der EFSA (**DRAR 2016**) verfügbar. Darin sind nun erstmals Studiendetails und teilweise auch Autorennamen öffentlich einsehbar. Für den DRAR wurden seitens des oder der Antragsteller(s) einige ältere Datensätze neu ausgewertet. Der RMS (*rappporteur member state*) hat teilweise ebenfalls Daten neu bewertet und entsprechend Endpunkte akzeptiert oder invalidiert. Ist ein solcher Fall eindeutig, dann wurde der alte Wert in grau in Tabelle 4 aufgeführt. Das „*peer reviewing*“ des DRARs und die Veröffentlichung der *EFSA Conclusion* samt Endpunkliste steht allerdings noch aus. Es könnten sich in diesem Prozess nochmals Änderungen ergeben. Eine weitere Schwierigkeit ergibt sich, da im DRAR 2016 nicht die Werte vor der Neuberechnung aufgeführt wurden. Dadurch kann es zu Duplikationen in der Effektdatensammlung (Tab. 4) kommen, besonders da im EC 2003 keine Details zu den Effektdaten und Autoren aufgeführt wurden. Ähnlich verhält es sich mit den weiteren Datenquellen. Einträge aus der **OPP-Datenbank** (*Office of Pesticide Programs*) der US-Umweltbehörde dar. Diese enthält geprüfte experimentelle Effektdaten<sup>4</sup>, die als „C“ (*core*) oder „S“ (*supplemental*) kategorisiert werden. Für die Risikobewertung der U.S. EPA werden

<sup>3</sup> Die spezifischen Bezeichnungen sind in Klammern angegeben

<sup>4</sup> „The toxicity data inputted into the database is compiled from actual studies reviewed by EPA in conjunction with pesticide registration or reregistration and studies performed by USEPA, USDA and USFWS laboratories which have been reviewed by Agency biologists and judged acceptable for use in the ecological risk assessment process.“ <http://www.ipmcenters.org/Ecotox/index.cfm>

im Normalfall die C-Studien verwendet. Fehlt für eine bestimmte Bewertung eine C-Studie, können nach sorgfältiger Prüfung auch S-Studien bei der Risikobewertung verwendet werden (US EPA 2004)<sup>5</sup>. S-Studien gelten als wissenschaftlich valide<sup>6</sup>, folgen aber nicht unbedingt den Richtlinien der US-EPA. So werden dort valide Daten aus der öffentlichen Literatur in den meisten Fällen als „S“ eingeordnet. Im vorliegenden Dossier wurden die Klassifizierung „C“ und „S“ übernommen. C-Studien werden wie Klimisch 1 Studien verwendet. S-Studien, die nicht selber recherchiert und überprüft werden konnten, werden wie Klimisch 3 Studien verwendet und sollen nicht als kritische Studien bei der AF-Methode dienen. Sie können aber unter Umständen verwendet werden um Datenlücken zu schliessen, zur Plausibilisierung anderer Testergebnisse, und zur Anpassung der AF. Im probabilistischen Ansatz können plausible S-Studien hingegen verwendet werden, da dieser robuster ist und der EQS<sub>SSD</sub> nicht so stark von einzelnen Datenpunkten verändert wird. Werte, die im DRAR 2016 als „*supportive/supplemental information*“ aufgeführt sind, werden ebenfalls wie „S“ Studien behandelt. Die **ICS-Datenbank** des Deutschen Umweltbundesamtes (UBA) enthält i.d.R. geprüfte und als valide eingeschätzte Effektdaten. Ein Auszug aus der Datenbank wurde uns zur Verfügung gestellt. Die Datenbank wird aber vermutlich erst nach Veröffentlichung der *EFSA Conclusion* aktualisiert und der Duplikate bereinigt. Das im Auftrag des UBAs erstellte EQS-Dossier (**Wenzel & Shemotyuk 2014**) stützt sich in grossen Teilen auf Daten aus der ICS-Datenbank. Sofern die Werte aus dem UBA-Dossier nicht in EC 2003 oder im DRAR 2016 enthalten waren, wurden sie hier gesondert aufgeführt. Konnte die Quelle nicht identifiziert werden, wurden die Daten als Klimisch 4 übernommen. Zitierte Effektdaten aus „**Univ. Hertfordshire**“ und „**HSDB 2007**“ wurden ebenfalls als Klimisch 4 klassifiziert, da es sich dabei nicht unbedingt um Daten handelt, die von einer Behörde geprüft wurden.

Um der unsicheren Datenlage Rechnung zu tragen wurde in Tabelle 4 auf die Berechnung geometrischer Mittelwerte verzichtet, wenn die den Daten zugrundeliegenden Studien (und ggf. Neuauswertung) nicht eindeutig identifizierbar waren. Bei direkter EQS-Relevanz wurden im Zweifelsfall daher die Werte aus dem DRAR (2016) bevorzugt. Aus der öffentlichen Literatur konnten nur wenige Studien gefunden werden. Diese wurden nach den CRED-Kriterien (Moermond et al. 2016) hinsichtlich ihrer Verlässlichkeit und Relevanz hin untersucht.

Insgesamt wurden Tests mit Formulierungen nicht für die EQS Herleitung verwendet, da Formulierungsstoffe einen möglichen Einfluss auf die Toxizität der Wirksubstanz haben können. Einige der kritischen Effektdaten wurden in Tests unter Verwendung von Lösungsvermittlern durchgeführt. In Tab. 4 sind diese Studien markiert, v.a. wenn Lösungsmittelkonzentrationen nicht angegeben waren, oder die nach dem TGD for EQS (EC, 2011) zulässige Höchstkonzentration von 0.01% bzw. 100 µL/L überschritten wurden. Laut Hutchinson et al. (2006) wurde vor allem für das in einigen Tests verwendete DMF eine Wachstumsstimulierung in Tests mit Algen beobachtet. Tests mit DMF, welche im DRAR 2018 akzeptiert wurden, wurden generell als Klimisch 2 bewertet.

Gemäss TGD for EQS werden bei den Biotests mit Algen die Werte zur Wachstumsrate gegenüber denen zum Biomassezuwachs bevorzugt für die EQS Herleitung verwendet (EC 2011). Für Algen-Tests aus der US-EPA Datenbank wurde vielmals der Endpunkt „Abundanz“ angegeben. Es ist nicht klar ersichtlich, ob es sich hierbei um die Wachstumsrate, Biomasse oder den Yield handelt. Darum wurden auch hier Werte

---

<sup>5</sup> [Seite 33]: [...] In some instances, a core study may not be available for a particular data requirement listed in 40 CFR 158. In this case, the risk assessment team may consider other sources of information to address the data gap (e.g., submitted studies considered to be supplemental and data from other sources not submitted as part of fulfilment of 40 CFR 158). If supplemental or non-guideline study data are available to address the type of information described by the associated guideline, then it may be used in the risk assessment after its use is carefully considered. Professional judgment is used by the risk assessment team to determine the utility of the available supplemental data for the proposed risk assessment [...].

<sup>6</sup> 'supplemental data are from studies found to be scientifically valid but do not follow all requirements set forth in Agency testing guidelines', since data were 'e.g. not collected using the EPA's test guidelines'. For instance, (reliable) data from the open literature are according to US EPA (2004) in most cases classified as 'supplemental'

zur Wachstumsrate gegenüber denen zur Abundanz bevorzugt. Beim Vorliegen mehrerer nicht relevanter Endpunkte (e.g., Biomarker-Antworten), wird jeweils nur der niedrigste Wert angegeben.



## 4. Ökotoxikologische Parameter

**Tab. 4:** Effektdatensammlung für Flufenacet. Zum allgemeinen Vorgehen siehe den letzten Abschnitt des vorangegangenen Kapitels. Die für die EQS Ableitung niedrigste und relevantesten Effektwerte pro Spezies wurden unterstrichen und wurden auch in Abb.1 dargestellt. Der derzeit anerkannte Speziesname wurde angegeben und der in der Studie verwendete Name wurde in Klammern angegeben. Das jeweils niedrigste valide und relevante Effektdatum pro Spezies ist unterstrichen und ebenfalls in Abb. 1 repräsentiert.

Abkürzungen: **kA** oder - = keine Angabe; **Form.** = Formulierung; **Kat.** = Kategorie; **Kat.** = Kategorie welche durch US-EPA vergeben wurde (C = core; S = supplemental); **NA** = „not accepted“ (im DRAR 2016); **SW**: natürliches Meerwasser (gefiltriert sofern nicht anderweitig angegeben); **Sal.** = Salinität

Effektdatentabelle													
Sammelbezeichnung	Organismus	Endpoint	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (µg/L)	Chem. Analytik	Exposition	Reinheit (%)	Notiz <sup>7</sup>	Validität	Literaturquelle
<b>akute Effektdaten – limnisch</b>													
Cyanobakterien	<i>Anabaena flos-aquae</i>	Wachstum (Abundanz)	5	d	EC50	=	<u>34000</u>	kA	S	97.5	F	1 (Kat. C)	OPP-Datenbank – (Studiendatum 1994), Wert auch zitiert in, PMRA 2003 und in Wenzel & Shemotyuk 2014
Cyanobakterien	<i>Anabaena flos-aquae</i>	Wachstumsrate	96	d	ErC50	>	53200	C	S	97.5	F, G	1	Hughes & Alexander (1993), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 236 ff.
Cyanobakterien	<i>Anabaena flos-aquae</i>	Wachstum (Yield)	96	d	EyC50	=	26650	C	S	97.5	F, G	1	Hughes & Alexander (1993), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 236 ff.
Cyanobakterien	<i>Anabaena flos-aquae</i>	Biomasse	5	d	ECb50	=	27730	C	S	-	F, Y	1	Hughes & Alexander (1993), Eintrag in ICS 2013, Wert zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Cyanobakterien	<i>Anabaena flos-aquae</i>	Zellzahl	5	d	EC50	=	32500	C	S	-	F, Y	1	Hughes & Alexander (1993), Eintrag in ICS 2013, Wert zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Cyanobakterien	<i>Synechococcus leopoliensis</i>	Wachstumsrate und Yield	72	d	ErC50 EyC50	>	10000	B	S	97.5	F,	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 232 ff.
Algen	<i>Chlamydomonas terricola</i>	Wachstumsrate	9	d	ErC50	=	<u>657</u>	C	S	97.5	F, Q	2	Sobczyk (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 227 ff.
Algen	<i>Chlamydomonas terricola</i>	Wachstum (Yield)	9	d	EyC50	=	332	C	S	97.5	F, Q	2	Sobczyk (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 227 ff.
Algen	<i>Chlorella vulgaris</i>	Wachstumsrate	72	h	ErC50	=	<u>11100</u>	B	S	97.5	F, Q	2	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 223 ff.
Algen	<i>Chlorella vulgaris</i>	Wachstum (Yield)	72	h	EyC50	=	3710	B	S	97.5	F, Q	2	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 223 ff.
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstumsrate	72	h	ErC50	=	<u>675</u>	C	S	97.5	F, Q	2	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 219 ff.
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstum (Yield)	72	h	EyC50	=	76.96	C	S	97.5	F, Q	2	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 219 ff.

