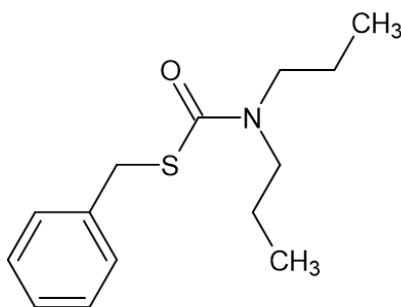




Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

Prosulfocarb

CAS nr. 52888-80-9



Vandkvalitetskriterium	VKK _{ferskvand}	1,1 µg/L
Vandkvalitetskriterium	VKK _{saltvand}	0,11 µg/L
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{ferskvand}	8,6 µg/L
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK _{saltvand}	0,86 µg/L
Sedimentkvalitetskriterium	SKK _{ferskvand}	75,4 µg/kg tørvægt (5% OC)* 1508 µg/kg tørvægt × f _{OC}
Sedimentkvalitetskriterium	SKK _{saltvand}	7,5 µg/kg tørvægt (5% OC)* 150 µg/kg tørvægt × f _{OC}
Biota-kvalitetskriterium, sekundær forgiftning	BKK _{sek.forgiftn., fisk}	0,20 mg/kg vådvægt fisk
Biota-kvalitetskriterium, sekundær forgiftning	BKK _{sek.forgiftn., musling}	0,056 mg/kg vådvægt musling
Biota-kvalitetskriterium, human konsum	HKK	0,61 mg/kg fiskeriprodukt, vådvægt

*SKK-værdierne ovenfor er grundet beregningsmetoden behæftet med betydelig usikkerhed og bør derfor kun anvendes som indikative værdier.

Februar 2023

Indholdsfortegnelse

FORORD	3
ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS	4
1 INDLEDNING	11
2 FYSISK-KEMISKE EGENSKABER	12
3 SKÆBNE I MILJØET	13
3.1 NEDBRYDELIGHED	13
3.2 BIOAKKUMULERING	13
3.3 FORDELING TIL SEDIMENT	13
3.4 NATURLIG FOREKOMST	14
4 TOKSICITETSDATA	15
4.1 TOKSICITET OVER FOR VANDLEVENDE ORGANISMER	15
4.2 TOKSICITET OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	16
4.3 TOKSICITET OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	17
4.4 TOKSICITET OVER FOR MENNESKER	18
5 ANDRE EFFEKTER	19
6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM	20
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	20
6.1.1 <i>Deterministiske metode</i>	20
6.1.2 <i>SSD metoden</i>	20
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	22
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	22
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA, SEKUNDÆR FORGIFTNING ($BKK_{\text{SEK. FORGIFTN.}}$)	23
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMANKONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)	26
6.6 VANDKVALITETSKRITERIUM BASERET PÅ $BKK_{\text{SEK. FORGIFTN.}}$ OG HKK	26
7 KONKLUSION	28
8 REFERENCER	29

Bilag A: Test data for prosulfocarb

Bilag B: EpiSuite beregninger

Forord

Et kvalitetskriterium i vandmiljøet er det højeste koncentrationsniveau, ved hvilket der skønnes, ikke at forekomme uacceptable negative effekter på vandøkosystemer.

Miljøstyrelsen (MST) udarbejder kvalitetskriterier for kemikalier i vandsøjlen, i sediment, i dyr og planter (biota) og for human konsum.

Miljøstyrelsen bruger kvalitetskriterierne som det faglige grundlag til at kunne fastsætte miljøkvalitetskrav, hvorved der forstås den endelige koncentration af et bestemt forurenende stof i vand, sediment eller biota, som ikke må overskrides af hensyn til beskyttelsen af miljøet og menneskers sundhed.

Metodikken, der anvendes til udarbejdelse af miljøkvalitetskrav er harmoniseret i EU og baserer sig på vandrammedirektivet (EU 2000), EU's vejledning til fastsættelse af kvalitetskriterier i vandmiljøet (EU 2018) og Miljøstyrelsens vejledning til fastsættelse af vandkvalitetskriterier (Miljøstyrelsen 2004). Metodikken er endvidere i overensstemmelse med EU's vejledning til risikovurdering under REACH forordningen (EU 2008).

Den sidste litteratursøgning er foretaget december 2021. Adgang til Draft Assessment Report for 2006 (KEMI, 2006) – der først blev erhvervet efter det udkast til vandkvalitetskrav, som blev sendt i høring – har ført til opdateringer af de foreslået vandkvalitetskriterier, især foranlediget af adgangen til flere algestudier.

English Summary and conclusions

Prosulfocarb is an active substance (pesticide) used as an herbicide and it belongs to the class of thiocarbamates. The mode of action of the substance is inhibition of lipid synthesis in the meristem.

Derivation of environmental quality standards (EQS) for the aquatic environment is following the EU Guidance Document No. 27. Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards, TGD (EU 2018).

AA-EQS for water

Valid data from long-term exposure to freshwater organisms is found for 11 species (*Anabaena flos-aquae*, *Desmodesmus subspicatus*, *Chlamydomonas reinhardtii*, *Chlorella vulgaris*, *Raphidocelis subcapitata*, *Navicula pelliculosa*, *Daphnia magna*, *Chironomus riparius*, *Oncorhynchus mykiss*, *Lemna gibba* and *Myriophyllum spicatum*) representing the seven taxonomic groups: cyanobacteria, algae (chlorophyta and diatom), crustaceans, insects, fish and macrophytes. The lowest EC₁₀/NOEC value is identified for the algae, *Raphidocelis subcapitata*, with an EC₁₀ of 0,011 mg/L.

In addition, data from a mesocosm study with phytoplankton and zooplankton and a microcosm study with 94 phytoplankton taxa, 54 periphyton and 46 zooplankton taxa are available. The latter study is assigned a Klimisch score of three and is therefore not used. Phytoplankton showed the greatest sensitivity in the microcosm study with a NOEC of 0.015 mg/L. The study is not used for the derivation of the AA-EQS, as this NOEC value is higher than the lowest NOEC/EC₁₀ value for the tests with algae, invertebrates and fish.

No long-term test data have been found for saltwater organisms.

The dataset is listed in appendix A.

According to TGD (EU 2018) the requirement for a Species Sensitivity Distribution (SSD) is at least 10 different species representing at least 8 taxonomic groups. This is almost fulfilled, and therefore both the deterministic approach and an SSD is performed.

Deterministic approach

As the chronic data set for freshwater consists of experimental data from long-term tests at the three trophic levels: algae, crustaceans and fish, an assessment factor of 10 can be applied to the lowest EC₁₀ of 0.011 mg/L for the algae, *Raphidocelis subcapitata*. This results in the following AA-EQS for freshwater:

$$\text{AA-EQS}_{\text{freshwater}} = 0.011 \text{ mg/L} / 10 = 0.0011 \text{ mg/L} = 1.1 \text{ } \mu\text{g/L}$$

The AA-EQS for saltwater is based on the same test data as for the freshwater since no test data for saltwater organism is available. Compared to the AA-EQS_{freshwater} an additional factor of 10 is applied resulting in an assessment factor of 100 used on the EC₁₀ value:

$$\text{AA-EQS}_{\text{saltwater}} = 0.011 \text{ mg/L} / 100 = 0.00011 \text{ mg/L} = 0.11 \text{ }\mu\text{g/L}$$

SSD

The ecotoxicity data applied in the SSD is marked in bold in appendix A. The SSD is performed using ETX v. 2.3 from 2017 developed by RIVM and resulted in a HC₅ of 6.7 $\mu\text{g/L}$ with a lower and upper 90 % confidence limit of 0.72 $\mu\text{g/L}$ and 24.71 $\mu\text{g/L}$, respectively. The standard deviation of the log₁₀-transformed data is 0.86. All three “goodness of fit” test (Anderson-Darling, Kolmogorov-Smirnov and Kramer von Mises) accepted a log_{normal} distribution of the data.

According to TGD (EU 2018) an assessment factor of five is used as a default for determine AA-EQS. Since the amount of taxonomic groups do not quite fulfill the requirement and the SD > 0.5 an assessment factor of six seems appropriate.

$$\text{AA-EQS}_{\text{freshwater}} = 6.7 \text{ }\mu\text{g/L} / 6 = 1.1 \text{ }\mu\text{g/L}$$

Since no test data for saltwater organism is available, an additional factor of 10 is applied so an assessment factor of 60 is used on the HC₅-value:

$$\text{AA-EQS}_{\text{saltwater}} = 6.7 \text{ }\mu\text{g/L} / 60 = 0.11 \text{ }\mu\text{g/L}$$

The results based on the SSD is identical to the results from the deterministic approach.

MAC-EQS for water

Valid acute toxicity data for freshwater have been found for 12 species (*Anabaena flos-aquae*, *Chlamydomonas reinhardtii*, *Chlorella vulgaris*, *Navicula pelliculosa*, *Desmodesmus subspicatus*, *Raphidocelis subcapitata*, *Scenedesmus subspicatus*, *Daphnia magna*, *Oncorhynchus mykiss*, *Lepomis macrochirus*, *Lemna gibba* and *Myriophyllum spicatum*) representing the six taxonomic groups: cyanobacteria, algae (chlorophyta and diatom), crustaceans, fish and macrophytes. The acute effect concentrations are between 0.086 mg/L and 8.34 mg/L, with the lowest effect concentration, E(L)C₅₀, found for the algae, *Desmodesmus subspicatus*.

No short-term test data have been found for saltwater organisms.

The dataset is listed in appendix A.

MAC-EQS is derived for freshwater and saltwater organisms using the deterministic approach based on the highest toxicity for algae experimentally determined with E_rC₅₀ of 0.086 mg/L = 86 $\mu\text{g/L}$. According to TGD (EU 2018), an assessment factor of 100 can be applied to the lowest E(L)C₅₀ value when data is available for short-term tests on at least three trophic levels of the base set (fish, crustaceans and algae). However, it is possible to lower this to 10 if the standard deviation of the log₁₀ transformed data for the different trophic levels is less than 0.5 or if the substance has a known mode of toxic action and representative species for the most sensitive taxonomic group is included in the data set. Prosulfocarb is an herbicide with a known mechanism of action, so algae and aquatic plants are expected to be the most sensitive taxonomic groups, which also is observed from the test data. Therefore, it is considered acceptable to apply an assessment factor of 10 to the lowest EC₅₀ value. Hereby, the MAC-EQS_{freshwater} is calculated:

$$\text{MAC-EQS}_{\text{freshwater}} = 0.086 \text{ mg/L} / 10 = 0.0086 \text{ mg/L} = 8.6 \text{ } \mu\text{g/L}$$

The MAC-EQS for saltwater is based on the same test data as for the freshwater as no test data for saltwater organism is available. An assessment factor of 100 can be applied to the lowest E(L)C₅₀-value when short-term data are available for at least three trophic levels of the base set (fish, crustaceans and algae):

$$\text{MAC-EQS}_{\text{saltwater}} = 0.086 \text{ mg/L} / 100 = 0.00086 \text{ mg/L} = 0.86 \text{ } \mu\text{g/L}$$

QS for sediment

According to TGD (EU 2018), it is relevant to derive sediment quality criteria for a substance when $\log K_{ow} \geq 3$ or $\log K_{oc} \geq 3$. $\log K_{oc}$ for prosulfocarb is 3.14, therefore it is relevant to derive a QS for sediment-dwelling organisms.

One 25-day chronic study has been reported for a sediment-living organism, *Chironomus riparius*, giving a NOEC of 1.25 mg/L based on the emergence and rate of development of the sediment-dwelling larvae. A conversion of this NOEC expressed as a water concentration to a sediment concentration using the EqP method resulted in a sediment concentration more than one order of magnitude higher than the measured concentration levels in the sediment. It was actually observed that the concentration in sediment apparently increased with exposure time suggesting that an equilibrium in the sediment is not achieved instantaneously. Therefore, it was assessed that this test cannot be used to derive a quality criterion for sediment, as the exposure concentration in the sediment during the test is not known. The toxicity for sediment-living organisms is determined by means of equilibrium calculation based on the toxicity in the aquatic environment according to the EqP method stated in TGD (EU 2018), as this only study for the toxicity of prosulfocarb for sediment-dwelling organisms is assessed not to be acceptable. For the purpose of deriving sediment QS, the derived water quality criteria (AA-EQS) for freshwater and saltwater are used, both of which are based on available data for the most sensitive organism in the aquatic environment, as well as the geometric mean of the K_{oc} value of 1367 L/kg.

