

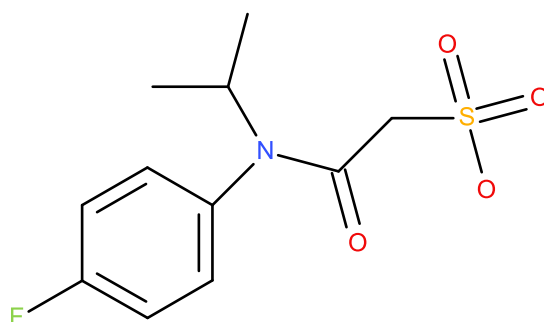


Miljøministeriet  
Naturstyrelsen  
Miljøstyrelsen

# Fastsættelse af kvalitetskriterier for vandmiljøet

## FOE-sulfonsyre

201668-32-8



Vandkvalitetskriterium	VKK <sub>ferskvand</sub>	760 µg/l
Vandkvalitetskriterium	VKK <sub>saltvand</sub>	76 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK <sub>ferskvand</sub>	980 µg/l
Korttidsvandkvalitetskriterium	KVKK <sub>saltvand</sub>	98 µg/l

November 2015

# Indhold

<b>FORORD</b>	<b>3</b>	
<b>ENGLISH SUMMARY AND CONCLUSIONS</b>	<b>4</b>	
<b>1 INDLEDNING</b>	<b>5</b>	
<b>2 FYSISK KEMISKE EGENSKABER</b>	<b>6</b>	
<b>3 SKÆBNE I MILJØET</b>	<b>7</b>	
3.1 NEDBRYDELIGHED	7	
3.2 BIOAKKUMULERING	7	
3.3 NATURLIG FOREKOMST	7	
<b>4 GIFTIGHEDSDATA</b>	<b>8</b>	
4.1 GIFTIGHED OVER FOR VANDLEVENDE ORGANISMER	8	
4.2 GIFTIGHED OVER FOR SEDIMENTLEVENDE ORGANISMER	8	
4.3 GIFTIGHED OVER FOR PATTEDYR OG FUGLE	8	
4.4 GIFTIGHED OVER FOR MENNESKER	9	
<b>5 ANDRE EFFEKTER</b>	<b>10</b>	
<b>6 UDLEDNING AF VANDKVALITETSKRITERIUM</b>	<b>11</b>	
6.1 VANDKVALITETSKRITERIUM (VKK)	11	
6.2 KORTTIDSVANDKVALITETSKRITERIUM (KVKK)	11	
6.3 KVALITETSKRITERIUM FOR SEDIMENT (SKK)	11	
6.4 KVALITETSKRITERIUM FOR BIOTA (BKK)	12	
6.5 KVALITETSKRITERIUM FOR HUMAN KONSUM AF VANDLEVENDE ORGANISMER (HKK)		12
<b>7 KONKLUSION</b>	<b>13</b>	
<b>8 REFERENCER</b>	<b>14</b>	

# Forord

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

Miljøstyrelsen (MST) udarbejder på vegne af Naturstyrelsen kvalitetskriterier for kemikalier i vandsøjlen (vandkvalitetskriterium), i sediment og i dyr og planter (biota).

Naturstyrelsen 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 risikovurdering ("TGD") (EU 2003), EU's vejledning til fastsættelse af kvalitetskriterier i vandmiljøet (EU 2011) og Miljøstyrelsens vejledning til fastsættelse af vandkvalitetskriterier (Miljøstyrelsen 2004).

Den sidste litteratursøgning er foretaget den november 2015.

# English Summary and conclusions

## Environmental Quality Standards for FOE-sulfuric acid (CAS 201668-32-8)

Short-term EC<sub>50</sub> and LC<sub>50</sub> values are available for one species of fish, crustacea, algae and higher plants, and NOEC values for the alga and plant.

All E(L)C<sub>50</sub> values are “greater than” values, and it is not possible to decide from the test data which of the groups is the most sensitive in acute tests.

QSAR predictions (ECOSAR) predict greater sensitivity in algae compared to fish and crustacea.