<sup>7</sup> Für Tests mit marinen Organismen wird die Salinität in Klammern angegeben. In Studien, in welchen die nach dem TGD for EQS (EC, 2011) zulässige Höchstmenge an Lösungsmittel (0.01% bzw. 0.1 ml/L), wird das verwendete Lösungsmittel und dessen Konzentration im Testansatz bzw. der Lösemittelkontrolle angegeben.

Effektdatentabelle													
Sammelbezeichnung	Organismus	Endpoint	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (µg/L)	Chem. Analytik	Exposition	Reinheit (%)	Notiz <sup>7</sup>	Validität	Literaturquelle
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Selenastrum capricornutum</i> )	Wachstum (Yield)	96	h	EyC50	=	1.783	D	S	99.4	F, N, P (DMF 0.05%)	2	Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) und erneut im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 193 ff.
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstum (Yield)	72	h	EyC50	=	5.38	C	S	97.5	F	1	Bruns (2010), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 200 ff.
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstumsrate	72	h	ErC50	=	21.2	C	S	97.5	F, Q	2	Bruns (2010), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 200 ff.
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstumsrate	96	h	ErC50	=	6.45	B	S	99.5	F, Q	2	Anderson (1997), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 205 ff.
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Selenastrum capricornutum</i> )	Wachstumsrate	96	h	ErC50	=	3.15	D	S	99.4	F, N, P (DMF 0.05%)	2	Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) und erneut im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 196 ff.
		Geom. Mittelwert <sup>(8)</sup>	72/96	h	ErC50	=	7.55						
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Biomasse	72	h	EbC50	=	1.42	kA	-	-	F, N	1	Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) in ICS 2013, Wert zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Biomasse	72	h	EbC50	=	2.04	kA	-	-	F, H, O	1	EC 2003, auch zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstumsrate	72	h	ErC50	=	1.59	kA	-	-	F, N	1	Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) in ICS 2013, Wert zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014 und in EC 2003
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Selenastrum capricornutum</i> )	Wachstum (Abundanz)	5	d	EC50	=	2.9	kA	S	99.4	F, O, R	1 (Kat. C)	OPP-Datenbank – (Studiendatum 1995), Wert auch zitiert in HSDB 2007, PMRA 2003 und in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstumsrate	5	d	ErC50	=	4.47	C	S	kA	F, N, R	1	Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) in ICS Datenbank
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstum (Abundanz)	5	d	EC50	=	4.54	kA	S	96.8	F, K, R	1	OPP-Datenbank (Studiendatum 1995), auch zitiert in HSDB 2007
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstumsrate	5	d	ErC50	=	4.45	kA	-	-	F, K, R	1	ICS 2013, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Biomasse	5	d	EbC50	=	3.04	C	S	kA	F, N, R	1	Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) in ICS Datenbank
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Zellzahl	5	d	EC50	=	3.06	C	S	kA	F, N, R	1	Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) in ICS Datenbank
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Populationsabundanz	5	d	EC50	=	2.9	kA	-	-	F, R	3 <sup>(9)</sup>	Bayer 1995, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Biomasse	5	d	EbC50	=	1.22	A	S	kA	R	4 <sup>(10)</sup>	Bayer 1995, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i>	Wachstumsrate	5	d	ErC50	=	8.46	A	S	kA	R	4 <sup>(10)</sup>	Bayer 1995, zitiert in Wenzel &

<sup>8</sup> Dieser geometrische Mittelwert wird auch im DRAR vom RMS für die Risikobewertung vorgeschlagen (2016, Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 213 f.). Hier werden diese ebenfalls berechnet. Eine ausführliche Begründung findet sich im Annex I.

<sup>9</sup> Es handelt sich bei diesem Wert vermutlich um einen Übertragungsfehler (daher als nicht bewertbar Klimisch 3 eingestuft), da in der ICS-Datenbank andere Werte für die Referenz (Bayer 1995) vorliegen.

<sup>10</sup> Als nicht bewertbar angegeben, da in der ICS-Datenbank nicht eindeutig als geprüft gekennzeichnet und folgender Kommentar hinzugefügt wurde: „Range Findig Test, Zellzahlen nach 48 h und 72 h bestimmt, 4 Testkonzentrationen, keine Analytik, Angaben zum pH-Wert fehlen, sonstige Validitätskriterien erfüllt“

Effektdatentabelle													
Sammelbezeichnung	Organismus	Endpoint	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (µg/L)	Chem. Analytik	Exposition	Reinheit (%)	Notiz <sup>7</sup>	Validität	Literaturquelle
	<i>(Pseudokirchneriella subcapitata)</i>												Shemotyuk 2014
Algen	<i>Navicula pelliculosa</i>	Wachstumsrate	96	H	ErC50	=	5044	B	S	98.8	F	2 <sup>(11)</sup>	Bowers und Dobbs (1995), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 241 ff
Algen	<i>Navicula pelliculosa</i>	Wachstum (Yield)	96	h	EyC50	=	2173	B	S	98.8	F	2 <sup>(11)</sup>	Bowers und Dobbs (1995), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 241 ff
Algen	<i>Navicula pelliculosa</i>	Biomasse	5	d	EbC50	=	1470	kA	-	-	F, Y	1	Bowers und Dobbs (1995) in ICS 2013, Wert zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Navicula pelliculosa</i>	Wachstumsrate	5	d	ErC50	=	1860	kA	-	-	F, H	1	ICS 2013, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Navicula pelliculosa</i>	Wachstumsrate	5	d	ErC50	=	8520	kA	-	-	F, Y	1	Bowers und Dobbs (1995) in ICS 2013, Wert zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Navicula pelliculosa</i>	Zellzahl	5	d	EC50	=	2070	kA	-	-	F, Y	1	Bowers und Dobbs (1995) in ICS 2013, Wert zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Navicula pelliculosa</i>	Wachstum (Abundanz)	5	d	EC50	=	6080	kA	S	96.8		1 Kat. C	OPP-Datenbank, (Studiendatum 1995), Wert auch zitiert in HSDB 2007
Algen	<i>Navicula pelliculosa</i>	Wachstum (Abundanz)	5	d	EC50	=	3800	kA	S	98.8		1 Kat. C	OPP-Datenbank (Studiendatum 1995), Wert auch zitiert in HSDB 2007, PMRA 2003 und in Wenzel & Shemotyuk 2014
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Wachstumsrate (Frondzahl)	7	d	ErC50	=	25.9	C	S	97.5	F, P, Z (DMF 0.02%)	2	Hughes & Alexander (1994), neu ausgewertet von Dorgerloh 1998, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 281 ff
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Wachstumsrate (Frondzahl)	7	d	ErC50	=	16.1	B	S	97.5	F	1	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 286 ff
		Geom. Mittelwert	7	d	ErC50	=	20.4						
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Wachstumsrate (Frondfäche)	7	d	ErC50	=	13.9	B	S	97.5	F	1	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 286 ff
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Yield (Frondzahl)	7	d	EyC50	=	7.638	B	S	97.5	F	1	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 286 ff
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Yield (Frondfäche)	7	d	EyC50	=	6.824	B	S	97.5	F	1	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 286 ff
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Anzahl Fronds (unklar ob Wachstums-rate oder Yield)	14	d	EC50	=	2.43	C	S	kA	F, Z	1	Hughes & Alexander (1994), ICS Datenbank, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014 als PMRA 2003; Studie neu ausgewertet als „Dorgerloh 1998“
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Wachstum (Abundanz)	14	d	EC50	=	2.45	kA	S	97.5	Z	1 Kat. C	OPP-Datenbank, Studiendatum 1993. Auch zitiert in HSDB 2007
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Yield (Frondfäche)	14	d	ErC50	>	126	B2	S	97.5	F, I	C3	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 291 ff
Wasserpflanze	<i>Myriophyllum spicatum</i>	Wachstumsrate (Sprosslänge)	14	d	ErC50	=	36.1	C	S	97.5	F	3	Banman et al. 2011, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S.

<sup>11</sup> Studie wurde im DRAR (2016) als unterstützende Information (*supportive information*) aufgeführt. Der Grund für die reduzierte Verlässlichkeit ist, dass der Variationskoeffizient für die Wachstumsrate über die gesamte Versuchsdauer im Test bei 16.85% lag, nach der OECD 201 TG (2006) 10% aber nicht überschreiten sollte.

Effektdatentabelle													
Sammelbezeichnung	Organismus	Endpunkt	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (µg/L)	Chem. Analytik	Exposition	Reinheit (%)	Notiz <sup>7</sup>	Validität	Literaturquelle
													305 ff
Wasserpflanze	<i>Myriophyllum spicatum</i>	Wachstumsrate (Trockengewicht)	14	d	ErC50	=	58.3	C	S	97.5	F	3	Banman et al. 2011, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 305 ff
Wasserpflanze	<i>Myriophyllum spicatum</i>	Wachstumsrate (Nassgewicht)	14	d	ErC50	=	48.53	C	S	97.5	F	3	Banman et al. 2011, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 305 ff
Wasserpflanze	<i>Myriophyllum spicatum</i>	Yield (Sprosslänge)	14	d	EyC50	=	26.2	C	S	97.5	F	3	Banman et al. 2011, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 305 ff
Wasserpflanze	<i>Myriophyllum spicatum</i>	Yield (Nassgewicht)	14	d	EyC50	=	18.8-59.6	C	S	97.5	F	3	Banman et al. 2011, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 305 ff
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Kumulative Mortalität und Immobilisierung	48	h	EC50	=	<u>30900</u>	C	S	96.8	F, P (Aceton 0.05%)	2	Bowers (1994), zitiert in EC 2003 und im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 156 ff
Krebstiere	<i>Hyalella azteca</i>	kA	4	d	NOEC	=	<u>830</u>	kA	-	-	F, M	1, C3	ICS 2013, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Krebstiere	<i>Hyalella azteca</i>	Mortalität	4	d	LC50	=	<u>2450</u>	C	S	98.8	F, G, P	2	Bowers (1995), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 156 ff
Krebstiere	<i>Hyalella azteca</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	<u>2800</u>	kA	-	-	F, H	1 <sup>(12)</sup>	PMRA 2003, auch zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Fische	<i>Cyprinus carpio</i>	Mortalität	96	h	LC50	>	10-12	B3	R	97.5	F, Q	1	Anonym (2010) mit Änderungen 2011 und 2012, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 77 ff.
Fische	<i>Danio rerio</i>	Entwicklungstoxizität (Mortalität, Schlupferfolg, Fehlbildung)	5	d	AC50 <sup>(13)</sup>	=	11286	A	-	-	-	C3	(Padilla, Corum et al. 2012)
Fische	<i>Lepomis macrochirus</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	<u>2130</u>	C	R	98.9	F, P (Aceton 0.05%)	2	Anonym (1995), zitiert im EC 2003 und im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 70 ff
Fische	<i>Lepomis macrochirus</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	2257.4	kA	-	-	F	4	HSDB 2007, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Fische	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	<u>3500</u>	kA	-	-	F, H	1	PMRA 2003, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Fische	<i>Oncorhynchus mykiss</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	<u>5840</u>	C	R	98.9	F, P (Aceton 0.05%)	2	Anonym (1995), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 66 ff
<b>akute Effektdate – marin</b>													
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	Wachstum (Abundanz)	5	d	EC50	=	<u>5.0</u>	kA	S	98.8	F, J, O	1 (Kat. C)	OPP-Datenbank (Studiendatum 1995)
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	Wachstum (Abundanz)	5	d	EC50	=	14.4	kA	S	96.8	F	1 (Kat. C)	OPP-Datenbank (Studiendatum 1996)
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	Wachstumsrate	5	d	ErC50	=	5.59	kA	-	-	F	3 <sup>(14)</sup>	Bowers (1995), Neu berechnet von

<sup>12</sup> Im DAR und in der ICS-Datenbank liegt für *H. azteca* lediglich die Studie von Bowers (1995) vor. In der ICS Datenbank sind LC50 Werte für andere Zeitpunkte aufgeführt, darunter der 72 h LC50 von 2.86 mg/L. Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass der im PMRA 2003 zitierte Wert sich auf diesen Wert stützt. Es wurde daher kein geom. Mittelwert gebildet und in der kritischen Tabelle wird der LC50 von 2450 µg/L aufgeführt.

