

TEXTE

47/2015

Revision der Umweltqualitätsnormen der Bundes-Oberflächen- gewässerverordnung nach Ende der Übergangsfrist für Richtlinie 2006/11/EG und Fortschreibung der europäischen Umweltqualitätsziele für prioritäre Stoffe

TEXTE 47/2015

Umweltforschungsplan des
Bundesministeriums für Umwelt,
Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit

Forschungskennzahl 3712 28 232
UBA-FB 002062

Revision der Umweltqualitätsnormen der Bundes-Oberflächengewässerverordnung nach Ende der Übergangsfrist für Richtlinie 2006/11/EG und Fortschreibung der europäischen Umweltqualitätsziele für prioritäre Stoffe

von

Dr. Andrea Wenzel
Dr. Karsten Schlich
B. Sc. Lidiya Shemotyuk

und

Dr. Monika Nendza

Fraunhofer-Institut für Molekularbiologie und Angewandte Oekologie
IME, Bereich Angewandte Oekologie, Schmallenberg


Analytisches Laboratorium für Umweltuntersuchungen und Auftragsforschung,
Luhnstedt

Im Auftrag des Umweltbundesamtes

Impressum

Herausgeber:

Umweltbundesamt
Wörlitzer Platz 1
06844 Dessau-Roßlau
Tel: +49 340-2103-0
Fax: +49 340-2103-2285
info@umweltbundesamt.de
Internet: www.umweltbundesamt.de

 /umweltbundesamt.de

 /umweltbundesamt

Durchführung der Studie:

Fraunhofer-Institut für Molekularbiologie und Angewandte Oekologie IME
Bereich Angewandte Oekologie
Auf dem Aberg 1, 57392 Schmallenberg

Analytisches Laboratorium für Umweltuntersuchungen und Auftragsforschung
Bahnhofstr. 1, 24816 Luhnstedt

Abschlussdatum:

2014

Redaktion:

Fachgebiet IV 2.3 Chemikalien
Christiane Heiß

Publikationen als pdf:

<http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/revision-der-umweltqualitaetsnormen-der-bundes>

ISSN 1862-4804

Dessau-Roßlau, Juni 2015

Das diesem Bericht zu Grunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit unter der Forschungskennzahl 3712 28 232 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autorinnen und Autoren.

Report Cover Sheet

Report No.	UBA-FB 00
Report Title	Revision der Umweltqualitätsnormen der Bundes-Oberflächengewässerverordnung nach Ende der Übergangsfrist für Richtlinie 2006/11/EG und Fortschreibung der europäischen Umweltqualitätsziele für prioritäre Stoffe
Author(s) (Family Name, First Name)	Dr. Andrea Wenzel, Dr. Karsten Schlich, B. Sc. Lidiya Shemotyuk Dr. Monika Nendza
Performing Organisation (Name, Address)	Fraunhofer Institute for Molecular Biology and Applied Ecology IME Division Applied Ecology Auf dem Aberg 1 57392 Schmallenberg, Germany Analytisches Laboratorium AL-Luhnstedt Bahnhofstr. 1 24816 Luhnstedt, Deutschland
Funding Agency	Umweltbundesamt Postfach 14 06 06813 Dessau-Roßlau
Report Date (Year)	2014
Project No. (FKZ)	3712 28 232
No. of Pages	182
Supplementary Notes	The full report with the EQS Proposal Datasheets are available at: http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24195
Keywords	Environmental quality standards, AA-EQS, MAC-EQS, 2,4-D, Arsenic, Bezafibrate, Carbamazepin, Carbendazim, Chloroacetic acid, Chromium, Dibutyltin, Dimethoate, Dimoxystrobin, Epichlorhydrin, Erythromycin, Flufenacet, Flurtamone, Imidacloprid, Copper, Metoprolol, Monobutyltin, Monolinuron, Nicosulfuron, Omethoate, Phosphoric acid triphenylester (Triphenyl phosphate), Phoxim, Roxithromycin, Sulcotrione, Sulfamethoxazol, Tetrabutyltin, Triclosan, Uranium, Zinc

Berichtskennblatt

Berichtsnummer	UBA-FB 00
Titel des Berichts	Revision der Umweltqualitätsnormen der Bundes-Oberflächengewässerverordnung nach Ende der Übergangsfrist für Richtlinie 2006/11/EG und Fortschreibung der europäischen Umweltqualitätsziele für prioritäre Stoffe
Autor(en) (Name, Vorname)	Dr. Andrea Wenzel, Dr. Karsten Schlich, B. Sc. Lidiya Shemotyuk Dr. Monika Nendza
Durchführende Institution (Name, Anschrift)	Fraunhofer-Institut für Molekularbiologie und Angewandte Oekologie IME Bereich Angewandte Oekologie Auf dem Aberg 1, 57392 Schmallenberg, Deutschland Analytisches Laboratorium für Umweltuntersuchungen und Auftragsforschung Bahnhofstr. 1, 24816 Luhnstedt, Deutschland
Fördernde Institution	Umweltbundesamt Postfach 14 06 06813 Dessau-Roßlau
Abschlussjahr	2014
Forschungskennzahl (FKZ)	3712 28 232
Seitenzahl des Berichts	182
Zusätzliche Angaben	Der vollständige Abschlussbericht mit den Datenblättern der UQN Vorschläge ist erhältlich unter: http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24195
Schlagwörter	Umweltqualitätsnormen, AA-EQS, MAC-EQS 2,4-D, Arsen, Bezafibrat, Carbamazepin, Carbendazim, Chloressigsäure, Chrom, Dibutylzinn, Dimethoat, Dimoxystrobin, Epichlorhydrin, Erythromycin, Flufenacet, Flurtamon, Imidacloprid, Kupfer, Metoprolol, Monobutylzinnkation, Monolinuron, Nicosulfuron, Omethoat, Phosphorsäuretriphenylester (Triphenylphosphat), Phoxim, Roxithromycin, Sulcotrion, Sulfamethoxazol, Tetrabutylzinn, Triclosan, Uran, Zink

Abstract

The Water Framework Directive 60/2000/EG (WFD) requires Environmental Quality Standards (EQS) for polluting substances. Member States have to set objectives for individual surface water bodies (Article 4 WFD). The transitional period for Directive 2006/11/EC ended in 2013. Therefore, revision, adoption and implementation of the EQS for the substances on the „Indicative list of main pollutants“ (see Annex VIII WFD) is needed to assess the status of the surface waters. In this context, the Federal Environmental Agency (UBA) initiated a project to update the environmental quality standards (EQS) for 10 pollutants (pollutants specific for river basin according to Ordinance on the Protection of Surface Waters (OGewV)) and to compile suggestions for environmental quality standards for 20 new chemicals.

The searched data were documented data sheets according to the "Guidance Document No. 27: Technical Guidance for Deriving Environmental Quality Standards" (EC, 2011). The derivation of EQS for the matrices to be considered was performed in accordance with the rules as laid down in the "Guidance Document No. 27".

Within this project EQS proposals were derived for the following 30 substances: 2.4-D, arsenic, bezafibrate, carbamazepin, carbendazim, chloroacetic acid, chromium, dibutyltin, dimethoate, dimoxystrobin, epichlorhydrin, erythromycin, flufenacet, flurtamone, imidacloprid, copper, metoprolol, monobutyltin cation, monolinuron, nicosulfuron, omethoate, triphenyl phosphate, phoxim, roxithromycin, sulcotrione, sulfamethoxazole, tetrabutyltin, triclosan, uranium, zinc.

The full report with the EQS Proposal Datasheets is available at:
<http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24195>

Kurzbeschreibung

Auf Grundlage der EU-Wasserrahmenrichtlinie 60/2000/EG (WRRL) sind die Mitgliedstaaten verpflichtet, zur Überprüfung des angestrebten guten Zustandes der Oberflächengewässer Qualitätsnormen für flussgebietsspezifische Schadstoffe festzulegen (Artikel 4 der WRRL). Zur Bewertung des Zustandes der Oberflächengewässer sind daher die Stoffe aus dem „Nichterschöpfenden Verzeichnis der wichtigsten Schadstoffe“ (siehe Anhang VIII WRRL) zu überprüfen und fortzuschreiben sowie Qualitätsnormen festzulegen. 2013 endete die Übergangsfrist für Richtlinie 2006/11/EG. Vor diesem Hintergrund initiierte das Umweltbundesamt ein Projekt, um für 10 ausgewählte Schadstoffe (flussgebietsspezifische Schadstoffe nach Oberflächengewässerverordnung (OGewV)) die Umweltqualitätsnormen zu aktualisieren und für 20 neue Stoffe Vorschläge für Umweltqualitätsnormen erarbeiten zu lassen.

Die recherchierten Daten wurden in Datenblättern dokumentiert, wie sie in dem Technischen Leitfaden "Guidance Document No. 27. Technical Guidance for Deriving Environmental Quality Standards" (EC, 2011) enthalten sind. Die Ableitung der UQN für die zu betrachtenden Matrices erfolgte nach den in dem "Guidance Document No. 27" beschriebenen Regeln.

Für die folgenden Stoffe wurden UQN Vorschläge erarbeitet: 2,4-D, Arsen, Bezafibrat, Carbamazepin, Carbendazim, Chloressigsäure, Chrom, Dibutylzinn, Dimethoat, Dimoxystrobin, Epichlorhydrin, Erythromycin, Flufenacet, Flurtamon, Imidacloprid, Kupfer, Metoprolol, Monobutylzinnkation, Monolinuron, Nicosulfuron, Omethoat, Phosphorsäuretriphenylester, Phoxim, Roxithromycin, Sulcotrion, Sulfamethoxazol, Tetrabutylzinn, Triclosan, Uran, Zink

Der vollständige Abschlussbericht mit den Datenblättern in englischer Sprache ist in elektronischer Form über das UBA-Internetangebot veröffentlicht:

<http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24195>

Inhalt

Report Cover Sheet	2
Berichtskennblatt	3
Abstract.....	4
Kurzbeschreibung	4
Liste der Abkürzungen.....	8
Einleitung und Zielsetzung.....	11
Datenrecherche	12
Datenbewertung.....	14
Ableitung von Umweltqualitätsnormen	14
Zusammenfassungen der UQN Ableitungen.....	19
1 2,4-D Zusammenfassung.....	19
2 Arsen Zusammenfassung	24
3 Bezafibrat Zusammenfassung.....	32
4 Carbamazepin Zusammenfassung	37
5 Carbendazim Zusammenfassung	43
6 Chloressigsäure Zusammenfassung	49
7 Chrom Zusammenfassung	54
8 Dibutylzinn-Kation Zusammenfassung.....	61
9 Dimethoat Zusammenfassung.....	67
10 Dimoxystrobin Zusammenfassung.....	72
11 Epichlorhydrin Zusammenfassung.....	77
12 Erythromycin Zusammenfassung	83
13 Flufenacet Zusammenfassung	88
14 Flurtamon Zusammenfassung.....	93
15 Imidacloprid Zusammenfassung	98
16 Kupfer Zusammenfassung	104
17 Metoprolol Zusammenfassung	111
18 Monobutylzinnkation Zusammenfassung	116
19 Monolinuron Zusammenfassung	123
20 Nicosulfuron Zusammenfassung	128
21 Omethoat Zusammenfassung	133
22 Phosphorsäuretriphenylester Zusammenfassung.....	138
23 Phoxim Zusammenfassung	145

24	Roxithromycin Zusammenfassung.....	150
25	Sulcotrion Zusammenfassung	155
26	Sulfamethoxazol Zusammenfassung	160
27	Tetrabutylzinn Zusammenfassung	165
28	Triclosan Zusammenfassung	170
29	Uran Zusammenfassung	178
30	Zink Zusammenfassung	187
31	Literatur	192

Liste der Abkürzungen

AA-EQS	Annual Average Environmental Quality Standard (long-term EQS)
ACR	acute chronic ratio
ADI	Acceptable Daily Intake
AF	Assessment Factor
AOEL	Acceptable Operator Exposure Level
ARA	Added Risk Approach
AVS	Acid Volatile Sulfur, Säureflüchtiger Schwefel
a.s.	active substance
BCF	Bioconcentration Factor
BfR	Bundesinstitut für Risikobewertung (Germany)
BMDL	Benchmarkdosis. Der Wert des unteren (in der Regel 90%- oder 95 %-) Vertrauensbereichs der „Benchmark Dose“ wird als „Benchmark Dose Lower Bound“ (BMDL) bezeichnet.
BMF	Biomagnification Factor
bw	body weight
dm	dry matter
DOC	Dissolved organic carbon
dw	dry weight
ECx	Concentration at which x% effect is observed
EqP	Equilibrium Partitioning Model
EQS	Environmental Quality Standard
FG	Frischgewicht
fw	freshwater
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry
IKSR	Internationale Kommission zum Schutz des Rheins Commission Internationale pour la Protection du Rhin Internationale Commissie ter Bescherming van de Rijn
LAWA	Bund-Länderarbeitsgemeinschaft Wasser. German Working Group on water issues of the Federal States and the Federal Government represented by the Federal Environment Ministry
LANUV NRW	Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz NordrheinWestfalen. (State Agency for Nature, Environment and Consumer Protection North Rhine Westphalia).
LCx	Concentration at which x % mortality is observed
LOEC	Lowest Observed Effect Concentration: lowest concentration tested at which the measured parameter shows significant inhibition relative to the control

LW _{TW} (BfR)	Trinkwasser-Leitwert des BfR, lebenslang gesundheitlich duldbare Höchstkonzentration eines PSM-Wirkstoffes im Trinkwasser, abgeleitet aus einem ADI.
MAC-EQS	Maximum Acceptable Concentration (short-term EQS)
MCI	Molecular Connectivity Index
MW _{TW} (UBA)	Trinkwasser-Maßnahmewert des UBA, trinkwasserhygienisch vorübergehend duldbare Höchstkonzentration eines PSM-Wirkstoffes/ „relevanten Metaboliten, Abbau- und Reaktionsprodukte“
NOAEL	No Observed Adverse Effect Level
NOEC	No Observed Effect Concentration: highest tested concentration for which the observed effect is not significantly different to the controls
PBT	Persistent, Bioaccumulative and Toxic Substances
PEC	Predicted Environmental Concentration
PNEC	Predicted No Effect Concentration
PSM	Pflanzenschutzmittel (plant protection agents)
QS	Quality Standard
QS _{biota, hh food}	Quality Standard for humans for the protection against adverse health effects from consuming fisheries products
QS _{biota, sec pois}	Quality Standard for biota (prey) to protect predators against secondary poisoning
QS _{freshwater, eco}	Quality Standard for freshwater community
QS _{sediment, freshwater}	Quality Standard for the protection of freshwater benthic organisms
QS _{sediment, fw, EqP}	Quality Standard for the protection of freshwater benthic organisms, calculated using the Equilibrium Partitioning approach
QS _{sediment, saltwater}	Quality Standard for the protection of freshwater benthic organisms
QS _{sediment, sw EqP}	Quality Standard for the protection of saltwater/marine benthic organisms, calculated using the Equilibrium Partitioning approach
QS _{saltwater, eco}	Quality Standard for saltwater pelagic community (saltwater)
REACH	Registration Evaluation and Authorisation of Chemicals (Regulation (EC) No 1907/2006)
RfD	Reference dose
RIVM	National Institute for Public Health and the Environment (Netherland)
SSD	Species Sensitivity Distribution
sw	saltwater
TDI	Tolerable Daily Intake
TG	Trockengewicht
UQN	Umweltqualitätsnorm
vPvB	very Persistent and very Bioaccumulative Substances
WHAM	Windermere Humic Aqueous Model

WHO	World Health Organisation
WFD	Water Framework Directive (2000/60/EC)
WRRL	Wasserrahmenrichtlinie

Einleitung und Zielsetzung

Die Oberflächengewässerverordnung (OGewV) dient der Umsetzung der Europäischen Wasser-rahmenrichtlinie (WRRL) und assoziierter Regelwerke. Die europäische Richtlinie 2006/11/EG betrifft die Regelung der Gewässerverschmutzung infolge der Ableitung bestimmter gefährlicher Stoffe in die Gewässer der Gemeinschaft.

Zu den Umweltzielen der EU-Wasserrahmenrichtlinie (WRRL) gehören das Erreichen eines guten chemischen und ökologischen Zustands von Oberflächengewässern und Grundwasserkörpern sowie die Vermeidung einer weiteren Verschlechterung (2000/60/EG und 2008/105/EG). Die WRRL enthält in Anhang X eine Liste prioritärer Stoffe, die ein erhebliches Risiko für die aquatische Umwelt auf EU Ebene darstellen. Nach Artikel 16 Absatz 4 der WRRL muss die Kommission die Liste prioritärer Stoffe mindestens alle vier Jahre überprüfen und gegebenenfalls auch Vorschläge für neue prioritäre Stoffe zur Festlegung von Umweltqualitätsnormen in Oberflächenwasser, Sedimenten oder Biota unterbreiten. Nach Artikel 4 der WRRL sind die Mitgliedstaaten verpflichtet Qualitätsnormen für flussgebietspezifische Schadstoffe festzulegen, die der Überprüfung des angestrebten guten Zustands der Oberflächengewässer dienen. Das „Nichterschöpfende Verzeichnis der wichtigsten Schadstoffe“ im Anhang VIII der WRRL, erfordert eine regelmäßige Überprüfung und Fortschreibung inklusive der Festlegung von Qualitätsnormen.

In Januar 2012 veröffentlichte die Europäische Kommission einen „Vorschlag für eine Richtlinie des Europäischen Parlaments und der Rates zur Änderung der Richtlinien 2000/60/EG und 2008/105/EG in Bezug auf prioritäre Stoffe im Bereich der Wasserpolitik“, die im aktualisierten Anhang I die Schadstoffe aus Anhang X der WRRL sowie die bis dahin neu vorgeschlagenen prioritären Stoffe enthält.

Vor diesem Hintergrund initiierte das Umweltbundesamt ein Projekt, um für ausgewählte Schadstoffe Umweltqualitätsnormen aktualisieren bzw. neue Umweltqualitätsnorm Vorschläge erarbeiten zu lassen. Bei der ersten Stoffgruppe handelt es sich um flussgebietspezifische Schadstoffe, die für Deutschland in der Oberflächengewässerverordnung (OGewV) aufgeführt werden.

Vom Auftraggeber wurden 30 Stoffe ausgewählt, für die die Erarbeitung von UQN-Vorschlägen erforderlich war. Dabei handelt es sich um 10 Stoffe mit vorhandener UQN (OGewV) und 20 Stoffe, für die keine UQN für die Wasserphase in der OGewV vorliegen.

Datenrecherche

Folgende Stoffe wurden vom Auftraggeber ausgewählt:

Tabelle 1: Übersicht über die ausgewählten Stoffe

Nr.	Stoffname	CAS-Nr.	Substanzklasse	UQN (OGewV) vorhanden
1	2,4-D	94-75-7	Pflanzenschutzmittel	ja
2	Arsen	7440-38-2	Halbmetal	ja
3	Bezafibrat	41859-67-0	Arzneimittel	nein
4	Carbamazepin	298-46-4	Arzneimittel	nein
5	Carbendazim	10605-21-7	Pflanzenschutzmittel	nein
6	Chloressigsäure	79-11-8	Chemikalie	ja
7	Chrom	7440-47-3	Metall	ja (Schwebstoff/Sediment)
8	Dibutylzinn-Kation	14488-53-0	Chemikalie	ja
9	Dimethoat	60-51-5	Pflanzenschutzmittel	ja
10	Dimoxystrobin	149961-52-4	Pflanzenschutzmittel	nein
11	Epichlorhydrin	106-89-8	Chemikalie	ja
12	Erythromycin	114-07-8	Arzneimittel	nein
13	Flufenacet	142459-58-3	Pflanzenschutzmittel	nein
14	Flurtamon	96525-23-4	Pflanzenschutzmittel	nein
15	Imidacloprid	138261-41-3	Pflanzenschutzmittel	nein
16	Kupfer	7440-50-8	Metall	ja (Schwebstoff/Sediment)
17	Metoprolol	37350-58-6	Arzneimittel	nein
18	Monobutylzinnkation	78763-54-9	Chemikalie	nein
19	Monolinuron	1746-81-2	Pflanzenschutzmittel	ja
20	Nicosulfuron	111991-09-4	Pflanzenschutzmittel	nein
21	Omethoat	1113-02-6	Pflanzenschutzmittel	ja
22	Phosphorsäuretriphenylester	115-86-6	Chemikalie	nein
23	Phoxim	14816-18-3	Pflanzenschutzmittel	ja
24	Roxythromycin	80214-83-1	Arzneimittel	nein
25	Sulcotrion	99105-77-8	Pflanzenschutzmittel	nein
26	Sulfamethoxazol	723-46-6	Arzneimittel	nein
27	Tetrabutylzinn	1461-25-2	Chemikalie	ja
28	Triclosan	3380-34-5	Biozid	nein
29	Uran	7440-61-1	Metall	nein
30	Zink	7440-66-6	Metall	ja (Schwebstoff/Sediment)

Für die ausgewählten 30 Schadstoffe wurden Recherchen nach Daten und Informationen durchgeführt, die für die Entwicklung von UQN nach dem "Guidance Document No. 27" (EC, 2011) erforderlich sind.

Abfragen der aquatischen Wirkungsdaten und erforderlichen physikalisch-chemischen Daten erfolgte für alle Kandidaten in:

- ECOTOX database from the US EPA (<http://www.epa.gov/ecotox>)
- Literaturdatenbanken wie TOXLINE, Pubmed-Datenbank, Scopus, Scirus, Springerlink, Science direct

- HSDB® Datenbank, Hazardous Substances Data Bank. Toxicology Data Network (TOXNET®) (<http://toxnet.nlm.nih.gov>).
- GSBL Gemeinsamer Stoffdatenpool Bund/Länder (<http://www.gsbl.de/>)
- ETOX Datenbank des Umweltbundesamt. Diese Datenbank enthält auch Qualitätsnormen anderer Staaten (<http://webetox.uba.de/webETOX/index.do>)
- ECHA für registrierte Substanzen, eingereichte Stoffdossiers (<http://echa.europa.eu/information-on-chemicals/registered-substances>)
- Joint Research Centre JRC Publications Repository (Online Service für Publikationen des European Commission's Joint Research Centre, enthält z.B. die EU risk assessment reports; <http://publications.jrc.ec.europa.eu/repository/>)
- ESIS European chemical Substances Information System (<http://esis.jrc.ec.europa.eu/>)
- OECD SIDS Dokumente: UNEP: Screening Information Database for High Volume Chemicals (<http://www.chem.unep.ch/irptc/sids/OECDIDS/sidspub.html>)
- RTECS®: Registry of Toxic Effects of Chemical Substances database über (<http://www.croner.co.uk/croner/jsp/CronerHome.do?cache=false&channelId=-238414>)
- Wirkdaten aus der UBA-internen Datenbank ICS wurden dem Auftragnehmer zur Projektarbeit zur Verfügung gestellt, wenn diese nicht frei über Internet/Datenbankrecherche zugänglich waren.
- Die Daten-/Literaturrecherche wird ergänzt durch Internetrecherchen unter Verwendung des chemischen Namens und der CAS Nummer.

Daneben wurden für Pflanzenschutzmittel zusätzlich spezielle Datenbanken durchsucht und auf verfügbare Bewertungsberichte zurückgegriffen:

- Öffentlich verfügbaren "Assessment reports" durchgesehen, u.a. erhältlich über EFSA (European Food Safety Authority: <http://dar.efsa.europa.eu/dar-web/provision>), oder über die EC: http://ec.europa.eu/sanco_pesticides/public/index.cfm?event=activesubstance.selection or http://ec.europa.eu/food/plant/protection/evaluation/new_subs_rep_en.htm)
- UK Pesticides Safety Directorate (PSD): (http://www.pesticides.gov.uk/psd_evaluation_all.asp)
- PPDB Pesticide Properties Database (<http://sitem.herts.ac.uk/aeru/ppdb/en/index.htm>)
- OPP Pesticide Ecotoxicity Database. U.S. Environmental Protection Agency and Office of Pesticide Programs (<http://www.ipmcenters.org/Ecotox/>)
- US EPA (<http://www.epa.gov/pesticides/reregistration/>)
- Health Canada (<http://www.pmr-arla.gc.ca/english/pubs/reeval-e.html>)
- EU Pesticides Database (http://ec.europa.eu/sanco_pesticides/public/index.cfm)

Bewertungsberichte anderer Institute, Organisation bzw. Nationen, in erster Linie:

- Niederlande: Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu (RIVM): Environmental Risk Limits (<http://www.rivm.nl/en/Search/Library>)
- Schweizerische Zentrum für angewandte Ökotoxikologie (Oekotoxzentrum) / EAWAG (<http://www.oekotoxzentrum.ch/expertenservice/qualitaetskriterien/vorschlaege>)

- Großbritannien: Wfd Water Framework Directive UK TAG (Technical Advisory Group) (<http://www.wfduk.org/resources%20/proposed-eqs-water-framework-directive-annex-viii-substances>)
- Großbritannien, Environmental Agency (www.environment-agency.gov.uk)
- US EPA, US Umweltschutzbehörde (<http://water.epa.gov/scitech/swguidance/standards/criteria/index.cfm>)

Datenbewertung

Die recherchierten Veröffentlichungen und Daten wurden auf ihre Validität und Plausibilität nach den Kriterien von Klimisch et al. (1997) geprüft und klassifiziert. Diese Einteilung, bei der Registrierung von Chemikalien unter REACH fester Bestandteil des Dossiers, klassifiziert die Studien in 4 Kategorien:

1 = „reliable without restrictions“

Studien nach internationalen Richtlinien, bevorzugt unter GLP, mit gut dokumentierten Testdaten und keinen/unwesentlichen Abweichungen von der Richtlinie.

2 = „reliable with restrictions“

Studien nach internationalen Richtlinien, meist nicht unter GLP, mit gut dokumentierten/nachvollziehbaren Testparametern. Die Studien stimmen nicht vollständig mit den Testrichtlinien überein, aber die Testdurchführung und das Ergebnis sind wissenschaftlich akzeptabel und plausibel.

3 = “not reliable“

Studien oder Daten, die nach einer nicht akzeptierten Methode durchgeführt wurden, mit Problemen bei der Testdurchführung. Studien/Publicationen mit unzureichender Datendokumentation, die eine Expertenbeurteilung nicht ermöglicht.

4 = “not assignable”

Studien oder Daten, für die keine ausreichenden experimentellen Daten vorgelegt werden und/oder die nur in kurzen Zusammenfassungen oder Sekundärliteratur zitiert werden.

Ableitung von Umweltqualitätsnormen

Die Ableitung der UQN für die zu betrachtenden Matrices (Süßwasser, Salzwasser, Sediment, Biota bzgl. Sekundärvergiftung in der Nahrungskette, Biota bzgl. fischkonsumierender Menschen) erfolgte nach den in dem “Guidance Document No. 27” beschriebenen Regeln.

Je nach Umfang der recherchierten Daten erfolgte die Ableitung der Umweltqualitätsnormen mittels deterministischer Methoden (Sicherheitsfaktoren) oder probabilistischer Methoden (Art-empfindlichkeitsverteilung, Species Sensitivity Distribution (SSD)). Studien mit der Klimisch-Klassifikation 1 oder 2 wurden für die UQN Ableitung mittels Bewertungsfaktor verwendet. Unter Einbeziehung von Testergebnissen aus Veröffentlichungen, die mangels Verfügbarkeit der Testrohdaten (typisch bei Veröffentlichungen) nicht als „valide“ im Sinne der Klimisch Codierungen 1 und 2 eingestuft werden konnten, die aber „zusätzliche/unterstützende Informationen“ (Klimisch 4) lieferten, standen teilweise relativ große Datenmengen für UQN Ableitungen mittels SSD zur Verfügung.

Die Ableitung der Umweltqualitätsnormen wurde in Datenblättern gemäß dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) dokumentiert.

Folgende Umweltqualitätsnormen¹ ($\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) wurden für die ausgewählten Stoffe vorgeschlagen. Zusätzlich sind die Qualitätsnormen für Sediment ($\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{ dw}$) und Biota ($\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{ ww}$) aus den Datenblättern mit aufgelistet.

Tabelle 2: Vorschläge für UQN für die ausgewählten Stoffe²

Nr.	Stoffname	MAC-QS _{fw} [$\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$]	MAC-QS _{sw} [$\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$]	AA-QS _{fw} [$\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$]	AA-QS _{sw} [$\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$]	QS _{sediment, fw} [$\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{ dw}$]	QS _{sediment, sw} [$\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{ dw}$]	QS _{biota, sec pols} [$\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{ biota ww}$]	QS _{biota, hh food} [$\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{ biota ww}$]
1	2,4-D	1,1	0,22	0,22	0,022	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich
2	Arsen	6,6	6,6	1,3	1,3	8590 (EqP)	3304 (EqP)	Nicht erforderlich	Kanzerogen*
3	Bezafibrat	762	76	2,3	0,23	51290 (EqP)	5129 (EqP)	83333 (106 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	Nicht erforderlich
4	Carbama-zepin	1990	199	0,5	0,05	19,4	3,9	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich
5	Carbendazim	0,7	0,14	0,15	0,015	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	1217 (45 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)
6	Chloressig-säure	8,1	1,62	0,58	0,058	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich
7	Chrom	3,4	-	3,4	0,6	80000	-	Nicht erforderlich	Kanzerogen*
8	Dibutylzinn-Kation	3,0	0,6	0,2	0,2	1175 (EqP)	1175 (EqP)	333 (DBTC) (1,9 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	1522 (11 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)
9	Dimethoat	0,98	0,098	0,07	0,007	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich
10	Dimoxy-strobin	2,0	0,2	0,03	0,003	0,49 (EqP)	0,049 (EqP)	Nicht erforderlich	244 (5,1 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)
11	Epichlorhydrin	1060	106	11	1,1	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	8,5 (8,5 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)
12	Erythromycin	2,0	0,2	0,2	0,02	19,1 (EqP)	1,91 (EqP)	1,5 (0,3 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)	Nicht erforderlich
13	Flufenacet	0,2	0,02	0,04	0,004	0,5 (EqP)	0,05 (EqP)	Nicht erforderlich	304 (1,84 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)
14	Flurtamon	0,99	0,099	0,23	0,023	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich
15	Imidacloprid	0,1	0,01	0,0024	0,00024	0,012	0,0012	Nicht erforderlich	3652 (1141 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)

¹ Die Umweltqualitätsnormen für die Wasserphase beziehen sich bei organischen Stoffen auf die Gesamtkonzentration und bei Metallverbindungen auf die „gelöste“ Konzentration sofern dies nicht anders angegeben ist.