For an EU standard sediment with a 5 % organic carbon (OC) content, the partition coefficient between solid and water in sediment is, $K_{p\text{sed}} = F_{oc\text{sed}} \times K_{oc} = 0.05 \times 1367 \text{ L/kg} = 68.35$, and the partition coefficient between sediment and water $K_{\text{sed-water}}$ can be determined based on the equation below:

$$\begin{aligned} K_{\text{sed-water}} &= F_{\text{air}\text{sed}} \times K_{\text{air-water}} + F_{\text{water-sed}} + F_{\text{solid-sed}} \times (K_{p\text{sed}} / 1000) \times RHO_{\text{solid}} \\ &= 0 \times 0.8 + 0.2 \times (68.35 / 1000) \times 2500 = 34.18 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3} \end{aligned}$$

QS_{sediment} for both freshwater and saltwater can be determined from the following equations, where the bulk density of wet sediment, RHO_{sed} is 1300 kg wet weight/m³:

$$\begin{aligned} QS_{\text{freshwater sediment}} &= (K_{\text{sed-water}} / RHO_{\text{sed}}) \times AA-QS_{\text{freshwater}} \times 1000 \\ &= 34.18 / 1300 \times 1.1 \text{ } \mu\text{g/kg ww} \times 1000 = 29 \text{ } \mu\text{g/kg ww} \\ &= 29 \text{ } \mu\text{g/kg ww} \times 2.6 \text{ kg ww/kg dw} = 75.4 \text{ } \mu\text{g/kg dw} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{QS}_{\text{saltwater sediment}} &= (\text{K}_{\text{sed-water}} / \text{RHO}_{\text{sed}}) \times \text{AA-QS}_{\text{saltwater}} \times 1000 \\
&= 34.18 / 1300 \times 0.11 \mu\text{g/kg ww} \times 1000 = 2.9 \mu\text{g/kg ww} \\
&= 2.9 \mu\text{g/kg ww} \times 2.6 \text{ kg ww/kg dw} = 7.5 \mu\text{g/kg dw}
\end{aligned}$$

Conversion from wet weight to dry weight of sediment is done with $\text{CONV}_{\text{sed}} = 2.6$ (EU 2018).

Based on organic carbon:

$$\begin{aligned}
\text{QS}_{\text{freshwater sediment}} &= 75.4 \mu\text{g/kg dw (5\% OC)} \\
&= 1508 \mu\text{g/kg dw} \times f_{\text{oc}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{QS}_{\text{saltwater sediment}} &= 7.5 \mu\text{g/kg dw (5\% OC)} \\
&= 150 \mu\text{g/kg dw} \times f_{\text{oc}}
\end{aligned}$$

QS for secondary poisoning

Prosulfocarb has a calculated $\log K_{\text{ow}} \geq 3$ (4.23) and a $\text{BCF}_{\text{fish}} > 100$ and thus a $\text{QS}_{\text{sec. pois.}}$ shall be derived according to the TGD (EU 2018).

Studies on mammals and birds have been available from EFSA (2007) on prosulfocarb. A NOAEL (reduced weight gain) of 0.5 mg/kg/day was reported in a 2-year rat study and a NOEL (reproduction) of 131 mg/kg bw/day was determined for prosulfocarb in a 20-week study with gray duck (*Anas platyrhynchos*). The $\text{QS}_{\text{sec. pois.}}$ is derived for biota using the lowest observed toxicity value for mammals, NOAEL for rats of 0.5 mg/kg bw/day obtained for chronic effects, and for avian, NOEL of 131 mg/kg bw/day obtained sub-acute effects. Both fish and mussels are chosen as the critical food item. Fish is chosen, because only BCF values are available for fish and mussels is chosen, because prosulfocarb is not expected to biomagnify.

Mammals

The energy-normalized concentration is calculated according to method A in the TGD (EU 2018) based on the NOAEL and the daily energy expenditure (DEE) for rats (bw = 250 g):

$$\begin{aligned}
\text{Log DEE [kJ/d]} &= 0.8136 + 0.7149 \times \log (\text{bw}) \\
&= 0.8136 + 0.7149 \times \log (250) = 2.53 \text{ kJ/d}
\end{aligned}$$

$$\text{DEE [kJ/d]} = 10^{2.53} = 338.8 \text{ kJ/d}$$

$$\begin{aligned}
\text{Conc}_{\text{energy-norm.}} &= \text{dose} \times (\text{bw} / \text{DEE}) \\
&= 0.5 \text{ mg/kg bw/day} \times (0.250 \text{ kg bw} / 338.8 \text{ kJ/d}) = 0.00037 \text{ mg/kJ}
\end{aligned}$$

Since prosulfocarb does not expect to biomagnify through the food chain, the value above is converted to a concentration in mussels as the critical food item. The value is also converted to a concentration in fish, since only BCF values are available for fish. According to table 7 in the TGD (EU 2018) the energy content for mussels is 19.0 kJ/g_{dw} and the moisture fraction is 92 %. The energy content for fish is 21.0 kJ/g_{dw} and the moisture fraction is 74 %. The concentration in the critical food items is calculated from the equation below:

$$\text{Conc}_{\text{food item}} = \text{Conc}_{\text{energy-norm.}} (\text{mg/kJ}) \times \text{Energy content}_{\text{food item}} (\text{mg/kg}_{\text{dw}}) \times (1 - \text{moisture fraction}_{\text{food item}})$$

The concentration for mussels and fish are calculated below:

$$\text{Conc}_{\text{food item, mussels}} = 0.00037 \text{ mg/kJ} \times 19000 \text{ kJ/kg}_{\text{dw}} \times (1-0.92) = 0.56 \text{ mg/kg mussels ww}$$

$$\text{Conc}_{\text{food, item, fish}} = 0.00037 \text{ mg/kJ} \times 21000 \text{ kJ/kg}_{\text{dw}} \times (1-0.74) = 2.02 \text{ mg/kg fish ww}$$

The values are based on a chronic study. Therefore, the assessment factor for extrapolation to chronic toxicity is 1. Further, an assessment factor of 10 is applied for extrapolation from laboratory toxicity studies to different protection levels.

$$Q_{\text{S mammals, sec. pois., mussels}} = 0.56 \text{ mg/kg mussels ww} / 1 / 10 = 0.056 \text{ mg/kg mussels ww}$$

$$Q_{\text{S mammals, sec. pois., fish}} = 2.02 \text{ mg/kg fish ww} / 1 / 10 = 0.20 \text{ mg/kg fish ww}$$

Avian

The energy-normalized concentration is calculated according to the TGD (EU 2018) based on the NOEL and the daily energy expenditure (DEE) for ducks (bw = 1082 g (Crocker 2002)):

$$\begin{aligned} \text{Log DEE [kJ/d]} &= 1.032 + 0.6760 \times \log (\text{bw}) \\ &= 1.032 + 0.6760 \times \log (1082) = 3.08 \text{ kJ/d} \end{aligned}$$

$$\text{DEE [kJ/d]} = 10^{3.08} = 1202.3 \text{ kJ/d}$$

$$\begin{aligned} \text{Conc}_{\text{energy-norm.}} &= \text{dose} \times (\text{bw} / \text{DEE}) \\ &= 131 \text{ mg/kg bw/day} \times (1.082 \text{ kg bw} / 1202.3 \text{ kJ/d}) = 0.118 \text{ mg/kJ} \end{aligned}$$

Since prosulfocarb does not expect to biomagnify through the food chain, the value above is converted to a concentration in mussels as the critical food item. The value is also converted to a concentration in fish, since only BCF values are available for fish. According to table 7 in the TGD (EU 2018) the energy content for mussels is 19.0 kJ/g_{dw} and the moisture fraction is 92 %. The energy content for fish is 21.0 kJ/g_{dw} and the moisture fraction is 74 %. The concentration in the critical food items is calculated from the equation below:

$$\text{Conc}_{\text{food item}} = \text{Conc}_{\text{energy-norm.}} (\text{mg/kJ}) \times \text{Energy content}_{\text{food item}} (\text{mg/kg}_{\text{dw}}) \times (1-\text{moisture fraction}_{\text{food item}})$$

The concentration for mussels and fish are calculated below:

$$\text{Conc}_{\text{food, item, mussels}} = 0.118 \text{ mg/kJ} \times 19000 \text{ kJ/kg}_{\text{dw}} \times (1-0.92) = 179 \text{ mg/kg mussels ww}$$

$$\text{Conc}_{\text{food, item, fish}} = 0.118 \text{ mg/kJ} \times 21000 \text{ kJ/kg}_{\text{dw}} \times (1-0.74) = 644 \text{ mg/kg fish ww}$$

The value is based on a 20-week study considered to be a chronic study. Therefore, the assessment factor for extrapolation to life-time exposure in the field is 1. Further, an assessment factor of 10 is applied for extrapolation from laboratory toxicity studies to different protection levels.

$$Q_{\text{S avians, sec. pois., mussels}} = 179 \text{ mg/kg mussels ww} / 1 / 10 = 17.9 \text{ mg/kg mussels ww}$$

$$QS_{\text{avians, sec. pois., fish}} = 644 \text{ mg/kg fish ww} / 1 / 10 = 64.4 \text{ mg/kg fish ww}$$

Proposed QS for secondary poisoning

As the study on mammals results in the lowest QS for secondary poisoning, $QS_{\text{sec. pois.}}$ for prosulfocarb is proposed:

$$QS_{\text{sec. pois., mussels}} = 0.056 \text{ mg/kg mussels ww}$$

$$QS_{\text{sec. pois., fish}} = 0.20 \text{ mg/kg fish ww}$$

QS for human health

According to TGD (EU 2018), QS for human consumption of fishery product is relevant if the substance has relevant human hazard properties. Prosulfocarb has the following relevant harmonized classifications under the CLP Regulation (EC) No. 1272/2008: Acute Tox. 4, H302 (Harmful if swallowed) and Skin sens. 1, H317 (May cause an allergic skin reaction). The QS for human health is based on the ADI of 0.005 mg/kg/day derived by EFSA.

According to the TGD (EU 2018), a default allocation factor of 20 % is applied to protect humans by consuming contaminated fish and seafood along with the assumption of a standard food intake of 0.00163 kg fish ww/kg bw/day for a person. QS for human health is calculated below:

$$\begin{aligned} QS_{\text{human health}} &= (0.2 \times TL_{\text{hh}} \text{ (mg/kg bw/day)}) / 0.00163 \\ &= (0.2 \times 0.005 \text{ (mg/kg bw/day)}) / 0.00163 \\ &= 0.61 \text{ mg/kg fish product ww} \end{aligned}$$

QS_{water} based on QS_{sec. pois.} and QS_{human health}

Since $QS_{\text{human health}}$ (0.61 mg/kg wet weight) is higher than $QS_{\text{sec. pois., fish}}$ (0.20 mg/kg wet weight fish) and $QS_{\text{sec. pois., mussels}}$ (0.056 mg/kg wet weight mussels), the lowest value is used in the determination of QS_{water} . In this case the lowest value is $QS_{\text{sec. pois.}}$ for mussels, however no BCF values is found for mussels, which mean the corresponding concentration in water cannot be determined. Instead the $QS_{\text{sec. pois.}}$ for fish is used to calculate a corresponding concentration in water.