According to the guidance (EU 2011) for derivation of the “annual average” EQS an assessment factor of 100 and 1000 for freshwater and saltwater, respectively, can be applied to the lowest EC<sub>10</sub> or NOEC from an alga test even if there are no corresponding values for other taxonomic groups, provided that there is such data for more than one algal species. In the current case only one species of algae is represented, but there is in addition a NOEC for *Lemna*. Though this is not an alga it represents the same trophic level, and it is accepted to apply an AF of respectively 100 and 1000 to the lowest NOEC. Lowest NOEC = 75.9 mg/l = 75900 µg/l. Thus:

$$\begin{aligned} \text{EQS}_{\text{freshwater}} &= 75900 \text{ µg/l} : 100 = 760 \text{ µg/l} \\ \text{EQS}_{\text{saltwater}} &= 75900 \text{ µg/l} : 1000 = 76 \text{ µg/l} \end{aligned}$$

For derivation of the maximum acceptable concentration (MAC) an AF of 100 and 1000 would normally be applied to the lowest E(L)C<sub>50</sub> value for fresh- and saltwater respectively. The E(L)C<sub>50</sub> values are, however, all “greater than values”.

On the other hand, the lowest E(L)C<sub>50</sub> predicted by the QSAR is 98 mg/l for algae which is just above the “greater than” value (86.7 mg/l) from the test with algae. 98 mg/l is used as the lowest E(L)C<sub>50</sub> to which the AF is applied.

$$\begin{aligned} \text{MAC}_{\text{freshwater}} &= 98000 \text{ µg/l} : 100 = 980 \text{ µg/l} \\ \text{MAC}_{\text{saltwater}} &= 98000 \text{ µg/l} : 1000 = 98 \text{ µg/l} \end{aligned}$$

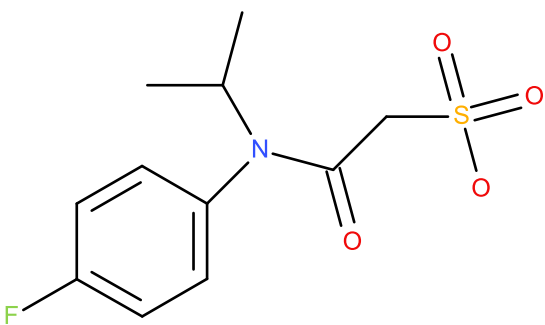
There is no information on effects on sediment dwelling organisms or on mammals and birds or on humans. Further, log K<sub>ow</sub> = 1.07 and K<sub>oc</sub> = 6 – 19. So no EQS for sediment, biota or human health has been set.

# 1 Indledning

Identiteten af FOE-sulfonyl fremgår af tabel 1.1.

Stoffet er et nedbrydningsprodukt af herbicidet flufenacet (fluthiamid).

Tabel 1.1. Identitet

IUPAC navn	Ethanesulfonic acid,2-[(4-fluorophenyl)(1-methylethyl)amino]-2-oxo-
Strukturformel	 <p>The chemical structure shows a central nitrogen atom (N) bonded to a 4-fluorophenyl ring (a benzene ring with a fluorine atom at the para position), a 1-methylethyl group (an isopropyl group), and a 2-oxoethanesulfonic acid group. The 2-oxoethanesulfonic acid group consists of a carbonyl group (C=O) attached to a methylene group (-CH2-), which is further attached to a sulfonic acid group (-SO3H). The sulfur atom (S) is yellow, and the oxygen atoms (O) are red. The fluorine atom (F) is green.</p>
CAS nr.	201668-32-8
EINECS nr.	
Kemisk formel	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> FNO <sub>4</sub> S
SMILES	<chem>c1cc(N(C(=O)CS(O)(=O)=O)C(C)C)ccc1F</chem>

## 2 Fysisk kemiske egenskaber

De fysisk kemiske egenskaber for FOE-sulfonsyre fremgår af tabel 2.1.

På grund af de meget lave skønnede  $K_{oc}$  og  $\log K_{ow}$  værdier er det mest sandsynligt at stoffet primært vil findes i vand. Og ikke bindes i sediment eller jord.