² Die UQN-Vorschläge sind in der Tabelle jeweils fett markiert. Für Monobutylzinn und Roxithromycin werden keine UQN vorgeschlagen.

Nr.	Stoffname	MAC-QS _{fw} [µg.L ⁻¹]	MAC-QS _{sw} [µg.L ⁻¹]	AA-QS _{fw} [µg.L ⁻¹]	AA-QS _{sw} [µg.L ⁻¹]	QS _{sediment, fw} [µg.kg ⁻¹ dw]	QS _{sediment, sw} [µg.kg ⁻¹ dw]	QS _{biota, sec pois} [µg.kg ⁻¹ biota ww]	QS _{biota, hh food} [µg.kg ⁻¹ biota ww]
16	Kupfer	2,4	2,4	1,1	0,7	87000	144000 (EqP)	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich
17	Metoprolol	180	18	43	4,3	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich
18	Monobutylzinn-Kation ³	0,0056 /19,3	0,0056 /1,93	0,0006 /0,75	0,00006 /0,075	3,6 (EqP) / 4500 (EqP)	0,36 (EqP) / 450 (EqP)	6622 (52.6 µg.L ⁻¹)	Nicht erforderlich
19	Monolinuron	20	2	0,15	0,015	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	182,6 (12,3 µg.L ⁻¹)
20	Nicosulfuron	0,085	0,0085	0,0087	0,00087	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich
21	Omethoat	2,1	0,21	0,0042	0,00042	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	18,3 (6,1 µg.L ⁻¹)
22	Phosphorsäuretriphenylester	24	2,4	3,7 (1,5)	0,37	1856 (EqP)	186 (EqP)	783 µg.kg ⁻¹ biota ww 1,5 µg.L ⁻¹	Nicht erforderlich
23	Phoxim	0,074	0,0074	0,00074	0,000074	0,017 (EqP)	0,0017 (EqP)	500 (0,31 µg.L ⁻¹)	228 (0,14 µg.L ⁻¹)
24	Roxithromycin ³	-	-	0,047	0,0047	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich
25	Sulcotrion	5,1	1,0	0,1	0,01	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	24,3 (10,5 µg.L ⁻¹)
26	Sulfamethoxazol	2,7	0,27	0,6	0,06	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich
27	Tetrabutylzinn	0,34	0,17	0,14 (0,014)	0,014	710	71	16,7 (0,014 µg.L)	Nicht erforderlich
28	Triclosan	0,16	0,016	0,02	0,002	2000	100	4167 (0,48 µg.L ⁻¹)	18300 (2,1 µg.L ⁻¹)
29	Uran**	3,4	0,34	0,44 (0,02)	0,042 (0,02)	1937 (EqP)	-	7,4 (0,02 µg.L ⁻¹)	36,5 (0,07 µg.L ⁻¹)
30	Zink ⁴	33	9,0	10,9	3,0	49000	-	Nicht erforderlich	Nicht erforderlich

*Die CMR Eigenschaften sind für die Bewertung der Ökotoxizität nicht relevant und im Rahmen dieser Arbeit nur zum Teil berücksichtigt. Es sei darauf hingewiesen, dass CMR Stoffe eine große Besorgnis hinsichtlich der menschlichen Gesundheit darstellen.

** Laut Leitfaden Nr. 27 (EC, 2011) wurde der Gesamt AA-QS für Süßwasser von 0,02 µg.L⁻¹ mit dem 90. Perzentil- (2,43 µg.L⁻¹) und dem Median Hintergrundwert (0,33 µg.L⁻¹) für Oberflächengewässer der FOREGS Datenbank (2005) verglichen. Da die Hintergrundwerte höher sind als die Gesamt AA-QS, sollte bevorzugt der „Added Risk Approach (ARA)“ verwendet werden. Die Extrapolation der Gewässerkonzentration aus der Biotakonzentration ist aufgrund der variablen BCF Werte von Uran mit Unsicherheit behaftet.

³ Basierend auf der vorhandenen, unsicheren Datenlage erscheint die Ableitung einer endgültigen verlässlichen Umweltqualitätsnorm zurzeit nicht sinnvoll.

⁴ QS für Süßwasser bezieht sich auf bioverfügbares Zn. QS für Salzwasser bezieht sich auf gelöstes Zn.

Nachfolgend sind die Zusammenfassungen der UQN-Ableitungen der 30 bearbeiteten Substanzen aufgeführt. Der vollständige Abschlussbericht mit den Datenblättern in englischer Sprache mit deutscher Zusammenfassung ist über die Seite

<http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24195>

der ETOX Datenbank erhältlich. Für die in den nachfolgenden Zusammenfassungen aufgeführten Referenzen wird auf die vollständigen Datenblätter verwiesen. Über die Verknüpfungen in der nachfolgenden Zusammenstellung sind die Datenblätter auch einzeln verfügbar.

Tabelle 3: Zusammenstellung der Verknüpfungen zu den vollständigen Datenblättern der ausgewählten Stoffe

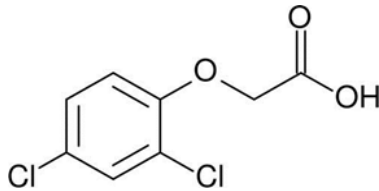
Stoffname	CAS-Nr.	Titel mit Link zur Quelle und Download
2,4-D	94-75-7	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD 2,4 D ACID http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24235
Arsen	7440-38-2	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD ARSEN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24345
Bezafibrat	41859-67-0	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD BEZAFIBRATE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24265
Carbamazepin	298-46-4	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD CARBAMAZEPINE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24221
Carbendazim	10605-21-7	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD CARBENDAZIM http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24234
Chloressigsäure	79-11-8	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD CHLOROACETIC ACID http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24233
Chrom	7440-47-3	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD CHROMIUM http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24347
Dibutylzinn-Kation	14488-53-0	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD DIBUTYL TIN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24260
Dimethoat	60-51-5	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD DIMETHOATE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24232
Dimoxystrobin	149961-52-4	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD DIMOXYSTROBIN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24231
Epichlorhydrin	106-89-8	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD EPICHLORHYDRIN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24239
Erythromycin	114-07-8	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD ERYTHROMYCIN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24269
Flufenacet	142459-58-3	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD FLUFENACET http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24355
Flurtamone	96525-23-4	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD FLURTAMONE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24238
Imidacloprid	138261-41-3	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD IMIDACLOPRID http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24228
Kupfer	7440-50-8	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD COPPER http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24356
Metoprolol	37350-58-6	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD METOPROLOL http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24268
Monobutylzinnkation	78763-54-9	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD MONOBUTYL TIN CATION http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24357
Monolinuron	1746-81-2	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD MONOLINURON http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24230
Nicosulfuron	111991-09-4	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD NICOSULFURON http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24229

Stoffname	CAS-Nr.	Titel mit Link zur Quelle und Download
Omethoat	1113-02-6	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD OMETHOATE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24227
Phosphorsäuretriphenyl-ester	115-86-6	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD TRIPHENYLPHOSPHATE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24358
Phoxim	14816-18-3	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD PHOXIM http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24359
Roxythromycin	80214-83-1	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD ROXITHROMYCIN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24360
Sulcotrion	99105-77-8	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD SULCOTRIONE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24222
Sulfamethoxazol	723-46-6	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD SULFAMETHOXAZOLE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24270
Tetrabutylzinn	1461-25-2	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD TETRABUTYLTIN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24362
Triclosan	3380-34-5	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD TRICLOSAN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24267
Uran	7440-61-1	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD URANIUM http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24363
Zink	7440-66-6	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD ZINC http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24266

Zusammenfassungen der UQN Ableitungen

1 2,4-D Zusammenfassung

1.1 Chemische Identität

Name	2,4-D
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	2,4-Dichlorphenoxyessigsäure
IUPAC Name	2,4-D; (2,4-Dichlorphenoxy)essigsäure
Chemikalienklasse	Herbizid aus der Gruppe der synthetischen Auxine
CAS Nummer	94-75-7
EU Nummer	202-361-1
Summenformel	C ₈ H ₆ Cl ₂ O ₃
Strukturformel	
Molare Masse (g·mol ⁻¹)	221,0

1.2 Verhalten in der Umwelt

2,4-D wird als Herbizid zur selektiven Bekämpfung von breitblättrigen Unkräutern eingesetzt. 2,4-D-Säure wird für Winter- und Sommergetreide, Gründüngungspflanzen, Grassamen, Brachland und an der Grenze zu Ackerland und Weiden (EC, 2001) verwendet. Die Hauptfreisetzung von 2,4-D als Herbizid ist in Böden zu erwarten. Ein Eintrag in Oberflächengewässer erfolgt durch das Aufbringen auf landwirtschaftliche Flächen oder im Run-off von diesen Flächen. Nach 100 Tagen waren 36 % des 2,4-D mineralisiert. In aeroben Böden zeigte sich eine Halbwertszeit (DT₅₀) zwischen 2 und 59 d bei 20 °C unter Laborbedingungen. In Feldstudien lag der DT₅₀-Werte zwischen 4,6 und 17,2 d (EC, 2001).

Aufgrund seines geringen Adsorptionspotentials (K_{oc} 5 - 212 L·kg⁻¹) kann es zu einer Auswaschung aus den Böden kommen, wenn die Substanz in Gebieten mit empfindlichen Böden und/oder Klimabedingungen angewendet wird (EC, 2001). Hierbei hat sich gezeigt, dass die Adsorption von 2,4-D in sauren Böden größer ist als in Böden mit neutralen oder alkalischen pH-Werten. Das geringe Adsorptionspotential deutet letztlich daraufhin, dass 2,4-D möglicherweise Oberflächen- und Grundwasser erreicht. Löst sich 2,4-D in Wasser, so adsorbiert es aufgrund seiner niedrigen K_{oc} wahrscheinlich nicht an Schwebstoffen und Sedimenten. Die DT₅₀ für wässrige Photolyse unter Laborbedingungen bei 25 °C liegt bei 13 d. In einem Wasser/Sediment-System wird 2,4-D in Wasser oder Sediment mit einer DT₅₀ von 29 d abgebaut. Es ist somit keine Persistenz von 2,4-D in der Umwelt zu erwarten. Eine bedeutende Bioakkumulation von 2,4-D im Nahrungsnetz ist ebenso nicht zu erwarten, auch wenn der einzig vorhandene BCF-Wert nicht unter Standardbedingungen erstellt wurde. Dennoch deuten der niedrige K_{ow} im Bereich zwischen 0,18 und -1,01 bei pH-Werten zwischen 5 und 9 auf ein geringes Bioakkumulationspotential.

1.3 Ableitung der Qualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Zum Schutz aquatischer Organismen in Binnenoberflächengewässern wurde nach der Wasserrahmenrichtlinie, Anhang 5 (WFD 2000/60/EC) die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 0,2 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen.

Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC-QS _{freshwater, eco}	<i>Myriophyllum spicatum</i> / 14 d, sedimentfrei EC ₅₀ : 11 µg.L ⁻¹	10	1,1 µg.L ⁻¹
MAC-Q _{saltwater, eco}		50	0,22 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Myriophyllum spicatum</i> / 14 d, sedimentfrei NOEC : 2 µg.L ⁻¹	10	0,2 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}		100	0,02 µg.L ⁻¹
QS _{sediment}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{blota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{blota, hh food}	-	-	Nicht erforderlich

1.4 MAC-QS Umweltqualitätsnorm

1.4.1 Binnen-/Oberflächengewässer

Daten zu der akuten Wirkung von 2,4-D zeigen, dass die niedrigste EC₅₀ von 11 µg.L⁻¹ in einem Versuch mit der Wasserpflanze *Myriophyllum spicatum* in einem sedimentfreien, axenischen System gefunden wurde. Der sensitivste Endpunkt war hierbei das Wurzelwachstum. Die EC₅₀ ist der geometrische Mittelwert aus sechs Werten verschiedener Studien im Rahmen eines Ring-Tests. Der Wert von 11 µg.L⁻¹ wurde für die Ableitung der MAC-QS_{freshwater, eco} genutzt. Zur Ableitung wurde ein Bewertungsfaktor von 10 gewählt, da die spezifische Wirkweise der Substanz bekannt ist und ein repräsentativer Datensatz an Arten von drei verschiedenen taxonomischen Gruppen (Fische, Daphnien und Algen), die drei trophische Ebenen abdecken, zur Verfügung stand. Dies führt zu einer MAC-QS_{freshwater, eco} von 1,1 µg.L⁻¹.

1.4.2 Meeresumwelt

Für die Ableitung der MAC-QS_{saltwater, eco} lagen mindestens ein L(E)C₅₀ von drei trophischen Ebenen des Basisdatensatzes (Fisch, Invertebraten und Algen) und ein L(E)C₅₀ für eine zusätzliche spezifische taxonomische Gruppe (Austern) vor. Darüber hinaus ist der spezifische Wirkmechanismus von 2,4-D bekannt und es ist ein Datensatz für die empfindlichste taxonomische Gruppe (*Myriophyllum spicatum*) vorhanden. Gemäß TGD für UQN (EC, 2011) kann ein Bewertungsfaktor von 50 auf den niedrigsten L(E)C₅₀-Wert zur Ableitung der MAC-QS_{saltwater, eco} angewandt werden. Der L(E)C₅₀ lag bei 0,22 µg.L⁻¹.

1.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnorm

1.5.1 Binnen-/Oberflächengewässer

Makrophyten stellen die sensitivste taxonomische Gruppe in Bezug auf die chronische Exposition gegenüber 2,4-D dar. Die Wurzellänge war der empfindlichste Endpunkt. Die niedrigsten NOEC von $2 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für die Wurzellänge von *Myriophyllum sibiricum* stammt aus einer chronischen Studie über 14 Tage. Dieser Wert wird durch die NOEC-Werte für die Wurzellänge von *M. spicatum* und *M. aquaticum*, die bei jeweils $4,7 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Ratte und Ratte, 2011) und $7 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Ebke et al., 2013) lagen, belegt.

Die 14 d NOEC von $2 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für die Wurzellänge von *Myriophyllum sibiricum* wurde für die Ableitung der AA-QS_{freshwater, eco} eingesetzt. Ein Bewertungsfaktor von 10 wurde gewählt, da langfristige Ergebnisse (NOEC) für Organismen von drei taxonomischen Gruppen (Fisch, Daphnien und Algen), die drei trophische Ebenen darstellen, zur Verfügung standen. Dies führt zu einer AA-QS_{freshwater, eco} von $0,2 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

1.5.2 Meeresumwelt

Langzeitstudien mit Salzwasserorganismen stand für die Ableitung der AA-QS_{saltwater, eco} nicht zur Verfügung. Es wurde daher für die Ableitung der Datensatz der Akutstudien genutzt. Die niedrigste L(E)C₅₀ lag bei $0,22 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Ein Bewertungsfaktor von 100 wurde für die Ableitung der AA-QS_{saltwater, eco} angewendet. Es ergibt sich hieraus eine AA-QS_{saltwater, eco} von $0,02 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

1.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

2,4-D hat nur ein geringes Potential an Schwebstoffe und/oder Sediment zu adsorbieren und hat nur ein geringes Akkumulationspotential. Aufgrund seiner geringen Persistenz und des geringen Bioakkumulationspotentials ergibt sich ein nur geringes Risiko für benthische Organismen. Es wurde keine Bewertung für Sedimentorganismen durchgeführt und somit kein QS_{Sediment} abgeleitet.

1.7 Ableitung der Biota Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

In Anbetracht des niedrigen Bioakkumulationspotentials und der geringen Toxizität auf Säugtiere und Vögel wurde keine Bewertung für Biota durchgeführt. Es wurde keine QS_{biota, secpois} abgeleitet.

1.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota Standards zum Schutz menschliche Gesundheit wird allein durch die intrinsischen toxischen Eigenschaften der Substanz beeinflusst. Für 2,4-D wurden keine genotoxischen, karzinogenen oder reproduktionstoxischen Eigenschaften festgestellt. Die Substanz ist nicht als giftig bei oraler Aufnahme klassifiziert und erfüllt damit nicht die Anforderungen des TGD für UQN (EC, 2011) zur Ableitung eines Biota Standards für den Schutz der menschlichen Gesundheit, da keine Sekundärvergiftung für Menschen durch den Verzehr von Fischerei-Produkten zu erwarten ist.

1.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Anhang I
Pflanzenschutzmittelrichtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Anhang I
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt in Anhang I
PBT Substanzen	<p>Keine PBT Substanz, erfüllt T Kriterium (nach Verordnung (EU) No. 253/2011 Anhang XIII (EU, 2011))</p> <p><u>Persistenz</u> DT₅₀ (Boden) = 2 - 59 d (P Schwellenwert > 120 d) DT₅₀ (Wasser/Sediment System) = 29 d</p> <p><u>Bioakkumulation</u> BCF = 10 (Schwellenwert > 2000) Basierend auf dem log P_{ow} Wert (log P_{ow} of 0,18, -0,83, -1,01 jeweils bei pH 5, 7, 9) besitzt 2,4-D kein Akkumulationspotential (EC, 2001)</p> <p><u>Toxizität</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1 oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008). Es gibt keine Hinweise der chronischen Toxizität oder Spezifischen Zielorgan-Toxizität nach wiederholte Exposition (STOT RE Kategorie 1 oder 2).</p> <p>Kriterium für „T Substanz“ erfüllt: Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L⁻¹</p>
Stoffe mit besonderer Besorgnis (SVHC) (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Herbicide Resistance Classification (HRAC)	0
Endokrine Wirkung	Potential für endokrine Aktivität in Fisch bei hohen Konzentrationen (nicht umweltrelevant). Derzeit ist nicht klar, ob 2,4-D eine endokrine Wirkung darstellt.

1.10 Existierende Qualitätsstandards für 2,4-D

Trinkwasser-Standards für 2,4-D gibt es von der Bundesanstalt für Risikobewertung (BfR, 2013) und der Europäischen Union (EU-Richtlinie 98/83/EG; EU, 1998). Nach Angaben der BfR (2013) liegt der Trinkwasser Leitwert bei 175 µg.L⁻¹ für 2,4-D, wobei der Trinkwasser Maßnahme Wert bei 10 µg.L⁻¹ liegt.

Nach der EU-Richtlinie 98/83/EG ergibt sich ein Trinkwassergrenzwert von 0,1 µg.L⁻¹.

AA-EQS _{freshwater, eco}	0,2 µg.L ⁻¹	Oekotoxzentrum, 2011
MAC-EQS _{freshwater, eco}	1,3 µg.L ⁻¹	Oekotoxzentrum, 2011
AA-EQS _{freshwater, eco}	0,3 µg.L ⁻¹	Crane et al., 2007
MAC-EQS _{freshwater, eco}	1,3 µg.L ⁻¹	Crane et al., 2007
Trinkwassergrenzwert	0,1 µg.L ⁻¹ (bevorzugter regulativer Standard)	Drinking water Directive 98/83/EC EU, 1998
LW _{TW} Trinkwasser Leitwert (guide value for drinking water)	175 µg.L ⁻¹	BfR, 2013
MW _{TW} (UBA) Trinkwasser Maßnahmewert (action threshold for drinking water)	10,0 µg.L ⁻¹	
ADI	50 µg.kg ⁻¹ bw/day	BfR, 2013
AOEL	150 µg.kg ⁻¹ bw/d, AOEL systemisch	EC, 2001

2 Arsen Zusammenfassung

2.1 Chemische Identität

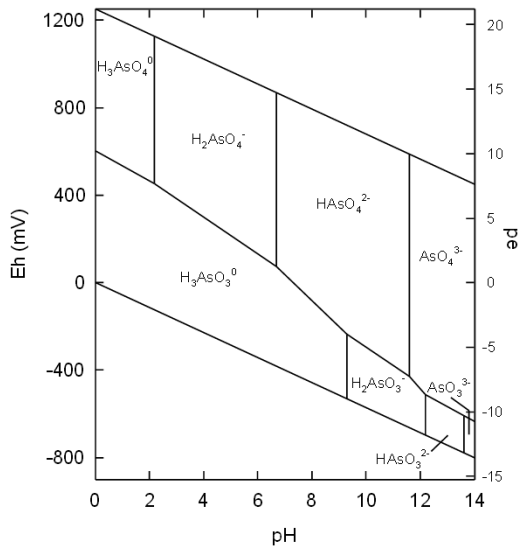
Name	Arsen
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	Arsen
CAS Name	Arsen
Chemikalienklasse	Halbmetall
CAS Nummer	7440-38-2
EC Nummer	-
Summenformel	As
Molare Masse (g.mol ⁻¹)	74,91

Das Halbmetall Arsen ist ein natürlich vorkommendes Element und kommt in geringen Konzentrationen in praktisch allen Böden vor. Arsenverbindungen sind in verschiedenen Konzentrationen somit in allen Umweltmedien vorhanden. Anorganische Arsenverbindungen wie Arsen trioxid - As(III) und Arsen pentoxid - As(V) stammen sowohl aus geogenen Quellen als auch aus industriellen Emissionen und sind im Hinblick auf ihre chronische Toxizität und kanzerogene Wirkung relevant.

2.2 Verhalten in der Umwelt

Die häufigsten natürlich vorkommenden As-Spezies in Gewässern sind Arsenit (As(III)) und Arsenat (As(V)). Die Mobilität dieser Spezies wird durch den pH-Wert, die Redoxspannung, die Gegenwart von Fe(III)-, Al(III)-, Mn(III/IV)-Oxiden und -Hydroxiden sowie Huminstoffen und Tonmineralien stark beeinflusst (Bissen und Frimmel, 2003). In aeroben Gewässern liegt Arsen in der Oxidationsstufe 5 vor (As(V)). Unter stark sauren Bedingungen (pH < 2) kommt As als H_3AsO_4 vor, im pH-Wert Bereich zwischen 2 und 11 dissoziiert die Arsensäure zu H_2AsO_4^- and HAsO_4^{2-} . Niedriges Redoxpotential führt zur Oxidationsstufe 3 (As(III)), wobei wiederum je nach pH die undissoziierte Säure oder die Hydrogenarsenite vorliegen (Bissen and Frimmel, 2003). Die Zusammenhänge sind in Abbildung 1 veranschaulicht.

Abbildung 1: Arsen Speziation (Arsenit und Arsenat) in Abhängigkeit des pH Wertes (Smedley and Kinniburgh (WHO, 2001))



2.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen

Daten zur Ableitung der Umweltqualitätsnormen wurden dem Bericht von Lepper et al. (2007) entnommen und durch Literaturrecherchen in öffentlich zugänglichen Datenbanken ergänzt.

Die Bewertung baut auch auf Informationen zu Arsen auf, die durch die internationale Kommission zum Schutz des Rheins veröffentlicht wurden (IKSR, Bericht 164).

Weiterhin lagen Berichte über die Gefährdung durch Arsen vom U.S. Fish and Wildlife Service (Eisler, 1988) und der U.S. Environmental Protection Agency von 1984 (USEPA, 1984) vor.

Da Arsen je nach Umweltbedingungen in verschiedenen Oxidationsstufen und Formen vorliegen kann, wurden Daten zu untenstehenden Verbindungen recherchiert (CAS Nummer Eingabe bei ECOTOX Datenbank). Die Ableitung der UQN erfolgte auf der vereinten Datenbasis von As(III) und As(V).

CAS Number	Formel	Chemischer Name
1303-28-2	As_2O_5	Arsenpentoxid
1327-53-3	As_2O_3	Arsentrioxid
7440-38-2	As	Arsen
7631-89-2	AsH_2NaO_4	Natriumdihydrogenarsenat
7778-39-4	AsH_3O_4	Arsensäure
7778-43-0	$AsHNa_2O_4$	Dinatriumhydrogenarsenat
7784-46-5	$AsNaO_2$	Natriumarsenit
13464-38-5	$AsNa_3O_4$	Trinatriumarsenat
15502-74-6	$AsO_3^{(3-)}$	Arsenit
7784-34-1	$AsCl_3$	Arsenrichlorid

CAS Number	Formel	Chemischer Name
7778-44-1	Ca ₃ As ₂ O ₄	Calciumarsenat
10048-95-0	AsHNa ₂ O ₄ x 7 H ₂ O	Dinatriumhydrogenarsenatheptahydrat
10103-60-3	AsH ₂ NaO ₄	Natriumdihydrogenarsenat
15120-17-9	Na ₃ AsO ₄	Natriumarsenat

Zum Schutz aquatischer Organismen in Binnenoberflächengewässern wurde nach der Wasserrahmenrichtlinie, Anhang 5 (WFD 2000/60/EC) die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 1,3 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen.

Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN*
MAC _{freshwater, eco}	SSD HC _{5 fw and sw data} 66,6 µg.L ⁻¹	10	6,6 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}		10	6,6 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	SSD HC _{5 fw and sw data} 6,6 µg.L ⁻¹	5	1,3 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}		5	1,3 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater, EqP}	AA-QS _{freshwater, eco} 1,3 µg.L ⁻¹	EqP ¹	8590 - 263000 µg.kg ⁻¹ _{dw} 3304 - 101150 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{sediment, saltwater, EqP}			
QS _{biota, sec pols}	---	---	Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	Da karzinogener Stoff, keine UQN Ableitung	---	---

¹ es wurden berechnete K_p_{sediment-water} (6607 L.kg⁻¹) und K_p_{Schwebstoffe-Wasser} (10000 L.kg⁻¹) Werte (Lepper et al., 2007) und ein gemessener K_d_{natural sediment-water} (450 L.kg⁻¹) (Mamindy-Pajany et al. 2013) verwendet.

2.4 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

2.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für die Bewertung der Langzeiteffekte in Süß- und Salzwasser liegen neben dem Grunddatensatz auch Ergebnisse für zusätzliche spezifische taxonomische Gruppen vor (Bakterien, Makrophyten, Mollusken und Amphibien). Das niedrigste Langzeittestergebnis ist die LOEC von 5 µg.L⁻¹, die mit As(V) und der Goldalge *Stichogloea doederleinii* erhoben wurde. Das Testergebnis wurde einem

Übersichtsartikel über die Anwendbarkeit der verschiedenen internationalen Algen-Testrichtlinien entnommen, verfasst von Hörnström (1990), einem Mitarbeiter des National Environmental Protection Board, Schweden. Wenn auch die Validität des Ergebnisses nicht überprüft werden kann, so wird davon ausgegangen, dass der Test nach den entsprechenden Richtlinien durchgeführt wurde und deren Validitätskriterien erfüllt wurden. Die LOEC wird im Rahmen der UQN Ableitung einer EC_{10} gleichgesetzt, vergleichbar mit NOEC/ EC_{10} Werte der gleichen Größenordnung ($< 10 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) und vergleichbar mit LOEC Werten von 10 und $13 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, die auch für marine Kieselalgen und Seeigelembryos gefunden wurden. Diese Daten bestätigen die hohe Toxizität von Arsen gegenüber einigen Spezies.

Nach dem Sicherheitsfaktoren-Konzept würde sich unter Verwendung des Sicherheitsfaktors von 10 auf die niedrigste NOEC nach dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) ein $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,5 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$ ergeben.

Da unter Einbeziehung von Testergebnissen aus Veröffentlichungen, die mangels Verfügbarkeit der Testrohdaten (typisch bei Veröffentlichungen) nicht als „valide“ im Sinne der Klimisch Codierungen 1 und 2 eingestuft wurden, aber als „zusätzliche/unterstützende Informationen“ (Klimisch 4) gewertet werden konnten, stand eine relativ große Datenbasis zur Verfügung. Die vereinte Datenbasis aus Süßwasser- und Salzwasser-Organismen (keine unterschiedliche Sensitivität nach EC, 2011) enthielt 43 NOEC/ EC_{10} Werte aus acht taxonomischen Gruppen.

Mit diesen Daten wurde eine Artenempfindlichkeitsverteilung (SSD) zur Ableitung der Umweltqualitätsnorm durchgeführt. Der HC_5 Wert der vereinten Datenbasis aus Süßwasser- und Salzwasser-Organismen betrug $6,62 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$.

Unter Verwendung des Sicherheitsfaktors von 5 nach dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) ergibt sich ein $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $1,3 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$, der als Qualitätsstandard vorgeschlagen wird.

Dieser Wert ist ungefähr 2-fach höher als der mediane Messwert in Oberflächengewässern nach FOREGS (2005).

2.4.2 Meeresumwelt

Zusätzlich zu den taxonomischen Gruppen des Süßwassers sind für drei weitere typisch marine Gruppen Kurzzeitergebnisse verfügbar (Stachelhäuter, Muschel, Makroalge). Nach dem Sicherheitsfaktoren Konzept würde sich unter Verwendung des Sicherheitsfaktors von 10 auf den niedrigsten NOEC ($5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) der vereinten Daten nach dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) ein $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,5 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$ ergeben.

Der bevorzugte SSD-Ansatz unter Verwendung des kombinierten Süß- und Salzwasser-Datensatzes resultiert unter Verwendung des Bewertungsfaktors 5 auf den HC_5 Wert von $6,62 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$ in der gleichen Konzentration für den Qualitätsstandard wie für die Binnenoberflächengewässer: $AA-QS_{\text{marin}}$ von $1,3 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$ und wird als Qualitätsstandard vorgeschlagen.

Da Langzeitdaten für mindestens zwei typische marine taxonomische Gruppen vorliegen, ist ein erhöhter Bewertungsfaktor zur Berücksichtigung der Unsicherheit bei der Extrapolation auf das marine Ökosystem nicht erforderlich.

2.5 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

2.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für eine Bewertung der akuten Wirkung auf pelagische Organismen liegen für mindestens drei Trophieebenen Kurzzeit-Toxizitätsdaten vor (Basisdatensatz). Zusätzlich stehen Daten zu Bakterien, Protozoen, Makrophyten, Insekten und Amphibien zur Verfügung.

Der niedrigste akute Wert ist eine E_rC_{50} von $14,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für die Grünalge *Chlamydomonas reinhardtii*, die mit As(V) in Phosphat-limitiertem Medium erhoben wurde (Wang et al., 2013).

Nach dem Sicherheitsfaktoren-Konzept würde sich unter Verwendung des Sicherheitsfaktors von 10 nach dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) ein MAC-QS von $1,41 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$ ergeben.