The BCF values for fish is 480-1100 L/kg (mean: 790 L/kg) from a test concentration of 0.05 mg/L and 230-700 (mean: 465 L/kg) from a test concentration of 0.005 mg/L. The concentration for AA-EQS_{freshwater} is 0.0011 mg/L and therefore, it seems reasonable to assume a BCF value of 465 L/kg.

$$QS_{\text{water, fish}} = 0.20 \text{ mg/kg ww} / 465 \text{ L/kg} = 0.00043 \text{ mg/L} = 0.43 \text{ } \mu\text{g/L}$$

This value is below AA-EQS_{freshwater} of 1.1 $\mu\text{g/L}$ but above AA-EQS_{saltwater} of 0.11 $\mu\text{g/L}$. The AA-EQS for freshwater and saltwater is not adjusted, because of the uncertainty of the BCF value for fish. The BCF value is observed to depend on the concentration of Prosulfocarb in the water and is observed to decrease with a descending concentration in the water. It can therefore be assumed, that the used BCF of 465 L/kg found at a test concentration of 0.005 mg/L will be higher than a BCF at a concentration of 0.0011 mg/L (AA-EQS_{freshwater}), which could result in a $QS_{\text{water, fish}}$ closer to AA-

EQS_{freshwater}. Therefore, it is assessed that AA-EQS is being protective of secondary poisoning and human health.

Conclusions

The following EQS have been derived for prosulfocarb:

AA-EQS _{freshwater}	= 1.1 µg/L
AA-EQS _{saltwater}	= 0.11 µg/L
MAC-EQS _{freshwater}	= 8.6 µg/L
MAC-EQS _{saltwater}	= 0.86 µg/L
QS _{sediment, freshwater}	= 75.4 µg/kg dry weight (5 % OC) 1508 µg/kg dry weight × f _{oc}
QS _{sediment, saltwater}	= 7.5 µg/kg dry weight (5 % OC) 150 µg/kg dry weight × f _{oc}
QS _{sec. pois., fish}	= 0.20 mg/kg wet weight
QS _{sec. pois., mussels}	= 0.056 mg/kg wet weight
QS _{human health}	= 0.61 mg/kg fish product wet weight

1 Indledning

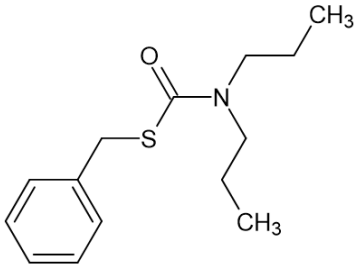
Nærværende datablad vedrører prosulfocarb med CAS nr. 52888-80-9.

Identiteten af prosulfocarb fremgår af Tabel 1.1.

Prosulfocarb er et aktivstof (pesticid), som anvendes som herbicid (ukrudtsmiddel) og tilhører klassen af thiocarbamater. Stoffets virkemekanisme er hæmning af lipidsyntesen i meristemet. Der har i en årrække været national fokus på anvendelse af prosulfocarb-midler i landbruget, da anvendelse af disse midler har medført stor afdrift til bl.a. naboarealer. Dette har været et problem, da prosulfocarb ikke er godkendt i frugt og grøntsager. Grænseværdien for, hvor meget prosulfocarb, der må være i f.eks. frugtafgrøder, er meget lav (0,01 mg/kg) (EU 2022).

Stoffet har en harmoniseret klassificering for miljøet (Tabel 1.1); Aquatic Chronic 2 (H411). Klassificeringen Acute Tox. 4 (H302) er dog også relevant ved humant konsum af fiskeriprodukter. Selvklassificeringerne er de samme kategorier, som de harmoniserede.

Tabel 1.1. Identitet af prosulfocarb

IUPAC navn	Dipropyl-thiocarbamic acid S-benzyl ester
Strukturformel	
CAS nr.	52888-80-9
EINECS nr.	634-871-9
Kemisk formel	C ₁₄ H ₂₁ NOS
SMILES	c1(CSC(=O)N(CCC)CC)ccccc1
Harmoniseret klassificering ¹	Acute Tox. 4, H302 (farlig ved indtagelse) Skin sens. 1, H317 (kan forårsage en allergisk hudreaktion) Aquatic Chronic 2, H411 (giftig for vandlevende organismer med langvarige virkninger)
Selvklassificering ²	Acute Tox. 4, H302 (farlig ved indtagelse) Skin sens. 1, H317 (kan forårsage en allergisk hudreaktion) Aquatic Chronic 2, H411 (giftig for vandlevende organismer med langvarige virkninger)

¹ <https://echa.europa.eu/da/brief-profile/-/brief-profile/100.100.363>

² <https://echa.europa.eu/da/information-on-chemicals/cl-inventory-database/-/discli/details/112451>

2 Fysisk-kemiske egenskaber

De fysisk-kemiske egenskaber for prosulfocarb fremgår af Tabel 2.1.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for prosulfocarb

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, M_w ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	251,4	EFSA 2007
Smeltepunkt, T_m ($^{\circ}\text{C}$)	$< -20\text{ }^{\circ}\text{C} \pm 0,5$, renhed: 99,6%	EFSA 2007
Kogepunkt, T_b ($^{\circ}\text{C}$)	$341\text{ }^{\circ}\text{C} \pm 0,5\text{ }^{\circ}\text{C}$, renhed: 99,6%	EFSA 2007
Damptryk, P_v (Pa)	$7,9 \times 10^{-4}$ ^a , renhed: 99,6 %	EFSA 2007
Henry's konstant, H ($\text{Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$)	$1,52 \times 10^{-2}$ ^a	EFSA 2007
Vandopløselighed, S_w ($\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$)	pH 6,1 \pm 0,4: 13,0 \pm 0,3 ^b , renhed: 99,6 %	EFSA 2007
Dissociationskonstant, pK_a	Dissocierer ikke ved miljørelevante pH ^c	EFSA 2007
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	4,23 ^d	EPI Suite 2021 (se bilag B)
Sediment/vand fordelingskoefficient, normaliseret til organisk karbon, K_{oc} ($\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$)	2350 ^e 1367	EPI Suite 2021 (se bilag B) APVMA 2007

^a ved 20 $^{\circ}\text{C}$

^b ved $20 \pm 0,5\text{ }^{\circ}\text{C}$

^c Har ikke nogen form for dissociation, der kan måles inden for testmetodernes pH-områder (teoretisk betragtning)

^d Estimeret værdi

^e Estimeret værdi – K_{ow} metode

3 Skæbne i miljøet

3.1 Nedbrydelighed

Der er udført test for let-bionedbrydelighed af prosulfocarb efter OECD 301B. Det blev her vist, at prosulfocarb ikke er let biologisk nedbrydeligt under aerobe forhold (EFSA 2007).

Forsvindingshastighederne af prosulfocarb ved en dosering på 4 kg/ha af radiomærket prosulfocarb i en 30 cm dyb vandmasse er undersøgt i op til 107 dage (APVMA 2007). Resultaterne viste, at prosulfocarb udgjorde hovedbestanddelen af samtlige radiomærkede stoffer, som var til stede i vand og sedimentet ved afslutningen af undersøgelsen. For nedbrydningen af prosulfocarb viste CO₂ sig at være det eneste større nedbrydningsprodukt i både vand og sediment. Ingen metabolit af prosulfocarb nåede signifikante niveauer (<1 %) i nogen af systemerne, kun metabolitten prosulfocarbsulfoxid udgjorde under 1 % af aktivstoffet i både sedimentet og vandet. DT₅₀-værdierne for prosulfocarb blev bestemt til at være 0,6-1,5 og 147-381 dage for henholdsvis vand og vand/sediment (APVMA 2007). Den signifikant længere halveringstid i sediment kan forklares ved tre forhold: 1) prosulfocarb har bundet sig til suspenderet materiale og efterfølgende sedimenteret; 2) der er en diffusion af prosulfocarb ned i sediment og 3) biologisk nedbrydning på grund af de anaerobe forhold i sedimentet.

Samlet set, kan prosulfocarb således karakteriseres som ikke let-bionedbrydeligt, men potentielt nedbrydeligt både under aerobe og anaerobe forhold.

3.2 Bioakkumulering

Der er udført to dynamiske 42-dages amerikanske undersøgelser af biokoncentrationen af ¹⁴C-prosulfocarb i regnbueørred ved behandlingsniveauer på 0,05 og 0,005 mg/L i en 28-dages eksponeringsperiode (refereret i APVMA 2007). Radioanalyse af filet, hel fisk og viscerale portioner blev udført i hele eksponeringsperioden. Ud fra data for optagelses- og frigivelsesfaserne blev det konkluderet, at ¹⁴C-prosulfocarb nåede steady-state niveau på dag 14 ved 0,05 mg/L og på dag 3 ved 0,005 mg/L. De gennemsnitlige målte BCF-værdier for vævene på dag 28 var i intervallet 480-1100 (gennemsnit 790) og 230-700 (gennemsnit 465) for henholdsvis 0,05 mg/L og 0,005 mg/L eksponeringsniveauer. BCF falder således tilsyneladende med koncentrationen i vand. Efter 14 dages frigivelsesfase var der en gennemsnitlig fjernelse på 98-99 % af vævsradioaktiviteten ved begge behandlingsniveauer. Data viser, at prosulfocarb hurtigt udskilles fra fiskevæv i rent vand og derfor ikke vil bioakkumulere.

3.3 Fordeling til sediment

Der er ikke direkte målinger af stoffets fordeling til sediment, men der er rapporteret en del målinger af stoffets fordeling i jordmatricen i EFSA (2007). Den højeste K_{OC} rapporteret herfra er på 1367 L/kg, hvilket svarer til en log K_{OC} på 3,14.

3.4 Naturlig forekomst

Prosulfocarb findes ikke naturligt i miljøet.

4 Toksicitetsdata

Troværdigheden af studierne er vurderet ved tildelingen af en Klimisch score fra 1 til 4 (Klimisch *et al.* 1997). Score 1 angiver, at studiet kan anvendes uden forbehold, mens score 2 angiver at studiet kan anvendes med forbehold, f.eks. at der er tilstrækkelige oplysninger, selvom studiet ikke er udført i forhold til guideline. Studier, som ikke er tilstrækkeligt beskrevet, tildeles score 3 eller 4, hvor score 4 tildeles studier, hvor det ikke er muligt at vurdere kvaliteten og dermed troværdigheden. Estimerede værdier tildeles scoren 3, da de ikke bør anvendes direkte i beregningerne af miljøkvalitetskriterier jf. TGD (EU 2018).

4.1 Toksicitet over for vandlevende organismer

Der er anført en del toksicitetsstudier over for vandlevende organismer i EFSA (2007). Der er ikke adgang til studierne, men da studierne har været vurderet og accepteret af RMS (reference member state, medlemsstat der laver review af vurderingen), vurderes dette at være tilstrækkeligt til, at de også kan anvendes ved fastsættelse af vandkvalitetskriteriet. Samme data samt flere supplerende data er fundet i et godkendelsesdokument fra NZ EPA (2020). Videre har der været adgang til Draft Assessment Report (DAR), Volume 3, Annex B9, KEMI (2006). DAR indeholder flere studier end de studier, der er summeret i EFSA (2007). De fundne data er angivet i bilag A.

Der er kun fundet data for ferskvandslevende organismer for stoffet.

Der er fundet troværdigt akut toksicitetsdata for 12 arter (*Anabaena flos-aquae*, *Chlamydomonas reinhardtii*, *Chlorella vulgaris*, *Navicula pelliculosa*, *Desmodesmus subspicatus*, *Raphidocelis subcapitata* (*Selenastrum capricornutum*), *Scenedesmus subspicatus*, *Daphnia magna*, *Oncorhynchus mykiss*, *Lepomis macrochirus*, *Lemna gibba* og *Myriophyllum spicatum*) fordelt på seks taksonomiske grupper (cyanobakterier, alger (grønalger og kiselalger), krebsdyr, fisk og vandplanter). De akutte effektkoncentrationer er mellem 0,086 mg/L og 8,34 mg/L, hvor den laveste effektkoncentration, E(L)C₅₀ er fundet for væksthæmning af algen, *Desmodesmus subspicatus*. Det skal her bemærkes, at der ses bort fra EC₅₀ baseret på biomasse, som generelt er lavere end EC₅₀ for væksthæmning. Krebsdyr og fisk viser dog sammenlignelig følsomhed i de akutte test.