<sup>13</sup> AC50 = halb-maximale Aktivitätskonzentration. In diesem Endpunkt sind Larven Mortalität und Schlupferfolg zu einem AC50 zusammengefasst worden, welcher nicht direkt mit einem EC50-Wert verglichen werden kann.

Effektdatentabelle													
Sammelbezeichnung	Organismus	Endpunkt	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (µg/L)	Chem. Analytik	Exposition	Reinheit (%)	Notiz <sup>7</sup>	Validität	Literaturquelle
													Dorgerloh (1998), in ICS Datenbank, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014 als PMRA 2003
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	Wachstumsrate	96	h	ErC50	=	9.49	B	S	99.4	F Sal.: kA	3 NA	Bowers (1995), Neu berechnet von Dorgerloh (1998), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 244 ff
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	Biomasse	96	h	EbC50	=	7.05	B	S	99.4	F Sal.: kA	3 NA	Bowers (1995), Neu berechnet von Dorgerloh (1998), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 244 ff
Molluske	<i>Crassostrea virginica</i>	Schalenwachstum	96	h	EC50	=	<u>12600</u>	C	T	98.2	F Sal.: SW	1	Wheat & Evans (1993) ), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 159 ff
Molluske	<i>Crassostrea virginica</i>	Mortalität	96	h	LC50	>	13900	C	T	98.2	F Sal.: SW	1	Wheat & Evans (1993) ), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 159 ff
Krebstiere	<i>Americamysis bahia</i> ( <i>Mysidopsis bahia</i> )	Mortalität	72	h	LC50	=	2830	kA	-	-	F, H	1	ICS 2003, zitiert in zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Krebstiere	<i>Americamysis bahia</i>	Mortalität	72	h	LC50	=	3370	kA	T	-	F, H	1	PMRA 2003, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Krebstiere	<i>Americamysis bahia</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	2720	kA	T	-	F	3 (Kat. S)	OPP-Datenbank (Studiendatum 1993), auch zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014 als Univ. Hertfordshire 2013.
Krebstiere	<i>Americamysis bahia</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	1780	kA	-	-	H	4	Univ. Hertfordshire 2013, zitiert in zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Krebstiere	<i>Americamysis bahia</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	<u>5600</u>	C	T	97.5	F Sal.: 20‰	1	Claude et al. (2013) ), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 159 ff
Fische	<i>Cyprinodon variegatus</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	<u>3310</u>	C	R	96.8	F, Q	1	Anonym (1994), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 73 ff.
Fische	<i>Cyprinodon variegatus</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	3376.1	kA	-	-	H	4	HSDB 2007, zitiert in zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
subchronische und chronische Effektdaten- limnisch													
Cyanobakterien	<i>Anabaena flos-aquae</i>	Wachstumsrate	96	d	NOErC	=	<u>3770</u>	C	S	97.5	F	1	Hughes & Alexander (1993), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 236 ff.
Cyanobakterien	<i>Anabaena flos-aquae</i>	Wachstum (Yield)	96	d	NOEyC	<	1930	C	S	97.5	F, G	1	Hughes & Alexander (1993), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 236 ff.
Cyanobakterien	<i>Synechococcus leopoliensis</i>	Wachstumsrate	72	d	ErC10	=	3750	B	S	97.5	F	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 232 ff.

<sup>14</sup> Die Werte aus der Studie von Bowers (1995, Neu berechnet von Dorgerloh (1998)) wurden im DRAR (2016) invalidiert. Allerdings wurde dies für die 96h-Werte diskutiert, und nicht für die 120 h-Werte. Aufgrund der Beschreibung kann aber vermutet werden, dass dies auch auf die 120-Werte zutrifft. Unter anderem zeigten sich die stärksten Effekte bei den zweit-niedrigsten getesteten Konzentrationen. Daher wird dieser Wert hier auch als nicht relevant (Klimisch 3) geführt. In der ICS Datenbank werden die Effektdaten für *Skeletonema costatum* auch allesamt als unvalidiert geführt. In der OPP-Datenbank sind die Effektdaten für *S. costatum* als „core“ klassifiziert – sie werden hier nicht invalidiert, da sie nicht überprüft werden konnten. Sie sollen aber nicht als kritische Studie zur EQS-Herleitung verwendet werden.

Effektdatentabelle													
Sammelbezeichnung	Organismus	Endpoint	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (µg/L)	Chem. Analytik	Exposition	Reinheit (%)	Notiz <sup>7</sup>	Validität	Literaturquelle
Cyanobakterien	<i>Synechococcus leopoliensis</i>	Wachstumsrate	72	d	NOErC <sub>(15)</sub>	=	307	B	S	97.5	F	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 232 ff.
Cyanobakterien	<i>Synechococcus leopoliensis</i>	Wachstum (Yield)	72	d	EyC10	=	293	B	S	97.5	F	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 232 ff.
Cyanobakterien	<i>Synechococcus leopoliensis</i>	Wachstum (Yield)	72	d	NOEyC	=	96	B	S	97.5	F	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 232 ff.
Algen	<i>Chlamydomonas terricola</i>	Wachstumsrate	9	d	ErC10	=	229	C	S	97.5	F, Q	1	Sobczyk (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 227 ff.
Algen	<i>Chlamydomonas terricola</i>	Wachstumsrate	9	d	NOErC	=	96	C	S	97.5	F, Q	1	Sobczyk (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 227 ff.
Algen	<i>Chlamydomonas terricola</i>	Wachstum (Yield)	9	d	EyC10	=	104	C	S	97.5	F, Q	1	Sobczyk (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 227 ff.
Algen	<i>Chlamydomonas terricola</i>	Wachstum (Yield)	9	d	NOEyC	=	96	C	S	97.5	F, Q	1	Sobczyk (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 227 ff.
Algen	<i>Chlorella vulgaris</i>	Wachstumsrate	72	h	ErC10	=	3000	B	S	97.5	F, Q	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 223 ff.
Algen	<i>Chlorella vulgaris</i>	Wachstumsrate	72	h	NOErC	=	980 <sub>(16)</sub>	B	S	97.5	F, Q	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 223 ff.
Algen	<i>Chlorella vulgaris</i>	Wachstum (Yield)	72	h	EyC10	=	1373	B	S	97.5	F, Q	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 223 ff.
Algen	<i>Chlorella vulgaris</i>	Wachstum (Yield)	72	h	NOEyC	=	980	B	S	97.5	F, Q	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 223 ff.
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstumsrate	72	h	ErC10	=	18.71	C	S	97.5	F, Q	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 219 ff.
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstumsrate	72	h	NOErC	=	8.4	C	S	97.5	F, Q	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 219 ff.
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstum (Yield)	72	h	EyC10	=	5.969	C	S	97.5	F, Q	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 219 ff.
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstum (Yield)	72	h	NOEyC	=	8.4	C	S	97.5	F, Q	1	Bruns (2011), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 219 ff.
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Selenastrum capricornutum</i> )	Wachstumsrate	96	h	NOEC	<	0.64 <sub>(17)</sub>	D	S	99.4	F, N, P (DMF 0.05%)	2	Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) und erneut im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 193 ff.
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Selenastrum capricornutum</i> )	Wachstum (Yield)	96	h	EC10	=	0.862	D	S	99.4	F, N, P (DMF 0.05%)	2	Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) und erneut im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 193 ff.

<sup>15</sup> Der relativ grosse Unterschied zwischen dem NOEC und dem EC10 in dieser Studie ist auf eine flache Dosis-Wirkungsbeziehung und geringe Variabilität der Daten zurückzuführen. Der Abstand zwischen den Testkonzentrationen ist nicht zu gross gewählt. Bei dem LOEC für die Wachstumsrate beträgt die Inhibition 5.9 %, beim LOEC für den Yield beträgt die Inhibition 5.7%. Da die maximale Inhibition der Wachstumsrate und des Yields bei 11.5% und 31.5%, respektive, liegen, ist die Dosis-Wirkungskurve im oberen Bereich extrapoliert und nicht durch experimentelle Daten unterstützt. Daher wird hier der NOEC bevorzugt.

<sup>16</sup> Der NOErC aus dieser Studie ist verlässlicher als der ErC10 und wird daher bevorzugt. Die Dosis-Wirkungsbeziehung deutet auf Hormesis-Effekte hin, die aber im Falle des Yields noch deutlicher sind. Zudem ist die Inhibition der Wachstumsrate erst bei den zwei höchsten Konzentrationen signifikant, und liegt lediglich bei 10.8 und 46% respektive. Die Passgenauigkeit der Daten zu Regressionskurve kann daher als unsicher angesehen werden. Der NOEC wird hier daher bevorzugt.

<sup>17</sup> Der 96h-NOErC von <0.64 µg/L konnte nicht nachvollzogen werden. Nach Table B. 9.2.6.2-1 (DRAR Vol. 3, B.9, S. 197) ist bei 0.64 µg/L keine Inhibition der Wachstumsrate auszumachen. Es wird daher der nachvollziehbarere ErC10 (siehe auch Dosis-Wirkungskurven in Annex 1) für die EQS-Herleitung bevorzugt.