Unter Einbeziehung von Testergebnissen, die mangels Verfügbarkeit der Testrohdaten (typisch bei Veröffentlichungen) nicht als „valide“ im Sinne der Klimisch Codierungen 1 und 2 klassifiziert wurden, aber als „zusätzliche/unterstützende Informationen“ (Klimisch 4) gewertet wurden, ergab sich eine relativ große Datenbasis. Die vereinte Datenbasis aus Süßwasser- und Salzwasser-Organismen (keine unterschiedliche Sensitivität bei den empfindlichsten Organismengruppen Algen und Crustacea, nach EC, 2011) enthielt 69 NOEC/EC₁₀ Werte aus elf taxonomischen Gruppen.

Mit diesen Daten wurde eine Artenempfindlichkeitsverteilung (SSD) zur Ableitung der Umweltqualitätsnorm durchgeführt. Der HC₅ Wert der vereinten Datenbasis aus Süßwasser- und Salzwasser-Organismen betrug $66,6 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$.

Unter Verwendung des Sicherheitsfaktors von 10 nach dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) ergibt sich ein MAC-QS_{freshwater, eco} von $6,6 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$, der als Qualitätsstandard vorgeschlagen wird.

Dieser Wert ist 2,7-fach höher als der 90-perzentil Messwert in Oberflächengewässern nach FOREGS (2005).

2.5.2 Meeresumwelt

Zusätzlich zu den taxonomischen Gruppen des Süßwassers sind für zwei weitere typisch marine Gruppen Kurzeitergebnisse verfügbar (Echinodermen, Polychaeten). Die niedrigste recherchierte EC₅₀ von $3 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ wird für die Nutzung im Sicherheitsfaktorenkonzept als nicht valide erachtet, da nur eine Kurzfassung verfügbar ist. Der Konzentrationsbereich des nächsthöheren verlässlichen LC₅₀ Wertes von $11 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ aus einem Test mit dem Copepoden *Strongylocentrotus purpuratus* liegt in Bereich der EC₅₀ Werte von *Skeletonema costatum* (Geometrischer Mittelwert aus zwei Werten = $15 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) und von der Seegurke *Strongylocentrotus purpuratus* und wird für die Ableitung der UQN verwendet.

Nach dem Sicherheitsfaktoren-Konzept würde sich unter Verwendung des Sicherheitsfaktors von 10 auf die niedrigste valide E/LC₅₀ von $11 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$ nach dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) ein MAC-QS_{saltwater, eco} von $1,1 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$ ergeben.

Da Kurzzeitdaten für mindestens zwei typische marine taxonomische Gruppen vorliegen, ist ein erhöhter Bewertungsfaktor zur Berücksichtigung der Unsicherheit bei der Extrapolation auf das marine Ökosystem nicht erforderlich.

Der bevorzugte SSD-Ansatz unter Verwendung aller kombinierten Süß- und Salzwasser-Daten resultiert unter Verwendung des Bewertungsfaktors 10 auf den HC₅ Wert von $66,6 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$. in der gleichen Konzentration für den Qualitätsstandard wie für die Binnenoberflächengewässer: MAC-QS_{marin} von $6,6 \mu\text{g As}\cdot\text{L}^{-1}$ und wird als Qualitätsstandard vorgeschlagen.

2.6 Ableitung von QS_{Sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien zur Durchführung einer Bewertung zum Schutz benthischer Organismen sind nach Lepper et al. (2007) erfüllt (estimated log $K_{\text{Sediment-Water}} > 3$). Es lagen nur wenige Sediment-testergebnisse vor. Nur in einer Studie wurde die Wirkung von Arsen auf Sedimentorganismen untersucht (Liber et al., 2011). Hierbei ergaben sich LC50 Werte aus 10 Tage Tests mit 7 -14 d alten *Hyalella azteca* und 8 d alten *Chironomus dilutus*, die aufgestocktem Sediment ausgesetzt waren. Da die Testdurchführung nicht denen der allgemein anerkannten Richtlinien entsprach (Tiere bei Teststart zu alt, und die Testdauer von 10 d zu kurz für einen chronischen Test) können die Tests als ergänzende Informationen zur akuten Toxizität gewertet werden.

Für *H. azteca* betrug die LC_{50} 532 000 $\mu\text{g As(III).kg}^{-1}$ Sediment TG und für *C. dilutus* 642 000 $\mu\text{g As(III).kg}^{-1}$ Sediment TG. Bezogen auf die Porenwasserkonzentration waren die entsprechenden Werte 27750 und 45290 $\mu\text{g.L}^{-1}$ Porenwasser.

Für *H. azteca* betrug die NOEC für Überleben und Wachstum 462 000 $\mu\text{g As(III).kg}^{-1}$ Sediment TG Für *C. dilutus* betrug die NOEC Werte für Überleben 39000 und für Wachstum $< 39000 \mu\text{g As(III).kg}^{-1}$ Sediment TG. Bei diesen NOEC Konzentrationen lagen die gemessenen Arsenkonzentrationen im Porenwasser bei 16430 bzw. 420 $\mu\text{g.L}^{-1}$.

Die $QS_{\text{SedimentEqP}}$ wurde anhand der Gleichgewichtsverteilung nach dem Leitfaden (EC, 2011) aus der AA- $QS_{\text{freshwater}}$ von 1,3 $\mu\text{g.L}^{-1}$ und den K_p Werten für Sediment-Wasser (6607 L.kg^{-1}) und Schwebstoff-Wasser von 10000 L.kg^{-1} abgeschätzt. Die berechneten Sedimentkonzentrationen für die $QS_{\text{SedimentEqP, dw}}$ lagen zwischen 8590 und 13000 $\mu\text{g As.kg}^{-1}$ Sediment TG bzw. für die $QS_{\text{SedimentEqP, WW}}$ zwischen 3304 und 5000 $\mu\text{g As.kg}^{-1}$ Sediment FG.

Unter Verwendung des höchsten gemessenen K_d Wertes (450 L.kg^{-1}) von Mamindy-Pajany et al. (2013), der mit natürlichem Sediment bestimmt wurde, ergibt sich eine $QS_{\text{Sediment, EqP, dw}}$ von 263000 $\mu\text{g As.kg}^{-1}$ Sediment TG ($101154 \mu\text{g As.kg}^{-1}$ Sediment FG).

2.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Nach Lepper et al. (2007) liegen keine Hinweise auf eine signifikante Biomagnifikation in der aquatischen Nahrungskette vor. Es wird kein signifikantes Risiko für Räuber, z.B. Säugetiere und Vögel, durch sekundäre Vergiftung erwartet.

2.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Nach EFSA (2014) lässt sich der Kenntnisstand wie folgt zusammenfassen:

Anorganische Arsenverbindungen sind giftiger als organische Arsenverbindungen. Obwohl beide Formen des anorganischen As potenziell schädlich für die menschliche Gesundheit sind, wirkt As(III) giftiger als As (V) (Hughes et al., 2011). Die Internationale Agentur für Krebsforschung (IARC) klassifizierte Arsen und anorganische As-Verbindungen als "krebserregend für den Menschen" (Gruppe 1) auf der Grundlage ausreichender Hinweise auf Kanzerogenität beim Menschen (IARC, 1973, 1980). Im Jahr 2010 zog der Gemeinsame FAO / WHO-Sachverständigenausschuss für Lebensmittelzusatzstoffe (JECFA) die vorläufige duldbare wöchentliche Aufnahme (PTWI) von 15 $\mu\text{g.kg}^{-1}$ Körpergewicht für anorganisches Arsen zurück. Basierend auf epidemiologischen Studien identifizierte JECFA 3,0 $\mu\text{g.kg}^{-1}$ Körpergewicht pro Tag als die untere Vertrauensgrenze der Benchmark-Dosis für eine 0,5 % erhöhte Inzidenz von Lungenkrebs ($BMDL_{0,5}$) (bzw. 2-7

$\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Körpergewicht pro Tag basierend auf dem Bereich der geschätzten Gesamtnahrungs-Exposition) (WHO, 2011b).

Zuvor hatte die Europäische Behörde für Lebensmittelsicherheit (EFSA) im Oktober 2009 eine Stellungnahme zu Arsen in Lebensmitteln veröffentlicht und darin den von dem JECFA-Gremium der WHO/FAO aufgestellten PTWI Wert (vorläufige duldbare wöchentliche Aufnahme) von $15 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Körpergewicht für anorganisches Arsen als nicht mehr angemessen beurteilt. Das Gremium legte ein BMDL $0,1$ zwischen $0,3$ und $8 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Körpergewicht pro Tag für ein erhöhtes Risiko für Krebserkrankungen der Lunge, der Haut und Blase, sowie Hautläsionen (EFSA CONTAM-Panel, 2009) fest. Derzeit gibt es keine Höchstgehalte (MLs) für Arsen in Lebensmitteln auf EU-Ebene. In einigen Mitgliedstaaten sind in der nationalen Gesetzgebung MLs festgelegt worden (EFSA; 2014) . In der Trinkwasserverordnung (Richtlinie 98/83/EG) ist ein parametrischer Wert von $10 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ ohne Unterscheidung der Arsen-Formen festgelegt. Bei natürlichen Mineralwässern (Richtlinie 2003/40/EG der Kommission) beträgt der maximal zulässige Wert ebenfalls $10 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, bezogen auf Gesamtarsen (EFSA, 2014).

2.9 Existierende Qualitätsstandards für Arsen

In Deutschland dürfen nach der Mineral- und Tafelwasser-Verordnung (Min/TafelWV, 2006) diese Wässer für Säuglingsernährung nur gewerbsmäßig in den Verkehr gebracht werden, wenn der Gesamtarsengehalt von $5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ nicht überschritten wird.

Weitere verfügbare Qualitätsanforderungen können u.a. im Informationssystem ETOX (<http://webetox.uba.de/webETOX>) recherchiert werden.

JD-UQN Binnengewässer ¹	Hintergrundwert + $0,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	IKSR, Bericht 164, 2009
JD-UQN Salzwasser ¹	Hintergrundwert + $0,6 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	IKSR, Bericht 164, 2009
ZHK-UQN Binnengewässer ²	Hintergrundwert + $8 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	IKSR, Bericht 164, 2009
ZHK-UQN Salzwasser ²	Hintergrundwert + $1,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	IKSR, Bericht 164, 2009
Qualitätsziel Süßwasser	$24 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Österreich, IKSR, Bericht 164, 2009
Qualitätsziel Süßwasser	$32 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Niederlande, IKSR, Bericht 164, 2009
AA-QS Süßwasser	$50 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	UK TAG Final, 2008
AA-QS Salzwasser	$25 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	UK TAG Final, 2008
Qualitätsziel _{sediment}	$55 \text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$	Niederlande, IKSR, Bericht 164, 2009
Zielvorgabe _{sediment}	$40 \text{mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ Sediment	IKSR, Bericht 164, 2009
UQN _{Sediment/Schwebstoff}	$40 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Schwebstoff/Sediment	Deutschlang OGewV
Mineral- und Tafelwasser für Säuglingsernährung	$5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Min/TafelWV, 2006

¹JD = Jahresdurchschnitt – höchstzulässige Konzentration (gleichwertig dem AA-QS)

²ZHK = Maximale Konzentration Durchschnitt – höchstzulässige Konzentration (gleichwertig dem MAC-QS)

2.10 Umweltkonzentrationen

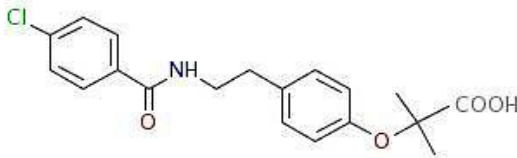
Statistische Daten für Arsen aus dem geochemischen Atlas für Europa (FOREGS, 2005).

Media	Parameter	Einheit	Anzahl	Minimum	Median	Mittelwert	Std. Abw.	90er Perzentil	Maximum
Oberflächengewässer	As	µg/L	807	<0,01	0,63	1,24	2,25	2,45	27,3
Flusssediment	As	mg/kg	852	<1,0	6,00	10,1	15,6	22,0	241
Flusssediment	As (AR)	mg/kg	845	<5,0	6,00	9,50	14,8	19,0	231

AR=aqua regia digestion, Std. Abw. = Standard Abweichung

3 Bezafibrat Zusammenfassung

3.1 Chemische Identität

Name	Bezafibrat
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	2-(4-{2-[(4-chlorbenzoyl)amino]ethyl}phenoxy)-2-methylpropionsäure
CAS Name	Bezafibrat
Stoffgruppe	Phenoxyacetat
CAS Nummer	41859-67-0
EC Nummer	255-567-9
Summenformel	C ₁₉ H ₂₀ Cl ₁ N ₁ O ₄
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	361,8

Bei dem Wirkstoff Bezafibrat handelt es sich um ein Clofibrat-Analogum, das als Lipidsenker bei Störungen des Fettstoffwechsels eingesetzt wird (Roche online Lexikon Medizin).

3.2 Verhalten in der Umwelt

Es waren keine Daten über den Verbleib der Substanz in der Umwelt verfügbar.

Bezafibrat ist mit $1,55 \times 10^{-3} \text{ g.L}^{-1}$ schwer wasserlöslich. Aufgrund des ermittelten K_{oc} von 205 wird keine Bindung an Sediment und Schwebpartikel erwartet. Bezafibrat ist nicht leicht bioabbaubar. Ein Abbau von 12 % in 28 Tagen wurde in der Bioabbaubarkeitsstudie „Manometric Respirometry Test“ nach OECD No. 301 F festgestellt (Roche, 2004).

Aufgrund der berechneten K_{oc} Werte von 205 und 414 L.kg^{-1} wird Bezafibrat als mobil im Boden angesehen.

Eine Verflüchtigung von Bezafibrat ist wegen der niedrigen Henry's Law Konstante ($3,8 \times 10^{-11} \text{ Pa.m}^3.\text{mol}^{-1}$) nicht zu erwarten.

Der BCF von 783 und der $\log K_{ow}$ zwischen 3,97 und 4,25 lassen auf eine mögliche Anreicherung in der Nahrungskette schließen.

3.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) AA-QS_{freshwater, eco} für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL (2000/60/EC), Anhang 5 (WFD, 2000) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 2,3 µg.L⁻¹) als „Gesamt UQN“ vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie zur QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Anabaena sp.</i> / 24 h	10	762 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwaterwater, eco}	EC ₅₀ : 7620 µg.L ⁻¹	100	76 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Ceriodaphnia dubia</i> / 7 d / Reproduktion	10	2,3 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwaterwater, eco}	NOEC : 23 µg.L ⁻¹	100	0,23 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	QS _{fw} = 2.3 µg.L ⁻¹	EqP	19727 µg.kg ⁻¹ _{ww} 51290 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{sediment, saltwater}	QS _{sw} = 0,23 µg.L ⁻¹	EqP	1973 µg.kg ⁻¹ _{ww} 5129 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{blota, sec pols}	Affen / 12 Monates / oral NOAEL : ~ 125 mg.kg ⁻¹ .d ⁻¹	30	106 µg.L ⁻¹
QS _{blota, hh food}	-	-	Nicht erforderlich

3.4 MAC-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

3.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Kurzzeitergebnisse waren für verschiedene Arten der drei Trophiestufen (Fisch, wirbellose Tiere und Algen) verfügbar. Blaualgen reagierten am empfindlichsten in akuten Tests mit Bezafibrat. Das niedrigste Kurzzeitergebnis, die 24 h EC₅₀ von 7620 µg.L⁻¹ für *Anabaena sp.*, wurde für die Ableitung der Qualitätsnorm MAC_{freshwater, eco} verwendet. Der Bewertungsfaktor von 10 wurde als angemessen angesehen, da der Datensatz für Kurzzeit-Toxizität vollständig, der empfindlichste Organismus darin enthalten und der spezifische Wirkmechanismus der Substanz bekannt war. Mit dem Bewertungsfaktor 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium MAC-QS_{freshwater, eco} von 762 µg.L⁻¹.

3.4.2 Meeresumwelt

Für die Beurteilung der Wirkung auf Salzwasserorganismen wurden die Kurzzeit-Testergebnisse der Studien mit Süßwasserorganismen herangezogen, da keine Daten für marine taxonomische Gruppen vorlagen. Für die Ableitung der MAC-QS_{saltwater, eco} wurde der Bewertungsfaktor 100 angewandt. Hieraus ergibt sich ein Qualitätsstandard MAC-QS_{saltwater, eco} von 76,2 µg.L⁻¹.

3.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

3.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Zu Ableitung der AA-QS_{freshwater, eco} lag ein vollständiger Grunddatensatz zur chronischen Wirkung von Bezafibrat vor. Langzeitergebnisse waren für Arten der drei Trophie Ebenen (Fisch, wirbellose Tiere und Algen) verfügbar. Zusätzlich, lagen die Daten für spezifische taxonomische Gruppen (Rotifera, Cnidaria) vor. Als empfindlichste Gruppe wurden Krebstiere (*Ceriodaphnia dubia*) identifiziert.

Die niedrigste NOEC stellt die 7 d NOEC von 23 µg.L⁻¹ für *Ceriodaphnia dubia* dar, die für den Endpunkt Reproduktion ermittelt wurde. Diese NOEC wurde für die AA-QS Ableitung herangezogen.

Da Langzeitergebnisse für drei Spezies aus drei Trophiestufen (Fische, Daphnien und Algen) vorlagen, wurde der Bewertungsfaktor 10 für die Ableitung der Qualitätsnorm angewandt. Hieraus ergibt sich ein AA-QS_{freshwater, eco} von 2,3 µg.L⁻¹

3.5.2 Meeresumwelt

Es liegen Langzeitdaten für Süßwasserarten vor, die drei Trophiestufen präsentieren. Der Bewertungsfaktor 100 wurde auf den niedrigsten NOEC-Wert von 23 µg.L⁻¹ für *Ceriodaphnia dubia* angewandt. Daraus ergibt sich ein AA-QS_{saltwater, eco} von 0,23 µg.L⁻¹.

3.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz benthischer Organismen sind erfüllt. Die log K_{ow} Werte (3,97 - 4,25) liegen über dem Schwellenwert von log K_{ow} 3.

Für Sedimentorganismen lagen keine Testergebnisse aus akuten oder chronischen Studien vor. Zur Ermittlung der Sediment-Qualitätsnormen aus den Wasserkonzentrationen wurde der Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten-Ansatz (Equilibrium Partitioning) gewählt. Gemäß dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) wurde auf Basis des AA-QS_{fw, eco} von 2,3 µg.L⁻¹ und des K_{oc} Wertes von 414 L.kg⁻¹ (worst case) ein QS_{sediment, EqP} von 19727 µg.kg⁻¹ (FG) (entsprechend 51290 µg.kg⁻¹ (TG)) für Sedimente der Binnen-/Oberflächengewässer- und der Meeresumwelt abgeleitet.

3.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Bei einem BCF von 783 kann eine Bioakkumulation von Bezafibrat in der Nahrungskette nicht ausgeschlossen werden. Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung im Hinblick auf den Schutz vor einer sekundären Vergiftung innerhalb der Nahrungskette sind mit einem BCF von >100 erfüllt. Für die Ableitung der QS_{biota, sec pois} wurde der NOAEL von 125000 µg.kg⁻¹ kg/Tag aus einer Studie an Affen über 12 Monate herangezogen. Die Ableitung der QS_{biota sec pois} wurde gemäß der Leitlinie „Technical Guidance for Deriving Environmental Quality Standards, Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) durchgeführt. Dabei wurde für die Umrechnung von NOAEL (Dosis) aus dem Säugetierversuch in NOEC (Konzentration) der Umrechnungsfaktor 20 angewandt. Daraus ergab sich eine NOEC von 2500000 µg.kg⁻¹.

Die Qualitätsnorm für Biota wurde auf Basis des Standardansatzes nach dem Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) bestimmt. Aufgrund der Studiendauer der Studie mit Affen von 12 Monate

wurde ein Bewertungsfaktor von 30 für die Ableitung herangezogen. Es ergab sich ein $QS_{\text{biota, sec pois, fw}}$ von $83333 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Körpergewicht.

Für die Ableitung der Qualitätsnorm für den marinen Bereich wurde ein Default-BMF von 1 gemäß der Leitlinie (EC, 2011) angewandt. Hieraus ergab sich ein $QS_{\text{biota, sec pois, sw}}$ von ebenfalls $83333 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Körpergewicht und für die Wasserphase eine entsprechende Qualitätsnorm von $106 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für Süß- und Salzwasser Ökosysteme.

3.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota Standards zum Schutz menschliche Gesundheit wird allein durch die intrinsischen toxischen Eigenschaften der Substanz beeinflusst. Für Bezafibrat wurden keine genotoxischen, karzinogenen oder reproduktionstoxischen Eigenschaften festgestellt. Die Substanz ist nicht als giftig bei oraler Aufnahme klassifiziert und erfüllt damit nicht die Anforderungen des TGD für UQN (EC, 2011) zur Ableitung eines Biota Standards für den Schutz der menschlichen Gesundheit, da keine Sekundärvergiftung für Menschen durch den Verzehr von Fischerei-Produkten zu erwarten ist.

3.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt
PBT Substanzen	Keine PBT Substanz (Verordnung (EU) No 253/2011, Anhang XIII, (EU, 2011)) Die Substanz ist nicht leicht biologisch abbaubar <u>Persistenz:</u> DT ₅₀ (Wasser) - keine Daten DT ₅₀ (Wasser/Sediment) - keine Daten DT ₅₀ (Boden) - keine Daten <u>Bioakkumulation:</u> BCF = 783,4 (P Schwellenwert > 2000) <u>Toxizität:</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1 oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008). Es gibt keine Hinweise der chronischen Toxizität oder Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholte Exposition (STOT RE Kategorie 1 oder 2). Kriterien für „T Substanz“ sind nicht erfüllt

Stoffe mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Keine Daten

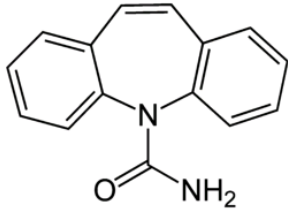
3.10 Existierende UQN-Vorschläge für Bezafibrat

PNEC ¹	0,46 µg.L ⁻¹	IKSR, Internationale Kommission zum Schutz des Rheins.
PNEC ¹	6,0 µg.L ⁻¹	LANUV NRW, 2007
AA-EQS	0,46 µg.L ⁻¹	Oekotoxzentrum, Switzerland, 2010
MAC-EQS	76 µg.L ⁻¹	

¹ PNEC - abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentration (gleichwertig dem AA-QS_{freshwater, eco})

4 Carbamazepin Zusammenfassung

4.1 Chemische Identität

Name	Carbamazepin
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	5H-Dibenz[b,f] azepin-5-carboxamide
CAS Name	Carbamazepine
Chemische Klasse	Dibenzazepin, Harnstoff Derivat
CAS Nummer	298-46-4
EC Nummer	206-062-7
Summenformel	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	236,28

Carbamazepin ist ein weitverbreitetes Humanarzneimittel, das vor allem zur Behandlung von Epilepsien und bipolaren Störungen eingesetzt wird. Es gehört zu der chemischen Klasse der Dibenzazepine und ist der Wirkstoffklasse der Harnstoffderivate zuzuordnen.

4.2 Verhalten in der Umwelt

Den Haupteintragspfad für Carbamazepin in die Umwelt stellen die kommunalen Kläranlagen dar. Carbamazepin besitzt eine relativ geringe Wasserlöslichkeit von 0,12 g/L (25 °C). Die K_{oc} Werte für Sediment und Boden zwischen 83 und 2630 L/kg lassen auf ein mäßiges Potential zur Adsorption an Schwebstoffe und Sediment schließen. Carbamazepin ist beständig gegenüber Hydrolyse, wird aber durch Photolyse mit einer DT_{50} von 100 - 121 Stunden abgebaut.

Carbamazepin ist biologisch nicht leicht abbaubar und sehr beständig in der Umwelt, wie die hohen DT_{50} Werte zwischen 47 und 233 Tagen für den Abbau im Wasser zeigen. Der DT_{50} einer Wasser/Sediment Studie von 328 Tagen für das gesamte System und eine Abbaurrate von 7 % für die Verweilzeit in Kläranlagen bestätigen die Beständigkeit von Carbamazepin in der aquatischen Umwelt. Die Substanz erfüllt die P und vP Kriterien für Wasser und Sediment nach ECHA (2008). Aufgrund dieser Eigenschaften besteht eine potentielle Gefährdung der aquatischen Organismen durch Exposition gegenüber Carbamazepin.

Carbamazepin besitzt eine geringe Lipophilie ($\log K_{ow} < 3$) und ein geringes Bioakkumulationspotential mit gemessenen BCF-Werten von 1,9 für Fische und 90 für Muscheln. Ein BAF von 3,8,

gemessen unter Freilandbedingungen mit Fischen, bestätigt, dass keine Gefahr für eine Anreicherung im Nahrungsnetz besteht.

Im Stoffwechsel des Menschen wird aus Carbamazepin eine Vielzahl von Metaboliten gebildet, die in Kläranlagenausläufen und Oberflächengewässern in unterschiedlichen Konzentrationen nachweisbar sind. Carbamazepin wird zu dem pharmakologisch aktiven (Gartiser et al. 2009) 10,11-Epoxycarbamazepin oxidiert, das weiter zu 10,11-Dihydroxydiolcarbamazepine (10,11-Dihydro-10,11-dihydroxy-carbamazepine) hydrolysiert und ausgeschieden wird.

Leclercq et al. (2009) bestimmten die Konzentrationen von sieben Metaboliten in Kläranlagenausläufen, die auch Metabolite von Oxacarbamazepin darstellen:

Carbamazepine-10,11-epoxide	[CAS 36507-30-9]
10-Hydroxy-10,11-dihydrocarbamazepine	[CAS 2933-92-8]
10,11-Dihydro-10,11-dihydroxycarbamazepine	[CAS 35079-97-1]
2-Hydroxycarbamazepine	[CAS 68011-67-6]
Iminostilbene	[CAS 256-96-2]
Acridine	[CAS 260-94-6]
Acridone	[CAS 578-95-0]

Mit Ausnahme von Iminostilben konnten alle Metabolite in den Abwässern der 3 untersuchten Kläranlagen nachgewiesen werden, wenn auch in unterschiedlichen Konzentrationen. Den Hauptanteil stellten 10-Hydroxy-10,11-dihydrocarbamazepin (1170, 1048 ng.L⁻¹, and < LOQ) und 10,11-Dihydro-10,11-dihydroxycarbamazepin (311 - 1500 ng.L⁻¹). Die anderen Metabolite wurden im unteren ng.L⁻¹ Bereich nachgewiesen bis maximal 48 ng.L⁻¹. Der pharmakologisch nicht aktive Metabolit 10,11-Dihydroxy-10,11-dihydrocarbamazepin (Gartiser et al. 2009, Miao und Metcalfe, 2003) liegt in Kläranlagenausläufen generell in höheren Konzentrationen vor als die Muttersubstanz (Writer et al. 2013, Leclercq et al., 2009, Hummel et al. 2006; Miao et al. 2005; Miao und Metcalfe, 2003). Die beiden mengenmäßig relevanten Metaboliten wurden in die Datenrecherche eingebunden, um die ökotoxikologische Relevanz der Metaboliten zu bewerten.

4.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) AA-QS_{freshwater, eco} für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für das Ableiten der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 0,5 µg.L⁻¹) als ‘Gesamt’ UQN vorgeschlagen.

Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Oncorhynchus mykiss</i> / 96 h LC ₅₀ : 19 900 µg.L ⁻¹	10	1990 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}		100	199 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Ceriodaphnia dubia</i> / 7 d NOEC : 25 µg.L ⁻¹	50	0,5 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}		500	0,05 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	<i>Chironomus riparius</i> / 28 d NOEC : 194 µg.kg ⁻¹	10	19,4 µg.kg ⁻¹ sediment dw
		EqP	0,42 µg.L ⁻¹ (Koc 885 L.kg ⁻¹)
QS _{sediment, saltwater}		50	3,9 µg.kg ⁻¹ sediment dw
QS _{blota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{blota, hh food}	-	-	Nicht erforderlich

4.4 MAC-QS Umweltqualitätsnorm

4.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für die Ableitung der maximal akzeptablen Umweltkonzentration (MAC-QS) zum Schutz der pelagischen Organismen liegen von mindestens drei Arten aus drei Trophieebenen Kurzzeit-Toxizitätsdaten vor. Das niedrigste akute Ergebnis ist die EC₅₀ von 19900 µg.L⁻¹ für Fische (*Oncorhynchus mykiss*), der mit einem Bewertungsfaktor von 10 für die MAC-QS Herleitung verwendet wurde. Dieser Bewertungsfaktor wurde gewählt, weil der Grunddatensatz vorliegt, es sich um einen Stoff mit bekanntem Wirkmechanismus (Wirkung über spannungsabhängige Natriumkanäle) handelt und weil darüber hinaus die Sensitivität der taxonomischen Gruppen vergleichbar ist (d.h. die Standard Abweichung der log transformierten niedrigsten L(E)C₅₀ liegt unter 0,5 (Mittelwert 1,65 ± 0,23, n=9)). Mit dem Bewertungsfaktor 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium MAC-QS von 1990 µg.L⁻¹.

4.4.2 Meeresumwelt

Für Salzwasserorganismen sind keine Kurzzeit-Testergebnisse erhältlich, so dass der Bewertungsfaktor 100 für die Ableitung von MAC-QS_{saltwater, eco} angewendet wird. Daraus ergibt sich ein Qualitätsstandard von 199 µg.L⁻¹.

4.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnorm

4.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Langzeitergebnisse liegen für repräsentative Arten (Fische, wirbellose Tiere und Algen) aus 3 Trophieebenen vor. Algen und aquatische Pflanzen erwiesen sich gegenüber Carbamazepin als unempfindlicher als Crustaceen und Fische.