Det kroniske datasæt for ferskvand består af eksperimentelle data fra troværdige langtidstest på 11 arter (*Anabaena flos-aquae*, *Desmodesmus subspicatus*, *Chlamydomonas reinhardtii*, *Chlorella vulgaris*, *Raphidocelis subcapitata*, *Navicula pelliculosa*, *Daphnia magna*, *Chironomus riparius*, *Oncorhynchus mykiss*, *Lemna gibba* og *Myriophyllum spicatum*) fordelt på syv taksonomiske grupper (cyanobakterier, alger (grønalger og kiselalger), krebsdyr, insekter, fisk og vandplanter). Der er rapporteret NOEC og EC₁₀-værdier på mellem 0,011¹ mg/L til 5,6 mg/L. Den laveste NOEC og EC₁₀ værdi er rapporteret for *Raphidocelis subcapitata*.

¹ Der er både rapporteret en NOEC (vækst) på 0,009 mg/L og en EC₁₀ (vækst) på 0,011 mg/L for samme studie med *Raphidocelis subcapitata*. EC₁₀-værdien anvendes her.

Der foreligger videre både et mesokosmos studie med phytoplankton og zooplankton og et microcosmos studie med 94 plantepilankton taxa, 54 perphyton og 46 zooplankton taxa. Det sidstnævnte studie er tildelt en Klimisch score på 3, og anvendes derfor ikke videre. Phytoplankton udviste den største følsomhed i microcosmos studiet med en NOEC på 0,015 mg/L. Denne NOEC-værdi er dog højere end den laveste værdi for testene med alger, krebsdyr og fisk.

4.2 Toksicitet over for sedimentlevende organismer

Der er kun rapporteret ét studie for en sedimentlevende organisme, *Chironomus riparius*, i KEMI (2006), EFSA (2007) og APVMA (2007). Studiet er en 25-dages kronisk undersøgelse, der resulterede i en NOEC_{vand-sediment} på 1,25 mg/L og en LOEC_{vand-sediment} på 2,50 mg/L baseret på fremkomsten og udviklingshastigheden af de sedimentboende larver. Studiet har fået en Klimisch score på 1 som følge af, at studiet har fulgt en draft OECD guideline og er et GLP studie. Det totale organiske karbon indhold (TOC) i sedimentet er angivet til 2,2 % (KEMI 2006). Sedimentkoncentrationen blev målt ved to af testkoncentrationerne (ved LOEC på 2,5 mg as/L og ved den højeste testkoncentration på 10 mg as/L), men ikke ved NOEC-koncentrationen på 1,25 mg/L. Forkortelsen "as" står for aktivstof.

NOEC_{vand-sediment} kan eventuelt omregnes til en sedimentkoncentration ved antagelse om ligevægt mellem vandkoncentrationen og sedimentkoncentrationen. Jævnfør TGD side 102-103 (EU 2018) kan det således beregnes:

Sediment-vand fordelingskoefficienten:

$$K_{\text{sed-water}} = F_{\text{water}_{\text{sed}}} + F_{\text{solid}_{\text{sed}}} \times (F_{\text{oc}_{\text{sed}}} \times K_{\text{OC}}) / 1000 \times \text{RHO}_{\text{solid}}$$

Hvor,

$F_{\text{water}_{\text{sed}}}$ er volumenbrøken af vand i sediment (0,8),

$F_{\text{solid}_{\text{sed}}}$ er volumenbrøken af fast stof (0,2),

$F_{\text{oc}_{\text{sed}}}$ er det organiske kulstofindhold i sedimentet (0,022),

K_{OC} er organisk kulstof vandfordelingskoefficienten for stoffet (1367 L/kg)

$\text{RHO}_{\text{solid}}$ er densiteten af faststof (2500 kg/m³), dvs.

$$K_{\text{sed-water}} = 0,8 + 0,2 \times (0,022 \times 1367) / 1000 \times 2500 = 15,837 \text{ m}^3/\text{m}^3$$

Herefter omregnes NOEC_{vand-sediment} til en sediment koncentration, hvor vådvægtensiteten af sediment, RHO_{sed} er 1300 kg vådvægt/m³:

$$\begin{aligned} \text{NOEC}_{\text{sediment}} &= (K_{\text{sed-water}} / \text{RHO}_{\text{sed}}) \times \text{NOEC}_{\text{vand-sediment}} \times 1000 \\ &= (15,837 \text{ m}^3/\text{m}^3 / 1300 \text{ kg}/\text{m}^3) \times 1,25 \text{ mg}/\text{L} \times 1000 \text{ L}/\text{m}^3 = 15,23 \text{ mg}/\text{kg} \text{ vådvægt} \\ &= 15,23 \text{ mg}/\text{kg} \text{ vådvægt} \times 2,6 \text{ kg} \text{ vådvægt}/\text{kg} \text{ tørvægt} = 40 \text{ mg}/\text{kg} \text{ tørvægt} \end{aligned}$$

Det noteres, at den beregnede NOEC-værdi er væsentligt højere, end de målte koncentrationer i sedimentet ved fx testkoncentrationen på 2,5 mg/L, hvor der blev målt en koncentration i sedimentet på 0,27 mg/kg tørstof (dag 0), 2,63 mg/kg tørstof (dag 7) og 3,37 mg/kg tørstof (dag 25). Den voksende koncentration i sedimentet med eksponeringstiden antyder, at en ligevægt i sedimentet ikke opnås momentant (KEMI 2006).

Derfor vurderes det samlet, at denne test ikke kan anvendes til afledning af kvalitetskriterium for sediment, da eksponeringskoncentrationen i sedimentet under testen ikke kendes.

4.3 Toksicitet over for pattedyr og fugle

Der er anført en del toksicitetsstudier over for pattedyr i EFSA (2007). Det har desværre ikke været muligt at få adgang til selve studierne, men da studierne har været vurderet og accepteret af RMS, er det vurderet tilstrækkeligt til også at anvende disse ved fastsættelse af kvalitetskriteriet for biota. De fundne data er angivet i Tabel 4.1. Den værdi, der anvendes til afledning af biotakvalitetskriteriet, er markeret med fed.

Tabel 4.1. Toksicitet over for pattedyr (EFSA 2007). (as: aktivstoffet prosulfocarb)

Art	Form	Varighed	Effekter	Endpoint	Bemærkning	Klimisch score
Rotte	as	90 dage	Reduceret kropsvægt, vægtøgning og reduceret fødeforbrug. Målorganer ved højere doser: lever, nyrer. Kolinerge virkninger.	NOAEL: 1 mg/kg lgv/dag	Korttidsstudie	2 (accepteret af RMS)
Hund	as	90 dage	Reduceret kropsvægt og vægtøgning. Målorganer ved højere doser: lever, nyrer og knoglemarv. Hæmatolytisk anæmi forbundet med histopatologiske ændringer i milten.	NOAEL: 30 mg/kg lgv/dag	Korttidsstudie	2 (accepteret af RMS)
Rotte	as	2 år	Reduceret vægtøgning.	NOAEL: 0,5 mg/kg lgv/dag	Langtidsstudie	2 (accepteret af RMS)
Mus	as	18 måneder	Reduceret vægtøgning.	NOAEL: 269 mg/kg lgv/dag	Langtidsstudie	2 (accepteret af RMS)

Der er anført toksicitetsstudier over for fugle i EFSA (2007). Det har ikke været muligt at få adgang til studierne, så vurderingerne er alene baseret på RMS's vurderinger. De fundne data er angivet i Tabel 4.2. Den værdi, der anvendes til afledning af biotakvalitetskriteriet, er markeret med fed.

Tabel 4.2. Toksicitet over for fugle (EFSA 2007). (as: aktivstoffet prosulfocarb)

Art	Form	Varighed	Effekter	Endpoint	Bemærkning	Klimisch score
Botwhite Quail (<i>Colinus virginianus</i>)	as	14 dage	Mortalitet	LD ₅₀ >2250 mg/kg lgv/dag	Akut studie	Er ikke vurderet - anvendes ikke.
Gråand (<i>Anas platyrhynchos</i>)	as	?	Mortalitet	LD ₅₀ >1506 mg/kg lgv/dag	Akut studie	Er ikke vurderet - anvendes ikke.
Gråand (<i>Anas platyrhynchos</i>)	as	20 uger	Reproduktion	NOEL: 131 mg/kg lgv/dag	Langtidsstudie	2 (accepteret af RMS)

4.4 Toksicitet over for mennesker

Jævnfør EFSA (2007) er der afledt en ADI på 0,005 mg/kg lgv/dag, baseret på et 2-årige rottestudie med en NOAEL på 0,5 mg/kg lgv/dag, og ved brug af en usikkerhedsfaktor på 100.

5 Andre effekter

Det er vurderet at prosulfocarb ikke har andre relevante effekter.

6 Udledning af vandkvalitetskriterium

Kvalitetskriterierne er fastsat i overensstemmelse med EU's Guidance Document no. 27: Technical Guidance Document (TGD) for Deriving Environmental Quality Standards (EU, 2018).

6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der er næsten tilstrækkelige data og taksonomiske grupper nok repræsenteret til at anvende SSD (Species Sensitivity Distribution) metoden, som jf. TGD (EU 2018) kræver minimum 10 forskellige arter fordelt på minimum 8 taksonomiske grupper. Der er data for 11 arter fordelt på syv taksonomiske grupper. Derfor anvendes både SSD metoden og den deterministiske metode med anvendelse af usikkerhedsfaktorer til udledning af vandkvalitetskriterier for prosulfocarb.

6.1.1 Deterministiske metode

Det kroniske datasæt for ferskvand består af eksperimentelle data fra langtidstest på de syv taksonomiske grupper: cyanobakterier, alger (grønalger og kiselalger), krebsdyr, insekt, fisk og vandplanter.

For det akutte datasæt udviser algerne den største følsomhed med den laveste E_rC_{50} på 0,086 mg/L for grønalg *Desmodesmus subspicatus*, mens krebsdyr og fisk viser sammenlignelig følsomhed. Ligeledes viser alger den største følsomhed i de kroniske test, hvor den laveste kroniske EC_{10} -værdi på 0,011 mg/L for *Raphidocelis subcapitata* anvendes til afledning af $VKK_{\text{ferskvand}}$. Da der er eksperimentelle data fra langtidstest fra både alger, krebsdyr og fisk kan der jf. vejledningen (EU 2018) anvendes en usikkerhedsfaktor på 10. Herved beregnes VKK for ferskvand:

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 0,011 \text{ mg/L} / 10 = 0,0011 \text{ mg/L} = 1,1 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Da der ikke er fundet testdata for saltvandsorganismer, afledes vandkvalitetskriteriet for saltvand iflg. TGD (EU 2018) ved brug af en højere UF (100) på de samme ferskvandsdata.

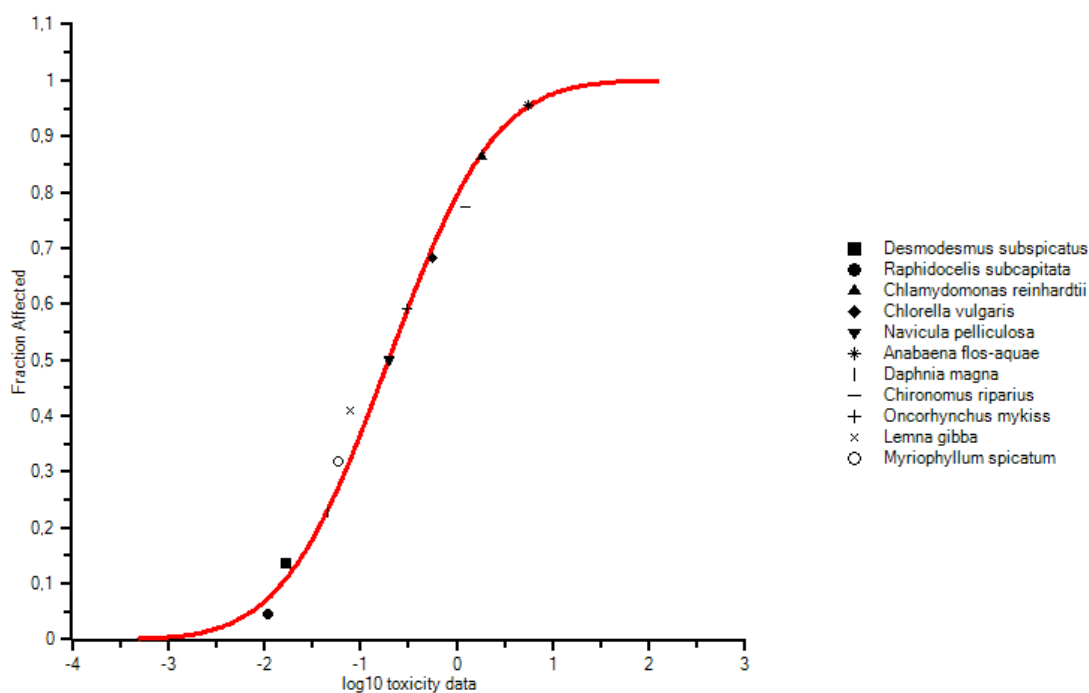
Herved beregnes VKK for saltvand:

$$VKK_{\text{saltvand}} = 0,011 \text{ mg/L} / 100 = 0,00011 \text{ mg/L} = 0,11 \text{ } \mu\text{g/L}$$

6.1.2 SSD metoden

De toksicitetsværdier, der indgår i artsfordelingsanalysen (SSD-analysen) er markeret med fed i bilag A. SSD-analysen er udført i programmet ETX v. 2.3 fra 2017 udviklet af RIVM. SSD-analysen ses i figur 6.1 og resultaterne af analysen er beskrevet nedenfor.