Effektdatentabelle													
Sammelbezeichnung	Organismus	Endpoint	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (µg/L)	Chem. Analytik	Exposition	Reinheit (%)	Notiz <sup>7</sup>	Validität	Literaturquelle
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Selenastrum capricornutum</i> )	Wachstum (Yield)	96	h	NOEC	=	0.64	D	S	99.4	F, N, P (DMF 0.05%)	2	Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) und erneut im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 193 ff.
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstum (Yield)	72	h	EyC10	=	2.053	C	S	97.5	F, Q	2	Bruns (2010), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 200 ff.
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstum (Yield)	72	h	NOEC	=	0.138	C	S	97.5	F, Q	2	Bruns (2010), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 200 ff.
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstumsrate	72	h	ErC10	=	2.571	C	S	97.5	F, Q	2	Bruns (2010), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 200 ff.
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstumsrate	72	h	NOErC	=	0.138 <sup>(18)</sup>	C	S	97.5	F, Q	2	Bruns (2010), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 200 ff.
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Selenastrum capricornutum</i> )	Wachstumsrate	96	h	ErC10	=	1.679	D	S	99.4	F, N, P (DMF 0.05%)	2	Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) und erneut im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 193 ff.
		Geom. Mittelwert <sup>(19)</sup>	72/96	h	NOEC	=	0.481						
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstumsrate	96	h	NOErC	<	2.25	B	S	99.5	F, Q	1	Anderson (1997), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 205 ff.
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Biomasse	72	h	EbC10	=	0.8	kA	-	-	F	1	ICS 2013, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstumsrate	72	h	ErC10	=	1.0	kA	-	-	F, H	1	ICS 2013, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	Wachstum	kA	-	NOEC	=	2.08	kA	-	-	F	1	PMRA 2003, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> )	kA	5	d	NOEC	=	2.5	kA	-	-	F, H, R	1	ICS 2013, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Navicula pelliculosa</i>	Wachstumsrate	5	d	ErC10	=	1860	kA	-	-	F, R	1	ICS 2013, zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Algen	<i>Navicula pelliculosa</i>	Wachstumsrate	96	h	NOErC	=	1120	B	S	98.8	F	3 (supporting)	Bowers und Dobbs (1995), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 241 ff.
Algen	<i>Navicula pelliculosa</i>	Yield	96	h	NOEC	=	1120	B	S	98.8	F	3 (supporting)	Bowers und Dobbs (1995), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 241 ff.
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Anzahl Fronds	14	d	NOEC	=	0.44	C	S	kA	F, Z	1	Hughes & Alexander (1994), neu ausgewertet von Dorgerloh 1998, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 281 ff.
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Wachstumsrate (Frondzahl)	7	d	NOEC	=	0.433	C	S	97.5	F, P, Z (DMF 0.02%)	2	Hughes & Alexander (1994), neu ausgewertet von Dorgerloh 1998, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 281 ff.
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Wachstumsrate (Frondzahl)	7	d	NOErC	=	0.658	B	S	97.5	F	1	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016

<sup>18</sup> Da weder der NOEC, noch der EC10 eindeutig verlässlicher ist, und im TGD for EQS eine entsprechende generelle Empfehlung fehlt, wird vorsorglich der niedrigere Wert zur EQS-Herleitung verwendet. Details dazu sind im Annex II aufgeführt.

<sup>19</sup> Bezüglich der Bildung eines geom. Mittelwertes zwischen NOEC und EC10-Werten gibt das TGD for EQS keine konkreten Anweisungen. Das TGD gibt auch keine Präferenz für einen der beiden Parameter, solange beide statistisch gesehen vergleichbar sind. Es spricht daher nichts dagegen einen geom. Mittelwert aus EC10 und NOEC zu bilden.

Effektdatentabelle													
Sammelbezeichnung	Organismus	Endpoint	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (µg/L)	Chem. Analytik	Exposition	Reinheit (%)	Notiz <sup>7</sup>	Validität	Literaturquelle
					(20)								Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 286 ff
		Geom. Mittelwert	7	d	NOEC	=	0.534						
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Wachstumsrate (Frondzahl)	7	d	ErC10	=	3.91	B	S	97.5	F	1	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 286 ff
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Yield (Frondzahl)	7	d	NOEyC	=	0.658	B	S	97.5	F	1	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 286 ff
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Yield (Frondzahl)	7	d	EyC10	=	1.792	B	S	97.5	F	1	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 286 ff
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Wachstumsrate (Frondfäche)	7	d	NOErC	=	0.658	B	S	97.5	F	1	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 286 ff
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Wachstumsrate (Frondfäche)	7	d	ErC10	=	3.91	B	S	97.5	F	1	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 286 ff
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Yield (Frondfäche)	7	d	NOEyC	=	0.658	B	S	97.5	F	1	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 286 ff
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Yield (Frondfäche)	7	d	EyC10	=	1.507	B	S	97.5	F	1	Bruns (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 286 ff
Wasserpflanze	<i>Myriophyllum spicatum</i>	Wachstumsrate (Sprosslänge)	14	d	NOErC	=	18.8	C	S	97.5	F, WS	3	Banman et al. 2011, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 305 ff
Wasserpflanze	<i>Myriophyllum spicatum</i>	Wachstumsrate (Nassgewicht)	14	d	NOErC	=	59.6	C	S	97.5	F, WS	3	Banman et al. 2011, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 305 ff
Wasserpflanze	<i>Myriophyllum spicatum</i>	Yield (Sprosslänge)	14	d	NOEyC	=	18.8	C	S	97.5	F, WS	3	Banman et al. 2011, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 305 ff
Wasserpflanze	<i>Myriophyllum spicatum</i>	Yield (Nassgewicht)	14	d	NOEyC	=	18.8	C	S	97.5	F, WS	3	Banman et al. 2011, zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 305 ff
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Reproduktion	21	d	NOEC	=	3260	C	R	96.8	F	1	Bowers & Gagliano (1994), zitiert in EC 2003 und im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 174 ff
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Wachstum und Überleben der Adulten	21	d	NOEC	>	12800	C	R	96.8	F	1	Bowers & Gagliano (1994), zitiert in EC 2003 und im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 174 ff
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Reproduktion	kA	-	NOEC	=	6330	kA	-	-	F	4 <sup>(21)</sup>	PMRA 2003, auch zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Insekten	<i>Chironomus riparius</i>	Emergenz	28	d	NOEC	=	5000	B4	S	97.5	WS	1 <sup>(22)</sup>	Bruns (2010), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 185 ff.
Fische	<i>Pimephales promelas</i>	Studie über den gesamten Lebenszyklus	140	d	NOAEC <sup>(23)</sup>	=	74.91	kA	-	-	H	4	HSDB 2007, zitiert in zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Fische	<i>Pimephales promelas</i>	Wachstum (Gewicht der adulten Männchen in der F0-Generation)	279	d	NOEC	=	138	C	T	95.6	F, V	1	Anonym (2002), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 114 ff.

<sup>20</sup> Der NOEC wird gegenüber dem EC10 bevorzugt, da beim LOEC (Wachstumsrate Frondfäche) bereits 9.8% Effekte auftraten, maximal aber nur 80.2 % Inhibition erreicht wurden, und die Regression daher einige Unsicherheit im oberen Konzentrationsbereich aufweist.

<sup>21</sup> Klimisch 4, da die Testdauer unbekannt ist.

<sup>22</sup> Wie zu erwarten, nahm die Flufenacet-Konzentration in der Wasserphase über die Expositionszeit ab. Die Verteilung von Flufenacet zwischen Wasserphase und Sediment entsprach allerdings der Erwartung. *Chironomus riparius* Larven leben in der Interphase zwischen Sediment und Wasserphase. Flufenacet ist ein Herbizid und Insekten gehören nicht zu der Gruppe der empfindlichsten Organismen.<sup>23</sup> Nach dem TGD for EQS (EC 2011, Tab. 5) wird ein NOAEC nicht zur EQS-Herleitung verwendet.

<sup>23</sup> Nach dem TGD for EQS (EC 2011, Tab. 5) wird ein NOAEC nicht zur EQS-Herleitung verwendet.



Effektdatentabelle													
Sammelbezeichnung	Organismus	Endpunkt	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (µg/L)	Chem. Analytik	Exposition	Reinheit (%)	Notiz <sup>7</sup>	Validität	Literaturquelle
Fische	<i>Onchorhynchus mykiss</i>	Längenwachstum und "swim up" im early life cycle toxicity test	66	d	NOEC	=	179	kA	-	-	F, U	1	PMRA 2003, auch zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Fische	<i>Onchorhynchus mykiss</i>	Prozent "swim up" und dry-weight	97	d	NOEC	=	334	C	T	98.8	F, Q	1	Anonym (1995), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 101 ff.
Fische	<i>Onchorhynchus mykiss</i>	Längenwachstum und Schlupfrate	97	d	NOEC	>	735	C	T	98.8	F, Q	1	Anonym (1995), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 101 ff.
Fische	<i>Onchorhynchus mykiss</i>	kA	97	d	NOEC	=	200	kA	-	-	F, H	1	EC 2003
subchronische und chronische Effektdaten- marin													
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	Wachstumsrate	96	h	NOErC	=	3.57	B	S	99.4	F	3 NA	Bowers (1995), Neu berechnet von Dorgerloh (1998), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 244 ff
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	Biomasse	96	h	NOEbC	=	3.57	B	S	99.4	F	3 NA	Bowers (1995), Neu berechnet von Dorgerloh (1998), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 244 ff
Algen	<i>Skeletonema costatum</i>	Wachstumsrate	5	d	NOEC	=	3.57	kA	-	-	F, N	3	PMRA 2003, auch zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Krebstiere	<i>Americamysis bahia</i> ( <i>Mysidopsis bahia</i> )	Mortalität der Nachkommen	28	d	NOEC	=	101	C	T	-	F, H	1	Davis (1995), ICS Datenbank, Wert zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Krebstiere	<i>Americamysis bahia</i> ( <i>Mysidopsis bahia</i> )	Gewicht	28	d	NOEC	=	22.2	C	T	-	F, H	1	Davis (1995), ICS Datenbank, Wert zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Krebstiere	<i>Americamysis bahia</i> ( <i>Mysidopsis bahia</i> )	Länge	28	d	NOEC	=	11.8	C	T	-	F, H	1	Davis (1995), ICS Datenbank, Wert zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Krebstiere	<i>Americamysis bahia</i> ( <i>Mysidopsis bahia</i> )	Reproduktion	28	d	NOEC	=	11.8	C	T	-	F, H	1	Davis (1995), ICS Datenbank, Wert zitiert in Wenzel & Shemotyuk 2014
Krebstiere	<i>Americamysis bahia</i> ( <i>Mysidopsis bahia</i> )	Reproduktion	31	d	NOEC	=	221	C	T	97.5	F	1	Claude, M.B. et al. (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 179 ff.
Krebstiere	<i>Americamysis bahia</i> ( <i>Mysidopsis bahia</i> )	Wachstum und Überleben	31	d	NOEC	≥	469	C	T	97.5	F	1	Claude, M.B. et al. (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 179 ff.
Fische	<i>Cyprinodon variegatus</i>	Überleben, Zeit bis zum Schlupf und % Schlupf	35	d	NOEC	≥	667	C	T	98.8	F, Q Sal.: 18 - 22 ‰	1	Anonym (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 109 ff.
Fische	<i>Cyprinodon variegatus</i>	Wachstum (Länge und Trockengewicht)	35	d	NOEC	=	49	C	T	98.8	F, Q Sal.: 18 - 22 ‰	1	Anonym (2013), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 109 ff.
Mikrokosmen-Studien													
Wasserpflanze	<i>Lemna gibba</i>	Wachstumsrate und Frond-Gewicht	84	-	NOEC	=	12	C	S	61.5	Form. WG60	1, C3	Foekema & Jak (1999), zitiert in im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 338 ff
Wasserpflanze	<i>Elodea</i>	Trockengewicht	84	-	NOEC	=	6	C	S	61.5	Form. WG60	1, C3	Foekema & Jak (1999), zitiert in im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 338 ff
Wasserpflanze	Periphyton, Plankton, Makrofauna	Wachstum/Abundanz	84	-	NOEC	≥	24	C	S	61.5	Form. WG60	3, C3	Foekema & Jak (1999), zitiert in im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 338 ff