Von den zuverlässigen NOEC Werten ist die NOEC des Reproduktionstests mit *Ceriodaphnia dubia* von $25 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ der niedrigste Wert. Die vorliegenden Langzeitdaten mit Fischen wurden in Early-Life-Stage Tests erhoben und weisen eine geringere Empfindlichkeit auf als die Ergebnisse der Daphnien-Reproduktionstests. Eine aktuelle Veröffentlichung von Galus et al. (2013) liefert allerdings Hinweise, dass die Reproduktion von Fischen möglicherweise bei deutlich geringeren Konzentrationen ($< 0,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) beeinträchtigt werden kann. Galus et al. (2013) beobachteten signifikante Effekte auf die Reproduktion in einem 42 d Test mit *Danio rerio* exponiert zu $0,5$ und $6,4 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (mittlere gemessene Konzentration). Es traten Hemmungen von 35 % bei $0,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, 41 % bei $10 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (nominal) in Test 1 sowie von 27 % bei $10 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ in Test 2 auf. Zusätzlich wurden histopathologische Schädigungen in den weiblichen Gonaden beobachtet. Die Autoren geben allerdings zu bedenken, dass die Effekte nicht konzentrationsabhängig waren und die Reproduktionshemmung bei $0,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ in einem Test mit sub-optimaler Kontrollreproduktionsrate erfolgte. Als Schlussfolgerung können die Ergebnisse der Veröffentlichung aufgrund des Testdesigns und fehlender detaillierter Daten nicht für die Ableitung von verlässlichen AA-QS herangezogen werden. Die deutlichen Hinweise auf eine Beeinträchtigung der Reproduktion bei Fischen sollten aber in einem geeigneten Fisch-Langzeittest untersucht werden.

Durch das Fehlen von zuverlässigen Daten zu Langzeiteffekten auf Fische, wird der AA-QS_{freshwater, eco} basierend auf zwei trophischen Ebenen unter Verwendung des Sicherheitsfaktors 50 und des NOEC für *C. dubia* von $25 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ abgeleitet.

Dieser Ansatz resultiert in einem AA-QS_{freshwater, eco} von $0,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

4.5.2 Meeresumwelt

Langzeitdaten für Salzwasserorganismen sind für eine Algen- und eine Amphipodenart verfügbar. Da diese Spezies zu keiner zusätzlichen marinen taxonomischen Gruppe gehören, wird der Bewertungsfaktor 500 auf den Süßwasser Wert (NOEC = $25 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) angewendet und eine AA-QS_{saltwater, eco} von $0,05 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ abgeleitet.

4.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Langzeit-Toxizität von Carbamazepin auf Sedimentorganismen wurde anhand von Tests mit *Chironomus*, *Lumbriculus* und *Potamopyrgus* beurteilt, die unterschiedlichen Ernährungstypen angehören. Zur Ableitung des Qualitätsziels wurde die sensitivste NOEC des *Chironomus* Tests von $194 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Sediment TM (normalisiert auf den C_{org} Gehalt von 5 %) und der Faktor 10 verwendet. Daraus ergibt sich ein QS_{sediment, fw} von $19,4 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Sediment TM.

Für den marinen Bereich wurde nach dem Guidance Document Nr. 27 (EC, 2011) zur Ableitung des QS_{sediment, freshwater} die niedrigste NOEC aus Süßwasser Sedimenttests mit einem Sicherheitsfaktor von 50 verrechnet. Dies ergibt einen QS_{sediment, saltwater} von $3,9 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Sediment TM.

Berechnet man nach dem Verteilungsgleichgewicht Modell (vgl. Guidance Document No. 27) aus der QS_{sediment, freshwater} die entsprechende Wasserkonzentration, so ergeben sich je nach K_{oc} Wert verschiedene Konzentrationen ($K_{\text{oc}} 2630 \text{ L}\cdot\text{kg}^{-1} = 0,146 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ / $K_{\text{oc}} 885 \text{ L}\cdot\text{kg}^{-1} = 0,423 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ / K_{oc}

100 L.kg⁻¹ = 2,95 µg.L⁻¹). Die K_{oc} Werte liegen zwischen 83 und 2630 L.kg⁻¹, der größte Anteil aber deutlich unter 1000 L/kg. Deshalb kann davon ausgegangen werden, dass die AA-QS_{freshwater, eco} von 0,05 µg.L⁻¹ ebenfalls für den Sedimentbereich schützend ist.

4.7 Ableitung der Biota-Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Carbamazepin weist ein vernachlässigbares Akkumulationspotential in der Nahrungskette auf. Daher ist keine Biota Bewertung erforderlich, da keine Gefahr einer Sekundärvergiftung für Raubtiere durch kontaminierte Beute erwartet wird. Es wurde kein QS_{secpois} abgeleitet.

4.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Es wurde keine Bewertung für Rückstände in aquatischen Biota im Hinblick auf die menschliche Gesundheit durchgeführt, da für Carbamazepin keine gentoxischen, karzinogenen oder reproduktionstoxischen Eigenschaften festgestellt wurden und mit keinen relevanten Anreicherungen in der Nahrungskette zu rechnen ist.

4.9 Metabolite

Mehrere Metabolite von Carbamazepin werden in Kläranlagenabwässern nachgewiesen und gelangen auf diesem Wege in die aquatische Umwelt. Durch Oxidation entsteht im menschlichen Stoffwechsel als Hauptmetabolit 10,11-Epoxycarbamazepin, das pharmakologisch aktiv ist. Durch Hydrolyse wird daraus das pharmakologisch inaktive 10,11-Dihydro-10,11-dihydroxy-carbamazepin gebildet, das schnell ausgeschieden wird. Neben den oben erwähnten Metaboliten wird auch 10-Hydroxy-10,11-dihydrocarbamazepin in Kläranlagenabläufen nachgewiesen.

Daten einer Wasser-Sediment Studie mit 10,11-Dihydro-10,11-dihydroxycarbamazepin (DT90 Wasser/Sediment System > 362 d) weisen den Metaboliten als sehr stabil in der Umwelt aus. Für die aquatische Ökotoxizität liegen Daten aus Kurzzeittests mit Algen, Daphnien und Fischembryonen und Langzeit NOEC Werte für Daphnien-Reproduktion und Algenwachstum vor. Die akute und chronische Toxizität des pharmakologisch nicht aktiven Metaboliten in diesen Testsystemen ist geringer als die des Carbamazepins. Über die Wirkung auf die Fischreproduktion kann mangels Daten keine Aussage getroffen werden.

Für die beiden Metabolite 10,11-Epoxycarbamazepin und 10,11-Dihydro-10,11-dihydroxycarbamazepin liegen keine Ökotoxizitätsdaten vor, so dass deren Gefährdungspotential nicht abgeschätzt werden kann. In Anbetracht der möglichen Effekte auf die Fischreproduktion erscheinen Tests mit den Metaboliten, besonders dem pharmakologisch aktiven 10,11-Epoxycarbamazepin sinnvoll.

4.10 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC)	Nicht aufgeführt als aktive Substanz in Anhang I der Richtlinie 91/414/EEC
EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt

Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt im Anhang I der Richtlinie
PBT Substanzen	<p>Keine PBT Substanz, erfüllt vP und T Kriterien (Verordnung (EU) No 253/2011, Anhang XIII)</p> <p><u>Persistenz:</u> DT_{50} (Wasser) = 47 - 233 d (vP, Schwellenwert > 60 d) DT_{50} (Wasser/Sediment) = 328 d (vP, Schwellenwert_{Sediment} > 180 d)</p> <p><u>Bioakkumulation</u> BCF = 1,9 - 4,6 (Fisch), 90 (Muschel) (Schwellenwert < 2000)</p> <p><u>Toxizität</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1 oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008). Es gibt keine Hinweise der chronischen Toxizität oder Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholte Exposition (STOT RE Kategorie 1 oder 2).</p> <p>Kriterium für „T Substanz“ erfüllt: Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L⁻¹</p>
Substanzen mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokriner Disruptor	Nicht untersucht, basierend auf den verfügbaren Informationen

4.11 Existierende UQN Vorschläge

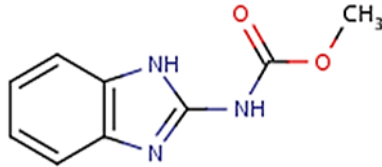
Es liegen keine abgeleiteten EU oder WHO Trinkwasser-Standards vor. Für Trinkwasser liegen in Deutschland ein Vorsorgewert, ein Gesundheitlicher Orientierungswert (GOW) und ein Prüf-/Maßnahmenwert für Gefahren von $\leq 0,1 \mu\text{g.L}^{-1}$, $0,3 \mu\text{g.L}^{-1}$ und $3 \mu\text{g.L}^{-1}$ vor (GOW, 2014, Dieter, 2011). Der Trinkwasserleitwert der LfU Bayern (2013) liegt bei $1 \mu\text{g.L}^{-1}$.

AA-QS	$0,5 \mu\text{g.L}^{-1}$	Kase, 2010 (Schweiz)
MAC-QS	$2550 \mu\text{g.L}^{-1}$	Kase, 2010 (Schweiz)

Vorschläge für Umweltqualitätsstandards anderer Länder liegen zurzeit nicht vor.

5 Carbendazim Zusammenfassung

5.1 Chemische Identität

Name	Carbendazim
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	Methyl benzimidazol-2-ylcarbamate
CAS Name	Methyl 1 <i>H</i> -benzimidazol-2-ylcarbamate
Chemikalienklasse	Benzimidazole
CAS Nummer	10605-21-7
EC Nummer	234-232-0
Summenformel	C ₉ H ₉ N ₃ O ₂
Strukturformel	
Molare Masse (g.mol ⁻¹)	191,21

Carbendazim ist sowohl ein Fungizid aus der Gruppe der Benzimidazole als auch der Hauptmetabolit anderer Fungizide, wie Benomyl und Thiophanat. Carbendazim wird gegen Pilzbefall in Getreide, bei Früchten, Obst und Gemüse eingesetzt. Der Pflanzenschutzmittel Wirkstoff Carbendazim ist in Deutschland zugelassen.

Eine Risikobewertung für Carbendazim wurde von der Europäischen Behörde für Lebensmittelsicherheit (EFSA) unter der EU-Direktive 91/414/EEC durchgeführt und in DAR-Berichten veröffentlicht (EFSA, 2009a-e). Diese Berichte wurden auch für diese Bewertung herangezogen. Qualitätsstandards für Carbendazim wurden außerdem vom RIVM (Dang and Smit, 2008) und dem Ökotoxzentrum (Junghans et al., 2011) abgeleitet. Diese Bewertungen und die zugehörigen Daten wurden bereits einem gründlichen Gutachterverfahren unterzogen und werden als gültig betrachtet.

5.2 Verhalten in der Umwelt

Untersuchungen zur biologischen Abbaubarkeit im Boden unter Freilandbedingungen zeigten Halbwertszeiten (DT₅₀) zwischen 9 und 50 Tagen (mit einem geometrischen Mittel von 17,2) und damit einen gemäßigten Abbau der Substanz im Boden. Der niedrige organische Kohlenstoff-Adsorptionskoeffizient K_{oc} (zwischen 200 und 246 L.kg⁻¹) deutet auf eine geringe Bindung an Bodenpartikel hin. Die Verflüchtigung von feuchten Oberflächen wird als unwesentlich erachtet.

Die Wasserlöslichkeit von Carbendazim beträgt zwischen 0,007 und 0,029 g.L⁻¹. Carbendazim ist schwer abbaubar. Innerhalb von 7 Tagen wurde kein photolytischer Abbau beobachtet.

Carbendazim ist bei pH 5 und pH 7 (bei 20 °C) hydrolytisch stabil, wird aber bei pH 9 und 20 - 22 °C mit einer DT₅₀ von 54 - 124 Tagen und bei pH 6 mit einer DT₅₀ von 32,5 Tagen zersetzt.

Die geringen K_{oc}-Werte deuten darauf hin, dass die Bindung der Substanz an Sediment unwahrscheinlich ist. Laut einer von Knoch (2001) durchgeführten Studie, wurde jedoch über einen längeren Zeitraum der größte Anteil von Carbendazim (10 % nach 3 Tagen und 59 % nach 120 Tagen) als nicht extrahierbare Fraktion im Sediment gefunden.

Da ein BCF von 23 - 27 in Fischen keine Hinweise auf eine Anreicherung in der Nahrungskette liefert, ist eine Bioakkumulation von Carbendazim in der Nahrungskette nicht zu erwarten.

Eine Verflüchtigung von Carbendazim ist wegen des niedrigen Dampfdrucks und der niedrigen Henry's Law Konstante nicht zu erwarten.

5.3 Ableitung der Qualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) AA-QS_{freshwater, eco} für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{fw, eco} 0,15 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Ictalurus punctatus</i> / 96 h / static LC ₅₀ : 7 µg.L ⁻¹	10	0,7 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}		50	0,14 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Daphnia magna</i> / 21 d NOEC : 1,5 µg.L ⁻¹	10	0,15 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}		100	0,015 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{sediment, saltwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{blota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{blota, hh food}	20 µg.kg ⁻¹ bw/day (ADI)	-	1217 µg.kg ⁻¹ 45 µg.L ⁻¹

5.4 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

5.4.1 Binnen-/Oberflächengewässer

5.4.1.1 - Bewertungsfaktor (AF)-Methode

Es wurde eine Bewertung zum Schutz der pelagischen Organismen durchgeführt.

Für drei Arten aus drei Trophiestufen sind Kurzzeit-Toxizitätsdaten verfügbar. Das niedrigste akute Ergebnis ist die LC_{50} von $7 \mu\text{g.L}^{-1}$ für Fisch im Dottersackstadium (*Ictalurus punctatus*) (Palawski and Knowles, 1986). Für die Herleitung des MAC-QS wurde dieser Wert mit einem Bewertungsfaktor von 10 eingesetzt. Da zur Kurzzeit-Toxizität Ergebnisse für drei Spezies aus drei Trophiestufen (Fische, Daphnien und Algen) und Ergebnisse für nicht-Standardorganismen sowie aus Tests mit dem empfindlichen Dottersackstadium von Fischen vorliegen, wurde dieser Bewertungsfaktor als angemessen angesehen.

Mit dem Bewertungsfaktor 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium MAC-QS von $0,7 \mu\text{g.L}^{-1}$.

5.4.1.2 Art-Empfindlichkeitsverteilung (SSD)-Methode

Kurzzeit-Ergebnisse für Plathelminthes (Turbellaria: *Dugesia lugubris*), Annelida (Clitellata: *Dero digitata*, *Stylaria lacustris*), Mollusca (*Crassostrea virginica*), Arthropoda (*Gammarus pulex*, *Daphnia magna*, *Macrobrachium ferreirai*, *Americamysis bahia*), Ciliata (*Tetrahymena pyriformis*) (van Wijngaarden et al., 1998; Rico et al., 2011; Bates et al., 1998; Rankin et al., 1977) und Amphibie (*Rana hexadactyla*) (Khangarot et al., 1985) liegen vor. Allerdings wurde die Studie von van Wijngaarden et al. (1998) mit Carbendazim in einer Formulierung durchgeführt. Wir verglichen die Ergebnisse für *Daphnia magna* (<1,5 mm) 48-h $EC_{50} = 192 \mu\text{g.L}^{-1}$ und 25-d $NOEC = 25,8 \mu\text{g.L}^{-1}$ mit Ergebnissen anderer verfügbarer „peer-reviewed“ Tests (z. B. 48-h $EC_{50} = 150 \mu\text{g.L}^{-1}$ (Fischer, 1988) und 21-d $NOEC = 0,0015 \mu\text{g.L}^{-1}$ (Kelly et al., 1997)). Die von van Wijngaarden et al. (1998) ermittelte Empfindlichkeit von *Daphnia magna* entsprach weitgehend den Ergebnissen aus Standardtests. Daher wurden diese Daten in die Bewertung einbezogen.

Die Datensätze für die Art-Empfindlichkeitsverteilung (SSD) beruhen auf dreizehn Kurzzeit- LC_{50}/EC_{50} -Werten für verschiedene Arten, die sieben taxonomische Gruppen (Fisch, Krebstiere, Ciliata, Annelida, Algen, Plathelminthes und Amphibien) abdecken. Daten für höhere Pflanzen liegen nicht vor. Allerdings deuten die für Algen verfügbaren Daten darauf hin, dass die Primärproduzenten keine empfindliche Gruppe darstellen.

Der 96-h- EC_{50} Wert für *Crassostrea virginica* zeigt mit $>1145 \mu\text{g.L}^{-1}$ eine geringe Empfindlichkeit der Mollusken, wurde aber wegen des „größer als“ Wertes nicht in die Bewertung aufgenommen.

Die SSD-Methode für nur sieben taxonomische Gruppen ist mit Anwendung des Bewertungsfaktors 10 in diesem Fall annehmbar. Der Median HC_5 von $11,9 \mu\text{g.L}^{-1}$ wurde ermittelt. Die Prüfung nach dem Anderson-Liebling Test ($P \leq 0,1$) ergab eine normale Verteilung der Daten.

Der $MAC-QS_{fw, eco}$ von $1,19 \mu\text{g.L}^{-1}$ wurde nach der SSD Methode berechnet.

Als vorläufiger QS wurde der mit der AF-Methode abgeleitete $MAC-QS_{fw, eco}$ von $0,7 \mu\text{g.L}^{-1}$, vorgeschlagen, da die Datenlage den Anforderungen des Guidance Document No. 27 (EC, 2011) an eine zuverlässige SSD nicht vollständig genügt.

5.4.2 Meeresumwelt

Zur Beurteilung der Wirkung auf Salzwasserorganismen liegen Kurzzeit-Testergebnisse für Süßwasserarten vor, die drei Trophiestufen (Fische, Daphnien und Algen) präsentieren. Außerdem sind die Kurzzeit-Werte für Salzwasserorganismen aus zwei Trophiestufen (Fische, Invertebraten) und eine zusätzliche taxonomische Gruppe (Mollusken) verfügbar. Demzufolge wurde für die Ableitung von MAC-QS_{sw, eco} der Bewertungsfaktor 50 auf niedrigsten LC₅₀ von 7 µg.L⁻¹ für Fisch im Dottersackstadium (*Ictalurus punctatus*) aus Süßwasserstudien angewendet. Daraus ergibt sich ein Qualitätsstandard von 0,14 µg.L⁻¹.

5.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

5.5.1 Binnen-/Oberflächengewässer

5.5.1.1 Bewertungsfaktor (AF)-Methode

Die niedrigsten Langzeit-Testergebnisse wurden für wirbellose Tiere (NOEC: 1,5 µg.L⁻¹ für *Daphnia magna*), Fisch (NOEC: 3,2 µg.L⁻¹ für *Oncorhynchus mykiss*) und Plathelminthes (NOEC: 3,4 µg.L⁻¹ für *Dugesia lugubris*) ermittelt. Für *Daphnia magna* liegen aus der Literatur Langzeit-Testergebnisse von 1,5 bis 13 µg.L⁻¹ vor. Jedoch stammen diese Daten aus Studien unterschiedlicher Qualität und weisen teilweise Defizite auf, so dass die Ableitung eines geometrischen Mittelwertes nicht gerechtfertigt ist. In Mikrokosmosstudien von van den Brink et al. (2000) und Cuppen et al. (2000) wurde ein 21-Tage EC₁₀-Wert von 25 (17 - 37) µg.L⁻¹ bestimmt (als Zusatzinformation verwendete Daten).

Die AA-QS-Ableitung basiert auf dem NOEC-Wert von 1,5 µg.L⁻¹ für *Daphnia magna*. Der Bewertungsfaktor 10 wurde angewandt, da Langzeitergebnisse (NOECs) für drei Spezies aus drei Trophiestufen (Fische, Daphnien und Algen) verfügbar sind. Das führt zu einem AA-QS_{fw, eco} von 0,15 µg.L⁻¹.

5.5.1.2 Art-Empfindlichkeitsverteilung (SSD)-Methode

Für die SSD Methode wurden Langzeitergebnisse von van Wijngaarden et al. (1998) für Plathelminthes (Turbellarie: *Dugesia lugubris*), Annelida (Clitellata: *Dero digitata*, *Stylaria lacustris*), Mollusca (Gastropoda: *Bithynia tentaculata*, *Planorbis planorbis*), Arthropoda (Crustacea: *Gammarus pulex*, *Daphnia magna*, *Simocephalus vetulus*, *Cyclops agilis*, *Asellus aquaticus*) und Insecta (*Chaoborus obscuripes*) berücksichtigt.

Die Daten aus der Mikrokosmenstudie von Cuppen et al. (2000) wurden für die SSD Methode verwendet. Es wurden jedoch nur auf sinkender Abundanz beruhende NOECs mit einer soliden Dosis-Wirkung-Beziehung berücksichtigt.

Waren mehrere Werte pro Art verfügbar, wurde für die SSD der niedrigste NOEC/EC₁₀ verwendet.

Zusammenfassend enthält der Datensatz für die Art-Empfindlichkeitsverteilung (SSD) elf NOEC/EC₁₀-Werte verschiedener Arten, die sieben taxonomische Gruppen (Fisch, Crustacea, Insecta, Annelida, Mollusca, Algen, Plathelminthes) repräsentieren. Daten für höhere Pflanzen sind nicht verfügbar. Die für Algen vorliegenden Daten zeigen jedoch, dass Primärproduzenten keine empfindliche Gruppe darstellen. Die Art-Empfindlichkeitsverteilung (SSD)-Methode ist in diesem Fall für die Daten aus sieben taxonomischen Gruppen annehmbar. Ein Median HC₅ von 0,64 µg.L⁻¹ wurde ermittelt. Die Daten sind nach dem Anderson-Liebling Test ($P \leq 0,5$) normal verteilt.

Da der Datensatz für die SSD-Methode auf nur sieben taxonomischen Gruppen beruhte, wurde für die QS-Ableitung der Bewertungsfaktor 7 angewandt. Der AA-QS_{fw, eco} von 0,09 µg.L⁻¹ wurde nach der SSD-Methode berechnet.

Als vorläufiger QS wurde der AA-QS_{fw, eco} von 0,15 µg.L⁻¹, abgeleitet nach der AF Methode, vorgeschlagen.

5.5.2 Meeresumwelt

Es liegen nur Langzeitdaten für Süßwasserarten vor, die drei Trophiestufen präsentieren. Der Bewertungsfaktor 100 wurde auf den niedrigsten NOEC-Wert 1,5 µg.L⁻¹ (*Daphnia magna*¹), der in einer Studie mit Süßwasserorganismen erhoben wurde, angewandt. Daraus ergibt sich ein AA-QS_{sw, eco} von 0,015 µg.L⁻¹.

5.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz der benthischen Organismen sind nicht erfüllt. Der Adsorptionskoeffizient (K_{oc}=200-246) ist niedriger als 500-1000 L.kg⁻¹, und der log K_{ow} ist mit 1,5 kleiner als der Trigger Wert von 3.

5.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höhere Trophie Stufen

Der für Fisch abgeleitete BCF von 23 - 27 deutet auf ein sehr geringes Potenzial von Carbendazim zur Bioakkumulation in der Nahrungskette hin. Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz der Organismen höheren Trophie Stufen sind nicht erfüllt. Der QS_{biota, sec pois} wurde nicht abgeleitet.

5.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota-Standards zum Schutz der menschlichen Gesundheit wird allein durch die Substanzeigenschaften gesteuert. Carbendazim ist als „Muta. Cat. 1B (H340)“ und „Repr. Cat. 1B (H360FD)“ eingestuft. Es wurde eine Bewertung hinsichtlich des Schutzes der menschlichen Gesundheit durchgeführt und ein vorläufiger QN (QS_{biota, hh food}) unter Einbeziehung des vorhandenen ADI-Werts von 20 µg.kg⁻¹ bw abgeleitet. Da weder ein BMF noch ein BAF vorliegen, wurde gemäß der Leitlinie ein Default-BMF von 1 angewandt. Mit Hilfe von Default-Angaben für Körpergewicht (70 kg) und den Verzehr von Fischprodukten (0,115 kg.d⁻¹) sowie BCF von 27, wurde ein QS_{biota, hh food} von 1217,4 µg.kg⁻¹ ermittelt. Der berechnete QS_{biota, hh food} von 1,2174 µg.kg⁻¹ entspricht dem Wert 45 µg.L⁻¹ für Süß- und Salzwasser.

5.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC)	Anhang I

EC Richtlinie 1107/2009	
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt Anhang 1
PBT Substanzen	<p>Keine PBT Substanz, erfüllt T Kriterium (Verordnung (EU) No 253/2011, Anhang XIII (EU, 2011)):</p> <p><u>Persistenz</u> DT_{50} (Wasser) = 5,8 - 10,8 d (P Schwellenwert > 40 d) DT_{50} (Wasser/Sediment) = 16,1 - 73,6 d (vP Schwellenwert > 180 d) DT_{50} (Boden) = 20 - 37 d (lab), geom. Mittelwert 30 d DT_{50} (Boden) = 9 - 50 d (Freiland), geom. Mittelwert 17,2 d (P Schwellenwert > 120 d)</p> <p><u>Bioakkumulation</u> BCF = 23 - 27 (Fisch), (Schwellenwert < 2000)</p> <p><u>Toxizität</u> Kriterium für „T Substanz“ erfüllt: Substanz erfüllt die Kriterien für mutagen (Kategorie 1B), H340 und reproduktionstoxisch (Kategorie 1B), H360FD gemäß der CLP Verordnung (CLP, 2008).</p> <p>Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L⁻¹</p>
Substanzen mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Appendix 4
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokriner Disruptor	Keine Hinweise auf endokrine Wirkungen in Wasserorganismen.

5.10 Existierende Qualitätskriterien für Carbendazim

Es liegen keine abgeleiteten EU- oder WHO- Trinkwasserstandards vor. Es wurde der bevorzugte Regulierungsstandard von 0,1 µg.L⁻¹ gemäß der europäischen Trinkwasserverordnung übernommen.

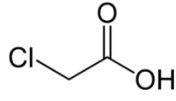
PNEC_{freshwater_lt}¹	0,15 µg.L ⁻¹	Johnson et al., 2009
PNEC_{freshwater_st}	0,7 µg.L ⁻¹	Johnson et al., 2009
AA-EQS	0,34 µg.L ⁻¹	Junghans et al., 2011
MAC-EQS	0,57 µg.L ⁻¹	Junghans et al., 2011
MPC_{eco, water}²	0,6 µg.L ⁻¹	Dang et al., 2008

¹ PNEC_{freshwater_lt} = equivalent to AA-QS_{freshwater, eco}. PNEC_{freshwater_st} = equivalent to MAC-QS_{freshwater, eco}

² MPC_{eco, water} = equivalent to AA-QS_{freshwater, eco}

6 Chloressigsäure Zusammenfassung

6.1 Chemische Identität

Name	Chloressigsäure
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	Monochloressigsäure
IUPAC Name	2-Chloro-ethanoic acid
Chemikalienklasse	organische Verbindung
CAS Nummer	79-11-8
EU Nummer	201-178-4
Summenformel	C ₂ H ₃ ClO ₂
Strukturformel	
Molare Masse (g.mol ⁻¹)	94,5

Eine ausführliche Substanz Evaluierung und Risikobewertung wurde unter der Regulierung (EEC) No 793/93 durchgeführt und im Risikobewertungsbericht (EU, 2005) veröffentlicht. Aus 1993 liegt ein Bewertungsbericht des Beratergremiums für umweltrelevante Altstoffe vor (BUA, 1993).

In der Europäischen Gemeinschaft wird Chloressigsäure hauptsächlich als ein Zwischenprodukt für die Synthese anderer Produkte wie Carboxymethylcellulose (CMC), Carboxymethylstärke, Pflanzenschutzmittel (z. B. 2,4-D oder MCPA), Kunststoffe, Thioglykolsäure, Natriumchloracetat und weiterer Produkte wie Ester und Amide verwendet. Das Salz der Chloressigsäure wird als aktiver Wirkstoff in Herbiziden verwendet. Zurzeit sind in der EU keine Pflanzenschutzmittel mit diesem Wirkstoff zugelassen (EU, 2014). Bis Ende 2007 bestand noch in Großbritannien eine Genehmigung mit Berufung auf "wesentliche Verwendungszwecke" (ADAS, 2008).

6.2 Verhalten in der Umwelt

Chloressigsäure ist gut wasserlöslich (4210 g.L⁻¹ bei 20 °C). Im Wasser ist eine Bindung der Substanz an die Feststoffe unwahrscheinlich. Außerdem ist die Chloressigsäure leicht biologisch abbaubar und besitzt keine bioakkumulierenden Eigenschaften. Es wurde ein BCF von 3,16 berechnet.

Der K_{oc} Wert von 4 deutet auf eine hohe Mobilität der Chloressigsäure im Boden hin.

Der Dampfdruck von 8,7 Pa bei 25 °C weist darauf hin, dass eine Verflüchtigung von Chloressigsäure von Oberflächen keinen bedeutenden Abbauweg darstellt.

6.3 Ableitung der Qualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) AA-QS_{freshwater, eco} für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätskriterien (AA-QS_{freshwater, eco} 0,58 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Desmodesmus subspicatus</i> / 72 h EC ₅₀ : 0,033 mg.L ⁻¹	10	8,1 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}	EC ₅₀ : 0,23 mg.L ⁻¹ Geometrische Mittel 0,0871 mg.L ⁻¹	50	1,62 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Desmodesmus subspicatus</i> / 72 h NOEC: 0,0058 mg.L ⁻¹	10	0,58 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}		100	0,058 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{sediment, saltwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, sec pois}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	-	-	Nicht erforderlich

6.4 MAC-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

6.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für mindestens drei Arten aus drei Trophiestufen sind Kurzzeit-Toxizitätsdaten verfügbar. Algen wurden als die sensibelste Organismengruppe identifiziert. Von den akuten Daten sind drei Kurzzeitergebnisse für die Alge *Desmodesmus subspicatus* verfügbar: 72-h E_rC₅₀ = 33 µg.L⁻¹, 72-h E_rC₅₀ = 230 µg.L⁻¹ und 48-h E_rC₅₀ = 70 µg.L⁻¹. Das geometrische Mittel von 81 µg.L⁻¹ dieser Werte wurde für die MAC-QS Herleitung verwendet. Mit dem Bewertungsfaktor 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium MAC-QS von 8,1 µg.L⁻¹. Der Bewertungsfaktor 10 wurde angewandt, da der Wirkmechanismus bekannt ist und repräsentative Arten der empfindlichsten taxonomischen Gruppe in dem Datensatz enthalten sind.

6.4.2 Meeresumwelt

Zur Beurteilung der Wirkung auf Salzwasserorganismen liegen Kurzzeit-Testergebnisse für drei Süßwasser Spezies aus drei Trophiestufen (Fische, Daphnien und Algen) und einer zusätzlichen taxonomischen Gruppe (Bakterien) vor.

Demzufolge wurde für die Ableitung von MAC-QS_{saltwater, eco} der Bewertungsfaktor 50 angewendet. Daraus ergibt sich ein Qualitätsstandard von 1,62 µg.L⁻¹.