SSD Graph



Figur 6.1 SSD-analyse af kronisk toksicitet for ferskvandsorganismer.

HC₅ = 0,0067 mg/L = 6,7 µg/L, med en nedre 90 % konfidensgrænse på 0,72 µg/L og en øvre på 24,71 µg/L.

Standardafvigelsen for de log₁₀ transformerede data er 0,86.

Alle tre "goodness of fit" test (Anderson-Darling, Kolmogorov-Smirnov og Kramer von Mises) i ETX accepterer at data er log_{normal} fordelt ved alle signifikans niveauer.

Jf. TGD (EU 2018) er udgangspunktet for valg af usikkerhedsfaktor til bestemmelse af VKK for ferskvand en faktor 5. Da antallet af taksonomiske grupper ikke helt er opfyldt i henhold til TGD (EU 2018) og SD > 0,5, kan der argumenteres for at hæve usikkerhedsfaktoren til en faktor 6.

Herved beregnes VKK for ferskvand:

$$VKK_{\text{ferskvand}} = 6,7 \mu\text{g/L} / 6 = 1,1 \mu\text{g/L}$$

Da der ikke er fundet testdata for saltvandsorganismer, afledes vandkvalitetskriteriet for saltvand derfor iflg. TGD (EU 2018) ved brug af en ekstra usikkerhedsfaktor på 10 på samme ferskvandsdata.

Herved beregnes VKK for saltvand:

$$VKK_{\text{saltvand}} = 6,7 \mu\text{g/L} / 6 / 10 = 0,11 \mu\text{g/L}$$

Resultaterne for SSD-analysen er ens med resultaterne for den deterministiske metode.

6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Det akutte datasæt for ferskvand består af eksperimentelle data fra korttidstest på de seks taksonomiske grupper: cyanobakterier, alger (grønalger og kiselalger), krebsdyr, fisk og vandplanter.

For akut giftighed for ferskvandsorganismer er den højeste giftighed fundet for alger med en E_rC_{50} på 0,086 mg/L for grønalgen *Desmodesmus subspicatus*.

Jævnfør TGD (EU 2018) skal der anvendes en usikkerhedsfaktor på 100 på den laveste $E(L)C_{50}$ -værdi ved data tilgængeligt for korttidstest på mindst tre trofiske niveauer: fisk, krebsdyr og alger. Der er mulighed for at ændre denne til 10, hvis standardafvigelsen på de \log_{10} transformerede data for de forskellige arter er mindre end 0,5 eller stoffet har en kendt virkemekanisme og hvis den mest følsomme gruppe er inkluderet i datasættet. Da prosulfocarb er et herbicid med kendt virkemekanisme, vil det forventes, som det også er observeret, at alger og vandplanter vil være de mest følsomme grupper. Derfor vurderes det, at det er acceptabelt at anvende en usikkerhedsfaktor på 10 på den lavest EC_{50} -værdi. Herved beregnes KVKK for ferskvand:

$$KVKK_{\text{ferskvand}} = 0,086 \text{ mg/L} / 10 = 0,0086 \text{ mg/L} = 8,6 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Der er ikke fundet testdata for saltvandsorganismer, hvorved korttidsvandkvalitetskriteriet for saltvand udledes fra samme E_rC_{50} på 0,086 mg/L for ferskvandsalger. Jf. TGD (EU 2018) da stoffets virkemekanisme er kendt, og der er testdata for den mest følsomme gruppe, anvendes der en usikkerhedsfaktor på 100 på den laveste $E(L)C_{50}$ -værdi ved data tilgængelige for korttidstest på mindst tre trofiske niveauer: fisk, krebsdyr og alger. Herved beregnes KVKK for saltvand:

$$KVKK_{\text{saltvand}} = 0,086 \text{ mg/L} / 100 = 0,00086 \text{ mg/L} = 0,86 \text{ } \mu\text{g/L}$$

6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

Jævnført TGD (EU 2018) er det relevant at udlede et sedimentkvalitetskriterie for et stof, når $\log K_{ow} \geq 3$ eller $\log K_{oc} \geq 3$.

Da prosulfocarb har en K_{oc} på 1367 L/kg, svarende til en $\log K_{oc}$ på 3,14, er det relevant at udlede et sedimentkvalitetskriterie for prosulfocarb.

Der er ét enkelt troværdigt studie med en sedimentlevende organisme tilgængeligt, *Chironomus riparius*, (25 dage) med spiket sediment med en rapporteret $NOEC_{\text{vand}}$ på 1,25 mg as/L (nominel) (Schmidt (2004) refereret i KEMI (2006)). Dette studie blev dog vurderet til ikke at være egnet til en afledning af et sedimentkvalitetskriterium (se afsnit 4.2).

Da der ikke er andre tilgængelige data for toksiciteten af prosulfocarb for sedimentlevende organismer, bestemmes toksiciteten for sedimentlevende organismer derfor ved hjælp af ligevægtsberegning ud fra toksiciteten i vandmiljøet, jævnfør EqP-metoden angivet i TGD (EU 2018). Til brug for udledning af sedimentkvalitetskriterier anvendes de udledte

vandkvalitetskriterier for fersk- og saltvand, som begge er baseret på tilgængelige data for den mest følsomme organisme i vandmiljøet, samt K_{OC} på 1367 L/kg.

For et EU standard sediment med et indhold på 5 % organisk karbon (OC) bliver fordelingskoefficienten mellem fast stof og vand, $K_{p_{sed}} = F_{OC_{sed}} \times K_{OC} = 0,05 \times 1367 \text{ L/kg} = 68,35$, og fordelingskoefficienten mellem sediment og vand, $K_{sed-water}$ kan dermed beregnes jf. s. 103 i TGD (EU 2018):

$$K_{sed-water} = F_{air_{sed}} \times K_{air-water} + F_{water-sed} + F_{solid-sed} \times (K_{p_{sed}} / 1000) \times RHO_{solid} \\ = 0 \times 0,8 + 0,2 \times (68,35 / 1000) \times 2500 = 34,18 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$$

Der næst kan SKK for fersk- og saltvand bestemmes på baggrund af nedenstående formler (side 104 i TGD), hvor vådvægtensiteten af sediment, RHO_{sed} er 1300 kg vådvægt/ m^3 (side 103 i TGD):

$$SKK_{ferskvand} = (K_{sed-water} / RHO_{sed}) \times VKK_{ferskvand} \times 1000 \\ = (34,18 \text{ m}^3/\text{m}^3 / 1300 \text{ kg/m}^3) \times 0,0011 \text{ mg/L} \times 1000 = 0,029 \text{ mg/kg vådvægt} = 29 \\ \mu\text{g/kg vådvægt} \\ = 29 \mu\text{g/kg vådvægt} \times 2,6 \text{ kg vådvægt/kg tørvægt} = 75,4 \mu\text{g/kg tørvægt}$$

$$SKK_{saltvand} = (K_{sed-water} / RHO_{sed}) \times VKK_{saltvand} \times 1000 \\ = (34,18 \text{ m}^3/\text{m}^3 / 1300 \text{ kg/m}^3) \times 0,00011 \text{ mg/L} \times 1000 = 0,0029 \text{ mg/kg vådvægt} = 2,9 \\ \mu\text{g/kg vådvægt} \\ = 2,9 \mu\text{g/kg vådvægt} \times 2,6 \text{ kg vådvægt/kg tørvægt} = 7,5 \mu\text{g/kg tørvægt}$$

Omregning fra vådvægt til tørvægt af sediment er foretaget med $CONV_{sed} = 2,6$ jf. TGD (side 104).

Baseret på OC er de endelige sedimentkvalitetskriterier:

$$SKK_{ferskvand} = 75,4 \mu\text{g/kg tørvægt (5 \% OC)} \\ = 1508 \mu\text{g/kg tørvægt} \times f_{oc}$$

$$SKK_{saltvand} = 7,5 \mu\text{g/kg tørvægt (5 \% OC)} \\ = 150 \mu\text{g/kg tørvægt} \times f_{oc}$$

Anvendelse af EqP-metoden er behæftet med betydelig usikkerhed og ovenstående SKK-værdier bør derfor anvendes som indikative eller foreløbige værdier, indtil de kan verificeres ud fra eksperimentelle endpoints baseret på test med sedimentlevende organismer.

6.4 Kvalitetskriterium for biota, sekundær forgiftning ($BKK_{sek. forgiftn.}$)

Prosulfocarb har en estimeret $\log K_{ow}$ på >3 (4,23 jf. afsnit 2) og en $BCF_{fisk} >100$ (jf. afsnit 3.2) og dermed udledes et $BKK_{sek. forgiftn.}$, jf. TGD (EU 2018).

Der er rapporteret en NOAEL på 0,5 mg/kg lgv/dag i et 2-årigt rottestudie (se afsnit 4.3), samt en NOEL (reproduktion) på 131 mg/kg lgv/dag i et 20 ugers studie med gråand (*Anas platyrhynchos*) (se afsnit 4.3). Disse to værdier anvendes til at udlede biotakriteriet, hvorefter den laveste af de herved afledte værdier anvendes til endelig fastsættelse af biotakriteriet.

Pattedyr

Energiindholdet normaliseres jf. TGD (EU 2018) – metode A (afsnit 4.4.5.1), hvor formlen for pattedyr anvendes for at finde et dyrs, i dette tilfælde en rottes, daglige energi-konsum via føde:

$$\text{Log DEE [kJ/d]} = 0,8136 + 0,7149 \times \log (\text{lgv (g)})$$

Da der ikke er adgang til studierapporten for testen, er en gennemsnitlig vægt for en voksen rotte på 250 g anvendt:

$$\text{Log DEE [kJ/d]} = 0,8136 + 0,7149 \times \log (250 \text{ g}) = 2,53$$

$$\text{DEE [kJ/d]} = 10^{2,53} = 338,8 \text{ kJ/d}$$

Herefter anvendes rottens daglige energiforbrug via indtaget af føde per dag, legemsvægt (kg) og NOAEL-værdien (0,5 mg/kg lgv/dag) til at beregne den energi-normaliserede koncentration:

$$\begin{aligned} \text{Konc}_{\text{energinormaliseret}} &= \text{dosis} \times (\text{lgv} / \text{DEE}) \\ &= 0,5 \text{ mg/kg lgv/dag} \times (0,250 \text{ kg lgv} / 338,8 \text{ kJ/dag}) = 0,00037 \text{ mg/kJ} \end{aligned}$$

Værdien omregnes herefter til en koncentration i musling, da prosulfocarb ikke forventes at biomagnificere i fødekæden. Værdien omregnes også til en koncentration i fisk, da der jf. afsnit 3.2. kun er BCF-værdier tilgængelig for fisk.