## Notizen

### **Angaben zur chemischen Analytik**

- A: Basierend auf der nominalen Konzentration (ohne begleitende chemische Analytik).  
B: Basierend auf der nominalen Konzentration, Wiederfindung wurde gemessen und lag zwischen 80-120 %.  
B2: Basierend auf der nominalen Spitzen-Konzentration bei wiederholter Applikation (analytisch verifiziert)  
B3: Die zwei niedrigsten getesteten Konzentrationen von 6.4 und 12.8 mg/L wurden analytisch verifiziert. Bei höheren Konzentrationen lag die Wiederfindung allerdings weit unterhalb von 80%, was auf das Erreichen der Löslichkeitsgrenze hinweist. Die angegebenen Effektkonzentrationen beziehen sich daher auf die abgeschätzte Löslichkeitsgrenze.  
B4: Basierend auf der nominalen Konzentration in der Wasserphase 1 Stunde nach Test-Beginn (gemessen wurde 83 % der nominalen Konzentration). Abnahme in der Wasserphase über die Zeit auf 14% nach 28 Tagen.  
C: Basierend auf der (mittleren) gemessenen Konzentration.  
D: Basierend auf der initial gemessenen Konzentration.  
E: Keine Angabe ob gemessene oder nominale Konzentration angegeben wurde

### **Angaben zum Expositionsregime**

- S: statische Exposition  
R: semi-statische Exposition  
T: Durchfluss (*flow-through*) Exposition

### **Angaben zum Reinheit/Formulierung der Testsubstanz**

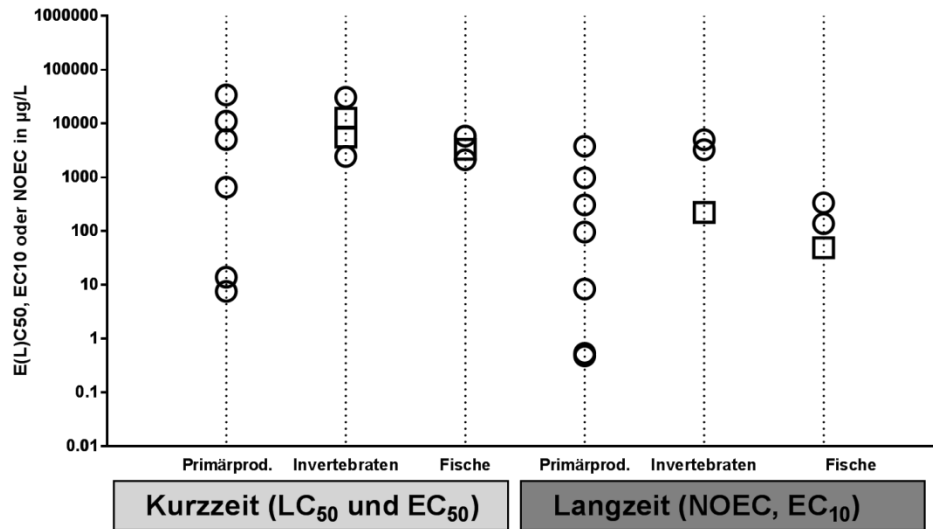
- RG: *Reagent grade* – nach heutigen Standards entspricht dies einer Reinheit von  $\geq 95\%$  (Sigma-Aldrich.com)

## **Notizen**

- F: Validität der Studie bzw. des Effektdatums wurde nicht überprüft, sondern „*face value*“ übernommen. Siehe Kapitel 3 – Allg. Vorgehen  
G: Es wurden lediglich die durch den RMS akzeptierten Endpunkte aufgeführt (e.g. nur der EC50 für 96 h und nicht auch jene für 72 und 120 h).  
H: Wert konnte nicht überprüft werden. Beim Vorliegen eines vergleichbaren Wertes aus dem DRAR (2016) soll dieser bevorzugt werden.  
I: Keine gleichbleibende Expositionskonzentrationen. Pflanzen wurden kurzen Spitzenkonzentrationen ausgesetzt, und Effekte über einen Erholungszeitraum bewertet. Ergebnis bezieht sich auf eine Spitzenkonzentration. Studie nicht relevant (C3).  
J: In dem Auszug aus der OPP-Datenbank ist ein EC50 von 5.1  $\mu\text{g/L}$  eingetragen, auch wenn in der ECOTOX Knowledgebase der US-EPA ein Wert von 5.0 eingetragen ist, und beide Datenbanken eigentlich identisch sein sollten. Es wird hier nur ein Wert (5.0  $\mu\text{g/L}$ ) aufgeführt. Bei diesem handelt es sich vermutlich um einen gerundeten Wert aus „Bowers 1995“, welcher in der ICS Datenbank als 5.59  $\mu\text{g/L}$  (Neuberechnung „Dorgerloh 1998“) eingetragen ist, und welcher im DRAR 2016 invalidiert wurde. Daher wird der Wert hier nicht zur EQS-Herleitung verwendet (siehe auch Notiz O).  
K: Diese Effektkonzentration wurde aus der US-EPA-Datenbank und aus Wenzel & Shemotyuk 2014 übernommen. Es besteht die Möglichkeit, dass ein Übertragungsfehler vorliegt, und es sich eigentlich um denselben Wert handelt. Aufgrund des Studiendatums handelt es sich aber vermutlich um den Werte aus der Studie von Bowers (1995), welcher in der ICS-Datenbank als 5d-ErC50 von 4.47  $\mu\text{g/L}$  fast identisch vorliegt. Werte allesamt in grau dargestellt (siehe Notiz N).  
M: Für diesen Test wurde in Wenzel & Shemotyuk 2014 eine Versuchsdauer von 4 Tagen angegeben, was für einen chronischen Test mit dem Endpunkt Reproduktion zu kurz wäre. Das Effektdatum war unter den chronischen Effektdaten aufgeführt. Es kann daher ein Übertragungsfehler vermutet werden, wobei die tatsächliche Versuchsdauer vermutlich bei 24 Tagen lag. Der Wert wird daher nicht invalidiert.  
N: Die Werte welche aus der Auswertung von Bowers (1995) stammen wurden von Dorgerloh (1998) neu ausgewertet. Im DRAR wurden die Daten dann erneut ausgewertet. Nur die Effektkonzentrationen aus dieser Auswertung werden hier aufgelistet, da diese die alten Werte ersetzen (siehe DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 193- 199). Wenn in anderen Dossiers Werte aufgeführt wurden, die jenen aus den Studien von Bowers (1995) oder Dorgerloh (1998) entsprechen, werden diese in grau dargestellt und nicht zur EQS-Herleitung verwendet.  
O: Aufgrund des Datums kann vermutet werde, dass diese Effektkonzentrationen aus einer ersten Auswertung der Studiendaten stammt und das die in der Tabelle enthaltenen Effektdaten für denselben Testorganismus (Endpunkt, Expositionszeit, etc. ) Neuauswertungen entstammen. Aufgrund fehlender Angaben ist aber eine eindeutige Zuordnung nicht möglich. Da der Wert von einer Zulassungsbehörde zu einer bestimmten Zeit einmal akzeptiert wurde soll er hier zunächst nicht invalidiert werden (solange, bis Duplikate bzw. frühere Auswertungen entfernt werden können), der Wert soll aber vorsorglich nicht direkt zur EQS-Herleitung verwendet werden.  
P: Die in dieser Studie verwendete Menge an Lösungsvermittler überschreitet die nach dem TGD for EQS (EC, 2011) vorgesehenen Obergrenze von 0.01%, bzw. 100  $\mu\text{L}$  um den Faktor  $\leq 5$ . In einigen Kurzzeit-Standardtests (e.g. OPPTS 850.1075 Fish Acute Toxicity Test, Freshwater and Marine) US EPA 1996) ist eine Lösungsmittelkonzentration von bis zu 0.05% erlaubt. Diese Lösungsmittelkonzentration wurde im DRAR auch nicht zum Anlass genommen Studien zu invalidieren. Die Studien werden daher hier als „verlässlich mit Einschränkung“ klassifiziert.  
Q: Die im Test verwendete Lösungsmittelkonzentration ist unbekannt. Sofern keine negativen Effekte auf Kontrollen auftraten und Werte plausibel erscheinen, wurden diese Studien nicht invalidiert, sondern als Klimisch 2 klassifiziert.  
R: Wie in der OECD-Testrichtlinie 201 (OECD 2011) empfohlen, sollte das Algenwachstum während des gesamten Testzeitraums exponentiell sein. Bei den empfohlenen Testspezies wie *R. subcapitata* ist dies in der Regel bei 72 bis max. 96 h der Fall. Für langsamer wachsende Algen kann die Testdauer allerdings verlängert werden, damit ein ausreichendes Kontrollwachstum erreicht wird. Notiz „F“ wurde für Algentests mit einer Dauer  $> 96$  h vergeben, bei denen keine Angaben zum Kontrollwachstum vorlagen, und für die auch nicht von langsam wachsenden Algenspezies ausgegangen werden kann. Diese Daten sollen nicht zur EQS-Herleitung verwendet werden (in grau dargestellt); die ursprüngliche Validitätsangabe wurde aber zur Nachvollziehbarkeit beibehalten.