6.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

6.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Es liegen Daten der Langzeitstudien für Algen, Crustacea und Fische vor. Den empfindlichsten belastbaren NOEC von 5,8 µg.L⁻¹ weist die Grünalge *Desmodesmus subspicatus* auf. Dieser Wert wurde für die Ableitung von AA-QS verwendet. Daten aus anderen Studien mit *Desmodesmus subspicatus*, *Pseudokirchneriella subspicata* und *Scenedesmus quadricauda* zeigen vergleichbare Ergebnisse, und bestätigen somit, dass Algen die empfindlichste der geprüften taxonomischen Gruppen ist. Der Bewertungsfaktor 10 wurde angewandt, weil Langzeitergebnisse (NOECs, EC₁₀) von mindestens drei Arten (Fisch, Schalentiere und Algen) dreier verschiedener Trophie Ebenen verfügbar sind.

Nach der AF-Methode ergibt sich daraus ein Langzeit-Qualitätskriterium AA-QS_{freshwater, eco} von 0,58 µg.L⁻¹.

6.5.2 Meeresumwelt

Es liegen nur Langzeitdaten für Süßwasserarten vor, die drei Trophiestufen repräsentieren. Der Bewertungsfaktor 100 wurde auf den niedrigsten NOEC-Wert von 58 µg.L⁻¹, der in einer Studie mit Süßwasserorganismen erhoben wurde, angewandt. Daraus ergibt sich ein AA-QS_{saltwater, eco} von 0,058 µg.L⁻¹.

6.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Es wurde keine Qualitätsnorm für den Sedimentbereich abgeleitet, weil eine Exposition des Sediments zu vernachlässigen ist. Der auf organischen Kohlenstoff normierte Adsorptionskoeffizient (K_{oc}) für Chloressigsäure liegt weit unter dem Schwellenwert <500-1000 L.kg⁻¹, somit ist die Bindung der Substanz an Sediment unwahrscheinlich. Die log K_{oc} und log K_{ow} Werte sind kleiner als drei und unterschreiten die Triggerwerte für die Durchführung einer Sediment Bewertung nicht erreicht.

Außerdem gibt es keine Hinweise einer hohen Toxizität für im Sediment lebende Organismen.

6.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Es ist keine Biota Bewertung erforderlich, da keine Gefahr einer Sekundärvergiftung für Raubtiere beim Fressen kontaminierter Beute erwartet wird. Da keine gemessene BCF, BAF oder BMF vorliegen, wurde der Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizient (log K_{ow} = 0,34) stellvertretend für ein Bioakkumulationspotential verwendet. Der BCF von 3.162 wurde mittels des BCFWIN v2.17 Modells des EPI Suite v3.20 Programms berechnet und in der Datenbank der ECHA (2013) veröffentlicht. Es gibt keine Hinweise für eine Akkumulation der Substanz in der Nahrungskette, außerdem ist Chloressigsäure leicht biologisch abbaubar.

6.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota Standards zum Schutz menschliche Gesundheit wird allein durch die intrinsischen toxischen Eigenschaften der Substanz beeinflusst. Für Chloressigsäure wurden keine genotoxischen, karzinogenen oder reproduktionstoxischen Eigenschaften festgestellt. Die Substanz ist nicht als giftig bei oraler Aufnahme klassifiziert und erfüllt damit nicht die Anforderungen des TGD für UQN (EC, 2011) zur Ableitung eines Biota Standards für den Schutz der menschlichen Gesundheit, da keine Sekundärvergiftung für Menschen durch den Verzehr von Fischereiprodukten zu erwarten ist.

6.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Anhang I
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt als aktive Substanz in Anhang I
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt im Anhang I der Richtlinie
PBT Substanzen	Keine PBT Substanz, erfüllt T Kriterium (Verordnung (EU) No 253/2011, Anhang XIII) <u>Persistenz</u> Die Substanz ist leicht biologisch abbaubar DT ₅₀ (Boden) = 66 h - 33 d (P Schwellenwert > 120 d) DT ₅₀ (Wasser) < 10-14 d (P Schwellenwert > 40 d) DT ₅₀ (Sediment) - keine Daten <u>Bioakkumulation</u> BCF = 3,162 (P Schwellenwert > 2000) <u>Toxizität</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1 oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008). Es gibt keine Hinweise auf chronische Toxizität oder Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholter Exposition (STOT RE Kategorie 1 oder 2). Kriterium für „T Substanz“ erfüllt: Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L ⁻¹
Stoffe mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein

Endokrine Wirkung	Nein
--------------------------	------

6.10 Existierende Qualitätsstandards für Monochloressigsäure

Für Monochloressigsäure wird der generell für Pestizide geltende Trinkwasser-Standard der Trinkwasserrichtlinie der Europäischen Gemeinschaft (EU, 1998) mit $0,1 \mu\text{g.L}^{-1}$ verwendet.

MPC_{freshwater}¹	0,58 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Vos and Bodar, 2008
MPC_{saltwater}¹	0,058 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Vos and Bodar, 2008
PNEC²	0,58 $\mu\text{g.L}^{-1}$	EU, 2005

¹ MPC_{water} – höchstzulässige Konzentration im Wasser (gleichwertig dem AA-QS_{freshwater, eco})

² PNEC - abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentration (gleichwertig dem AA-QS_{freshwater, eco})

7 Chrom Zusammenfassung

7.1 Chemische Identität

Name	Chrom
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	Chrom
CAS Name	Chrom
Chemische Klasse	Metall
CAS Nummer	7440-47-3
EC Nummer	231-175-5
Summenformel	Cr
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	51,996

Chrom ist ein relativ häufiges Element und kommt in einer durchschnittlichen Konzentration von 200 mg.kg⁻¹ in der Erdkruste vor (IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins, 2009). In Böden findet man im Allgemeinen Gehalte von 10 bis 90 mg.kg⁻¹ (IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins, 2009). In Oberflächengewässern sind die Gehalte meist zwischen 1 und 10 µg.L⁻¹, in skandinavischen Seen häufig niedriger (Maycock et al., 2007). Typische Konzentrationen in den Ozeanen liegen im Bereich 0,1-5 µg.L⁻¹ und zumeist <1 µg.L⁻¹ (Maycock et al., 2007).

Anthropogene Chromemissionen können in der Metallurgie, der metallverarbeitenden Industrie und bei der Verwendung als Zwischenprodukt der chemischen Industrie erfolgen.

Chrom kommt im Gewässer in drei- und sechswertiger Form vor. Unter aeroben Bedingungen ist Chrom(VI) stabil. Unter anaeroben Bedingungen wird es zu Chrom(III) reduziert. Unter oxidierenden Bedingungen ist auch eine Umwandlung von Chrom(III) zu Chrom(VI) möglich. Die Anteile von Chrom(III) und Chrom(VI) an der gesamten Chromkonzentration in Fließgewässern ist nicht konstant, Chrom(VI) hat einen Anteil von 30-70% (Slooff et al., 1990, IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins, 2009).

Dreiwertiges Chrom ist ein essentielles Spurenelement für Mensch und Tier. Sechswertige Chromverbindungen verursachen allergische und asthmatische Reaktionen und gelten als krebserzeugend.

7.2 Verhalten in der Umwelt

Bedingt durch die Bildung schwerlöslicher Chrom(III)-Verbindungen und die Adsorption von Chrom an Schwebstoffen ist ein großer Teil des Chroms in Gewässern partikulär gebunden. Letztendlich findet eine Deposition im Sediment statt. Während die hohe Wasserlöslichkeit des

Cr(VI) das Ausmaß seiner Sorption limitiert, reduziert die geringe Wasserlöslichkeit des Cr(III) seine Bioverfügbarkeit (Maycock et al., 2007).

Chrom(VI) ist die thermodynamisch stabile Spezies unter stark oxidierenden Bedingungen, während Cr(III) unter reduzierenden Bedingungen vorherrscht. Die Adsorption von Cr(III) an Schwebstoffen und Sediment nimmt mit ansteigendem pH zu, im Gegensatz dazu nimmt die Adsorption von Cr(VI) mit abnehmendem pH zu (Maycock et al., 2007).

In den meisten Böden liegt Chrom als Cr(III), überwiegend in Form unlöslicher Karbonate und Oxide, die nicht mobil sind, vor. Das Verhalten von Chrom im Boden hängt von seiner Speziation ab, die durch das Redoxpotential und den pH des Boden bestimmt wird (Maycock et al., 2007).

Bioabbau ist für Metalle nicht relevant. Die mikrobielle Reduktion von Cr(VI) zu Cr(III) hängt ab von der Menge an Biomasse, Cr(VI) Konzentration, Temperatur, pH, Kohlenstoffquelle, Redoxpotential, sowie der Anwesenheit von Oxyanionen und Metallkationen. Allerdings ist Cr(VI) für die meisten Mikroben toxisch, doch einige resistente Bakterienarten wurden identifiziert (Maycock et al., 2007).

7.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 3,4 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Die zur Ableitung der Umweltqualitätsnormen herangezogenen Daten sind überwiegend dem UK EQS Dossier (Maycock et al., 2007) entnommen, das die Daten des EU RAR (European Commission, 2005) enthält. Das IKSR Dossier verwendet dieselbe Datenbasis (IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins, 2009). Damit stehen viele Daten zu akuten und längerfristigen ökotoxikologischen Effekten von Cr(III) und Cr(VI) in verschiedenen limnischen und marinen Organismen (Fische, Invertebraten, Algen, Pflanzen und Amphibien) zur Verfügung. Die Prüfung der Datenqualität wurde aus dem EU RAR (European Commission, 2005) und dem UK EQS Dossier (Maycock et al., 2007) übernommen. Aktuelle Daten zur aquatischen Toxizität von Chrom (Borgmann et al., 2005; van Kolck et al., 2008; Vignati et al., 2010; Ouyang et al., 2012; Norwood et al., 2013; Dutton and Fisher, 2014) liegen in der gleichen Größenordnung wie die qualitätsgeprüften Daten aus dem EU RAR (European Commission, 2005) und dem UK EQS Dossier (Maycock et al., 2007). Daher wird empfohlen die bereits validierten Daten zu verwenden und die etablierten Ableitungen zu übernehmen (European Commission, 2005; Maycock et al., 2007).

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	HC5 von 10,3 µg Cr(VI).L ⁻¹ (European Commission, 2005; Maycock et al., 2007)	3	3,4 µg Cr.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}	---	---	Keine Angabe
AA-QS _{freshwater, eco}	HC5 von 10,3 µg Cr(VI).L ⁻¹ (European Commission, 2005; Maycock et al., 2007)	3	3,4 µg Cr.L ⁻¹

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
AA-QS _{saltwater, eco}	<i>Nereis arenaceodentata</i> 2 w Mortalität NOEC = 6 µg Cr(VI).L ⁻¹	10	0,6 µg Cr.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	<i>Daphnia magna</i> NOEC = 47 µg Cr(III).L ⁻¹	10, EP (European Commission, 2005)	80000 µg Cr.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{sediment, saltwater}	---	---	Keine Daten
QS _{biota, sec pois}	---	---	Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	Da karzinogener Stoff, keine UQN abgeleitet	---	---

1.2 MAC-QS Umweltqualitätsnorm

1.2.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Die Datenlage zur akuten Toxizität erfordert die QN Ableitung mittels eines Bewertungsfaktors, während zur längerfristigen Toxizität die Anwendung des statistischen Verfahrens (Species Sensitivity Distribution Model (SSD)) möglich ist. Daraus resultiert eine niedrigere PNEC bei kurzfristigen Expositionen als bei chronischer Exposition. Aufgrund der CMR Eigenschaften von Cr(VI) ist dennoch ein MAC-QS_{freshwater, eco} von 2,0 µg Cr(VI).L⁻¹ abgeleitet worden, dieser Wert ist aber nicht konsistent mit dem AA-QS_{freshwater, eco} von 3,4 µg Cr(VI).L⁻¹. Das TGD sieht für Fälle dieser Art in Kapitel 3.2.1. vor, dass die kurzfristige UQN mit der Jahresdurchschnitts-UQN gleichgesetzt wird (European Communities, 2011). Daher wird ein MAC-UQN Wert von 3,4 µg.L⁻¹ für Cr vorgeschlagen.

1.2.2 Meeresumwelt

Aufgrund von Unsicherheiten bei der Ableitung der PNEC für Cr(VI) und einer nicht ausreichenden Datenlage für Chrom (III) wird keine MAC-QS_{saltwater, eco} vorgeschlagen (IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins, 2009).

1.3 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnorm

1.3.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Langzeitergebnisse liegen für Cr(III) für repräsentative Arten aus mindestens 3 trophischen Ebenen vor. Das niedrigste chronische Ergebnis ist eine NOEC von 47 µg Cr.L⁻¹ für *Daphnia magna* (Chapman and et al., 1985), das mit einem Bewertungsfaktor von 10 ein AA-QS_{freshwater, eco} von 4,7 µg.L⁻¹ ergibt (Maycock et al., 2007).

26 Langzeitergebnisse für Cr(VI), NOECs oder geometrische Mittelwerte multipler NOECs, erlauben die Ableitung mittels SSD. Mit ETX 2.0 (van Vlaardingen et al. 2004) wurde ein HC₅ von 10,3 µg Cr(VI).L⁻¹ berechnet (Maycock et al., 2007). Mit einem Bewertungsfaktor von 3 (European Communities, 2011) ergibt sich ein AA-QS_{freshwater, eco} von 3,4 µg Cr(VI).L⁻¹ (Maycock et al., 2007).

Die fast gleichen Werte für Cr(III) und Cr(VI) legen nahe die Chromspezies hinsichtlich ihrer Wirkungen auf aquatische Biota nicht zu differenzieren und eine gemeinsame QN für gesamt-Chrom vorzuschlagen.

1.3.2 Meeresumwelt

Für Salzwasserorganismen sind für Cr(III) keine Langzeit-Testergebnisse verfügbar, die akuten Daten weisen aber auf eine ähnliche Empfindlichkeit wie Süßwasserspezies hin. Für Cr(VI) ist die niedrigste valide NOEC von $6 \mu\text{g Cr(VI)} \cdot \text{L}^{-1}$ für *Nereis arenaceodentata* angegeben (Mearns et al., 1976), die mit einem Bewertungsfaktor von 10 einen AA- $QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,6 \mu\text{g Cr(VI)} \cdot \text{L}^{-1}$ ergibt (Maycock et al., 2007).

1.4 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Gemäß UK EQS dossier (Maycock et al., 2007) ist die Datenlage unzureichend um eine QN für Sedimentorganismen abzuleiten. Die IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins (2009) empfiehlt die $PNEC_{\text{sediment}}$ aus dem EU RAR (European Commission, 2005) von $31000 \mu\text{g Cr} \cdot \text{kg}^{-1}_{\text{ww}}$ ($\sim 80000 \mu\text{g Cr} \cdot \text{kg}^{-1}_{\text{dw}}$) zu übernehmen, ggf. mit Berücksichtigung von Hintergrundkonzentrationen. Unter der Annahme eines Verteilungskoeffizienten von $75000 \text{ L} \cdot \text{kg}^{-1}$, entspricht die Konzentration an Schwebstoffen von $80000 \mu\text{g Cr} \cdot \text{kg}^{-1}_{\text{dw}}$ einer gelösten Konzentration von $\sim 1 \mu\text{g Cr} \cdot \text{L}^{-1}$ (IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins, 2009).

Weil Chrom an Schwebstoffen und Sedimenten akkumulieren kann, empfiehlt IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins (2009) die Einhaltung des vorgeschlagenen QS_{sediment} zu überwachen und zu prüfen ob die QS für die Wasserphase ausreichen, um die Chromgehalte in Schwebstoffen und Sedimenten unterhalb von $80000 \mu\text{g Cr} \cdot \text{kg}^{-1}_{\text{dw}}$ zu halten.

1.5 Ableitung der Biota-Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Bioakkumulation und Anreicherung entlang von Nahrungsketten ist für die Wirkungen von Chrom nicht relevant (European Commission, 2005; Maycock et al., 2007; IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins, 2009). Ein QS_{secpois} wurde nicht abgeleitet.

7.4 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die CMR Eigenschaften einiger Chromate, die auch auf der SVHC Kandidatenliste geführt werden, sind für die Bewertung der Ökotoxizität von Chrom nicht relevant. Sie stellen aber eine große Besorgnis hinsichtlich der menschlichen Gesundheit dar. Eine angemessene Berücksichtigung war im Rahmen dieses Vorhabens nicht möglich, da UQN für flussgebietsspezifische Stoffe nur auf den Schutz der aquatischen Lebensgemeinschaft abzielen, so dass keine QS_{hn} Ableitung erfolgte.

7.5 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt			
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Anhang 1 listet einige Chromverbindungen			
	Name	Formel	EU	CAS
	Dichromtrioxid	Cr ₂ O ₃	215-160-9	1308-38-9
	Chromtrioxid	CrO ₃	215-607-8	1333-82-0
	Dichromtris(sulfat)	Cr ₂ (SO ₄) ₃	233-253-2	10101-53-8
	Chromdioxid	CrO ₂	234-630-4	12018-01-8
	Dichromeisentetraoxid	Cr ₂ FeO ₄	235-105-2	12068-77-8
	Chromhydroxidsulfat	CrHO ₅ S	235-595-8	12336-95-7
Fritte, chem.		266-047-6	65997-18-4	
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt			
Biozide (98/8/EC)	Anhang 1 listet einige Chromverbindungen			
	Name	EU	CAS	
	Chromtrioxid	215-607-8	1333-82-0	
	Kaliumdichromat	231-906-6	7778-50-9	
	Natriumdichromat	234-190-3	10588-01-9	
Mischung von Chromtrioxid (EINECS 215-607-8; 34.2%), Diarsenpentoxid (EINECS 215-116-9; 24.1%), Kupfer(II)oxid (EINECS 215-269-1; 13.7%), Wasser (EINECS 231-791-2; 28%)	Mischung			
PBT Substanzen	Nicht gekennzeichnet als PBT Substanz (gemäß Verordnung (EU) No. 253/2011 Anhang XIII (European Union 2011))			
Stoffe mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Die SVHC Kandidatenliste enthält einige Chromverbindungen			
	Name	CAS	EU	Begründung
	Dichromtris (chromat)	24613-89-6	246-356-2	Karzinogen (Art. 57a)
	Chromtrioxid	1333-82-0	215-607-8	Karzinogen und mutagen (Art. 57a und 57b)
	Kaliumdichromat	7778-50-9	231-906-6	Karzinogen, mutagen und reprotoxisch (Art. 57a, 57b und 57c)
	Ammoniumdichromat	7789-09-5	232-143-1	Karzinogen, mutagen und reprotoxisch (Art. 57a, 57b und 57c)
	Natriumchromat	7775-11-3	231-889-5	Karzinogen, mutagen und reprotoxisch (Art. 57a, 57b und 57c)
	Kaliumchromat	7789-00-6	232-140-5	Karzinogen und mutagen (Art. 57a und 57b)
	Blei sulfochromat gelb (C.I. Pigment Yellow 34)	1344-37-2	232-693-2	Karzinogen und reprotoxisch (Art. 57a und 57c)
	Blei chromate molybdat sulfat	12656-85-8	235-759-9	Karzinogen und reprotoxisch (Art. 57a und

	rot (C.I. Pigment Red 104)			57c)
	Bleichromat	7758-97-6	231-846-0	Karzinogen und reprotoxisch (Art. 57a und 57c)
	Natriumdichromat	7789-12-0 1058801-9	234-190-3	Karzinogen, mutagen und reprotoxisch (Art. 57a, 57b und 57c)
	Strontiumchromat	7789-06-2	232-142-6	Karzinogen (Art. 57a)
POPs (Stockholm Konvention)	Nein			
Endokrine Wirkung	Nicht belegt, basierend auf den verfügbaren Informationen			

7.6 Existierende UQN Vorschläge für Chrom

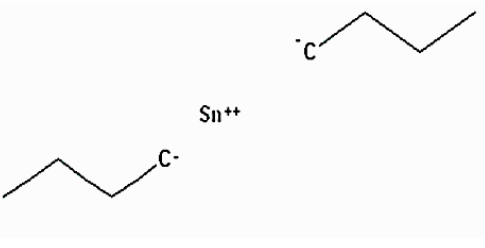
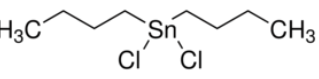
	Cr(III)	Cr(VI)	
EQS Süß- und Küstengewässer, Klasse 1	---	0,2 µg.L ⁻¹	Norwegen, Klima- og forurensningsdirektoratet, 2012
QC AQL Süßwasser	8,9 µg.L ⁻¹	1 µg.L ⁻¹	Canada, CCME-Canadian Council of Ministers of the Environment, 1999
QC AQL PNEC	4,7 µg.L ⁻¹	3,4 µg.L ⁻¹	EU, European Commission, 2005
PNEC Süßwasser langfristig	4,7 µg.L ⁻¹	3,4 µg.L ⁻¹	UK, Maycock et al., 2007
EQS Süß- und Küstengewässer, Klasse 2 (PNEC)	4,7 µg.L ⁻¹	3,4 µg.L ⁻¹	Norwegen, Klima- og forurensningsdirektoratet, 2012
JD-UQN Binnenoberflächen-gewässer (Flüsse und Seen)	Cr (III + VI): HK* + 3,4 µg.L ⁻¹		IKSR, IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins, 2009
PNEC Süßwasser kurzfristig	32 µg.L ⁻¹	---	UK, Maycock et al., 2007
QS AQL	50 µg.L ⁻¹	10 µg.L ⁻¹	Schweiz, Behra et al., 1994
QC AQL Süßwasser CCC	74 µg.L ⁻¹	11 µg.L ⁻¹	USA, US EPA, 2009
QC AQL Süßwasser CMC	570 µg.L ⁻¹	16 µg.L ⁻¹	USA, US EPA, 2009
EQS Süß- und Küstengewässer, Klasse 3 (kurzzeitig)	36 µg.L ⁻¹		Norwegen, Klima- og forurensningsdirektoratet, 2012
EQS Süß- und Küstengewässer, Klasse 4 (akut)	360 µg.L ⁻¹		Norwegen, Klima- og forurensningsdirektoratet, 2012
JD-UQN Küsten- und Übergangsgewässer	Cr (III + VI): HK* + 0,6 µg.L ⁻¹		IKSR, IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins, 2009
PNEC Meerwasser langfristig	---	0,6 µg.L ⁻¹	UK, Maycock et al., 2007

QC AQL Meerwasser	56 µg.L ⁻¹	1,5 µg.L ⁻¹	Canada, CCME-Canadian Council of Ministers of the Environment, 1999
PNEC Meerwasser kurzfristig	---	32 µg.L ⁻¹	UK, Maycock et al., 2007
QC AQL Meerwasser CCC	---	50 µg.L ⁻¹	USA, US EPA, 2009
QC AQL Meerwasser CMC	---	1100 µg.L ⁻¹	USA, US EPA, 2009
EQS Sediment, Klasse 1	60000 µg.kg ⁻¹ _{dw}		Norwegen, Klima- og forurensningsdirektoratet, 2012
QC AQL Sediment	80000 µg.kg ⁻¹ _{dw}	---	EU, European Commission, 2005
AA AQL Sediment	80000 µg.kg ⁻¹ _{dw} (+ HK)		IKSR, IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins, 2009
EQS Sediment, Klasse 2 (PNEC)	620000 µg.kg ⁻¹		Norwegen, Klima- og forurensningsdirektoratet, 2012
EQS Sediment, Klasse 3 (short-term)	6000000 µg.kg ⁻¹		Norwegen, Klima- og forurensningsdirektoratet, 2012
EQS Sediment, Klasse 4 (acute)	60000000 µg.kg ⁻¹		Norwegen, Klima- og forurensningsdirektoratet, 2012
Zielwert, Schwebstoffe	100000 µg.kg ⁻¹ _{dw}		IKSR, IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins, 2009

HK = Hintergrundkonzentration (Oberflächengewässer) = ca. 0,02 - 0,5, Rhein = 0,38 (IKSR - Internationale Kommission zum Schutz des Rheins, 2009)

8 Dibutylzinn-Kation Zusammenfassung

8.1 Chemische Identität

Name	Dibutylzinn
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	-
CAS Name	Tin ⁽²⁺⁾ ,dibutyl-, ion
Chemikalienklasse	Zinnorganische Verbindungen
CAS Nummer	14488-53-0
EC Nummer	-
Summenformel	C ₈ H ₁₈ Sn
Strukturformel	
Molare Masse (g.mol ⁻¹)	232,9
Name	Dibutylzinndichlorid
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	-
CAS Name	Dibutyl(dichloro)stannane
Chemikalienklasse	Zinnorganische Verbindungen
CAS Nummer	683-18-1
EC Nummer	211-670-0
Summenformel	C ₈ H ₁₈ Cl ₂ Sn
Strukturformel	
Molare Masse (g.mol ⁻¹)	303,8445

Zinnorganische Verbindungen werden als PVC-Stabilisatoren, Katalysatoren für Polymere und Beschichtungen für Glas verwendet. Außerdem werden sie als Ladungskontrollmittel für die Aufladung von Tonern oder als Stabilisator von Druckertinte eingesetzt (van Herwijnen, 2012).

Für Dibutylzinn-Kationen (DBT) sind nur wenige Daten zur Ökotoxizität veröffentlicht. Die meisten Toxizitätsstudien mit DBT wurden mit Säugetieren durchgeführt, mit aquatischen Organismen gibt es nur wenige Studien. Die jüngste Umweltrisikobewertung für Dibutylzinn wurde durch das Niederländische Institut für öffentliche Gesundheit und Umwelt (RIVM) (van Herwijnen, 2012) durchgeführt. Die Bewertung baut auf Daten zu Dibutylzinndichlorid (DBTC) auf, die durch die internationale Kommission zum Schutz des Rheins bewertet und im Bericht „Afleiding Kombi milieukwaliteitsnormen voor Rijnrelevante stoffen“ veröffentlicht wurden (ICBR, 2009).

Da Dibutylzinndichlorid unter Umweltbedingungen rasch zum Dibutylzinn-Kation dissoziiert, das zu Dibutylzinn-Oxid, -Hydroxid, sowie -Karbonat umgewandelt wird, wurde es als zulässig erachtet, die vorliegende Bewertung auf Basis der Daten zu Dibutylzinndichlorid vorzunehmen.

8.2 Verhalten in der Umwelt

Dibutylzinndichlorid ist gut wasserlöslich ($33 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ bei $20 \text{ }^\circ\text{C}$). In Wasser dissoziiert Dibutylzinndichlorid zum Dibutylzinn-Kation. Kationen adsorbieren stärker an Sediment und Schwebstoffe, als ihre neutralen Partner (ToxNet). Dibutylzinn-Kationen verhalten sich bei einer Reaktion mit Wasser wie eine einfache protische Säure (Maguire, 1985). In Salzwasser kann das Chloridion mit Hydroxydionen effektiv konkurrieren, wobei in Anwesenheit von Dibutylzinndichlorid eine Mischung der Dibutylzinnverbindungen entsteht (Donard, 1985).

Dibutylzinndichlorid ist mit einem Abbau von ca. 6 % in 28 Tagen im modifizierten Sturm-Test biologisch nicht leicht abbaubar (ECHA, 2013). Der biologische Abbau (DT_{50}) von Dibutylzinn beträgt 150 Tage in Wasser (Karlsson, Jahr unbekannt) und 120 - 150 Tage in Sediment (EC, 2006). Eine Verflüchtigung von Dibutylzinn aus der Wasserphase stellt keinen bedeutenden Abbauweg dar (ToxNet).

Im Boden dissoziiert Dibutylzinndichlorid zu Dibutylzinn-Kation, das als solches verbleibt oder rasch zu Dibutylzinnoxid, -Hydroxid, -Karbonat bzw. -Hydrat umgewandelt wird (Blunden und Chapman, 1986). Die Halbwertszeit (DT_{50}) von Dibutylzinn im Boden beträgt 122 Tage (Terytze et al, 2000). Die $\log K_{oc}$ -Werte von Dibutylzinn zwischen 3,21 und 5,78 (van Herwijnen, 2012) deuten auf eine mäßige Mobilität des Dibutylzinn im Boden hin.

8.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen wurde nach der Wasserrahmenrichtlinie, Anhang 5 (WFD 2000/60/EC) die niedrigste der Qualitätsnormen ($\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}} 0,2 \text{ } \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN*
MAC _{freshwater, eco}	Scenedesmus obliquus / 96 h / DBTC EC ₅₀ (growth rate): 40 µg DBTC.L ⁻¹	10	3,0 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}	EC ₅₀ (growth rate): 30 µg DBT.L ⁻¹	50	0,60 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	Mytilis edulis / 33 d / DBT NOEC : 2	10	0,20 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}	LOEC : 20	10	0,20 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, sed}	0,2 µg.L ⁻¹	EqP	452 µg.kg ⁻¹ _{ww} 1175 µg.kg ⁻¹ _{dw}
AA-QS _{saltwater, sed}	0,2 µg.L ⁻¹	EqP	452 µg.kg ⁻¹ _{ww} 1175 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{blota, sec pols}	Rat / 90 days / oral / Reproduction / Developmental Toxicity Screening Test (DBTC) NOEC: 30000 µg.kg ⁻¹	90	1,9 µg.L ⁻¹
QS _{blota, hh food}	TDI: 0,25 µg.kg ⁻¹ bw/day	-	1522 µg.kg ⁻¹ 11 µg.L ⁻¹

* Konzentrationen angegeben als DBT Kation

8.4 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

8.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Es wurde eine Bewertung für den Schutz pelagischer Organismen durchgeführt.

Für mindestens drei Arten aus drei Trophieebenen sind Kurzzeit-Toxizitätsdaten verfügbar. Zusätzlich wurden in der Literatur Daten zu Bakterien und Mollusken gefunden. Das niedrigste akute Ergebnis ist eine EC₅₀ von 40 µg.L⁻¹ für Algen (*Scenedesmus obliquus* und *Skeletonema costatum*). Die Studie wurde mit Dibutylzinnchlorid durchgeführt. Dies ergibt, bezogen auf Dibutylzinn, eine EC₅₀ von 30 µg.L⁻¹. Die für Dibutylzinn berechnete EC₅₀ wurde zur Herleitung des MAC-QS verwendet. Aufgrund dessen, dass der Grunddatensatz vorliegt und es sich um einen Stoff mit bekanntem Wirkmechanismus handelt, wurde ein Bewertungsfaktor von 10 gewählt.