Jf. Tabel 7 i TGD (EU 2018) angives et energiindhold for musling på 19 kJ/g tørvægt og et vandindhold på 92%. Ligeledes angives et energiindhold for fisk på 21 kJ/g tørvægt og et vandindhold på 74% og koncentrationen i fødeemnerne beregnes ud fra følgende formel:

$$\text{Konc}_{\text{fødeemne}} (\text{mg/kg vådvægt}) = \text{Konc}_{\text{energinormaliseret}} (\text{mg/kJ}) \times \text{Energiindhold} (\text{mg/kg tørvægt}) \times (1 - \text{vandindhold})$$

For musling og fisk resulterer det i nedenstående koncentrationer:

$$\text{Konc}_{\text{fødeemne, musling}} = 0,00037 \text{ mg/kJ} \times 19000 \text{ mg/kg tørvægt} \times (1 - 0,92) = 0,56 \text{ mg/kg vådvægt musling}$$

$$\text{Konc}_{\text{fødeemne, fisk}} = 0,00037 \text{ mg/kJ} \times 21000 \text{ kJ/kg tørvægt} \times (1 - 0,74) = 2,02 \text{ mg/kg vådvægt fisk}$$

Det anvendte 2-årige rottestudie betragtes som et kronisk studie ifølge TGD (EU 2018). Dermed skal der anvendes en usikkerhedsfaktor på 1 for omregning til livstidstoksicitet (Tabel 9 i EU 2018). Ydermere, da der ved udledning af kriteriet foreligger to kroniske toksicitetsværdier fra relevante studier, anvendes den højeste usikkerhedsfaktor på 10, jf. tabel 10, s. 89 i TGD (EU 2018) for at tage højde for ekstrapolering fra laboratorie studie til forskellige beskyttelsesniveauer. Følgende koncentrationer foreslås som kriterie for fisk og musling:

$$\text{BKK}_{\text{sek.forgiftn. musling, pattedyr}} = 0,56 \text{ mg/kg vådvægt musling} / 1 / 10 = 0,056 \text{ mg/kg vådvægt musling}$$

$$\text{BKK}_{\text{sek.forgiftn, fisk, pattedyr}} = 2,02 \text{ mg/kg vådvægt fisk} / 1 / 10 = 0,20 \text{ mg/kg vådvægt fisk}$$

Fugle

Energiindholdet normaliseres jf. TGD (EU 2018) – metode A (afsnit 4.4.5.1), hvor formelen for fugle anvendes for at finde et dyrs, i dette tilfælde en gråands, daglige energi-konsum via føde:

$$\text{Log DEE [kJ/d]} = 1,032 + 0,6760 \times \log (\text{lgv (g)})$$

Da der ikke er adgang til studierapporten for testen, er en gennemsnitlig vægt for en voksen gråand på 1082,0 g (Crocker 2002) anvendt:

$$\text{Log DEE [kJ/d]} = 1,032 + 0,6760 \times \log (1082 \text{ g}) = 3,08$$

$$\text{DEE [kJ/d]} = 10^{3,08} = 1202,3 \text{ kJ/d}$$

Herefter anvendes fuglens daglige energiforbrug via indtaget af føde per dag, legemsvægt (kg) og NOEL-værdien (131 mg/kg lgv/dag) til at beregne den energi-normaliserede koncentration:

$$\begin{aligned} \text{Konc}_{\text{energinormaliseret}} &= \text{dosis} \times (\text{lgv} / \text{DEE}) \\ &= 131 \text{ mg/kg lgv/dag} \times (1,082 \text{ kg lgv} / 1202,3 \text{ kJ/dag}) = 0,118 \text{ mg/kJ.} \end{aligned}$$

Værdien omregnes herefter til en koncentration i musling, da prosulfocarb ikke forventes at biomagnificere i fødekæden. Værdien omregnes også til en koncentration i fisk, da der jf. afsnit 3.2. kun er BCF-værdier tilgængelig for fisk.

Jf. Tabel 7 i TGD (EU 2018) angives et energiindhold for musling på 19 kJ/g tørvægt og et vandindhold på 92%. Ligeledes angives et energiindhold for fisk på 21 kJ/g tørvægt og et vandindhold på 74% og koncentrationen i fødeemnerne beregnes ud fra følgende formel:

$$\text{Konc}_{\text{fødeemne}} (\text{mg/kg vådvægt}) = \text{Konc}_{\text{energinormaliseret}} (\text{mg/kJ}) \times \text{Energiindhold} (\text{mg/kg tørvægt}) \times (1 - \text{vandindhold})$$

For musling og fisk resulterer det i nedenstående koncentrationer:

$$\text{Konc}_{\text{fødeemne, musling}} = 0,118 \text{ mg/kJ} \times 19000 \text{ mg/kg tørvægt} \times (1 - 0,92) = 179 \text{ mg/kg vådvægt musling}$$

$$\text{Konc}_{\text{fødeemne, fisk}} = 0,118 \text{ mg/kJ} \times 21000 \text{ kJ/kg tørvægt} \times (1 - 0,74) = 644 \text{ mg/kg vådvægt fisk}$$

Det anvendte 20 ugers fuglestudie betragtes som et kronisk studie. Jf. Tabel 9 i TGD (EU 2018) skal der anvendes en usikkerhedsfaktor på 1 for omregning af et kronisk studie til livstidstoksicitet. Ydermere, anvendes den højeste usikkerhedsfaktor på 10, jf. tabel 10, s. 89 i TGD (EU 2018) for at tage højde for ekstrapolering fra laboratorie studie til forskellige beskyttelsesniveauer. Følgende koncentrationer foreslås som kriterie for fisk og musling:

$$\text{BKK}_{\text{sek.forgiftn. musling, fugle}} = 179 \text{ mg/kg vådvægt musling} / 1 / 10 = 17,9 \text{ mg/kg vådvægt musling}$$

$$\text{BKK}_{\text{sek.forgiftn, fisk, fugle}} = 644 \text{ mg/kg vådvægt fisk} / 1 / 10 = 64,4 \text{ mg/kg vådvægt fisk}$$

Forslag til BKK_{sek. forgiftn.}

Da studiet for pattedyr resulterer i de laveste BKK for sekundær forgiftning, foreslås BKK_{sek. forgiftn.} for prosulfocarb til:

$BKK_{\text{sek. forgiftn., musling}} = 0,056 \text{ mg/kg vådvægt musling}$

$BKK_{\text{sek. forgiftn., fisk}} = 0,20 \text{ mg/kg vådvægt fisk}$

6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Kriterier for, hvorvidt der skal beregnes et kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK) fremgår af TGD (EU 2018), afsnit 2.4.3.2.

Prosulfocarb har følgende relevante harmoniserede klassificeringer under CLP-reguleringen (EC) No. 1272/2008: Acute Tox. 4, H302 (farlig ved indtagelse), samt Skin sens. 1, H317 (kan forårsage en allergisk hudreaktion).

Der er, som tidligere nævnt, afledt en ADI på 0,005 mg/kg lgv/dag, baseret på et 2-årigt rottestudie med en NOAEL på 0,5 mg/kg lgv/dag, og ved brug af en usikkerhedsfaktor på 100.

Jf. TGD (EU 2018, afsnit 4.5.3) anvendes en standard allokeringfaktor på 20 % og en antagelse om at en gennemsnitsborger på 70 kg indtager 115 g fisk og skaldyr pr. dag, svarende til et dagligt indtag på 0,00163 kg fisk/lgv til bestemmelse af HKK:

$$\begin{aligned} \text{HKK} &= (0,2 \times TL_{\text{hh}} \text{ (mg/kg lgv/dag)}) / 0,00163 \\ &= (0,2 \times 0,005 \text{ (mg/kg lgv/dag)}) / 0,00163 = 0,61 \text{ mg/kg fiskeriprodukt, vådvægt} \end{aligned}$$

6.6 Vandkvalitetskriterium baseret på BKK_{sek. forgiftn.} og HKK

Jf. TGD (EU, 2018) skal der laves en tilbageregning fra biotakvalitetskriterierne (BKK_{sek. forgiftn.} og HKK) til en vandkoncentration, for at se om vandkriteriet sat for direkte effekter, også beskytter for sekundær forgiftning gennem fødekæden, samt beskytter mod forgiftning ved human konsum af fiskeriprodukter.

HKK (0,61 mg/kg vådvægt) er højere end BKK_{sek. forgiftn., fisk} (0,20 mg/kg vådvægt fisk) og BKK_{sek. forgiftn., musling} (0,056 mg/kg vådvægt musling), og den laveste værdi anvendes i tilbageregningen til en vandkoncentration. I dette tilfælde er den laveste værdi BKK_{sek. forgiftn.} for musling, men da der ikke er fundet BCF-værdier for musling er det ikke muligt at tilbageregne denne til en tilsvarende vandkoncentration.

Ifølge målingerne af BCF for prosulfocarb (afsnit 3.2) falder BCF tilsyneladende med koncentrationen i vand. De gennemsnitlige målte BCF-værdier for regnbueørred er 480-1100 L/kg (gennemsnit: 790 L/kg) ved en testkoncentration på 0,05 mg/L og 230-700 L/kg (gennemsnit 465 L/kg) ved en testkoncentration på 0,005 mg/L. Ved en koncentration omkring VKK_{ferskvand} (0,0011 mg/L) vil det være rimeligt at antage en BCF på 465 L/kg.

Der er ingen data for biomagnificeringen af prosulfocarb, men da BCF er under 2000, kan BMF_{fisk} og $BMF_{\text{b,m}}$ begge sættes til 1 jf. Tabel 22 i TGD (EU 2018).

Ved tilbageregning, og ved anvendelse af gennemsnittet af de målte BCF på 465, beregnes et vandkvalitetskriterium baseret på $BKK_{\text{sek.forgiftn., fisk}}$ til:

$$BKK_{\text{vand, fisk}} = 0,20 \text{ mg/kg vådvægt fisk} / 465 \text{ L/kg} = 0,00043 \text{ mg/L} = 0,43 \text{ }\mu\text{g/L}$$

Denne $BKK_{\text{vand, fisk}}$ noteres at være på niveau, men under det fastsatte vandkvalitetskriterie for ferskvand, $VKK_{\text{ferskvand}}$ på 1,1 $\mu\text{g/L}$, men over det fastsatte vandkvalitetskriterium for saltvand, VKK_{saltvand} på 0,11 $\mu\text{g/L}$.

Det vurderes, at der ikke er behov for at justere $VKK_{\text{ferskvand}}$ på baggrund af den lavere beregnede værdi for BKK_{vand} , da usikkerheden ved BCF-værdien for prosulfocarb er betydelig, som følge af den observerede koncentrationsafhængighed af BCF. Det kan derved også antages, at den anvendte BCF på 465 L/kg fundet ved en testkoncentration på 0,005 mg/L vil være højere end BCF ved en koncentration på 0,0011 mg/L ($VKK_{\text{ferskvand}}$), som ville kunne resultere i en $BKK_{\text{vand, fisk}}$ tættere på $VKK_{\text{ferskvand}}$. Derfor vurderes det samlet, at de foreslåede vandkvalitetskriterier, også vil beskytte sekundær forgiftning af biota og human konsum.

7 Konklusion

Følgende kvalitetskriterier for vandmiljøet er udregnet for prosulfocarb:

Vandkvalitetskriterium

VKK _{ferskvand}	1,1 µg/l
VKK _{saltvand}	0,11 µg/l

Korttidsvandkvalitetskriterium

KVKK _{ferskvand}	8,6 µg/l
KVKK _{saltvand}	0,86 µg/l

Sedimentkvalitetskriterium

SKK _{ferskvand}	75,4 µg/kg tørvægt (5% OC)* 1508 µg/kg tørvægt x f _{oc}
SKK _{saltvand}	7,5 µg/kg tørvægt (5% OC)* 150 µg/kg tørvægt x f _{oc}

Biotakvalitetskriterium, sekundær forgiftning

BKK _{sek.forgiftn., fisk}	0,20 mg/kg vådvægt fisk
BKK _{sek.forgiftn., musling}	0,056 mg/kg vådvægt musling

Biotakvalitetskriterium, human konsum

HKK	0,61 mg/kg føde vådvægt
-----	-------------------------

*SKK-værdierne ovenfor er grundet beregningsmetoden behæftet med betydelig usikkerhed og bør derfor kun anvendes som indikative værdier.