- U: Angaben wurden aus der aufgeführten Sekundärliteratur übernommen. Der angegebene NOEC stammt mit hoher Wahrscheinlichkeit aus der Studie, welche im DRAR Volume 3 – Annex B.9 (AS) ab S. 101 beschrieben wird (Anonym 1995). Im DRAR wird der Endpunkt Längenwachstum bei Tag 66 (33 d *post hatch*) als transient und daher biologisch nicht relevant beschrieben, da am Ende der Studie bei Tag 97 kein Längenunterschied mehr zwischen der Behandelten und der Kontroll-Gruppe bestand. Der NOEC für das Ausschwimmen der Larven („swim up“) beträgt 334 µg/L.
- V: weitere durch den RMS akzeptierte Endpunkte & NOECs sind dem RMS-Kommentar zu entnehmen (DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 128 f.)
- WS: Wasser-Sediment Testsystem. Testsubstanz in die Wasserphase appliziert.
- X: Dieses Effektdatum wurde für den selben Organismus in DRAR (2016) aufgeführt, allerdings stimmen nicht alle Angaben überein, e.g. der Endpunkt. Daher wird der Wert in grau dargestellt und stattdessen soll der Wert aus der im DRAR aufgeführten Studie zur EQS-Herleitung verwendet werden.
- Y: In der ICS-Datenbank ist für diese Studie ein anderer Wert eingetragen. Dies liegt aller Voraussicht nach daran, dass Werte im DRAR (2016) neu ausgewertet wurden, wie es auch an verschiedene Stellen erwähnt wurde (e.g. DRAR 2016, Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 241). Daher wird der Wert in grau dargestellt und stattdessen soll der Wert aus der im DRAR aufgeführten Studie zur EQS-Herleitung verwendet werden.
- Z: In der ICS Datenbank sind mehrere Effektdaten gelistet, die sich alle auf die Rohdaten aus derselben Lemna-Studie beziehen (im Original von Malcolm Pirnie 1993). In der „OPP-Datenbank“ ist ein 14d-EC50 von 2.45 µg/L zitiert (Studiendatum 1993, auch zitiert in HSDB 2007). Eine weitere Auswertung dieser Daten geschah scheinbar 1994 mit einem nahezu identischen 14d-EC50 von 2.43 µg/L (Ref.: Hughes & Alexander (1994)). Nach neuem Stand sind 7-Tage-Werte relevanter und so wurden 7-Tage Werte nach OECD-Draft 98 berechnet (Ref.: Dogerloh, 1998, zitiert im DRAR Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 281 ff). In einer ersten Neuauswertung wurden Effektkonzentrationen nun auf nominale Konzentrationen bezogen, da die Initialkonzentrationen bei >80% der nominalen Konzentrationen lagen. Bei den niedrigeren Konzentration war die Wiederfindung allerdings < 80%. Der RMS forderte daraufhin eine Neuauswertung basierend auf der mittleren gemessene Konzentration – nur diese Werte aus dem DRAR werden hier aufgeführt. In Wenzel & Shemotyuk 2014 wurde ein 7-d NOEC von 0.6 µg/L aus der ICS Datenbank zitiert. In dem uns zur Verfügung gestellten Auszug aus der ICS-Datenbank (Stand: 12.01.2018) ist jedoch ein 7d-NOEC von 0.626 µg/L angegeben (als 0,000626 mg/L). Vermutlich wurde dieser Wert in Wenzel & Shemotyuk 2014 gerundet. Die Werte aus der ICS Datenbank beziehen sich aller Voraussicht nach auf die erste Neuauswertung (nominale Konzentrationen). Die Werte werden daher nicht hier nicht aufgeführt. Alle 14-Tage Werte werden gegenüber den 7-Tage Werten als weniger relevant eingestuft und sind daher in grau dargestellt.

## 5. Graphische Darstellung der Toxizitätsdaten



**Abb.1:** Grafische Darstellung der relevanten Kurzzeit- und Langzeit-Effektdaten für Primärproduzenten, Invertebraten und Fische aus Tabelle 4 für Flufenacet. Dargestellt ist der niedrigste exakte und valide Wert pro limnische Spezies (Kreis) und marine Spezies (Rechteck). Die Standardabweichung der logarithmierten E(L)C<sub>50</sub>-Werte wurde nicht berechnet, da der Wirkmechanismus von Flufenacet bekannt ist, und Vertreter einer der sensitivsten Gruppen im Datensatz vorhanden sind.

Aus der Abbildung 1 ist deutlich zu entnehmen, dass die empfindlichsten Organismen aus Kurzzeit- und Langzeittest aus der Gruppe der Primärproduzenten stammen. Der Abstand der sensitivsten Primärproduzenten zu den sensitivsten Invertebraten und Fischen ist im akuten Datensatz deutlich grösser im Vergleich zum chronischen Datensatz. Des Weiteren unterscheiden sich die Sensitivitäten innerhalb Primärproduzenten stark, und Vertreter anderer trophischer Ebenen sind sogar empfindlicher als einige der Vertreter der Primärproduzenten, v.a. Cyanobakterien und Diatomeen. Ähnlich verhält es sich mit anderen Herbiziden aus der Klasse der Zellteilungshemmer (VLCFA-Inhibitoren), wie Metazachlor und Metolachlor. Dies weist auf einen spezifischen Wirkmechanismus von Flufenacet innerhalb der Primärproduzenten hin.

### 5.1 Vergleich der Empfindlichkeit mariner und limnischer Organismen

Für marine Organismen liegen im akuten Datensatz exakte und verlässliche Werte für jeweils eine Spezies von Mollusken, Invertebraten und Fischen. Im Langzeit-Effekt Datensatz liegen nur für eine marine Invertebraten- und eine marine Fisch-Spezies Daten vor. Im limnischen Datensatz liegen insgesamt weitaus mehr Effekt Daten vor. Aufgrund der geringen Anzahl an Effekt Daten für marine Organismen ist eine statistische Analyse der Unterschiede in der Empfindlichkeit von marinen und limnischen Organismen daher nicht sinnvoll. Marine Organismen erscheinen jedenfalls auch nicht generell sensitiver als limnische Vertreter. Die niedrigsten Effektwerte im akuten und chronischen Datensatz stammen ausserdem beide von limnischen Organismen. Für die EQS Herleitung wird daher nicht zwischen marinen und limnischen Organismen unterschieden.

## 6. Herleitung der EQS

Um chronische und akute Qualitätsziele herzuleiten, kann die Sicherheitsfaktormethode (AF-Methode) auf Basis von Kurzzeit- und Langzeiteffektdateen angewendet werden. Dabei wird mit dem tiefsten chronischen Datenpunkt ein AA-EQS (Annual-Average-Environmental-Quality-Standard) und mit dem tiefsten akuten Datenpunkt ein MAC-EQS (Maximum-Acceptable-Concentration-Environmental-Quality-Standard) abgeleitet. Wenn der Datensatz umfassend genug ist, können diese EQS zusätzlich mittels einer Speziessensitivitätsverteilung (SSD) bestimmt werden. Valide Mikro-/Mesokosmosstudien dienen einerseits zur Verfeinerung des AF, der durch eine SSD hergeleitet wurde. Andererseits können sie auch direkt zur Bestimmung eines EQS verwendet werden.

## 7. Chronische Toxizität

### 7.1. AA-EQS Herleitung für Flufenacet mit AF-Methode

Tab. 5: Übersicht zu den kritischen Toxizitätswerten von Flufenacet auf Wasserorganismen aus längerfristigen Untersuchungen.

Gruppe	Spezies	Wert	Konz. in µg/L	Literatur
<b>Basisdatensatz</b>				
Primärproduzenten	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>S. capricornutum</i> )	NOEC /EC10	0.481	<b>Geom. Mittelwert</b> <sup>(24)</sup>
Krebstiere	<i>Americamysis bahia</i> ( <i>Mysidopsis bahia</i> )	NOEC	221	<b>Claude et al. (2013)</b> , zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 179 ff.
Fische	<i>Cyprinodon variegatus</i>	NOEC	49	<b>Anonym (2013)</b> , zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 73 ff.
<b>Weitere</b>				
Insekten	<i>Chironomus riparius</i>	NOEC	5000	<b>Bruns (2010)</b> , zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 185 ff.

Es liegen NOEC-Werte für die Organismengruppen der Primärproduzenten (Cyanobakterien, Algen, Wasserpflanzen), Insekten, Krebstiere und Fische vor.

Das niedrigste chronische Effektdatum ist ein geometrischer Mittelwert von 0.481 µg/L aus einem ErC10 und einem NOErC aus zwei Studien mit der Grünalge *R. subcapitata*. Diese sind im DRAR 2018 nachvollziehbar aufgeführten, auch wenn die Studien einige Schwächen aufweisen und lediglich als „verlässlich mit Einschränkung“ bewertet wurden. Nicht nachvollziehbare Studien (e.g. aus der ICS-Datenbank) wurden nicht berücksichtigt, liegen aber in einem ähnlichen Bereich. Dies lässt vermuten, dass es sich um gerundete Werte, oder Werte vor einer Neuauswertung handelt. *Lemna gibba*, erscheint mit einem NOEC (geom. Mittelwert) von 0.534 µg/L ähnlich sensitiv wie *R. subcapitata*.

Da ein vollständiger Datensatz mit einem Vertreter der vermutlich sensitivsten taxonomischen Gruppe vorhanden ist, wird ein Sicherheitsfaktor von 10 vorgeschlagen, wodurch sich folgendes Langzeit-Qualitätskriterium (finaler Wert gerundet) ergibt:

$$\text{AA-EQS}_{\text{AF}} = 0.481 \mu\text{g/L} / 10 \approx \mathbf{0.048 \mu\text{g/L}}$$

<sup>24</sup> Geom. Mittelwert aus: **NOErC=0.138 µg/L** (Bruns (2010), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 200 ff.) und **ErC10 = 1.679 µg/L** (Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) und erneut im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 193 ff.

## **7.2. AA-EQS mit SSD-Methode**

Aufgrund des spezifischen Wirkmechanismus ist eine SSD für alle Organismengruppen nicht relevant. Es liegen exakte, verlässliche und relevante Effektdaten für acht verschiedene Vertreter der Primärproduzenten vor. Da nach dem TGD for EQS mindestens 10-15 Datenpunkte vorliegen sollten kann keine spezifische SSD mit Vertretern der Primärproduzenten erstellt werden.

## **7.3. AA-EQS aus Mikro-/Mesokosmosstudien**

Im DRAR ist eine Indoor-Mikrokosmos Studie aufgeführt (Foekema & Jak (1999), zitiert in im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 338 ff). In dieser Studie wurde allerdings eine Formulierung (WG60) getestet. Wie erwähnt werden im vorliegenden Dossier Effektdaten aus Test mit Formulierungen nicht zur EQS-Herleitung verwendet, können aber als zusätzliche Information herangezogen werden. Die Studie weist laut RMS eine Vielzahl an Schwächen auf, darunter eine hohe Variabilität zwischen den Replikaten, und fehlende Aussagekraft der Ergebnisse für Grünalgen. Daher wird für diese Studie ein  $\text{NOEC}_{\text{macrophytes}}$  von 6  $\mu\text{g/L}$  (nominal) vorgeschlagen, basierend auf den Effekten auf das Trockengewicht von *Elodea sp.* In der Studie nahm die Expositionskonzentration mit  $\text{DT}_{50} = 18,8$  Tage ab. Ein NOEC basierend auf gemessene Konzentrationen läge daher vermutlich noch tiefer. Die Ergebnisse stehen aber nicht im Widerspruch zu den Ergebnissen aus Einzelspezies-Untersuchungen und sprechen auch nicht für die Erhöhung des Sicherheitsfaktors zur Herleitung des  $\text{AA-EQS}_{\text{AF}}$ .

## **7.4. AA-EQS Schlussfolgerung**

Wie im TGD for EQS (EC, 2011) vorgesehen, sollen nach Möglichkeit alle Methoden zur EQS-Herleitung angewendet werden. Es ist lediglich die Bestimmung eines  $\text{AA-EQS}_{\text{AF}}$  möglich. Dieser steht aber nicht im Widerspruch zu Ergebnissen aus einer Mesokosmenstudie. Demnach wird eine  $\text{AA-EQS}$  von 0.048  $\mu\text{g/L}$  vorgeschlagen.

## 8. Akute Toxizität

### 8.1. MAC-EQS Herleitung für Flufenacet mit AF-Methode

Tab. 6: Übersicht der kritischen akuten Toxizitätswerte von Flufenacet auf Wasserorganismen.