Mit diesem Bewertungsfaktor ergibt sich für Dibutylzinn ein Kurzzeit-Qualitätskriterium MAC-QS_{freshwater, eco} von 3,0 µg DBT.L⁻¹.

8.4.2 Meeresumwelt

Für den Bereich der marinen Organismen lagen Kurzeitergebnisse für Salzwasserbakterien und Mollusken für die Bewertung vor. Diese Organismen repräsentieren zusätzliche spezifische taxonomische Gruppen. Auf Grundlage der zusätzlichen taxonomischen Gruppen und auf Basis des Datensatzes für Süßwasserorganismen ergibt sich für die MAC-QS_{saltwater, eco}-Ableitung ein Bewertungsfaktor von 50.

Es ergibt sich für Dibutylzinn ein MAC-QS_{saltwater, eco} von 0,60 µg DBT.L⁻¹.

8.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

8.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer und Meeresumwelt

Für die Bewertung der Langzeiteffekte in Süß- und Salzwasser liegen neben dem Grunddatensatz auch Ergebnisse für zusätzliche spezifische taxonomische Gruppen vor (Mollusken und Echinodermen). Das niedrigste belastbare Langzeittestergebnis ist die NOEC von $2,0 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (umgerechnet auf Dibutylzinn) und basiert auf der Überlebensrate von Muscheln (*Mytilus edulis*). Dieser Wert wurde für die AA-QS-Ableitung für Binnen- / Oberflächengewässer und Meeresumwelt verwendet. Bei Verwendung eines Bewertungsfaktors von 10 ergibt sich ein AA-QS_{freshwater, eco} von $0,20 \mu\text{g DBT}\cdot\text{L}^{-1}$ und ein AA-QS_{saltwater, eco} von $0,20 \mu\text{g DBT}\cdot\text{L}^{-1}$.

8.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien zur Durchführung einer Bewertung zum Schutz benthischer Organismen sind erfüllt. Der Wert des $\log K_{oc}$ liegt zwischen 3.21 und 5.78 und überschreitet somit den Schwellenwert von 3.

Aufgrund dessen, dass für Sedimentlebewesen keine Testergebnisse vorliegen, wurde zur Ermittlung der Qualitätsnormen der Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten-Ansatz (Equilibrium Partitioning) gewählt. Diesem Ansatz lag die AA-QS_{freshwater, eco} von $0,2 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ zugrunde. Gemäß dem „Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) wurde ein QS_{sediment, fw EqP} und ein QS_{sediment, sw EqP} von jeweils $1175 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG) abgeleitet.

8.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Die Kriterien, die eine Bewertung zum Schutz vor Sekundärvergiftungen in der Nahrungskette verlangen, sind erfüllt. Der BCF liegt bei 135 und überschreitet somit den Schwellenwert von 100. Die Qualitätsnorm für Biota wurde gemäß dem „Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) und auf Grundlage einer NOEC von $30000 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ aus einem 90 Tage Screening-Test mit Ratte (Reproduktions-/Entwicklungstoxizität) abgeleitet. Es wurde ein Bewertungsfaktor von 90 angewandt, woraus sich ein QS_{biota, sec pois} von $1,9 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für Süß- und Salzwasserorganismen ergibt.

8.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Eine Bewertung für die menschliche Gesundheit durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten wurde aufgrund einer möglichen Bioakkumulation von DBT im Nahrungsnetz und aufgrund der Klassifizierung von DBTC als fortpflanzungsgefährdend (Kategorie 1B) gemäß CLP (2008) durchgeführt. Auch die Kriterien für die spezifische Zielorgan -Toxizität nach wiederholter Exposition (STOT RE Kategorie 1) werden von DBTC erfüllt.

Eine vorläufige QS_{biota, hh food} wurde auf der Grundlage des verfügbaren, von der EFSA (2004) abgeschätzten, TDI-Wertes ($0,25 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Körpergewicht) abgeleitet. Aus chronischen Fütterungsstudien liegt ein NOAEL im Bezug auf die Immuntoxizität von DBT $25 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Körpergewicht pro Tag vor.

Der Bewertung liegen keine BMF oder BAF Werte zugrunde. Ein Standard-BMF von 1 wurde gemäß des Guidance-Dokument Nr. 27 (EC, 2011) angenommen. Die QS_{biota, hh food} liegt unter Berücksichtigung des menschlichen Körpergewichtes (70 kg), des Verbrauchs von Fischereierzeugnissen

(0,115 kg.d⁻¹) bei 1522 µg.kg⁻¹ und entspricht einer Konzentration von 11 µg.L⁻¹ in der Wasserphase für Süß- und Meerwasser.

8.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC)	Nicht aufgeführt als aktive Substanz in Anhang I der Richtlinie 91/414/EEC
EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt im Anhang I der Richtlinie
PBT Substanzen	<p>Keine PBT Substanz, erfüllt die vP and T Kriterien (Regulation (EU) No. 253/2011 Anhang XIII (EU, 2011))</p> <p><u>Persistenz</u> DT₅₀ (Boden) = 122 d (P Schwellenwert > 120 d) DT₅₀ (Wasser) = 150 d (vP Schwellenwert > 60 d) DT₅₀ (Sediment) = 120-150 d (P Schwellenwert > 120 d)</p> <p><u>Bioakkumulation</u> BCF = 135 (Leber) BCF = 60 (Niere) BCF = 46 (Wirbelknochen) BCF = 12 (Muskel) (Schwellenwert > 2000)</p> <p><u>Toxizität</u> Für DBT sind keine Daten bezüglich der Klassifikation vorhanden. Allerdings erfüllt DBTC die Kriterien für die Klassifikation als reproduktionstoxisch (Kategorie 1B) gemäß CLP (2008) und ist eingestuft als STOT RE (Kategorie 1) für Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholter Exposition.</p> <p>Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L⁻¹</p>
Substanzen mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Dibutylzinn ist nicht aufgeführt. Dibutylzinndichlorid (DBTC) ist gelistet.
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokriner Disruptor	Ja

8.10 Existierende Qualitätsstandards für Dibutylzinn

MAC_{freshwater}¹	0,30 µg.L ⁻¹	van Herwijnen, 2012
MAC_{saltwater}¹	0,15 µg.L ⁻¹	van Herwijnen, 2012
MPC_{freshwater}¹	0,15 µg.L ⁻¹	van Herwijnen, 2012
MPC_{saltwater}¹	0,15 µg.L ⁻¹	van Herwijnen, 2012
MPC_{sediment, eco}¹	370 µg.kg dw ⁻¹	van Herwijnen, 2012
PNEC²	0,4 µg.L ⁻¹	Floyd und George, 2005
UQN³	0,0077 µg.L ⁻¹	Karlsson, Jahr unbekannt

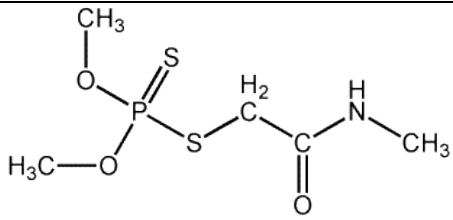
¹ MPC – höchstzulässige Konzentration (gleichwertig dem AA-QS)

² PNEC - abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentration (gleichwertig dem AA-QS_{freshwater, eco})

³ UQN oberirdische Gewässer einschließlich Übergangsgewässer sowie Küstengewässer nach § 7 Absatz 5 Satz 2 des Wasserhaushaltsgesetzes

9 Dimethoat Zusammenfassung

9.1 Chemische Identität

Name	Dimethoat
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	O,O-Dimethyl-S-(2-oxo-3-azabutyl)dithiophosphat; O,O-Dimethyl-S-(N-methylcarbamoyl)methyldithiophosphat; Dithiophosphorsäure-O,O-dimethyl-S-(2-(methylamino)-2-oxoethyl)ester
IUPAC Name	Phosphorodithioic acid, O,O-dimethyl S-[2-(methylamino)-2-oxoethyl] ester
Chemikalienklasse	Thiophosphorsäureester
CAS Nummer	60-51-5
EU Nummer	200-480-3
Summenformel	C ₅ H ₁₂ NO ₄ PS ₂
Strukturformel	
Molare Masse (g.mol ⁻¹)	229,3

Dimethoate ist ein Insektizid, Akarizid und Nematizid aus der Gruppe der Thiophosphorsäureester (EFSA, 2005).

9.2 Verhalten in der Umwelt

Es wird erwartet, dass Dimethoat primär in Böden und Oberflächengewässer freigesetzt wird.

In Oberflächenwasser gelangt es über den Ablauf von oder durch Aufsprühen auf behandelte landwirtschaftliche Flächen. Die Halbwertszeit (DT₅₀) in Böden liegt zwischen 2,0 bis 4,1 Tage (Laboruntersuchungen) und 4,6 bis 9,8 Tage unter Feldbedingungen. Dies deutet auf einen schnellen Abbau der Substanz im Boden hin. Zusammen mit einem K_{oc} zwischen 16,25 und 51,88 L.kg⁻¹ ergibt sich eine zu erwartende hohe Mobilität von Dimethoat in Boden. Zusätzlich kann es zu einer schnellen Adsorption an Schwebstoffe und Sedimente kommen. Dimethoat ist in Wasser sehr gut löslich (Wasserlöslichkeit: 39,8 g.L⁻¹) und hat eine Halbwertszeit von 68 Tagen in Wasser bei pH 7 bzw. 4,4 Tagen bei pH 9. Bei einem log K_{ow} von 0,704 ist eine Bioakkumulation von Dimethoat im Nahrungsnetz nicht zu erwarten.

9.3 Ableitung der Qualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) AA-QS_{freshwater, eco} für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 0,07 µg.L⁻¹) als Gesamt UQN vorgeschlagen. Es ist zu

prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QNwater	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungsfaktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	SSD HC ₅ mit Crustacean und Insekten HC ₅ : 9,8 µg.L ⁻¹	10	0,98 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}		100	0,098 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Baetis rhodani</i> / 96 h / Durchfluss LC ₅₀ : 7,0 µg.L ⁻¹	100	0,07 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}		1000	0,007 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	---	---	Nicht erforderlich
QS _{sediment, saltwater}	---	---	Nicht erforderlich
QS _{blota, sec pols}	---	---	Nicht erforderlich
QS _{blota, hh food}	---	---	Nicht erforderlich

9.4 MAC-QS Umweltqualitätsnorm

9.4.1 Binnen-/Oberflächengewässer

Ergebnisse von Kurzzeit-Toxizitätsstudien mit den empfindlichsten taxonomischen Gruppen waren verfügbar (Algen, wirbellose Tiere, Insekten, Fische). Die niedrigste LC₅₀ lag bei 7,0 µg.L⁻¹ und stammt aus einem Versuch mit der Eintagsfliege *Baetis rhodani*. Dieser Wert wurde für die MAC-QS_{freshwater, eco} Ableitung verwendet. Ein Bewertungsfaktor von 10 kann aufgrund der spezifischen Wirkweise von Dimethoat und des repräsentativen Datensatzes an Kurzzeit-Toxizitätsstudien für die Ableitung genutzt werden. Die Ableitung der MAC-QS_{freshwater, eco} auf Basis eines Bewertungsfaktors von 10 ergibt eine MAC-QS_{freshwater, eco} von 0,70 µg.L⁻¹.

Die große Anzahl der Testergebnisse (44 Daten aus 7 taxonomischen Gruppen) lässt die Ableitung eines HC₅ Wertes mittels SSD mit ETX 2.0 (van Vlaardingen et al. 2004) als sinnvoll erscheinen. Das Schweizer Oekotoxzentrum (2013) führte eine SSD mit den Daten von Arten der taxonomischen Gruppen durch, die am empfindlichsten auf den Acetylcholinesterase-Hemmer reagierten (Crustacea und Insecta, n=15). Es wurde ein HC₅ von 9,77 µg.L⁻¹ berechnet. Aufgrund der Vielzahl an Kurzzeit-Toxizitätsstudien (n=15) waren die Anforderungen des TGD zur Ableitung einer UQN (EC, 2011) erfüllt. Die MAC-QS_{freshwater, eco}, die sich aus der SSD mit den empfindlichsten Arten ergab, wurde daher als relevante MAC-QS_{freshwater, eco} eingestuft. Das Oekozentrum (2013) verwendete einen Faktor von 10 zur Ableitung der MAC-QS_{freshwater, eco}, da die 15 Spezies die erforderliche Mindestzahl darstellten und die Insekten scheinbar eine höhere Sensitivität aufwiesen als die Krustentiere. MAC-QS_{freshwater, eco} liegt somit bei 0,98 µg.L⁻¹.

9.4.2 Meeresumwelt

Auch für die Meeresumwelt lagen Ergebnisse aus Kurzzeit-Toxizitätsstudien mit Krebstieren, Insekten und verschiedene Fischarten aus der Literatur vor. Die Insekten stellten den empfindlichsten Organismus dar. Für die Ableitung der $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ wurden die Effektkonzentrationen mit denen, die mit Süßwasserorganismen erstellt wurden, gepoolt. Es lagen keine zusätzlichen taxonomischen Gruppen für den Bereich der Meeresumwelt vor. Es wurde für die Ableitung der $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ ein zusätzlicher Bewertungsfaktor von 10 verwendet, was zu einem Bewertungsfaktor von 100 führt, der auf die HC_5 der SSD für Süßwasserorganismen angewandt wurde.

Hieraus ergibt sich ein $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,098 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

9.5 AA- QS_{water} Umweltqualitätsnorm

9.5.1 Binnen-/Oberflächengewässer

Die niedrigste NOEC aus einer chronischen Studie ergab sich in einem Reproduktionstest mit *Daphnia magna* und lag bei $24 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Auf Grundlage des vorliegenden Datensets sind Invertebraten die empfindlichste Art. Der NOEC-Wert aus der chronischen Studie mit *Daphnia magna* wurde für die AA- QS Ableitung genutzt. Ein Bewertungsfaktor von 10 wurde angewandt. Es ergab sich ein $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $2,4 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

Dieser NOEC Wert von $24 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ ist jedoch höher als der niedrigste LC_{50} -Wert aus einer Akutstudie (LC_{50} von $7 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für *Baetis rhodani*). In diesem Fall wird im TGD für UQN (EC, 2011) vorgeschlagen, zur AA- $QS_{\text{freshwater, eco}}$ Ableitung einen Bewertungsfaktor von 100 auf den niedrigsten E/LC_{50} Wert des Kurzzeittest anzuwenden, wenn für diese Gruppe/Familie kein chronischer Wert vorhanden ist.

Daraus resultiert ein $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,07 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

9.5.2 Meeresumwelt

Für marine Organismen lagen keine Ergebnisse aus chronischen Studien vor. Gemäß des TGD für UQN (EC, 2011) ist somit ein Bewertungsfaktor zu wählen, der 10-mal höher ist als der Faktor für die Ableitung der $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$. Die $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ wurde mit einem Bewertungsfaktor von 1000 abgeleitet.

Hieraus ergibt sich ein $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,007 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

9.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die $\log K_{ow}$ von Dimethoat liegt unter dem Schwellenwert von 3, die mittlere K_{oc} liegt bei $30,1 \text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$. Unter diesen Voraussetzungen ist die Ableitung der QS_{sediment} zum Schutz benthischer Organismen gemäß TGD für UQN (EC, 2011) nicht erforderlich.

9.7 Ableitung der Biota Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Dimethoat hat aufgrund des niedrigen K_{ow} von 0,704, die unterhalb des Schwellenwertes von 3 liegt, kein Potential in der Nahrungskette zu akkumulieren. Aufgrund des niedrigen Bioakkumulationspotentials im Nahrungsnetz wurde keine Ableitung einer $QS_{biota\ sec.\ pois}$ durchgeführt.

9.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota Standards zum Schutz menschliche Gesundheit wird allein durch die intrinsischen toxischen Eigenschaften der Substanz beeinflusst. Für Dimethoat wurden keine genotoxischen, karzinogenen oder reproduktionstoxischen Eigenschaften festgestellt. Die Substanz ist nicht als giftig bei oraler Aufnahme klassifiziert und erfüllt damit nicht die Anforderungen des TGD für UQN (EC, 2011) zur Ableitung eines Biota Standards für den Schutz der menschlichen Gesundheit, da keine Sekundärvergiftung für Menschen durch den Verzehr von Fischerei-Produkten zu erwarten ist.

9.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht anwendbar
Pflanzenschutzmittelrichtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Aufgeführt als aktive Substanz in Anhang I
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt in Anhang I der Richtlinie
PBT Substanzen	Keine PBT Substanz (nach Verordnung (EU) No. 253/2011 Anhang XIII (EU, 2011)) <u>Persistenz</u> DT ₅₀ (Boden) = 2,0 - 4,1 d (Schwellenwert > 120 d) DT ₅₀ (Wasser) = 12,5 - 14,8 d (Schwellenwert > 40 d) DT ₅₀ (Wasser/Sediment) = 13,2 - 17,2 d (Schwellenwert Sediment > 120 d) <u>Bioakkumulation</u> BCF = 1,1 - 6 (Schwellenwert > 2000) <u>Toxizität</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1 oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2). Es gibt keine Hinweise auf chronische Toxizität oder Spezifischen Zielorgan-Toxizität nach wiederholter Exposition (STOT RE Kategorie 1 oder 2) gemäß CLP (2008). Aquatische NOEC Werte sind > 10 µg.L ⁻¹
Stoffe mit besonderer Besorgnis (SVHC) (1907/2006/EC)	Nein

POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Daten aus Versuchen mit Schnecken deuten daraufhin, dass es eine endokrine Wirkung auf die Eiproduktion und -entwicklung geben kann. Diese Hypothese muss noch bestätigt werden (UK, 2007).

9.10 Existierende Qualitätsstandards für Dimethoat

Trinkwasser-Standards für Dimethoat gibt es von der Bundesanstalt für Risikobewertung (BfR, 2013), der Europäischen Union (EU-Richtlinie 98/83/EG) und der EFSA (2005). Nach Angaben der BfR (2013) liegt der Trinkwasser Leitwert bei $4,0 \mu\text{g.L}^{-1}$ für Dimethoat. Nach der EU-Richtlinie 98/83/EG ergibt sich ein Trinkwassergrenzwert von $0,10 \mu\text{g.L}^{-1}$, während der Trinkwasser-Grenzwert nach der EFSA (2005) bei $6,0 \mu\text{g.L}^{-1}$ liegt.

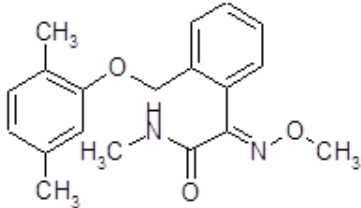
PNEC_{freshwater, long-term} PNEC_{saltwater, long-term}	$0,48 \mu\text{g.L}^{-1}$	UK, 2007
PNEC_{freshwater, short-term} PNEC_{saltwater, long-term}	$4,0 \mu\text{g.L}^{-1}$	UK, 2007
AA-EQS_{freshwater} MAC-EQS_{freshwater}	$0,07 \mu\text{g.L}^{-1}$ $0,7 \mu\text{g.L}^{-1}$	Oekozentrum, 2013
MPC_{eco, water} MPC_{dw water} MPC_{eco, saltwater} MAC_{eco, water}	$0,07 \mu\text{g.L}^{-1}$ $0,10 \mu\text{g.L}^{-1}$ $0,07 \mu\text{g.L}^{-1}$ $0,70 \mu\text{g.L}^{-1}$	RIVM, 2008
Trinkwassergrenzwert	$0,10 \mu\text{g.L}^{-1}$	Directive 98/83/EC
Trinkwasser Leitwert	$4,0 \mu\text{g.L}^{-1}$	BfR, 2013
Trinkwasser-Maßnahmewerte (MW TW des UBA)	$10 \mu\text{g.L}^{-1}$	BfR, 2013
Trinkwassergrenzwert	$6,0 \mu\text{g.L}^{-1}$	EFSA, 2005

¹ MPC_{water} – höchstzulässige Konzentration im Wasser (gleichwertig dem AA-QS_{freshwater, eco})

² PNEC - abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentration (gleichwertig dem AA-QS_{freshwater, eco})

10 Dimoxystrobin Zusammenfassung

10.1 Chemische Identität

Name	Dimoxystrobin
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	(E)-2-(Methoxyimino)-N-methyl-2-[α -(2,5-xylyloxy)-o-tolyl]acetamid
Synonyme	-
Chemikalienklasse	Strobilurine
CAS Nummer	149961-52-4
EU Nummer	-
Summenformel	C ₁₉ H ₂₂ N ₂ O ₃
Strukturformel	
Molare Masse (g.mol ⁻¹)	326,4

Eine ausführlich Evaluierung von Dimoxystrobin wurde unter der EU-Richtlinie 91/414/EWG durchgeführt und der Evaluierungsbericht von der europäischen Behörde für Lebensmittelsicherheit (EFSA, 2005a-f) veröffentlicht.

Dimoxystrobin wird primär als Pflanzenschutzmittel und zur Schädlingsbekämpfung eingesetzt. Es findet seine Anwendung auch im Innenbereich von Gebäuden. Laut der europäischen Behörde für Lebensmittelsicherheit wird Dimoxystrobin bei Winterweizen zwischen den BBCH-Wachstumsstadien 49 und 69 gegen bestimmter Pilzerreger, z.B. *Septoria tritici*, *Fusarium spp*, *Drechslera tritici repentes*, *Puccinia recondita*, *Cladosporium spp*. und *Leptosphaeria nodorum*, verwendet (EFSA, 2005a).

10.2 Verhalten in der Umwelt

Der Haupteintragspfad von Dimoxystrobin in die Umwelt erfolgt aufgrund der Nutzung als Pflanzenschutzmittel über den Boden. Je nach Bodenart liegt die Abbaurate in Böden zwischen 88 und 401 Tagen, woraus sich auf eine lange Verweilzeit der Substanz in Böden schließen lässt. Anhand der K_{oc} Werte von Dimoxystrobin zwischen 195,8 und 935,3 L.kg⁻¹ (Mittelwert 486 L.kg⁻¹, DAR, EFSA, 2005a) wird die Mobilität als gering bis mäßig eingestuft.

Dimoxystrobin ist schwach wasserlöslich mit einer Löslichkeit zwischen 4,3 mg.L⁻¹ (pH 5,7) und 3,5 mg.L⁻¹ (pH 8). Eine Adsorption von Dimoxystrobin an Sediment oder Schwebstoffe kann bei einer Freisetzung in Oberflächengewässer nicht ausgeschlossen werden. Hydrolyseprozesse

werden in diesem Fall nicht erwartet, da Dimoxystrobin bei pH-Werten von 4, 7 und 9 stabil ist. Die Halbwertszeit bei einer Photolyse in wässriger Umgebung liegt bei > 30 Tagen. Dimoxystrobin ist nicht leicht biologisch abbaubar. Die Halbwertszeit in Wasser liegt zwischen 60 und 69 Tagen und überschreitet somit den Schwellenwert von 60 Tagen für sehr persistente Chemikalien. Auch eine Verflüchtigung von Dimoxystrobin ist aufgrund eines geringen Dampfdrucks und einer geringen Henry Konstante unwahrscheinlich.

Eine Bioakkumulation im Nahrungsnetz ist für Dimoxystrobin nicht zu erwarten. Der gemessene Bioakkumulationsfaktor liegt bei 48. Zusätzlich hat sich gezeigt, dass sich schnell Metabolite bilden, die, basierend auf Studien zur Biokinetik bei Säugetieren, wieder ausgeschieden werden.

In Böden bildet Dimoxystrobin verschiedene Metabolite. Die Metabolite 505M01, 505M08 und 505M09 sind dabei weniger persistent als die Muttersubstanz, wurden aber im Sickerwasser von Böden nachgewiesen.

In einer Wasser-Sediment-Studie wurden nur geringe Konzentrationen dieser Metabolite in der Wasser oder Sedimentphase gefunden (EFSA 2005a).

10.3 Ableitung der Qualitätsnorm für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) AA-QS_{freshwater, eco} für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL (2000/60/EC) Anhang 5 (WFD, 2000), wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 0,03 µg.L⁻¹) als “Gesamt” UQN vorgeschlagen.

Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QNwater	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Acipenser ruthenus</i> L. / 48 h (Dottersack Stadium)	10	2,0 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}	LC ₅₀ : 20 µg.L ⁻¹	100	0,2 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Oncorhynchus mykiss</i> / 97 d / ELS	10	0,03 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}	NOEC : 0,3 µg.L ⁻¹	100	0,003 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	QS _{freshwater} : 0,03 µg.L ⁻¹	EqP	0,19 µg.kg ⁻¹ _{ww} 0,49 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{sediment, saltwater}	QS _{saltwater} : 0,003 µg.L ⁻¹	EqP	0,019 µg.kg ⁻¹ _{ww} 0,049 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{biota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	ADI : 4 µg/kg bw/day	-	244 µg.kg ⁻¹ _{biota ww} 5,1 µg.L ⁻¹

10.4 MAC-QS Umweltqualitätsnorm

10.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für mindestens drei Arten aus drei Trophiestufen sind Kurzzeit-Toxizitätsdaten verfügbar. Fische und Krustentiere zeigen ähnliche Empfindlichkeiten gegenüber Dimoxystrobin. Der niedrigste LC_{50} Wert von $20 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ stammt aus einem Test über 48 Stunden mit *Acipenser ruthenus* L im Dottersackstadium, der für die MAC-QS Herleitung verwendet wurde. Mit einem Bewertungsfaktor von 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium MAC-QS von $2,0 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Der Bewertungsfaktor von 10 wurde angewandt, da repräsentative Arten der empfindlichsten taxonomischen Gruppe in dem Datensatz enthalten sind und es sich um eine Substanz mit bekanntem, spezifischem Wirkmechanismus handelt. Zusätzlich liegen auch Daten für Sedimentorganismen und eine weitere taxonomische Gruppe (Mollusken) für Dimoxystrobin vor.

10.4.2 Meeresumwelt

Es sind keine Studien mit Salzwasserorganismen der verschiedenen taxonomischen Gruppen verfügbar. Demzufolge wurde die $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ auf Grundlage des Datensatzes für Süßwasserorganismen abgeleitet. Mit einem Bewertungsfaktor von 100 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,2 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

10.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnorm

10.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Aus Langzeitstudien liegen Daten für mindestens drei Arten aus drei Trophiestufen vor. Die empfindlichste NOEC von $0,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ wurde in einem 7 Tage Test mit *Acipenser ruthenus* L erhoben. Der hierbei betrachtete Endpunkt „Gewicht“ hat allerdings auch wegen der kurzen Testdauer nur geringe ökologische Signifikanz. Für die Ableitung der AA-QS wurde daher die NOEC von $0,3 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ aus einem 97 Tage Fisch Early Life Stage Test verwendet. Gemäß der Leitlinie zur UQN-Ableitung (EC, 2011) wird ein Bewertungsfaktor von 10 angewandt, da in dem Datensatz bestehend aus drei taxonomischen Gruppen repräsentative Arten der empfindlichsten taxonomischen Gruppe enthalten sind.

Mit einem Bewertungsfaktor von 10 ergibt sich ein Langzeit-Qualitätskriterium AA-QS von $0,03 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

Daten der EFSA aus einer Mesokosmenstudie wurden ebenfalls zur Bewertung herangezogen. Hierbei konnten keine direkten toxischen Effekte auf Phytoplankton oder auf den Schlupf von Insekten bei Konzentrationen von $1,7 / 5,0 / 15$ und $45 \mu\text{g a.s.}\cdot\text{L}^{-1}$ festgestellt werden. Eine „ökologisch akzeptable Konzentration (NOEAC)“ von $15 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ wurde anhand der Mesokosmenstudie festgelegt. Fische, die die sensitivsten Organismen bei den Langzeittests darstellten, waren in dieser Studie nicht enthalten. Die Resultate der Mesokosmenstudie wurden daher in die Bewertung mit aufgenommen, aber für die Erstellung der Qualitätskriterien nicht weiter berücksichtigt.

10.5.2 Meeresumwelt

Daten zu Langzeitstudien mit marinen Organismen sind nicht verfügbar. Es liegen nur Langzeitdaten für Süßwasserarten vor. Hierbei umfasst der Datensatz drei Trophiestufen. Der Bewertungsfaktor 100 wurde auf den niedrigsten NOEC-Wert von $0,3 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, der in der Studie mit

Süßwasserorganismen erhoben wurde, angewandt. Daraus ergibt sich ein AA- $QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,003 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

10.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien für eine Beurteilung der Auswirkungen auf Sedimentorganismen sind erfüllt, da der $\log K_{\text{oc}}$ -Wert von Dimoxystrobin 3,59 beträgt und somit den Schwellenwerte von ≥ 3 zur Sedimentbewertung überschreitet.

Bei der vorliegenden Studie zur Wirkung von Dimoxystrobin auf Sedimentlebewesen erfolgte die Applikation der Substanz über die Wasserphase. Für die Ableitung der QS_{sediment} wurde die Gleichgewichtsverteilungsmethode (EqP) verwendet. Die Ableitung der QS_{sediment} erfolgte auf Grundlage der AA- $QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,03 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, eines K_d -Wertes von $8,18 \text{ L}\cdot\text{kg}^{-1}$ und eines K_{oc} Wertes von $486 \text{ L}\cdot\text{kg}^{-1}$. Hieraus ergibt sich ein $QS_{\text{sedimentfreshwater, EqP}}$ von $0,19 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (FG) und $0,49 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG). Die Ableitung erfolgte nach der Leitlinie zur UQN Ableitung (EC, 2011). Für die Meeresumwelt wurde ein $QS_{\text{sediment saltwater}}$ von $0,019 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (FG) und $0,049 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG) anhand der $QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,003 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ abgeleitet.

10.7 Ableitung der Biota-Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Es ist keine Biota Bewertung erforderlich, da keine Gefahr einer Sekundärvergiftung für Raubtiere durch kontaminierte Beute erwartet wird. Ein niedriges Bioakkumulationspotential, basierend auf einem berechneten BCF von 48, zusammen mit der Tatsache, dass der Stoff über keine hohe intrinsische Toxizität für Säugetiere und Vögel verfügt, belegen diese Einschätzung.