Tabel 2.1. Fysisk kemiske egenskaber for FOE-sulfonsyre

Parameter	Værdi	Reference
Molekylvægt, $M_w$ ( $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ )	275,3 <sup>1</sup>	
Smeltepunkt, $T_m$ ( $^{\circ}\text{C}$ )	166	MPBPWIN 1.43 i EPIWIN QSAR pakken
Kogepunkt, $T_b$ ( $^{\circ}\text{C}$ )	425	MPBPWIN 1.43 i EPIWIN QSAR pakken
Damptryk, $P_v$ (Pa)		
Henry's konstant, $H$ ( $\text{pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$ )	$4,5\cdot 10^{-9}$	HENRYWIN 3.20 i EPIWIN QSAR pakken
Vandopløselighed, $S_w$ ( $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ )	1,8 $1\cdot 10^6$	WSKOWWIN 1.42 WATERNT 1.01 i EPIWIN QSAR pakken
Dissociationskonstant, $\text{pK}_a$		
Octanol/vand fordelingskoefficient, $\log K_{ow}$	1,07	KOWWIN 1.68 i EPIWIN QSAR pakken
$K_{oc}$ ( $\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$ )	6-19	DAR

<sup>1</sup>Estimeret

## 3 Skæbne i miljøet

### 3.1 Nedbrydelighed

I risikovurderingen for flufenacet (DAR) er angivet at halveringstiden for FOE-sulfonsyres forsvinden fra jorden er mellem 189 – 270 dage, så stoffet må betragtes som persistent.

### 3.2 Bioakkumulering

Med den meget lave  $\log K_{ow}$  er det ikke sandsynligt, at stoffet vil bioakkumulere.

### 3.3 Naturlig forekomst

Ingen oplysninger.

## 4 Giftighedsdata

### 4.1 Giftighed over for vandlevende organismer

Effektkoncentrationer over for vandlevende organismer er sammenstillet i tabel 4.1.

I risikovurderingen for flufenacet, bilag B.7, afsnit 7.2.5 (DAR) er der inkluderet tests for giftigheden af FOE-sulfonsyre overfor fisk, krebsdyr, alger og højere planter.

Tabel 4.1. Giftighed over for vandlevende organismer.

Art	Varighed, timer	EC <sub>50</sub> el. LC <sub>50</sub> mg/l	NOEC mg/l	Reference
<i>Oncorhynchus mykiss</i>	96	>86,7		DAR
<i>Daphnia magna</i>	48	>87,3		DAR
<i>Lemna gibba</i>	14 dage	>75,9	75,9	DAR
<i>Scenedesmus subspicatus</i>	72	>86,7	>86,7	DAR

Tabel 4.2. ECOSAR (version 1.11) forudsigelser af giftigheden overfor fisk, krebsdyr og alger, EC<sub>50</sub> eller LC<sub>50</sub>. Alle værdier i mg/l

Model	Organismegruppe	EC <sub>50</sub> eller LC <sub>50</sub>
Amides – acid	Fisk	3793
Amides – acid, saltvand	Fisk	3319
Amides – acid	Krebsdyr	6406
Amides – acid, saltvand	Krebsdyr	256
Amides – acid	Alger	98
Neutral organic	Fisk	1542
Neutral organic	Krebsdyr	804
Neutral organic	Alger	420

### 4.2 Giftighed over for sedimentlevende organismer

Ingen oplysninger

### 4.3 Giftighed over for pattedyr og fugle

Ingen oplysninger



#### 4.4 Giftighed over for mennesker

Ingen oplysninger.

## 5 Andre effekter

Ingen oplysninger

# 6 Udledning af vandkvalitetskriterium

## 6.1 Vandkvalitetskriterium (VKK)

Der haves EC50 eller LC50 værdier for en art fisk, krebsdyr, alge og højere plante, samt NOEC værdier for algen og planten.

Jævnfør EU-vejledningen (EU 2011) kan en alge NOEC eller EC<sub>10</sub> ikke anvendes alene, men hvis der er værdier for flere algearter, og algerne er den mest følsomme gruppe i akuttetene, da er det muligt at basere VKK på en alge NOEC værdi.