Gruppe	Spezies	Wert	Konz. in µg/L	Literatur
<b>Basisdatensatz</b>				
Primärproduzenten	<i>Raphidocelis subcapitata</i> ( <i>Selenastrum capricornutum</i> )	EC50	7.55	<b>Geometrischer Mittelwert</b> <sup>(25)</sup>
Krebstiere	<i>Hyalella azteca</i>	LC50	2450	<b>Bowers (1995)</b> , zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 156 ff
Fische	<i>Lepomis macrochirus</i>	LC50	2130	<b>Anonym (1995)</b> , zitiert im EC 2003 und im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 70 ff
<b>Weitere</b>				
Molluske	<i>Crassostrea virginica</i>	EC50	12600	<b>Wheat &amp; Evans (1993)</b> , zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 159 ff

Tab. 7: Risikoklassierung der akuten aq. Toxizität anhand der niedrigsten gemessenen EC50-Werte (UN 2015).

Risikoklasse (akut)	niedrigster EC50-Wert	Erreichter Wert
nicht eingestuft	>100 mg/L	
3 (schädlich)	>10 mg/L; <100mg/L	
2 (giftig)	<10 mg/L; >1mg/L	
1 (sehr giftig)	< 1mg/L	X

Es liegen E(L)C50-Werte für die Organismengruppen der Primärproduzenten (Cyanobakterien, Algen, Wasserpflanzen), Mollusken, Krebstiere und Fische vor. Nach dem System zur Einstufung und Kennzeichnung von Chemikalien der UN ist Flufenacet als sehr giftig für aquatische Lebewesen einzustufen (Tab. 7). Um ein akutes Qualitätskriterium (MAC-EQS) herzuleiten, kann die AF-Methode auf der Datenbasis von akuten Toxizitätsdaten verwendet werden. Allerdings müssen mindestens 3 valide EC50-Kurzzeittestergebnisse von Vertretern der 3 trophischen Ebenen (Fische, Krebstiere, Algen) vorhanden sein um einen Assessmentfaktor von 100 mit den EC50 der sensitivsten Studie verwenden zu können. Für Substanzen mit einem spezifischen Wirkmechanismus, kann der AF weiter reduziert werden, wenn ein Vertreter der vermutlich sensitivsten Gruppe im Effektdatensatz vorhanden ist. Dies ist hier der Fall, da der Wirkmechanismus von Flufenacet auf Pflanzen ausgerichtet ist. Das niedrigste Effektdatum liegt für die Grünalge *Raphidocelis subcapitata* vor. Die genaue Bestimmung des geeignetsten und zuverlässigsten EC50 ist allerdings schwierig, da aufgrund einer Vielzahl an Neuberechnungen für diverse Zulassungsverfahren vorliegen (siehe auch Kapitel 3 – Bemerkungen). Es wurden ein geometrischer Mittelwert aus drei ErC50 gebildet, welche im DRAR nachvollziehbar beschrieben wurden, und die ebenfalls in einem geom. Mittelwert zusammengefasst wurden. Eine ausführliche Begründung findet sich im Annex 1. Unter Verwendung eines AF von 10 ergibt sich folgendes Kurzzeit-Qualitätskriterium:

$$\text{MAC-EQS} = 7.55 \mu\text{g/L} / 10 = 0.75 \mu\text{g/L}$$

<sup>25</sup> Geometrischer Mittelwert aus **ErC50 = 21.2 µg/L** (Bruns (2010), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 200 ff); **ErC50 = 6.45 µg/L** (Anderson (1997), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 205 ff); **ErC50 = 3.15 µg/L** (Bowers (1995), Neu ausgewertet von Dorgerloh (1998) und erneut im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 193 ff). Weitere Details im Annex 1.

## **8.2. MAC-EQS mit SSD-Methode**

Aufgrund des spezifischen Wirkmechanismus ist eine SSD für alle Organismengruppen nicht relevant. Es liegen exakte, verlässliche und relevante Effektdaten für acht verschiedene Vertreter der Primärproduzenten vor. *R. subcapitata* scheint allerdings weitaus sensibler als nahverwandte Grünalgen. Nach dem TGD for EQS müssten ohnehin mindestens 10-15 Datenpunkte vorliegen. Daher kann keine spezifische SSD mit Vertretern der Primärproduzenten erstellt werden.

## **8.3. MAC-EQS aus Mikro-/Mesokosmosstudien**

Es liegt lediglich die in Kapitel 7.3 beschriebene Mesokosmenstudie von Foekema & Jak (1999, zitiert in im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 338 ff) vor, in der Flufenacet als Formulierung (WG60) über einen längeren Zeitraum getestet wurde. Aufgrund der langen Expositionsdauer, der Probenahmezeiten (früheste Beprobung nach 7 Tagen) und der statistischen Auswertung (Multivariate Analyse für Tag 14 und Tag 28), sind die Daten nicht relevant für die Herleitung eines MAC-EQS. Siehe dazu Kapitel 3.4.1.3 im TGD for EQS (EC 2011, S. 51).

## **8.4. MAC-EQS Schlussfolgerung**

Wie im TGD for EQS (EC, 2011) vorgesehen, sollen nach Möglichkeit alle Methoden zur EQS-Herleitung angewendet werden. Es ist lediglich die Bestimmung eines MAC-EQS<sub>AF</sub> und es wird ein MAC-EQS von 0.75 µg/L vorgeschlagen.

# **9. Bewertung des Bioakkumulationspotentials und der sekundären Intoxikation**

Nach dem TGD for EQS (EC, 2011) soll zur Abschätzung des Risikos einer sekundären Intoxikation zunächst das Bioakkumulationspotential einer Substanz bestimmt werden. Dabei liefert ein gemessener Biomagnifikationsfaktor (BMF) von >1 oder ein Biokonzentrationsfaktor (BCF) >100 einen Hinweis auf ein Bioakkumulationspotential. Liegen keine verlässlichen BMF oder BCF Daten vor, kann stattdessen der  $\log K_{OW}$  zur Abschätzung verwendet werden, welcher ab einem Wert von >3 auf ein Bioakkumulationspotential hinweist.

Der  $\log K_{OW}$  liegt mit 3.5 oberhalb des Auslösewertes von 3. Der pKa liegt bei 12.58 (Tab. 1). Im umweltrelevanten pH Bereichen ist Flufenacet daher ungeladen. Der pH ist daher für die Bioakkumulationsbewertung von untergeordneter Bedeutung.

Es liegen mehrere BCF-Werte vor, die in Wenzel und Shemotyuk (2014) zitiert wurden. Aus den drei verfügbaren BCF Werten (60, 71.4, 165) wurde im UBA-Dossier ein geometrischer Mittelwert von 89 berechnet. Bei dem berücksichtigten BCF von 60 handelt es sich allerdings um einen berechneten Wert, der nicht mit den anderen Werten verrechnet werden sollte. Der BCF von 165 stammt aus dem Kanadischen Dossier (PMRA 2003) und wurde im Sonnenbarsch (*Lepomis macrochirus*) bestimmt. In dem Dossier sind nur wenige Details zu dem Test aufgeführt. Es wird beschrieben, dass Flufenacet (FOE 5043) während der Expositionsphase sehr schnell akkumulierte. Wann ein Konzentrationsgleichgewicht (*steady-state*) erreicht wurde ist nicht angegeben. Der Gesamtrückstands-BCF, abgeleitet von der Aufnahmegeschwindigkeitskonstante, beträgt 165 für den ganzen Fisch, 38 für das Filet und 103 für die Eingeweide. Die Ausscheidung von Flufenacet erfolgte schnell. Mehr als 94% der Radioaktivität wurden am Ende der Depurationsphase aus dem Körper eliminiert. Aufgrund der relativ niedrigen



Bioakkumulation und der schnellen Ausscheidung wurde die Biokonzentration von Flufenacet in Fischen als unbedenklich eingestuft.

Der dritte vom UBA verwendete BCF von 71.4 ist im DRAR beschrieben und stammt ebenfalls aus einer Bioakkumulationsstudie mit *Lepomis macrochirus* (Annex B.9 (AS) S. 131 ff.). Fische wurden dabei über 28 Tagen in einem Durchflusssystem mit einer Konzentration (0.1 mg/L) radioaktiv-markiertem Flufenacet exponiert, gefolgt von einer 15-tägigen Ausscheidungsphase. Während der Expositionsphase erreichten Konzentrationen im Fisch nach 7 Tagen einen stationären Zustand (*steady-state*). Der höchste *steady-state*-BCF für den ganzen Fisch belief sich auf 71.4. Die Halbwertszeit (CT50) für die Ausscheidungsphase betrug 0.3 Tage. Auch wenn die Studie einige Schwächen aufweist, wird ein niedriges Bioakkumulationspotential als ausreichend belegt angesehen (DRAR 2016, Annex B.9 (AS) S. 138 f.). Basierend auf dem BCF von 71.4 wurde im DRAR ebenfalls ein akzeptables Risiko einer sekundären Intoxikation für fischfressende Vögel bestimmt (DRAR 2016, Vol. 1, S. 165). Den Einschätzungen im DRAR wird im vorliegenden Dossier gefolgt und somit das Risiko einer sekundären Intoxikation entlang der Nahrungskette in limnischen Ökosystemen als gering angesehen.

## 10. Schutz der aquatischen Organismen

Der Effektdatensatz für Flufenacet umfasst alle 3 trophischen Ebenen bei den Kurzzeit- und den Langzeittoxizitäten. Dabei stellen die Primärproduzenten die empfindlichste Organismengruppen dar.

Wie im Kapitel 3 unter „Allgemeines Vorgehen“ erläutert, besteht aufgrund der vielen Neuauswertungen älterer Studien die Möglichkeit von Duplikationen im Datensatz. Zudem steht das „*peer reviewing*“ des DRARs und die Veröffentlichung der *EFSA Conclusion* samt Endpunkliste noch aus. Daher könnten sich die hier vorgeschlagenen UQK mittelfristig noch geringfügig ändern. Die mittels der AF-Methode vorgeschlagenen **MAC-EQS von 0.75 µg/L** und **AA-EQS von 0.048 µg/L** sollten aber zum jetzigen Stand einen ausreichenden Schutz für aquatische Organismen unterschiedlicher trophischer Ebenen bieten. Das Risiko einer sekundären Intoxikation wird als gering erachtet.