10.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Dimoxystrobin erfüllt die Kriterien für die Einstufung als krebserzeugend (Kategorie 2) und reproduktionstoxisch (Kategorie 2) nach CLP (2008) und erfüllt damit die Anforderungen zur Ableitung eines Biota Standards für den Menschen, die sich ausschließlich durch die potentiell gefährlichen Eigenschaften der Chemikalie begründen.

Somit wurde eine Bewertung für die menschliche Gesundheit durchgeführt und eine vorläufige $QS_{\text{biota, hh food}}$ auf Grundlage des verfügbaren ADI-Wertes von $4 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1} \text{ bw}\cdot\text{d}^{-1}$, abgeschätzt von der EFSA (2012), abgeleitet.

Da kein BMF oder BAF zur Verfügung stand, wurde ein BMF von 1 gemäß der Leitlinie zur UQN Ableitung (EC, 2011) angenommen. Die $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $243,5 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ wurde auf Basis folgender Annahmen abgeleitet: 70 kg Körpergewicht, $0,115 \text{ kg}\cdot\text{d}^{-1}$ Verzehr von Fischerei Erzeugnissen und einem gemessenen BCF von 48.

Die $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $243,5 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ entspricht einer Wasserkonzentration von $5,07 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Süß- und Meerwasser).

10.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nein
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nein
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Anhang I
Biozide (98/8/EC)	Nein
PBT Substanzen	Keine PBT Substanz, erfüllt vP und T Kriterien (Verordnung (EU) No 253/2011, Anhang XIII) <u>Persistenz</u> DT ₅₀ (Boden) = 88 - 401 d (vP Schwellenwert > 180 d) 57,6 - 131,6 d (Freiland) DT ₅₀ (Wasser) = 60 - 69 d (vP Schwellenwert > 60 d) DT ₅₀ (Wasser/Sediment) = 26,9 d (P Schwellenwert > 120 d) <u>Bioakkumulation</u> BCF = 48 (P Schwellenwert > 2000) <u>Toxizität</u> Substanz erfüllt die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 2) und reproduktionstoxisch (Kategorie 2) gemäß CLP (2008). Kriterium für „T Substanz“ erfüllt: Reproduktionstoxisch (Kategorie 2), Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L ⁻¹
Substanzen mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Keine Daten

10.10 Existierende Qualitätsstandards für Dimoxystrobin

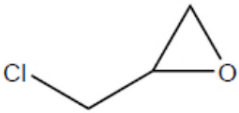
Da weder Trinkwasser Standardwerte von der EU noch der WHO verfügbar waren, wurde der generell für Pestizide geltende Trinkwasser-Standard der Trinkwasserrichtlinie der Europäischen Gemeinschaft (EG Richtlinie 98/83/EG (EU, 1998) mit 0,1 µg.L⁻¹ verwendet.

PEC _{surface water} *	1,85 µg.L ⁻¹	EFSA, 2005d
--------------------------------	-------------------------	-------------

* Berechnete Umweltkonzentration in Oberflächengewässer nach bestimmungsgemäßer Pflanzenschutzmittelanwendung

11 Epichlorhydrin Zusammenfassung

11.1 Chemische Identität

Name	Epichlorhydrin
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	Chloromethyloxiran
CAS Name	1-Chlor-2,3-epoxypropan
Chemikalienklasse	Chlororganische Verbindung und Epoxide
CAS Nummer	106-89-8
EC Nummer	203-439-8
Summenformel	C ₃ H ₅ ClO
Strukturformel	
Molare Masse (g·mol ⁻¹)	92,53

Epichlorhydrin kommt in der Umwelt nicht als natürlicher Stoff vor. Es wird kommerziell aus Chlor und Propylen hergestellt oder aus Salzsäure und natürlichem Glycerin erzeugt (Solvay, 2007a). Epichlorhydrin wird als Bestandteil von Epoxidharzen und Glycerin verwendet, aber auch als Ausgangsmaterial zur Herstellung von Glycerin- und Glycidol-Derivaten, die als Weichmacher, Stabilisatoren, Lösungsmittel, Farbstoff-Zwischenprodukte, oberflächenaktive Mittel und Arzneimitteln verwendet werden. Darüber hinaus wird Epichlorhydrin in Farben, Lacken und Schellack genutzt. Direkt wird es auch als Stabilisator in chlorhaltigen Materialien wie synthetischem Gummi und auch in Insektiziden verwendet (US EPA, 1983). Epoxidharze werden in Schutzbeschichtungen wie Lebensmittelverpackungen und Getränkedosen eingesetzt. Epichlorhydrin ist als Lebensmittelzusatz unter der kanadischen „Food and Drug Verordnung“ aufgeführt (Health Canada, 2005). Nach Pham und Marks (2004) werden Epoxidharze in strukturellen Anwendungen wie Leiterplattenlaminaten, Halbleiter- und Strukturverbundstoffen verwendet. Weiterhin wird Epichlorhydrin in synthetisches Glycerin umgewandelt. Es ist ein vielseitiger Ausgangsstoff bei der Synthese vieler organischer Verbindungen.

Es wurden bereits detaillierte Bewertungen von Epichlorhydrin im Rahmen der Verordnung über chemische Altstoffe (EC, 1993) durchgeführt. Zusätzlich wurde eine Risikobewertung angefertigt, die als Bericht (EC, 2000) veröffentlicht wurde. Eine Bewertung der Umweltaspekte der Substanz Epichlorhydrin wurde von Environment & Health Canada (2008) durchgeführt. Ebenso stand für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen ein ECHA Datensatz für registrierte Stoffe (ECHA, 2014) mit Epichlorhydrin zur Verfügung. Trinkwasser-Standards im Rahmen der WHO-Richtlinien für Trinkwasserqualität (WHO, 2004), der Deutschen Trinkwasserrichtlinie (TrinkwV, 2001) und der britischen Trinkwasserrichtlinie (EU, 1998) lagen ebenfalls zugrunde.

11.2 Verhalten in der Umwelt

Epichlorhydrin ist relativ flüchtig und verdampft leicht aus Böden und anderen festen Oberflächen. Auf Grundlage der abgeschätzten K_{oc} Werte von 0,625 bis 40 (Deneer et al., 1988) ist bei einem Eintrag in Wasser nicht damit zu rechnen, dass Epichlorhydrin an Schwebstoffen und Sedimenten adsorbiert. Stattdessen ist, basierend auf der Henry Konstante, eine Verflüchtigung von der Wasseroberfläche zu erwarten. Die daraus berechneten Halbwertszeiten (Lyman et al., 1990) für Verflüchtigung liegen bei 19 Stunden für einen Modellfluss und bei 12 Tagen für einen modellierten See.

Die Hydrolyse stellt einen entscheidenden Faktor für das Umweltverhalten von Epichlorhydrin dar. Bezogen auf die Hydrolyse ergaben sich Halbwertszeiten von 8,2 Tagen in destilliertem Wasser und 5,3 Tagen in Meerwasser (Santodonato et al., 1980). Ein BCF von 1 - 15 deutet darauf hin, dass das Potenzial für eine Bioakkumulation in Wasserorganismen sehr gering ist (Arnot & Gobas, 2003; BCFWIN, 2000; OASIS Forecast, 2005). Biologischer Abbau und chemische Reaktionen mit Ionen und reaktiven Spezies können die Degradation in Böden und Wasser zusätzlich beschleunigen. Daten aus Feldstudien fehlen zu diesem Sachverhalt allerdings. In der Atmosphäre wird Epichlorhydrin durch Reaktion mit photochemisch erzeugten Hydroxylradikalen abgebaut.

11.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) $AA-QS_{freshwater, eco}$ für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für das Ableiten der Süßwasser-Umweltqualitätsnormen bestimmt. Obwohl der abgeleitete vorläufige $QS_{biota, hh food}$ auf einen niedrigeren Wert hinauslief, wurde der $AA-QS_{freshwater, eco}$ als „Gesamt UQN“ vorgeschlagen, da die menschliche Gesundheit nicht im Fokus dieser Bewertung steht und die Ableitung des Qualitätsstandard für die menschliche Gesundheit ausführlichere Diskussionen erfordert, besonders hinsichtlich der vermutlichen karzinogenen Eigenschaften der Substanz.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen ($AA-QS_{freshwater, eco}$ $11 \mu\text{g.L}^{-1}$) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QS _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
$MAC_{freshwater, eco}$	<i>Pimephales promelas</i> / 96 h LC ₅₀ : 10600 $\mu\text{g.L}^{-1}$	10	1060 $\mu\text{g.L}^{-1}$
$MAC_{saltwater, eco}$		100	106 $\mu\text{g.L}^{-1}$
$AA-QS_{freshwater, eco}$		1000	11 $\mu\text{g.L}^{-1}$
$AA-QS_{saltwater, eco}$		10000	1,1 $\mu\text{g.L}^{-1}$
$QS_{sediment, freshwater}$	-	-	Nicht erforderlich
$QS_{sediment, saltwater}$	-	-	Nicht erforderlich
$QS_{biota, sec pols}$	-	-	Nicht erforderlich

QS _{blota, human}	0,14 µg.kg bw ⁻¹ (TDI) (vermutlich karzinogener Stoff)	-	8,52 µg.kg ⁻¹ * 8,52 µg.L ⁻¹ *
----------------------------	--	---	---

* Diskussionsbedarf hinsichtlich der vermutlich karzinogenen Eigenschaften der Substanz

11.4 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

11.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Die Ableitung der MAC-QS_{freshwater, eco} wurde anhand der vorhandenen Toxizitätsdaten akuter, aquatischer Studien durchgeführt. Die Ableitung erfolgte auf Grundlage von Daten zur akuten Toxizität von Epichlorhydrin auf Fische, Invertebraten, Algen und Amphibien. Die niedrigste LC₅₀ aus Fischstudien lag bei 10600 µg.L⁻¹ aus einer Studie mit der amerikanischen Elritze (*Pimephales promelas*). Der Einfluss von Epichlorhydrin auf das Algenwachstum der Grünalge *Pseudokirchnerella subcapitata* wurde ebenfalls betrachtet. Hierbei lag der für die Ableitung relevante E_rC₅₀ bei 15000 µg.L⁻¹. Im Bereich der Invertebraten (wirbellose Tiere) wurde ein EC₅₀ von 24000 µg.L⁻¹ in einem Versuch mit *Daphnia magna* ermittelt.

Anhand der Effektkonzentrationen zeigt sich, dass Fische, hier *Pimephales promelas*, am sensitivsten auf Epichlorhydrin reagieren. Die MAC-QS_{freshwater, eco} wurde somit auf Basis dieses Wertes abgeleitet. Die LC₅₀ in diesem Test lag bei 10600 µg.L⁻¹. Der Bewertungsfaktor zur Ableitung der MAC-QS_{freshwater, eco} wurde mit 10 festgelegt. Zur Anwendung eines Bewertungsfaktors von 10 ist zum einen ein kompletter Datensatz zur Wirkung der Substanz auf drei verschiedene trophische Ebenen notwendig und zum anderen muss der Wirkmechanismus der Substanz bekannt sein. Ein spezifischer Wirkmechanismus ist auf Basis der vorhandenen Daten aus der Literatur und der vorhandenen Wirkkonzentrationen allerdings nicht erkennbar. Gemäß dem Guidance Document No. 27 für EQS (EC, 2011) wurden die Werte der verschiedenen Tests zur akuten Toxizität, sowohl aus dem Bereich des Süßwassers als auch des Salzwassers gesammelt, logarithmisch transformiert und die Standardabweichung wurde bestimmt. Die Standardabweichung der log-transformierten L(E)C₅₀-Werte lag dabei unterhalb von 0,5. Auf Basis des Guidance Document No. 27 für EQS (EC, 2011) ist somit die Verwendung eines Bewertungsfaktors von 10 erlaubt. Dies führte zu einer MAC-QS_{freshwater, eco} von 1060 µg.L⁻¹.

11.4.2 Meeresumwelt

Für die Ableitung der MAC-QS_{marin water, eco} lagen lediglich Daten aus Akutstudien einer trophischen Ebene (Fische) vor. *Cyprinodon variegatus* war der Organismus der in Studien mit Salzwasserorganismen am empfindlichsten auf Epichlorhydrin reagierte. Es ergab sich ein LC₅₀ von 11800 µg.L⁻¹. Aufgrund der geringen Anzahl an Akutstudien mit Salzwasserorganismen wurde die Ableitung der MAC-QS_{saltwater, eco} auf Basis des kombinierten Datensatzes aus Akutstudien von Süß- und Salzwasserorganismen durchgeführt, der schon für die Ableitung der MAC-QS_{freshwater, eco} verwendet wurde.

Der niedrigste LC₅₀ von 10600 µg.L⁻¹ stammt aus der Studie mit *Pimephales promelas*. Nach dem TGD für EQS (EC, 2011) wurde ein Bewertungsfaktor von 100 für die Ableitung verwendet.

Die Standardabweichung der log-transformierten L(E)C₅₀-Werte lag dabei unterhalb von 0,5 und erlaubt somit nach dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) die Verwendung eines Bewertungsfaktors von 10. Hieraus ergibt sich ein MAC-QS_{marin water, eco} von 106 µg.L⁻¹.

11.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnorm

11.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für die Ableitung der AA-QS_{freshwater, eco} waren Daten zur Wirkung von Epichlorhydrin in Langzeitstudien für Algen und Protozoen verfügbar. Die Alge (*Pseudokirchneriella subcapitata*) stellte hierbei die empfindlichste Organismengruppe dar. Es ergab sich eine NOEC von 1700 µg.L⁻¹. Für die Ableitung der AA-QS_{freshwater, eco} wurde ein Bewertungsfaktor von 1000 verwendet. Gemäß des Guidance Document No. 27 für EQS (EC, 2011) kann ein Bewertungsfaktor von 100 auf nur ein vorhandenes Ergebnis einer Langzeitstudie für Daphnie und Fisch angewendet werden, wenn dieses Resultat für die trophische Ebene erzeugt wurde, die den niedrigsten L(E)C₅₀ in den Kurzzeitstudien ergab. In diesem Fall ist die Alge (*Pseudokirchneriella subcapitata*) der empfindlichste Organismus in Langzeitstudien, während in den Akutstudien Fische am sensitivsten reagierten. Ein Bewertungsfaktor von 100 kann somit nicht angewendet werden. In diesem Fall ist der Schutz von Organismen, die empfindlicher reagieren, nicht gewährleistet.

Die Ableitung der AA-QS_{freshwater, eco} erfolgt auf Basis der Ergebnisse der Akutstudien mit Epichlorhydrin. Gemäß des Guidance Document No. 27 für EQS (EC, 2011) wird in diesem Fall ein Bewertungsfaktor von 1000 angewendet. Die niedrigste LC₅₀ einer Akutstudie mit *Pimephales promelas* lag bei 10600 µg.L⁻¹. Dies führt zu einer AA-QS_{freshwater, eco} von 11 µg.L⁻¹. Die abgeleitete AA-QS_{freshwater, eco} liegt in einem vergleichbaren Bereich mit den bereits bestehenden AA-QS_{freshwater, eco} von 10 µg.L⁻¹ (OGewV, 2011).

11.5.2 Meeresumwelt

Für die Ableitung eines AA-QS_{marin water, eco} lagen keine Daten aus chronischen Studien vor. Es wurde daher auch hier der kombinierte Datensatz aus Akutstudien mit Süß- und Salzwasserorganismen für die Ableitung genutzt. Ein Bewertungsfaktor von 10000 wurde in Übereinstimmung mit dem Guidance Document No. 27 für EQS (EC, 2011) gewählt. Der niedrigste vorhandene LC₅₀ aus den vorhandenen Studien war der mit *Pimephales promelas* ermittelte LC₅₀ von 10600 µg.L⁻¹. Es ergibt sich hieraus ein AA - QS_{marin water, eco} von 1,1 µg.L⁻¹ für Epichlorhydrin.

11.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Es wurde keine Qualitätsnorm für den Sedimentbereich abgeleitet, weil eine Exposition des Sediments zu vernachlässigen ist. Der auf organischen Kohlenstoff normierte Adsorptionskoeffizient (K_{oc}) für Epichlorhydrin (0,65 - 40 L.kg⁻¹) liegt weit unter dem Schwellenwert von 500 - 1000 L.kg⁻¹. Eine Bindung der Substanz an Sediment ist somit unwahrscheinlich. Die log K_{oc} und log K_{ow} Werte sind ebenfalls deutlich kleiner als der Triggerwert von drei für die Durchführung einer Sedimentbewertung.

11.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Es ist keine Biota-Bewertung erforderlich, da keine Gefahr einer Sekundärvergiftung für Raubtiere beim Fressen kontaminierter Beute erwartet wird. Der BCF von 1 - 15 liegt unterhalb des Schwellenwertes (BCF ≤ 100). Zusätzlich gibt es keine Hinweise für eine Akkumulation der Substanz in der Nahrungskette.

11.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota-Standards zum Schutz der menschlichen Gesundheit wird allein durch die toxikologischen Substanzeigenschaften gesteuert. Epichlorhydrin ist als mögliches Karzinogen mit Kategorie 1B eingestuft (H350) und erfüllt somit die Anforderungen für eine Bewertung gesundheitsschädlicher Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten.

Es wurde ein vorläufiger Biota-Standard zum Schutz der menschlichen Gesundheit $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $8.5 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{\text{biota ww}}$ und $8.5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ abgeleitet, der noch hinsichtlich der vermutlich karzinogenen Eigenschaften der Substanz ausführlicherer Diskussionen bedarf. Die Gewässerkonzentration liegt im Bereich des für den AA- $QS_{\text{freshwater, eco}}$ ableiteten Wertes.

11.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Anhang I
Pflanzenschutzmittelrichtlinie (91/414/EEC)	Nicht aufgeführt als aktive Substanz in Anhang I
EC Richtlinie 1107/2009	
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt in Anhang I der Richtlinie
PBT Substanzen	<p>Keine PBT Substanz, erfüllt T Kriterium (Verordnung (EU) No 253/2011, Anhang XIII)</p> <p><u>Persistenz</u> DT_{50} (Wasser) = 3,9 - 8,2 d (Schwellenwert > 40 d)</p> <p><u>Bioakkumulation</u> $BCF = 1 - 15$ (Schwellenwert > 2000) $\text{Log } K_{ow} = 0,3 - 0,45$ (Schwellenwert > 4.5)</p> <p><u>Toxizität</u> Die Substanz erscheint in Teil 3 von Anhang VI der Richtlinie (EC) No 1272/2008 und ist als karzinogen Kategorie 1B (Tabelle 3.1) klassifiziert.</p> <p>Substanz erfüllt die Kriterien für die Klassifikation als CMR: karzinogen (Kategorie 1A oder 1B) CLP (2008).</p> <p>Gefahrenhinweise: H301 Giftig beim Verschlucken H311 Giftig beim Hautkontakt H331 Giftig beim Einatmen H314 Verursacht schwere Verätzungen der Haut und schwere Augenschäden. H317 Kann allergische Hautreaktionen verursachen H350 Kann Krebs erzeugen</p>

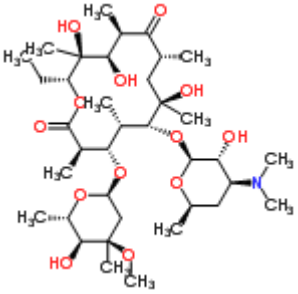
	Kriterium für „T Substanz“ erfüllt: Karzinogenität Kategorie 1B Aquatische NOEC Werte (chronische Studien) <10 µg.L ⁻¹ für Süßwasserorganismen.
Stoffe mit besonderer Besorgnis (SVHC) (1907/2006/EC)	Ja
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Nicht hinreichend untersucht.

11.10 Existierende UQN Vorschläge für Epichlorhydrin

AA-EQS (Aquatic, Freshwater)	10 µg.L ⁻¹	OGewV, 2011
AA-EQS (Aquatic, Freshwater)	10 µg.L ⁻¹	Bro-Rasmussen, 1994
Trinkwassernorm	0,4 µg.L ⁻¹	WHO, 2004
Trinkwassernorm	0,1 µg.L ⁻¹	TrinkwV, 2001
Trinkwassernorm	0,1 µg.L ⁻¹	EU, 1998

12 Erythromycin Zusammenfassung

12.1 Chemische Identität

Name	Erythromycin
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	(3R,4S,5S,6R,7R,9R,11R,12R,13S,14R)-6-[[[(2S,3R,4S,6R)-4-(Dimethylamino)-3-hydroxy-6-methyltetrahydro-2H-pyran-2-yl]oxy]-14-ethyl-7,12,13-trihydroxy-4-[[[(2R,4R,5S,6S)-5-hydroxy-4-methoxy-4,6-dimethyltetrahydro-2H-pyran-2-yl]oxy]-3,5,7,9,11,13-hexamethyloxacyclotetradecan-2,10-dion
CAS Name	Erythromycin
Chemische Klasse	Makrolidantibiotikum
CAS Nummer	114-07-8
EC Nummer	204-040-1
Summenformel	C ₃₇ H ₆₇ N ₁ O ₁₃
SMILES	<chem>CC[C@@H]1[C@@]([C@@H]([C@H](C=O)[C@@H](C[C@@]([C@@H]([C@H]([C@@H]([C@H](C=O)O1)C)O[C@H]2C[C@@]([C@H]([C@@H](O2)C)O)(C)OC)C)O[C@H]3[C@@H]([C@H](C[C@H](O3)C)N(C)C)O)(C)O)C)O)(C)O</chem>
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	733,93

Erythromycin ist ein Human- und Veterinärarzneistoff aus der Gruppe der Makrolid-Antibiotika und wird zur oralen Therapie von Infektionskrankheiten des Hals-, Nasen- und Ohrbereichs, der tiefen Atemwege (Bronchitis, Lungenentzündung), der Augen (Bindehautentzündung), bei Wundrose (Erysipel), Diphtherie, schweren Formen der Akne vulgaris und bestimmten Formen der Harnröhrentzündung verwendet.

Die jährliche Produktionsmenge in der EU war 2003 113,6 Tonnen (Kümmerer, 2003). In Deutschland wurden 2005 19,1 Tonnen Erythromycin verabreicht, von denen 15,5 Tonnen unverändert und 3,6 Tonnen in metabolisierter Form (Dehydrato-Erythromycin) ausgeschieden werden (Kümmerer et al., 2009). 2012 wurden in Deutschland noch 7,8 Tonnen Erythromycin verkauft (Ebert and Hein, 2013). In Oberflächengewässern wurden von der LAWA Konzentrationen von

<0,005 µg.L⁻¹ bis 0,24 µg.L⁻¹ mit einem maximalen Mittelwert von 0,213 µg.L⁻¹ zwischen 2009 und 2011 mitgeteilt (Ebert and Hein, 2013).

12.2 Verhalten in der Umwelt

Kommunale Kläranlagen stellen den Haupteintragspfad für Erythromycin in die Umwelt dar. Erythromycin ist wenig wasserlöslich (0,5 - 1,4 mg.L⁻¹) und wird wenig an Sediment und Klärschlamm adsorbiert ($K_{oc} = 25 - 620 \text{ L.kg}^{-1}$). K_{oc} -Werte für Erythromycin für Schwebstoffe liegen nicht vor. Der Erythromycinabbau in Wasser ist gering. Der Eliminationsgrad von Erythromycin in Kläranlagen ist 10 - 50 % nach konventioneller Behandlung und >90 % nach Ozonierung (LANUV NRW, 2007). Erythromycin scheint weder in erheblichem Umfang an Klärschlamm zu binden noch biologisch abgebaut zu werden, da Kläranlagen Ein- und Ausläufe praktisch identische Konzentrationen aufweisen (Sundstøl Eriksen et al., 2009).

Im Boden ist für Erythromycin eine mittlere Mobilität zu erwarten ($K_{oc} = 49 - 570 \text{ L.kg}^{-1}$). Experimentelle Informationen zur Abbaubarkeit von Erythromycin in Boden liegen kaum vor, allerdings weisen Schätzwerte auf eine geringe Bioabbaubarkeit hin und damit auf mögliche Persistenz (Ortiz de Garcia et al., 2013).

Weil Erythromycin nicht flüchtig ist, ist ein möglicher atmosphärischer Abbau (US EPA, 2012a).

Erythromycin weist ein deutliches Bioakkumulationspotential auf ($\log K_{ow} = 3,06$), das durch Freilandmessungen bestätigt wird (BAF für Fisch = 4492 L.kg⁻¹ (Gao et al., 2012)). Die wesentlich geringeren berechneten Werte könnten fehlerhaft sein, weil die komplexe chemische Struktur von Erythromycin nicht von den Modellen abgedeckt wird.

1.6 Ableitung der Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 0,2 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	Alge <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> Wachstum	10	2,0 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}	72 h EC ₅₀ : 20 µg.L ⁻¹	100	0,2 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	Cyanobakterien <i>Synechococcus leopoldensis</i> Wachstm	10	0,2 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}	144 h NOEC : 2,0 µg.L ⁻¹	100	0,02 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	QS _{freshwater} : 0,2 µg.L ⁻¹	EqP	7,34 µg.kg ⁻¹ _{ww} 19,1 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{sediment, saltwater}	QS _{saltwater} : 0,02 µg.L ⁻¹	EqP	0,734 µg.kg ⁻¹ _{ww} 1,91 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{biota, sec pols}	PNEC _{Oral} [mg.kg ⁻¹ food] : 1.5	30	0,3 µg.L ⁻¹

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
QS _{biota, hh food}	-	-	Nicht erforderlich

Die zur Ableitung der Umweltqualitätsnormen herangezogenen Daten werden als valide angesehen. Diese Daten sind in Quellen mit Gutachterverfahren publiziert und im Rahmen einer Studie zur Ausarbeitung von Vorschlägen für akute und chronische Qualitätskriterien für ausgewählte schweizrelevante Substanzen (Oekotoxzentrum 2013) als Klimisch 2 (valide mit (geringen) Einschränkungen (Klimisch et al., 1997)) beurteilt. Auch ist davon auszugehen dass signifikante Abweichungen zwischen nominalen und gemessenen Toxizitätswerten für das schlecht abbaubare Erythromycin unwahrscheinlich sind. Toxizitätswerte oberhalb von 500 µg.L⁻¹ (US EPA, 2012a) könnten im Konflikt mit der tatsächlichen Wasserlöslichkeit des Erythromycins stehen und sind daher nur mit Vorsicht zu verwenden.

1.7 MAC-QS Umweltqualitätsnorm

1.7.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Daten zur akuten Toxizität liegen für mindestens drei Arten aus drei Trophieebenen vor. Die empfindlichsten Arten sind Algen und Cyanobakterien. Kleinkrebse und Fische sind weniger empfindlich. Das niedrigste akute Ergebnis ist die EC50 von 20 µg.L⁻¹ für Algen (*Pseudokirchneriella subcapitata* (Isidori et al., 2005)), das mit einem Bewertungsfaktor von 10 eine MAC-QS_{freshwater, eco} von 2,0 µg.L⁻¹ ergibt. Der Bewertungsfaktor von 10 kann gemäß Guidance Document No. 27 (European Communities, 2011) angewendet werden bei Stoffen mit spezifischem Wirkmechanismus (hier Erythromycin als Inhibitor der Proteinsynthese durch Bindung an 50S Ribosomen in gram-positiven Bakterien, die es in eukaryoten Lebewesen nicht gibt) wenn empfindliche Spezies (hier Algen und Cyanobakterien) im Datensatz repräsentiert sind).

1.7.2 Meeresumwelt

Für Salzwasserorganismen sind keine Kurzzeit-Testergebnisse verfügbar, so dass der Bewertungsfaktor 100 für die Ableitung der MAC-QS_{saltwater, eco} angewendet wird. Daraus ergibt sich ein Qualitätsstandard von 0,2 µg.L⁻¹.

1.8 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnorm

1.8.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Langzeitergebnisse liegen für repräsentative Arten (Fische, wirbellose Tiere und Algen) aus 3 trophischen Ebenen vor. Algen und aquatische Pflanzen erwiesen sich gegenüber Erythromycin als empfindlicher im Vergleich zu Kleinkrebsen und Fischen.

Das niedrigste chronische Ergebnis ist die NOEC von 2,0 µg.L⁻¹ für Blaualgen (*Synechococcus leopoldensis* (Ando et al., 2007)), das mit einem Bewertungsfaktor von 10 eine AA-QS_{freshwater, eco} von 0,2 µg.L⁻¹ ergibt.

12.2.1 Meeresumwelt

Für Salzwasserorganismen sind keine Langzeit-Testergebnisse verfügbar, so dass der Bewertungsfaktor 100 für die Ableitung der AA-QS_{saltwater, eco} angewendet wird. Daraus ergibt sich ein Qualitätsstandard von 0,02 µg.L⁻¹.

12.3 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz benthischer Organismen sind erfüllt. Die K_{oc}-Werte streuen (570 - 1900) mit einem Mittelwert >1000 L.kg⁻¹. Auch ist der log K_{ow}-Wert >3. Weil keine Untersuchungen mit Sedimentorganismen vorliegen, wurde die Gleichgewichtsverteilung (Equilibrium Partitioning (EqP)) genutzt. Ausgehend von QS_{fw} = 0,2 µg.L⁻¹ und K_{oc} = 1877 L.kg⁻¹ wurden QS_{sediment, fw EqP} von 19,1 µg.kg⁻¹ (TG) und QS_{sediment, sw EqP} von 1,91 µg.kg⁻¹ (TG) gemäß Guidance Document No. 27 (European Communities 2011) berechnet.

12.4 Ableitung der Biota-Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Erythromycin weist ein erhebliches Akkumulationspotential in der Nahrungskette auf (BAF = 4500, log K_{ow} > 3). Eine PNEC_{oral} von 1,5 mg.kg⁻¹ wurde abgeleitet (Munoz et al., 2010) und ergibt eine QS_{biota} von 0,3 µg.L⁻¹ auf der Basis des höchsten BAF von 4500 (Gao et al., 2012).

12.5 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Es wurde keine Bewertung für Rückstände in aquatischen Biota im Hinblick auf die menschliche Gesundheit durchgeführt, da für Erythromycin keine genotoxischen, karzinogenen oder reproduktionstoxischen Eigenschaften festgestellt wurden. Die Substanz erfüllt damit nicht die Anforderungen des TGD für UQN (EC, 2011) zur Ableitung eines Biota Standards für den Schutz der menschlichen Gesundheit.

12.6 Metabolite

Dehydrato-Erythromycin ist der Hauptmetabolit des Erythromycins in der aquatischen Umwelt; weil aber auch Erythromycin verfahrensbedingt als Dehydrato-Erythromycin detektiert wird, können die Ausgangssubstanz (Erythromycin) und ihr Metabolit (Dehydrato-Erythromycin) üblicherweise nicht unterschieden werden (BLAC, 2003; Göbel et al., 2004; Jessick, 2010).