8 Referencer

Australian Pesticides and Veterinary Medicines Authority (APVMA) (2007). Evaluation of the new active PROSULFOCARB in the product BOXER GOLD HERBICIDE. December 2007. Public Release Summary

Crocker D., Hart A. Gurney J., McCoy C. (2002). Project Pn0908: Methods For Estimating Daily Food Intake Of Wild Birds And Mammals. Final report. DEFRA, Department for Environment, Food & Rural Affairs https://www.hse.gov.uk/pesticides/resources/R/Research_PN0908.pdf

ECHA ED Assessment (2021). <https://echa.europa.eu/da/ed-assessment>

ECHA (2008): Guidance on information requirements and chemical safety assessment, Chapter R.7b: Endpoint specific guidance, version 1.1. Maj 2008.

EFSA (2006). Draft Assessment Report - public version- Initial risk assessment provided by the rapporteur Member State Sweden for the existing active substance Prosulfocarb of the third stage (part A) of the review programme referred to in Article 8(2) of Council Directive 91/414/EEC Volume 3, Annex B, B.9 March 2006.

EFSA (2007). Conclusion of DAR Conclusion regarding the peer review of the pesticide risk assessment of the active substance prosulfocarb finalised: 27 July 2007 (version of 3 August 2007 with minor editorial changes in the list of endpoints).

Ellgehausen H. (1986), Acute Toxicity of SC-0574 to *Scenedesmus subspicatus* (OECD: Algae Growth Inhibition Test), Research Consulting Company Ag. Unpublished Report No. RCC 056698.

EPI Suite (2021), December 2021. EPI-Suite calculation (EPIWEB version 4.1 US-EPA).

EU (2000). Europa-Parlamentets og Rådets Direktiv 2000/60/EF om fastsættelse af en ramme for fællesskabets vandpolitiske foranstaltninger af 23. oktober 2000.

EU (2008). ECHA: Guidance on information requirements and chemical safety assessment Chapter R.10: Characterisation of dose [concentration]-response for environment (https://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r10_en.pdf/bb902be7-a503-4ab7-9036-d866b8ddce69)

EU (2018). Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). Guidance Document No. 27. Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards. <https://circabc.europa.eu/sd/a/ba6810cd-e611-4f72-9902-f0d8867a2a6b/Guidance%20No%2027%20-%20Deriving%20Environmental%20Quality%20Standards%20-%20version%202018.pdf>

EU (2022). Pesticides. Maximum Residue Levels: Annexes II, III, IV, VII, Regulation 396/2005/EC, last amended by Regulation (EU) 2022/93, OJ L 16 of 25 January 2022

Juckeland (2013): Report no.: 13 10 48 018 W; UBA-internal code: 87702)

KEMI (2006): Draft Assessment Report (DAR), Volume 3, Annex B9

Klimisch, H., Andreae, M. & Tillmann, U. (1997). A systematic approach for evaluating the quality of experimental toxicological and ecotoxicological data. Regul. Toxicol. Pharm., 25, 1-5.

Miljøstyrelsen (2004). Principper for fastsættelse af vandkvalitetskriterier for stoffer i overfladevand. Vejledning fra Miljøstyrelsen nr. 4, 2004.

Liedtke (2012): Report no.: D46895; UBA-internal code: 82902

NZ EPA (2020): SCIENCE MEMO. APP203736 – Boxer Gold.

https://www.epa.govt.nz/assets/FileAPI/hsno-ar/APP203736/APP203736_Science_Memorandum_Revised-23-June-2020.pdf

Sacker, 2008; UBA-internal code: 75716; Test item: Prosulfocarb Technical)

Schmidt T (2004), Effects of Prosulfocarb technical on the development of sediment-dwelling larvae of *Chironomus riparius* in a water-sediment system, RCC Study No. 854235, RCC Ltd, Itingen, Switzerland, RCC Study No. 854235 (Syngenta Study No. 2031688)

Smyth D. V., Magor S. E., Shillabeer N. (1998), Prosulfocarb: Toxicity to the Freshwater Diatom *Navicula pelliculosa*, Zeneca Brixham Environmental Laboratory, Report No. BL6414/B. Study dates 20 to 23 July 1998.

Smyth D. V., Tapp J. F., Sankey S. A., Stanley, R. D. (1989), Prosulfocarb: Determination of Toxicity of an 80% EC Formulation to the Green Alga (*Selenastrum capricornutum*), Zeneca Brixham Environmental Laboratory, Unpublished Report No. BL/B3634.

Swarbrick, R.H. and Wallace S. J. (2001), Prosulfocarb: Toxicity to the green alga *Chlamydomonas reinhardtii*, AstraZeneca UK Limited unpublished Report No BL7141/B, study dates 20 to 25 August 2001.

UBA (2022): Comments on the draft EQS data sheet for prosulfocarb (CAS 52888-80-9), dated 17.06.2022.

US EPA (2017). EpiSuite beregninger ved EPI Suite, v.11

Wallace S. J. (2001b), Prosulfocarb: Toxicity to the blue green alga *Anabaena flosaquae*, AstraZeneca UK Limited unpublished Report No BL7139/B, study dates 25 to 30 June 2001.

Bilag A

Toksicitet over for vandorganismer (EC₅₀, NOEC, EC_x, PNEC osv.)

Ferskvandsorganismer

Akut toksicitet

Art	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Bemærkning	Reference	Troværdighed (1-4)
Alger Grønalger <i>Desmodesmus subspicatus</i>	as			E _r C ₅₀ (Vækst)	0,086		Sacker, 2008 refereret af UBA (2022)	1-2
<i>Raphidocelis subcapitata</i> (tidligere: <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>)	as	Nej	72 timer	E _b C ₅₀ (Biomasse)	0,049		Volz 2006 refereret i EFSA 2007	2
<i>Raphidocelis subcapitata</i> (tidligere: <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>)		Nej	72 timer	E _r C ₅₀ (Vækst)	0,120		Volz 2006 refereret i EFSA 2007	2
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	as	Ja	96 timer	E _r C ₅₀ (Vækst)	0,113	Afvigelser fra guideline noteret	Ellgehausen H. (1986) refereret i KEMI (2005)	2
<i>Raphidocelis subcapitata</i> (<i>Selenastrum capricornutum</i>)	Form.		96 timer	E _b C ₅₀ (Biomasse)	0,086 (as)		Smyth D. V., Tapp J. F., Sankey S. A., Stanley, R. D. (1989), refereret i KEMI (2005)	2
<i>Raphidocelis subcapitata</i> (<i>Selenastrum capricornutum</i>)	Form.		96 timer	E _r C ₅₀ (Vækst)	0,157 (as)		Smyth D. V., Tapp J. F., Sankey S. A., Stanley, R. D. (1989), refereret i KEMI (2005)	2

Art	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Bemærkning	Reference	Troværdighed (1-4)
<i>Chlamydomonas reinhardtii</i>	as	Ja	96 timer	E _b C ₅₀ (Biomasse)	3,69		Swarbrick, R.H. and Wallace S. J. (2001), refereret i KEMI (2005)	1
<i>Chlamydomonas reinhardtii</i>	as	Ja	96 timer	E _t C ₅₀ (Vækst)	7,72		Swarbrick, R.H. and Wallace S. J. (2001), refereret i KEMI (2005)	1
<i>Chlorella vulgaris</i>	as	Ja	96 timer	E _b C ₅₀ (Biomasse)	1,54		Wallace S. J. (2001a), refereret i KEMI (2005)	1
<i>Chlorella vulgaris</i>	as	Ja	96 timer	E _t C ₅₀ (Vækst)	8,34		Wallace S. J. (2001a), refereret i KEMI (2005)	1
Kiselalger								
<i>Navicula pelliculosa</i>	as	Ja	72 timer	E _b C ₅₀ (Biomasse)	0,33		Smyth D. V., Magor S. E., Shillabeer N. (1998), refereret i KEMI (2005)	1
<i>Navicula pelliculosa</i>	as	Ja	72 timer	E _t C ₅₀ (Vækst)	0,68		Smyth D. V., Magor S. E., Shillabeer N. (1998), refereret i KEMI (2005)	1
Cyanobakterier								
<i>Anabaena flos-aquae</i>	as	Ja	96 timer	E _b C ₅₀ (Biomasse)	3,77		Wallace S. J. (2001b), refereret i KEMI (2005)	1
<i>Anabaena flos-aquae</i>	as	Ja	96 timer	E _t C ₅₀ (Vækst)	7,48		Wallace S. J. (2001b), refereret i KEMI (2005)	1
Krebsdyr								
Branchiopoda <i>Daphnia magna</i>	as	Ikke angivet	48 timer	EC ₅₀ (Mortalitet)	0,42		EFSA 2007	2

Art	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Bemærkning	Reference	Troværdighed (1-4)
Malacostraca (storkrebs) <i>Asellus sp</i>	as	Ikke angivet	48 timer	EC ₅₀	0,81		Ashwell 2001 refereret i EFSA 2006, NZ EPA 2020	3
Amphipod <i>Hyalella azteca</i>		Ikke angivet	48 timer	EC ₅₀	1,08		Ashwell 2001 refereret i EFSA 2006, NZ EPA 2020	3
Insekt Diptera <i>Chaoborus sp</i>	as	Ikke angivet	48 timer	EC ₅₀	0,79		Ashwell 2001 refereret i EFSA 2006, NZ EPA 2020	3
Døgnfluer <i>Cloeon sp</i>	as	Ikke angivet	48 timer	EC ₅₀	1,41		Ashwell 2001 refereret i EFSA 2006, NZ EPA 2020	3
Fisk Regnbueørred <i>(Oncorhynchus mykiss)</i>	as	Ikke angivet	48 timer	LC ₅₀ (Mortalitet)	0,84		Douglas & Pell 1986 refereret i EFSA 2006, EFSA 2007	2
Bluegill sunfish, <i>(Lepomis macrochirus)</i>	as	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀ (Mortalitet)	2,2		EFSA 2007	2
Almindelige karpe <i>(Cyprinus carpio)</i>	as	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀ (Mortalitet)	1,8		NZ EPA 2020	3
Almindelige karpe <i>(Cyprinus carpio)</i>	as	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀ (Mortalitet)	1,19		NZ EPA 2020	3
Karpefisk <i>(Pimephales promelas)</i>	as	Ikke angivet	96 timer	LC ₅₀ (Mortalitet)	2,3		Peter 2001 refereret i EFSA 2006	3

Art	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Bemærkning	Reference	Troværdighed (1-4)
Planter Andemad (<i>Lemna gibba</i>)	as	Ikke angivet	14 dage	EC ₅₀ (Vækst)	0,69		Smyth <i>et al.</i> 1999 refereret i EFSA 2006, EFSA 2007	2
Andemad (<i>Lemna gibba</i>)	Prosulfoc arb-sulfoxid	Ikke angivet	7 dage	E _r C ₅₀ (væksthastighed)	0,013		Liedtke, 2012, refereret af UBA (2022)	1-2
Andemad (<i>Lemna gibba</i>)	Prosulfoc arb-sulfoxid	Ikke angivet	7 dage	E _y C ₅₀ (udbytte)	0,0028		Liedtke, 2012, refereret af UBA (2022)	1-2
<i>Myriophyllum spicatum</i>	Prosulfoc arb 800 EC	Ikke angivet	14 dage	EC ₅₀ (rodlængde)	0,127		Juckeland, 2013, refereret af UBA (2022)	1-2
<i>Myriophyllum spicatum</i>	Prosulfoc arb 800 EC	Ikke angivet	14 dage	E _r C ₅₀ (væksthastighed)	0,381		Juckeland, 2013, refereret af UBA (2022)	1-2
<i>Myriophyllum spicatum</i>	Prosulfoc arb 800 EC	Ikke angivet	14 dage	E _y C ₅₀ (udbytte)	0,263		Juckeland, 2013, refereret af UBA (2022)	1-2