## 11. Literatuur

- Bayer (2014a). Summary of the fate and behaviour in the environment for flufenacet. Data requirements: EU Regulation 1107/2009 & EU Regulation 283/2013. Document MCA. Section 7: Fate and behaviour in the environment. M-482174-01-2, 19 March 2014.
- Bayer (2014b). Summary of the ecotoxicological studies for flufenacet. Data requirements: EU Regulation 1107/2009 & EU Regulation 283/2013. Document MCA. Section 7: Fate and behaviour in the environment. M-482177-01-3, 17 March 2014.
- Chemistry Dashboard, U.S. Environmental Protection Agency.. <https://comptox.epa.gov/dashboard/DTXSID60891451> (accessed February 13, 2018), Flufenacet ESA
- DRAR (2016); Draft Renewal Assessment Report prepared according to the Commission Regulation (EU) Nr. 1107/2009 – FLUFENACET; Vol. 1-3; August 2016
- EC (2003). Review report for the active substance flufenacet Finalised in the Standing Committee on the Food Chain and Animal Health at its meeting on 4 July 2003 in view of the inclusion of flufenacet in Annex I of Directive 91/414/EEC.
- ICS - Internal Database of the Umweltbundesamt (Federal Environment Agency), Dessau, Germany. Verfügbar unter <https://webetox.uba.de/webETOX/index.do> (letzter Zugriff am 19.12.2017)
- INERIS (2015) VALEUR GUIDE ENVIRONNEMENTALE FLUFENACET – n° CAS : 142459-58-3; Validation groupe d'experts : 1/10/2015 ; Version 1 : 14/01/2016 ; DRC-16-136849-00369A ; Institut national de l'environnement industriel et des risques (INERIS)
- Foekema, E.M. and Jak, R.G. (1999). The fate and biological effects of flufenacet WG 60 in aquatic indoor Microcosms. TNO; Appeldoorn, NL. Bayer AG. TNO-MEP-R 99/423. Not published
- Hutchinson TH, Shillabeer N, Winter MJ, Pickford DB (2006). Acute and chronic effects of carrier solvents in aquatic organisms: a critical review. *Aquat Toxicol* 76, 69-92.
- Klimisch H J, Andreae M, Tillmann U 1997 A systematic approach for evaluating the quality of experimental toxicological and ecotoxicological data. *Regulatory Toxicology and Pharmacology* 25(1): 1-5
- LAWA (2010). Stoffdatenblatt: Flufenacet CAS 142459-58-3; LAWA Expertenkreis "Stoffe"; Stand 15.03.2010. AL-Luhnstedt.
- Lechelt-Kunze, C., R. C. Meissner, M. Drewes and K. Tietjen (2003). "Flufenacet herbicide treatment phenocopies the fiddlehead mutant in *Arabidopsis thaliana*." *Pest management science* 59(8): 847-856.
- Moermond C T A, Kase R, Korkaric M, Ågerstrand M (2016): CRED: Criteria for reporting and evaluating ecotoxicity data. *Environmental Toxicology and Chemistry* 35, 1297-1309.
- Modrcin, T. F., Desai, V. C., Newallis, P. E., Jelich, K., Brandriff, J. W., & Jackman, D. E. (2000). U.S. Patent No. 6,071,858. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.
- OECD (2011). Freshwater alga and cyanobacteria, growth inhibition test. OECD guidelines for the testing of chemicals, Test No 201. Organisation for Economic Co-operation and Development, Paris, France.
- OPP (2018) Datenbank (Office of Pesticide Programs) (US EPA) <http://www.ipmcenters.org/ECotox/index.cfm>.
- Padilla, S., D. Corum, B. Padnos, D. Hunter, A. Beam, K. Houck, N. Sipes, N. Kleinstreuer, T. Knudsen and D. Dix (2012). "Zebrafish developmental screening of the ToxCast™ Phase I chemical library." *Reproductive Toxicology* 33(2): 174-187.
- Perreau, F. and J. Einhorn (2006). "Determination of frequently detected herbicides in water by solid-phase microextraction and gas chromatography coupled to ion-trap tandem mass spectrometry." *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 386(5): 1449-1456.
- Pflanzenschutzmittelverzeichnis des Schweizer Bundesamt für Landwirtschaft (BLW); Verfügbar unter <https://www.psm.admin.ch/de/wirkstoffe> - letzter Zugriff 19.12.2017)
- PPDB: Pesticides Properties DataBase - University of Hertfordshire (Verfügbar unter: <https://sitem.herts.ac.uk/aeru/ppdb/en/> - letzter Zugriff 19.12.2017)
- Rijkswaterstaat (2008). Afleiding van 41 ad hoc MTR's 2007; für Rijkswaterstaat Waterdienst, WD rapport: 2008.007; Mai 2008. M. B. WD/WGKL, D. t. H. WD/WGKL, E. H. RIVM and P. J.-. RIVM.
- Smit, C. E. (2013). memo: voorstellen voor herziening van luchtnormen en waternormen. R.-R. v. V. e. Milieu.

UN (2015). Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS). New York, United Nations.

Wenzel, A. and L. Shemotyuk (2014). EQS DATASHEET - ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD - FLUFENACET, Umweltbundesamt, UBA.

## 12. Annex

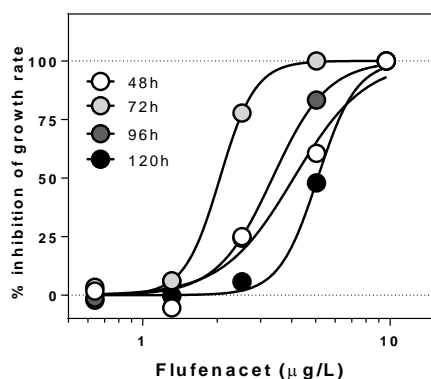
### Annex I

#### Begründung für die Berechnung eines geom. Mittelwertes aus den ErC50-Werten für *R. subcapitata*.

Laut TGD for EQS (EC, 2011, S. 150) solle ein geometrischer Mittelwert aus mehreren vergleichbaren Effektwerten für die selbe Spezies und denselben Endpunkt gebildet werden. Spezies und Endpunkt ist für die drei ausgewählten Effektwerte identisch. Der Unterschied besteht in der Testdauer. Nach OECD 201 beträgt diese für den Standardtest 72 h. Der Test kann u.U. verlängert werden, damit ein ausreichendes Wachstum der Kontrollen gewährleistet ist, besonders für langsam wachsende Algen, zu denen *R. subcapitata* unter optimalen Bedingungen aber nicht gehört. Die Frage ist nun, ob die Werte „vergleichbar“ sind, auch wenn die Testdauer unterschiedlich war.

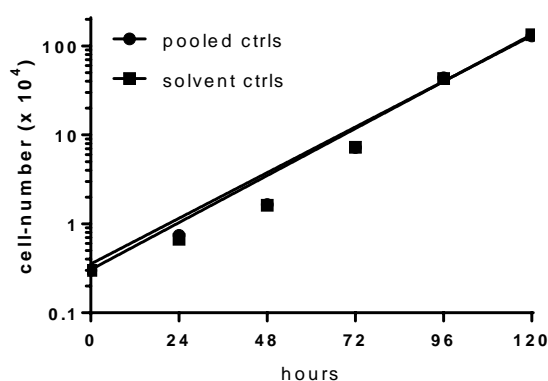
Laut DRAR war die Bestimmung der 72h-ECx mit den Daten aus Bowers (1995) nicht möglich. Der RMS merkte jedoch an, dass die Effektwerte zu den beiden Zeitpunkten ähnlich waren und die 72h-ECx vermutlich sehr nahe bei den 96h-ECx liegen würden. Da die Rohdaten vorlagen, wurden sie hier ebenfalls analysiert (Abb. A1). Dabei wurden Effekte durch Vergleich der behandelten Kulturen mit der Lösungsmittelkontrolle berechnet.

**A**



	48h	72h	96h	120h
Best-fit values				
Bottom	= 0	= 0	= 0	= 0
Top	= 100	= 100	= 100	= 100
HillSlope	-3.015	-6.058	-3.891	-5.559
IC50	4.076	2.05	3.344	5.094

**B**



section-by section growth-rates	0-24h	24-48h	48-72h	72-96h	96-120h
pooled ctrl	1.00	0.72	1.45	1.83	1.04
solvent ctrl	0.80	0.88	1.50	1.78	1.14

**Abb. A1:** (A) Dosiswirkungskurven und abgeleitete Parameter (EC50 in µg/L) für Effektdaten zu verschiedenen Zeitpunkten (24h-120h) und (B) Wachstum der Kontrolle mit angepassten Wachstumskurven (exp. Fkt.) und entsprechenden „section-by-section“ Wachstumsraten, berechnet aus den Daten von Bowers (Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 195).

Aus den Daten kann folgendes abgeleitet werden;

- a) Der hier bestimmte 96h-ErC50 liegt im Bereich des im DRAR neu berechneten 96h-ErC50 von 3.15 µg/L (Dorgerloh (1998), DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 196 ff.)
- b) Kontrollen (gepoolt und die Lösungsmittelkontrolle) wuchsen ähnlich. Das Wachstum scheint in beiden zunächst (bis 48 h) etwas geringer (lag-Phase), als zwischen 48 und 120 h.
- c) Es ist kein Trend für eine zunehmende Toxizität mit zunehmender Expositionszeit auszumachen. Der 72h-ErC50 wäre tendenziell niedriger als der 96 h ErC50.

#### Schlussfolgerung:

Trotz einiger Schwächen (siehe DRAR 2016, Vol. 3, B.9, S. 199), wurde die nach 96 h bestimmten Effektkonzentrationen im DRAR akzeptiert. Der hier angestellte Vergleich zeigt, dass ein 72h-ErC50 tendenziell noch niedriger liegen würde, als der 96 h-Wert. Da die Kontrollen über die gesamte Versuchsdauer exponentiell wuchsen, und sich kein Trend für abnehmende EC50-Werte über die Versuchsdauer zeigte, kann die Verwendung des 96h-ErC50 nicht als überprotektiv angesehen werden. Im Vergleich liegt der 72h-ErC50 von 21.2 µg/L aus Bruns (2010) (zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 200 ff.) höher. Vor diesem Hintergrund sollte der 96h-ErC50 von 3.15 µg/L (Dorgerloh (1998) nicht unberücksichtigt bleiben. Eine Überprüfung des dritten ErC50 von 6.45 µg/L (Anderson (1997), zitiert im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 205 ff.) war nicht möglich, da die Rohdaten nicht vorliegen. Aus der vorliegenden Analyse spricht aber nichts dafür, dass ein anderes Ergebnis erhalten werden könnte. Daher wird ein geometrischer Mittelwert gebildet und für die EQS-Herleitung verwendet.

#### Annex II

Im DRAR 2016 Volume 3 – Annex B.9 (AS), S. 204 f. wird ein 72h-NOErC von 0.138 µg/L angegeben. Aus den Angaben in Table B.9.2.6.3-1 (S. 202) sollte sich aber ein NOErC von 0.416 µg/L ergeben (Werte die mit Asterisk gekennzeichnet sind sollten einen signifikanten Effekt zeigen, und daher den LOEC definieren). Im Herstellerdossier wurde allerdings ebenfalls ein NOErC von 0.138 µg/L angegeben (Bayer 2014b), daher wurde dieser Wert in Tab. 4 eingetragen. Der grosse Unterschied zwischen dem NOErC und dem EC10 erklärt sich durch eine flache Dosis-Wirkungskurve und eine geringe Streuung der Daten im unteren Konzentrationsbereich. Um eine akzeptable Dosiswirkungskurve zu erhalten, wurden Effekte bei den höheren Konzentrationen ausgeklammert. Bei dem LOEC für die Wachstumsrate und dem Yield lagen der Effekte lediglich bei 1.9 % und 8.3 % respektive (Tab. B.9.2.6.3-1&2 im DRAR). Nach neueren Empfehlungen (OECD 201, §51) hätte man in dem Test die *treatments* mit der Lösemittelkontrolle vergleichen müssen, nicht mit der *pooled control*. Das würde zu einem etwas höheren prozentualen Effekt der LOEC und NOEC führen. Insgesamt ist die Studie verlässlich mit Einschränkung, auch da eine im DRAR nicht spezifizierte Lösungsmittel-Konzentration von DMF verwendet wurde.