For FOE-sulfonsyre er der kun en alge NOEC, men der er desuden en NOEC for andemad (*Lemna*). Da højere planter repræsenterer samme trofiske niveau som algerne, men til gengæld tilhører en helt anden systematisk gruppe, accepteres den som en ekstra "primær producent".

Ud fra de udførte økotoxikologiske tests er det ikke muligt at udtale sig om, hvilke af grupperne, der er mest følsomme i akuttetene. Ser man dog på QSAR forudsigelserne, så forudsiger begge de to modeller størst følsomhed blandt algerne.

Det vælges derfor at anvende en usikkerhedsfaktor på NOEC for *Lemna* på henholdsvis 100 og 1000 for ferskvand og saltvand.

Der fås således:

$$\text{VKK}_{\text{ferskvand}} = 75900 \mu\text{g/l} : 100 = 760 \mu\text{g/l}$$

$$\text{VKK}_{\text{saltvand}} = 75900 \mu\text{g/l} : 1000 = 76 \mu\text{g/l}$$

## 6.2 Korttidsvandkvalitetskriterium (KVKK)

Da alle EC50 værdierne er "større end" værdier og EC50 for *Lemna* er >NOEC er det ikke muligt at beregne et KVKK ud fra de målte værdier. Den laveste EC50 forudsagt af ECOSAR programmet er 98 mg/l for alger. Da dette er højere end, men af samme størrelsesorden som NOEC for *Lemna* anvendes EC50 = 98 mg/l som udgangspunkt for beregning af KVKK.

Jævnfør vejledningerne (EU 2011 og Miljøstyrelsen 2004) anvendes der en usikkerhedsfaktor på henholdsvis 100 og 1000 for fersk- og saltvand:

$$\text{KVKK}_{\text{ferskvand}} = 98000 \mu\text{g/l} : 100 = 980 \mu\text{g/l}$$

$$\text{KVKK}_{\text{saltvand}} = 98000 \mu\text{g/l} : 1000 = 98 \mu\text{g/l}$$

## 6.3 Kvalitetskriterium for sediment (SKK)

K<sub>oc</sub> og log K<sub>ow</sub> er meget lave og væsentligt under tærskelværdien for at udarbejde et SKK (K<sub>oc</sub> ≥ 1000 eller log K<sub>ow</sub> ≥ 3) og stoffet forventes ikke at bindes i sediment. Der beregnes ikke et SKK.

#### 6.4 Kvalitetskriterium for biota (BKK)

Den skønnede  $\log K_{ow}$  værdi er meget lav og væsentligt under tærskelværdien for at udarbejde et BKK ( $\log K_{ow} \geq 3$ ) og stoffet forventes ikke at bioakkumulere. Der beregnes ikke et BKK.

#### 6.5 Kvalitetskriterium for human konsum af vandlevende organismer (HKK)

Den skønnede  $\log K_{ow}$  værdi er meget lav og stoffet forventes ikke at bioakkumulere i fisk og skaldyr. Der beregnes ikke et HKK.

## 7 Konklusion

$$\text{VKK}_{\text{ferskvand}} = 760 \mu\text{g/l}$$

$$\text{VKK}_{\text{saltvand}} = 76 \mu\text{g/l}$$

$$\text{KVKK}_{\text{ferskvand}} = 980 \mu\text{g/l}$$

$$\text{KVKK}_{\text{saltvand}} = 98 \mu\text{g/l}$$

## 8 Referencer

Dar: European Commission Peer Review Programme: Monograph prepared in the context of the following active substance in Annex I of the Council Directive 91/414/EEC FOE 5043 (fluthiamide) August 1997 and later addenda.

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

EU 2003. Technical Guidance Document on Risk Assessment in support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for new notified substances, Commission Regulation (EC) No 1488/94 on Risk Assessment for existing substances, and Directive 98/8/EC of the European Parliament and of the Council concerning the placing of biocidal products on the market.

EU 2011. Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). Guidance Document No. 27. Technical Guidance Document for Deriving Environmental Quality Standards.

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