Ferskvandsorganismer

Kronisk toksicitet

Værdierne markeret med **fed** anvendes i SSD-analyse

	Form/salt	Målt	Varighed	Effekt	Værdi mg/l	Bemærkning	Reference	Troværdighed (1-4)
Alger Grønalger <i>Desmodesmus subspicatus</i>	as			NOEC (vækst)	0,017		Sacker, 2008 refereret af UBA (2022)	1-2
<i>Raphidocelis subcapitata</i> (tidligere: <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>)		Nej	72 timer	E _r C ₁₀ (Vækst)	0,0110		Volz 2006 refereret i EFSA 2007	2
<i>Raphidocelis subcapitata</i> (tidligere: <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>)		Nej	72 timer	NOE _r C (Vækst)	0,009		Volz 2006 refereret i EFSA 2007	2
<i>Raphidocelis subcapitata</i> (<i>Selenastrum capricornutum</i>)	Form.		96 timer	NOE _b C	0,042 (as)		Smyth D. V., Tapp J. F., Sankey S. A., Stanley, R. D. (1989), refereret i KEMI (2005)	2
<i>Raphidocelis subcapitata</i> (<i>Selenastrum capricornutum</i>)	Form.		96 timer	NOE _r C (Vækst)	0,042 (as)		Smyth D. V., Tapp J. F., Sankey S. A., Stanley, R. D. (1989), refereret i KEMI (2005)	2
<i>Chlamydomonas reinhardtii</i>	as	Ja	96 timer	NOE _b C	1,8		Swarbrick, R.H. and Wallace S. J. (2001), refereret i KEMI (2005)	1

<i>Chlamydomonas reinhardtii</i>	as	Ja	96 timer	NOE _r C (Vækst)	1,8		Swarbrick, R.H. and Wallace S. J. (2001), refereret i KEMI (2005)	1
<i>Chlorella vulgaris</i>	as	Ja	96 timer	NOE _b C (Biomasse)	0,56		Wallace S. J. (2001a), refereret i KEMI (2005)	1
<i>Chlorella vulgaris</i>	as	Ja	96 timer	NOE _r C (Vækst)	0,56		Wallace S. J. (2001a), refereret i KEMI (2005)	1
Kiselalger								
<i>Navicula pelliculosa</i>	as	Ja	72 timer	NOE _b C (Biomasse)	0,16		Smyth D. V., Magor S. E., Shillabeer N. (1998), refereret i KEMI (2005)	1
<i>Navicula pelliculosa</i>	as	Ja	72 timer	NOE _r C (Vækst)	0,20		Smyth D. V., Magor S. E., Shillabeer N. (1998), refereret i KEMI (2005)	1
Cyanobakterier								
<i>Anabaena flos-aquae</i>	as	Ja	96 timer	NOE _b C (Biomasse)	5,6		Wallace S. J. (2001b), refereret i KEMI (2005)	1
<i>Anabaena flos-aquae</i>	as	Ja	96 timer	NOE _r C (Vækst)	5,6		Wallace S. J. (2001b), refereret i KEMI (2005)	1
Krebsdyr								
<i>Daphnia magna</i>	as	Nej	21 dage	NOEC (Mortalitet)	0,045		Bätscher 2004 refereret i EFSA 2006, EFSA 2007	2
Insekt								
Diptera								
<i>Chironomus riparius</i>	as	Ja (også i sediment)	25 dage	NOEC	1,25	Vand-sediment system, spiket 2,2% TOC sediment; GLP, Draft OECD 219	Schmidt 2004 refereret i EFSA 2006, NZ EPA 2020, KEMI 2006	1

<i>Chironomus riparius</i>	as	Ikke angivet	28 dage	NOEC	1,3	Vand-sediment system, spiket vand	Sacker 2008 refereret i NZ EPA 2020	3
Fisk Regnbueørred (<i>Oncorhynchus mykiss</i>)	as	Ikke angivet	21 dage	NOEC (Mortalitet og sub-lethale effekter)	0,31		Tapp et al. 1989b refereret i EFSA 2006, EFSA 2007	2
Planter Andemad (<i>Lemna gibba</i>)	as	Ikke angivet	14 dage	NOEC (Vækst)	0,079		Smyth <i>et al.</i> 1999 refereret i EFSA 2006, EFSA 2007	2
Andemad (<i>Lemna gibba</i>)	Prosulfoc arb-sulfoxid	Ikke angivet	7 dage	NOEC (væksthastighed, udbyttet)	0,00058		Liedtke, 2012, refereret af UBA (2022)	1-2
<i>Myriophyllum spicatum</i>	Prosulfoc arb 800 EC	Ikke angivet	14 dage	NOEC (væksthastighed, rodlængde, udbytte)	0,058		Juckeland, 2013, refereret af UBA (2022)	1-2
Microcosmos 94 planteplankton-taxa blev indsamlet, 54 periphyton (chlorophyta dominerende i begge) og 46 zooplankton taxa blev identificeret (hjuldyr dominerende).	as		58 dage	NOEC (Community)	0,015		van Wijngaarden 2006 refereret i EFSA 2007	2
Mesocosmos Studium udført i et hollandsk dige-system. Makrofyter og planteplankton) er dog	as		24 uger ~168 dage	NOAEC	0,076		Arts <i>et al.</i> 2003 refereret i EFSA 2007	3

inkluderet i
undersøgelsen

Saltvandsorganismer

Akut toksicitet

Ingen data fundet.

Saltvandsorganismer

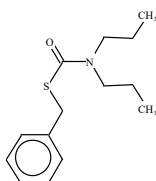
Kronisk toksicitet

Ingen data fundet.

Bilag B

EpiSuite-beregninger

EPI Suite Results For CAS 52888-80-9



SMILES : c1ccccc1CSC(=O)N(CCC)CCC
CHEM : Prosulfocarb
MOL FOR: C14 H21 N1 O1 S1
MOL WT : 251.39

----- EPI SUMMARY (v4.11) -----

Physical Property Inputs:

Log Kow (octanol-water): -----
Boiling Point (deg C) : -----
Melting Point (deg C) : -----
Vapor Pressure (mm Hg) : -----
Water Solubility (mg/L): -----
Henry LC (atm-m³/mole) : -----

Log Octanol-Water Partition Coef (SRC):
Log Kow (KOWWIN v1.68 estimate) = 4.23
Log Kow (Exper. database match) = 4.65
Exper. Ref: TOMLIN,C (1994)

Boiling Pt, Melting Pt, Vapor Pressure Estimations (MPBPVP v1.43):

Boiling Pt (deg C): 368.31 (Adapted Stein & Brown method)
Melting Pt (deg C): 117.45 (Mean or Weighted MP)
VP(mm Hg,25 deg C): 4.83E-005 (Modified Grain method)
VP (Pa, 25 deg C) : 0.00644 (Modified Grain method)
MP (exp database): < 25 deg C
BP (exp database): 129 @ 0.25 mm Hg deg C
VP (exp database): 5.18E-07 mm Hg (6.91E-005 Pa) at 25 deg C

Water Solubility Estimate from Log Kow (WSKOW v1.42):

Water Solubility at 25 deg C (mg/L): 2.484
log Kow used: 4.65 (expkow database)
no-melting pt equation used
Water Sol (Exper. database match) = 13.2 mg/L (20 deg C)
Exper. Ref: TOMLIN,C (1994)

Water Sol Estimate from Fragments:
Wat Sol (v1.01 est) = 5.6852 mg/L

ECOSAR Class Program (ECOSAR v1.11):
Class(es) found:
Thiocarbamates, Mono

Henrys Law Constant (25 deg C) [HENRYWIN v3.20]:
Bond Method : 9.36E-007 atm-m3/mole (9.48E-002 Pa-m3/mole)
Group Method: Incomplete
Exper Database: 1.30E-08 atm-m3/mole (1.32E-003 Pa-m3/mole)
For Henry LC Comparison Purposes:
User-Entered Henry LC: not entered
Henrys LC [via VP/WSol estimate using User-Entered or Estimated values]:
HLC: 6.432E-006 atm-m3/mole (6.517E-001 Pa-m3/mole)
VP: 4.83E-005 mm Hg (source: MPBPVP)
WS: 2.48 mg/L (source: WSKOWWIN)

Log Octanol-Air Partition Coefficient (25 deg C) [KOAWIN v1.10]:
Log Kow used: 4.65 (exp database)
Log Kaw used: -6.275 (exp database)
Log Koa (KOAWIN v1.10 estimate): 10.925
Log Koa (experimental database): None

Probability of Rapid Biodegradation (BIOWIN v4.10):
Biowin1 (Linear Model) : 0.8355
Biowin2 (Non-Linear Model) : 0.9044
Expert Survey Biodegradation Results:
Biowin3 (Ultimate Survey Model): 2.6189 (weeks-months)
Biowin4 (Primary Survey Model) : 3.6836 (days-weeks)
MITI Biodegradation Probability:
Biowin5 (MITI Linear Model) : 0.1047
Biowin6 (MITI Non-Linear Model): 0.1111
Anaerobic Biodegradation Probability:
Biowin7 (Anaerobic Linear Model): 0.5146
Ready Biodegradability Prediction: NO

Hydrocarbon Biodegradation (BioHCwin v1.01):
Structure incompatible with current estimation method!

Sorption to aerosols (25 Dec C) [AEROWIN v1.00]:
Vapor pressure (liquid/subcooled): 6.91E-005 Pa (5.18E-007 mm Hg)
Log Koa (Koawin est): 10.925
Kp (particle/gas partition coef. (m3/ug)):
Mackay model : 0.0434
Octanol/air (Koa) model: 0.0207
Fraction sorbed to airborne particulates (phi):
Junge-Pankow model : 0.611
Mackay model : 0.777
Octanol/air (Koa) model: 0.623

Atmospheric Oxidation (25 deg C) [AopWin v1.92]:
Hydroxyl Radicals Reaction:
OVERALL OH Rate Constant = 32.6270 E-12 cm3/molecule-sec
Half-Life = 0.328 Days (12-hr day; 1.5E6 OH/cm3)
Half-Life = 3.934 Hrs
Ozone Reaction:
No Ozone Reaction Estimation
Fraction sorbed to airborne particulates (phi):

0.694 (Junge-Pankow, Mackay avg)
0.623 (Koa method)
Note: the sorbed fraction may be resistant to atmospheric oxidation

Soil Adsorption Coefficient (KOCWIN v2.00):

Koc : 3370 L/kg (MCI method)
Log Koc: 3.528 (MCI method)
Koc : 2350 L/kg (Kow method)
Log Koc: 3.371 (Kow method)

Aqueous Base/Acid-Catalyzed Hydrolysis (25 deg C) [HYDROWIN v2.00]:
Rate constants can NOT be estimated for this structure!

Bioaccumulation Estimates (BCFBAF v3.01):

Log BCF from regression-based method = 2.735 (BCF = 543.3 L/kg wet-wt)
Log Biotransformation Half-life (HL) = -0.9778 days (HL = 0.1053 days)
Log BCF Arnot-Gobas method (upper trophic) = 1.653 (BCF = 44.94)
Log BAF Arnot-Gobas method (upper trophic) = 1.653 (BAF = 44.94)
log Kow used: 4.65 (expkow database)

Volatilization from Water:

Henry LC: 1.3E-008 atm-m³/mole (Henry experimental database)
Half-Life from Model River: 7.141E+004 hours (2975 days)
Half-Life from Model Lake : 7.791E+005 hours (3.246E+004 days)

Removal In Wastewater Treatment:

Total removal: 63.62 percent
Total biodegradation: 0.58 percent
Total sludge adsorption: 63.05 percent
Total to Air: 0.00 percent
(using 10000 hr Bio P,A,S)

Level III Fugacity Model:

Mass Amount (percent)	Half-Life (hr)	Emissions (kg/hr)	
Air	0.0715	7.87	1000
Water	12.5	900	1000
Soil	85	1.8e+003	1000
Sediment	2.41	8.1e+003	0

Persistence Time: 1.61e+003 hr

....