12.7 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht anwendbar
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC)	Nicht aufgeführt in Anhang I
EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt in Anhang I

PBT Substanzen	<p>Nicht gekennzeichnet als PBT Substanz (gemäß Verordnung (EU) No. 253/2011 Anhang XIII (European Union 2011))</p> <p><u>Persistenz</u> Geeignete experimentelle Werte liegen nicht vor, Abschätzungen weisen auf geringe Bioabbaubarkeit (Ortiz de Garcia et al., 2013). (Schwellenwert >120 d)</p> <p><u>Bioakkumulation</u> BCF = 4492 (Fisch (Gao et al. 2012)), BCF = 40 (Muschel (Klosterhaus et al. 2013)) (Schwellenwert >2000)</p> <p><u>Toxizität</u> (nach Verordnung (EC) No 1272/2008 Anhang VI): aquatische NOEC Werte <10 µg.L⁻¹: z.B. Cyanobakterien <i>Synechococcus leopoldensis</i> Wachstum 144 h NOEC = 2,0 µg.L⁻¹ (Ando et al., 2007).</p> <p>Die Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifizierung als Karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), Mutagen (Kategorie 1 oder 1B), oder Reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (European Commission, 2008).</p>
Stoffe mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Nicht untersucht, basierend auf den verfügbaren Informationen
Wassergefährdungsklasse (WGK)	1

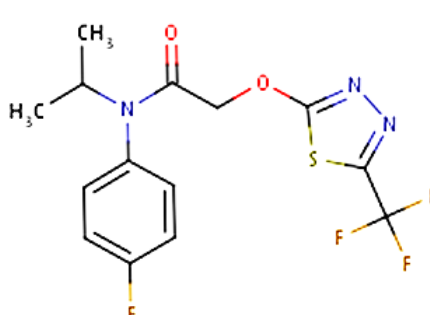
12.8 Existierende UQN Vorschläge für Erythromycin

AAC-QS	0,04 µg.L ⁻¹	Schweiz, Vorschlag, Oekotoxzentrum, 2013
MAC-QS	2,3 µg.L ⁻¹	Schweiz, Vorschlag, Oekotoxzentrum, 2013
AQL QN-V	0,02 µg.L ⁻¹	Deutschland, Vorschlag, Janel and et al., 2006

UQN Vorschläge anderer Länder liegen zurzeit nicht vor.

13 Flufenacet Zusammenfassung

13.1 Chemische Identität

Name	Flufenacet
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	4'-fluoro-N-isopropyl-2-[5-(trifluormethyl)-1,3,4-thiadiazol-2-yloxy]acetanilide
CAS Name	<i>N</i> -(4-Fluorphenyl)- <i>N</i> -isopropyl-2-(5-trifluormethyl-[1,3,4]thiadiazol-2-yloxy)acetamid
Stoffgruppe	Oxyacetamid
CAS Nummer	142459-58-3
EC Nummer	-
Summenformel	C ₁₄ H ₁₃ F ₄ N ₃ O ₂ S
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	363,33

Flufenacet ist ein weitverbreitetes Herbizid, das als Wirkstoff in mehreren Pflanzenschutzmitteln genutzt wird. „Flufenacet wirkt auf das meristematische Pflanzengewebe. Die Zellteilung, Zellwandbildung und Zellstreckung werden gehemmt, was im meristematischen Gewebe der Wurzeln und Sprosse anhand von Wachstumshemmungen festzustellen ist. Die Wirkungsweise von Flufenacet beruht auf der Störung der Bildung sehr langer Fettsäuren (VLCFAE = very-long-chain fatty acid elongase) (HRAC-Gruppe: K3).“ (BVL, 2011)

13.2 Verhalten in der Umwelt

Den Haupteintragspfad für Flufenacet in die Umwelt stellt die Nutzung als Pflanzenschutzmittel dar. Flufenacet besitzt eine relativ geringe Wasserlöslichkeit von 0,056 g.L⁻¹ (bei pH 7). Der K_{oc} von 202 (Mittelwert) lässt auf ein mäßiges Potential zur Adsorption an Schwebstoffe und Sediment schließen. Flufenacet ist beständig gegenüber Hydrolyse und wird im Wasser durch Photolyse mit einer $DT_{50} > 30$ Tage langsam abgebaut.

Die Halbwertszeit (DT_{50}) für den biologischen Abbau von Flufenacet im Wasser liegt bei 8 bis 62 Tagen, im Sediment beträgt sie zwischen 19 und 85 Tagen. Die Substanz erfüllt die P-Kriterien

für Wasser nach ECHA (2008). Aufgrund dieser Eigenschaften besteht eine potentielle Gefährdung der aquatischen Organismen durch Exposition gegenüber Flufenacet.

Abhängig vom Bodentyp ist mit einer hohen bis mäßigen Mobilität von Flufenacet zu rechnen. Der biologische Abbau betrug in Feldversuchen zwischen 10 und 76 Tagen.

„Eine Akkumulation im Boden ist nicht zu erwarten“ (BVL, 2009a).

Mit einem BCF von 89 (geometrischer Mittelwert) besitzt Flufenacet ein geringes Bioakkumulationspotential. Dies lässt auf keine Gefahr der Anreicherung im Nahrungsnetz schließen.

13.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen

Die Qualitätsnorm bzw. der Qualitätsstandard (QS) für den jährlichen Mittelwert (annual average) AA-QS_{freshwater, eco} für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz von aquatischen Biota wird gemäß der WRRL (Wasserrahmenrichtlinie) Anhang 5 (WFD, 2000/60/EC) die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 0,04 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz von Rohwasser das zur Trinkwassergewinnung genutzt wird, ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungsfaktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> ErC ₅₀ : 1,6 µg.L ⁻¹	10	0,2 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}		100	0,02 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Lemna gibba</i> / 14 d / Frondzahl NOEC : 0,44 µg.L ⁻¹	10	0,04 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}		100	0,004 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	AA-QS _{fw, eco} 0,044 µg.L ⁻¹	EqP	0,2 µg.kg ⁻¹ _{ww} 0,5 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{sediment, saltwater}	AA-QS _{sw, eco} 0,0044 µg.L ⁻¹	EqP	0,02 µg.kg ⁻¹ _{ww} 0,05 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{biota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	ADI: 5 µg.kg ⁻¹ bw ⁻¹	-	304 µg.kg ⁻¹ _{biota ww} 1.84 µg.L ⁻¹

13.4 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

13.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für die Ableitung der maximal zulässigen Umweltkonzentration (MAC-QS) zum Schutz der pelagischen Organismen liegen Kurzzeit-Toxizitätsdaten von mindestens drei Arten aus drei Trophieebenen vor. Das niedrigste akute Ergebnis ist die ErC₅₀ von 1,59 µg.L⁻¹ (gerundet auf 1,6 µg.L⁻¹ für Algen (*Pseudokirchneriella subcapitata*), die für die MAC-QS-Herleitung mit einem Bewertungs-

faktor von 10 verwendet wurde. Dieser Bewertungsfaktor wurde gewählt, weil der Grunddatensatz vorliegt und es sich um einen Stoff mit bekanntem Wirkmechanismus handelt. Mit dem Bewertungsfaktor 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium MAC-QS von $0,2 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

13.4.2 Meeresumwelt

Für Salzwasserorganismen sind keine Kurzzeit-Testergebnisse für zusätzliche taxonomische Gruppen verfügbar, so dass für die Ableitung von $\text{MAC-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ der Bewertungsfaktor 100 angewendet wurde. Daraus ergibt sich ein Qualitätsstandard von $0,02 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

13.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

13.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Langzeitergebnisse liegen für repräsentative Arten (Fische, wirbellose Tiere und Algen) aus drei trophischen Ebenen vor. Wie bei einem Herbizid zu erwarten, erwiesen sich Algen und Makrophyten gegenüber Flufenacet als empfindlichste taxonomische Gruppen.

Von den zuverlässigen NOEC-Werten ist die NOEC von $0,44 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ aus einem 14 Tage-Test mit *Lemna gibba* der niedrigste Wert. In einer Mikrokosmenstudie wurde für *Lemna gibba* ein nominaler NOEC von $12 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (bezogen auf die aktive Substanz) ermittelt (Foekema and Jak, 1999). Auf Grund der Abnahme der Expositionskonzentrationen (DT_{50} 18,8 Tage) und der Variabilität zwischen den Replikaten, sollten die Ergebnisse der Studie nicht als Ausgangspunkt für die Ableitung einer UQN verwendet werden.

Für die $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ wurde der Bewertungsfaktor 10 auf die NOEC aus dem *Lemna* Test angewendet. Der Faktor 10 ist gerechtfertigt, weil der Grunddatensatz vorlag und die empfindlichste taxonomische Gruppe in dem Datensatz enthalten war. Dieser Ansatz resultiert in einem vorläufigen $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,04 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

13.5.2 Meeresumwelt

Bei der Ableitung der Qualitätsnorm für Salzwasserorganismen wurde der Bewertungsfaktor 100 angewandt, da Ergebnisse für Repräsentanten der drei Trophieebenen vorliegen, aber keine Daten zusätzlicher taxonomischer Gruppen verfügbar waren.

Daraus ergibt sich eine $\text{AA-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,004 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

13.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien zur Durchführung einer Bewertung zum Schutz benthischer Organismen sind basierend auf dem $\log K_{ow}$ von 3,2 erfüllt. Die K_{oc} Werte liegen mit 100 - 200 $\text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$ unterhalb des Triggerwertes von $\log K_{oc}$ 3. Nach dem Vorsorgeprinzip wurde dennoch ein Sediment Qualitätsziel abgeleitet.

Da für Sedimentlebewesen keine Testergebnisse vorlagen, wurde zur Ermittlung der Qualitätsnormen der Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten-Ansatz (Equilibrium Partitioning) gewählt. Gemäß dem „Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) wurde ein $\text{QS}_{\text{sediment, fw EqP}}$ von $0,52 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG) und ein $\text{QS}_{\text{sediment, sw EqP}}$ von $0,052 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG) abgeleitet.

13.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höhere Trophie Stufen

Flufenacet weist ein vernachlässigbares Akkumulationspotential in der Nahrungskette auf, basierend auf dem BCF von 71.4 (EC, 2003) oder mittleren BCF von 89. Eine Biota-Bewertung ist deshalb nicht erforderlich (EC, 2011), da keine Gefahr einer Sekundärvergiftung für Raubtiere durch kontaminierte Beute zu erwarten ist. Es wurde kein $QS_{\text{biota, sec pois}}$ abgeleitet.

13.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota Standards zum Schutz menschliche Gesundheit wird allein durch die intrinsischen toxischen Eigenschaften der Substanz beeinflusst. Eine Bewertung für Rückstände in aquatischen Biota im Hinblick auf die menschliche Gesundheit wurde durchgeführt, da Flufenacet die toxikologischen Kriterien für „Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholte Exposition (STOT RE Kategorie 2)“ erfüllt und damit die Anforderungen des TGD für UQN (EC, 2011) zur Ableitung eines Biota Standards für den Schutz der menschlichen Gesundheit. Die berechnete $QS_{\text{biota, hh food}}$ liegt bei $304 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ oder bezogen auf die Gewässerkonzentration (max. BCF 165) bei $1,84 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

13.9 Metabolite

Flufenacet wird unter Laborbedingungen im Boden mit DT_{50} -Werten von 21 bis 64 Tagen abgebaut; dabei entstehen drei Metaboliten. „Der Sulfonsäuremetabolit (M2) tritt mit Werten $>0,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ in Simulation und Lysimetern im Sickerwasser auf. Er ist jedoch weder ökotoxikologisch noch toxikologisch relevant“ (BVL, 2011).

13.10 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Aufgeführt als aktive Substanz in Anhang I
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt im Anhang I
PBT Substanzen	Keine PBT oder vPvB Substanz, Kriterien vP und T sind erfüllt (Verordnung (EU) No 253/2011, Anhang XIII) <u>Persistenz</u> DT_{50} (Wasser) = 8.1 - 61.7 d (vP Schwellenwert > 60 d) DT_{50} (Wasser/Sediment) = 19 - 85 d (P Schwellenwert > 120 d) DT_{50} (Boden, Freiland) = 13 - 76 d (P Schwellenwert > 120 d) <u>Bioakkumulation</u> BCF = 165 (Fisch) (B Schwellenwert < 2000)

	<p>Toxizität Folgende Kriterien für „T Substanz“ erfüllt: - Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholter Exposition (STOT RE Kategorie 2) (CLP, 2008). - Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L⁻¹</p> <p>Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1 oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008).</p>
Stoffe mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Nein

13.11 Existierende UQN-Vorschläge für Flufenacet

JG-MKN ¹	0,137 µg.L ⁻¹	Niederlande, RIVM, 2013
MAC-MKN ²	0,61 µg.L ⁻¹	Niederlande, RIVM, 2013
SEDIMENT ad hoc MTR ³	0,32 µg.kg ⁻¹ dw	Niederlande, RIVM, 2013
GRONDWATER ad hoc MTR ⁴	0,01 µg.L ⁻¹	Niederlande, RIVM, 2014
Vorläufiger JD-UQN (Süßwasser)	0,04 µg.L ⁻¹	Nendza, 2010
Vorläufiger ZHK-UQN (Süßwasser)	0,2 µg.L ⁻¹	Nendza, 2010
Vorläufiger JD-UQN (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer)	0,004 µg.L ⁻¹	Nendza, 2010
Vorläufiger ZHK-UQN (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer)	0,02 µg.L ⁻¹	Nendza, 2010
UQNbiota.Human	300 µg.kg ⁻¹	Nendza, 2010

¹ JG-MKN - equivalent to AA-QS_{freshwater, eco}

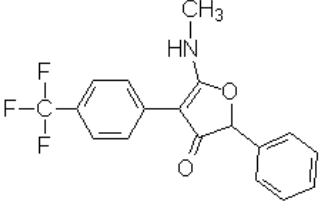
² MAC-MKN - equivalent to MAC_{freshwater, eco}

³ MTR - Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau, (MTR = MTT + Cb; MTT: Maximaal Toelaatbare Toevoeging (als gevolg van antropogene emissies), Cb: achtergrondconcentratie)

⁴ MTR - Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau Grundwasser

14 Flurtamon Zusammenfassung

14.1 Chemische Identität

Name	Flurtamon
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	(RS)-5-Methylamino-2-phenyl-4-(α,α,α -trifluor-m-tolyl)furan-3(2H)-on
IUPAC Name	5-[methylamino]-2-phenyl-4-[3-(trifluormethyl)phenyl]furan-3-on
Chemikalienklasse	Furanon (Herbizid)
CAS Nummer	96525-23-4
EU Nummer	-
Summenformel	$C_{18}H_{14}F_3NO_2$
Strukturformel	
Molare Masse ($g \cdot mol^{-1}$)	330,3

Flurtamon ist ein Herbizid aus der Gruppe Furanone. Es wird zur Kontrolle von breitblättrigen Unkräutern und einigen Ungräsern in Winterweizen, Wintergerste, Winterroggen und Triticale (EC, 2003)

14.2 Verhalten in der Umwelt

Flurtamon hat eine geringe Wasserlöslichkeit ($0,011 g \cdot L^{-1}$ bei $20^\circ C$) und ist hydrolytisch stabil. In einem Wasser-Sediment-System wurde eine Halbwertszeit (DT_{50}) von 22 - 24 Tagen für die Wasserphase und 50 - >100 Tage für das gesamte System bestimmt. Flurtamon hat unter Lichteinwirkung eine Halbwertszeit (DT_{50}) von 13 bis 17 Stunden. Die $\log K_{ow}$ -Werte liegen zwischen 2,8 und 3,2 und deuten auf ein Bioakkumulationspotential hin. BCF-Werte, die in Fischstudien bestimmt wurden, lagen jedoch unterhalb von 100. Eine signifikante Bioakkumulation von Flurtamon im Nahrungsnetz ist demnach nicht zu erwarten.

Der $\log K_{ow}$ von 3,2 deutet ebenso auf ein Adsorptionspotential von Flurtamon an Sedimente oder Böden an. Gemessene K_{oc} -Werte liegen im Bereich zwischen 88 und $543 L \cdot kg^{-1}$, wodurch auf ein geringes bis mäßiges Adsorptionspotential zu schließen ist.

Für den Bereich Boden gibt es Hinweise, dass Flurtamon das Potential besitzt, aufgrund der K_{oc} in das Grundwasser ausgespült zu werden. Derzeit gibt es jedoch keine Studien und Modellierungen, die diese Annahmen unterstützen (PSD, 2000). Stattdessen zeigt eine Lysimeter-Studie, dass Flurtamon nicht in das Grundwasser gelangt. Bei einer Konzentration von $325 g \cdot ha^{-1}$ waren nur $<0,01 \mu g \cdot L^{-1}$ im Grundwasser zu detektieren.

14.3 Ableitung der Qualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) AA-QS_{freshwater, eco} für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco}: 0,23 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QNwater	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Lemna gibba</i> / 14 d	10	1,0 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}	E _B C ₅₀ : 9,9 µg.L ⁻¹	100	0,10 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Lemna gibba</i> / 14 d	10	0,23 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}	NOEC: 2,3 µg.L ⁻¹	100	0,023 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{sediment, saltwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{blota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{blota, hh food}	-	-	Nicht erforderlich

14.4 MAC-QS Umweltqualitätsnorm

14.4.1 Binnen-/Oberflächengewässer

Von Flurtamon lagen Kurzzeit-Toxizitätsstudien für mindestens drei Arten (Algen, Makrophyten, Invertebraten, Fische) aus drei trophischen Ebenen vor. Auf Wasserpflanzen war die Wirkung von Flurtamon am stärksten. Die EC₅₀ aus einer Studie mit der schwimmenden Makrophyte *Lemna gibba* lag bei 9,9 µg.L⁻¹. Diese Effektkonzentration wurde für die Ableitung der MAC-QS_{freshwater, eco} verwendet.

Gemäß der TGD für UQN (EC, 2011) wurde ein Bewertungsfaktor von 10 gewählt, da die spezifische Wirkweise des Herbizids Flurtamon bekannt ist und da repräsentative Arten für die empfindlichste taxonomische Gruppe im Datensatz enthalten sind.

Die MAC-QS_{freshwater, eco} liegt bei 0,99 µg.L⁻¹, gerundet 1,0 µg.L⁻¹.

14.4.2 Meeresumwelt

Der Ableitung der MAC-QS_{saltwater, eco} lagen keine Kurzzeit-Toxizitätsstudien zur akuten Wirkung von Flurtamon auf Meeresorganismen vor. Gemäß der TGD für UQN (EC, 2011) wurde ein Bewertungsfaktor von 100 gewählt. Der Bewertungsfaktor von 100 wurde auf die niedrigste Effektkon-

zentration (EC_{50} : $9,9 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) aus der Studie mit *Lemna gibba* angewendet. Hieraus ergibt sich eine $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,099 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, gerundet $0,10 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

14.5 AA- QS_{water} Umweltqualitätsnorm

14.5.1 Binnen-/Oberflächengewässer

Daten aus Langzeit-Toxizitätsstudien mit Flurtamon sind für Algen, Invertebraten und verschiedene Fischarten verfügbar. Die Kieselalge *Navicula pellicolosa* (NOE_{rC} : $2,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) und die Wasserpflanze *Lemna gibba* (NOE_{rC} : $2,3 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) stellten dabei die sensitivsten Testorganismen dar. Der niedrigste NOEC-Wert wurde für die Ableitung der $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ verwendet. Aufgrund der Datenlage und da der spezifische Wirkmechanismus bekannt ist, wird ein Bewertungsfaktor von 10 angewendet (EC, 2011).

Hieraus ergibt sich eine $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,23 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

14.5.2 Meeresumwelt

Der Ableitung der $AA-QS_{\text{saltwater, eco}}$ lagen keine Langzeit-Toxizitätsstudien mit Meeresorganismen vor. Gemäß der TGD für UQN (EC, 2011) wurde ein Bewertungsfaktor, der 10 x höher als der verwendete Bewertungsfaktor für die Ableitung der $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ war, gewählt. Der Bewertungsfaktor lag bei 100 und wurde auf den niedrigsten NOEC-Wert von $2,3 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ aus einer chronischen Studie mit Süßwasserorganismen angewendet.

Hieraus ergibt sich eine $AA-QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,023 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

14.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Flurtamon hat nur ein geringes Potential, an Schwebstoffe und/oder Sediment zu adsorbieren und hat nur ein geringes Akkumulationspotential. Aufgrund seiner geringen Persistenz und des geringen Bioakkumulationspotentials ergibt sich ein nur geringes Risiko für benthische Organismen. Es wurde keine Bewertung für Sedimentorganismen durchgeführt und kein QS_{sediment} abgeleitet.

14.7 Ableitung der Biota Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

In Anbetracht des niedrigen Bioakkumulationspotentials mit einem BCF-Wert von 27,7 und der geringen Toxizität auf Säugetiere wurde keine Bewertung für Biota durchgeführt und keine $QS_{\text{biota, secpois}}$ abgeleitet. Die Anforderungen des TGD für UQN (EC, 2011) zur Ableitung eines Biota Standards für den Schutz der menschlichen Gesundheit sind nicht erfüllt.

14.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota Standards zum Schutz menschliche Gesundheit wird allein durch die intrinsischen toxischen Eigenschaften der Substanz beeinflusst. In Anbetracht des niedrigen Bioakkumulationspotentials mit einem BCF-Wert von 27,7 und der geringen Toxizität auf Säugetiere wurde keine Bewertung für Rückstände in aquatischen Biota im Hinblick auf die menschliche Gesundheit durchgeführt. Die Anforderungen des TGD für UQN (EC, 2011) waren nicht erfüllt.

14.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittelrichtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Anhang I
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt in Anhang I
PBT Substanzen	<p>Keine PBT Substanz, erfüllt das T Kriterium (nach Verordnung (EU) No. 253/2011 Anhang XIII) (EU, 2011)</p> <p><u>Persistenz</u> DT₅₀ (Boden) = 46 d - 65 d (Schwellenwert > 120 d) DT₅₀ (Wasser) = 22 - 24 d (Schwellenwert > 40 d) DT₅₀ (Wasser/Sediment) = 59 - > 100 d (Schwellenwert Sediment > 120 d)</p> <p><u>Bioakkumulation</u> BCF = 27 - 28 (Schwellenwert > 2000)</p> <p><u>Toxizität</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1A oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008). Es gibt keine Hinweise der chronischen Toxizität oder Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholte Exposition (STOT RE Kategorie 1 oder 2).</p> <p>Kriterium für „T Substanz“ erfüllt: Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L⁻¹</p>
Stoffe mit besonderer Besorgnis (SVHC) (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Nein

14.10 Existierende Qualitätsstandards für Flurtamon

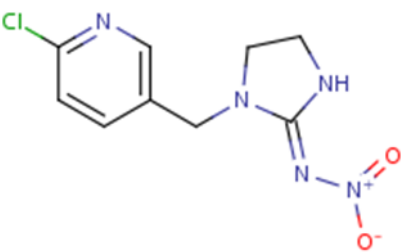
Für Flurtamon wird der generell für Pestizide geltende Trinkwasser-Standard der Trinkwasser-richtlinie der Europäischen Gemeinschaft (EG Richtlinie 98/83/EG (EU, 1998)) mit 0,1 µg.L⁻¹ verwendet.

AA-EQS _{freshwater, eco}	0,10 µg.L ⁻¹	Nendza, 2010
AA-EQS _{saltwater, eco}	0,01 µg.L ⁻¹	

MAC-EQ _{freshwater, eco}	1,0 µg.L ⁻¹	Nendza, 2010
MAC-EQ _{saltwater, eco}	0,10 µg.L ⁻¹	
QS _{blota human}	1800 µg.kg ⁻¹	Nendza, 2010
Trinkwassergrenzwert	0,10 µg.L ⁻¹ (preferred regulatory standard)	EU, 1998
AID	30 µg.kg ⁻¹ bw.day ⁻¹	EC, 2003
AOEL	20 µg.kg ⁻¹ bw.day ⁻¹ AOEL systemic	EC, 2003

15 Imidacloprid Zusammenfassung

15.1 Chemische Identität

Name	Imidacloprid
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	Imidacloprid (ISO Name); (E)-1-(6-Chlor-3-pyridinylmethyl)- N-nitroimidazolidin-2-ylidenamin
CAS Name	1-[(6-Chlor-3-pyridinyl)methyl]-N-nitro-2-imidazolidinimin
Chemikalienklasse	Neonicotinoid
CAS Nummer	138261-41-3
EC Nummer	-
Summenformel	C ₉ H ₁₀ ClN ₅ O ₂
Strukturformel	
Molare Masse (g.mol ⁻¹)	255,66

Eine Risikobewertung für Imidacloprid, einem Insektizid aus der Gruppe der Neonicotinoide, wurde von der Europäischen Behörde für Lebensmittelsicherheit (EFSA) unter der EU-Direktive 91/414/EEC durchgeführt und veröffentlicht (EFSA, 2006, 2008a, b). Qualitätsstandards für Imidacloprid wurden außerdem vom RIVM (Posthuma-Doodeman, 2008) und dem Schweizer Ökotoxzentrum (Junghans et al., 2011) abgeleitet. Diese Bewertungen und die zugehörigen Daten wurden bereits einem gründlichen Gutachterverfahren unterzogen und werden als valide betrachtet.

15.2 Verhalten in der Umwelt

Durch die Verwendung als Insektizid ist der höchste Eintrag von Imidacloprid in Böden zu erwarten. Untersuchungen zur biologischen Abbaubarkeit im Boden unter Freilandbedingungen ergaben Halbwertszeiten (DT₅₀) von 135 Tagen (geometrischer Mittelwert) und damit einen langsamen Abbau der Substanz im Boden. Der organische Kohlenstoff-Adsorptionskoeffizient K_{oc} zwischen 109 und 411 L.kg⁻¹ deutet auf eine gemäßigte Mobilität der Substanz im Boden hin. Die Verflüchtigung von feuchten Oberflächen wird als unwesentlich erachtet.

Die Wasserlöslichkeit von Imidacloprid beträgt 0,061g.L⁻¹. Die Substanz ist schwer abbaubar. Es wurden Halbwertszeiten im Wasser (DT₅₀) von 628 Tagen und im Sediment-Wasser System

zwischen 40 und 1333 Tagen berichtet. Bei Freisetzung im Wasser wird eine geringe Bindung an Sediment und Schwebstoffe erwartet.

Imidacloprid ist mit einer Halbwertszeit von über 1 Jahr hydrolytisch stabil. Eine Verflüchtigung von Imidacloprid ist wegen des niedrigen Dampfdrucks und der niedrigen Henry's Law Konstante nicht zu erwarten

Der BCF Wert von 3,2 deutet auf keine Anreicherung der Substanz in der Nahrungskette hin.

15.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 (WFD, 2000) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 0,0024 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Cloeon dipterum</i> / 96 h EC ₅₀ : 1 µg.L ⁻¹	10	0,1 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}		100	0,01 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Caenis horaria</i> / 28 d / Immobilisierung EC ₁₀ : 0,024 µg.L ⁻¹	10	0,0024 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}		100	0,00024 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, fw EqP}	AA-QS _{freshwater, eco} 0,0024 µg.L ⁻¹ K _{oc} (Mittelwert) 225	-	0,031 µg.kg ⁻¹ dw 0,012 µg.kg ⁻¹ ww
QS _{sediment, sw EqP}	AA-QS _{freshwater, eco} 0,0024 µg.L ⁻¹ (K _{oc} Mittelwert 225)	-	0,0031 µg.kg ⁻¹ dw 0,0012 µg.kg ⁻¹ ww
QS _{biota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	0,06 mg/kg bw/day (ADI)	-	3652 µg.kg ⁻¹ biota ww 1141 µg.L ⁻¹

15.4 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

15.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

15.4.1.1 Bewertungsfaktor (AF)-Methode

Für mindestens drei Arten aus drei Trophiestufen sind Kurzzeit-Toxizitätsdaten verfügbar. Das niedrigste akute Ergebnis, die EC₅₀ von 1 µg.L⁻¹, wurde für Insekten (*Cloeon dipterum*) und Krebstiere (*Cyprretta seuratti*) ermittelt. Für die Herleitung des MAC-QS wurde dieser Wert mit einem Bewertungsfaktor von 10 eingesetzt. Da der Datensatz für Kurzzeit-Toxizität vollständig, der spezifische Wirkmechanismus der Substanz bekannt und die empfindlichste Organismengruppe im Datensatz enthalten ist, wurde dieser Bewertungsfaktor als angemessen angesehen.

Mit dem Bewertungsfaktor 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium $MAC-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

15.4.1.2 Art-Empfindlichkeitsverteilung (SSD)-Methode

Erwartungsgemäß stellen Insekten und Krebstiere für das Insektizid Imidacloprid die empfindlichsten Organismengruppen dar. Die Daten aus Kurzzeittests für Krebstiere und Insekten wurden für eine HC_5 Berechnung anhand der Art-Empfindlichkeitsverteilung (SSD)-Methode verwendet. Alle akuten Daten, die für Süßwasser und Salzwasser Insekten und Krebstiere vorliegen, wurden für die Berechnung herangezogen, mit Ausnahme des hohen EC_{50} Daphnienwertes. Der Datensatz für die SSD-Methode enthält somit 20 Werte (LC_{50}/EC_{50}) aus akuten Studien. Die Berechnung mittels ETX 2.0 Software ergab einen medianen HC_5 von $0,80 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

Die Prüfungen nach dem Anderson-Liebling, Kolmogorov-Smirnov und Cramer von Mises Tests ($P = 0,1$) bestätigten die Normalverteilung der Daten.

Unter Verwendung des Bewertungsfaktors 5 wurde aus der medianen HC_5 von $0,80 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ ein $MAC-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,16 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ berechnet, der den mit der Bewertungsfaktor-Methode abgeleiteten Wert bestätigt.

Für die $MAC-QS_{\text{freshwater, eco}}$ wird der mit dem Bewertungsfaktor abgeleitete Wert von $0,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ verwendet.

15.4.2 Meeresumwelt

Für die Beurteilung der Wirkung auf Salzwasserorganismen wurden die Kurzzeit-Testergebnisse aus den Süßwasser Studien herangezogen (niedrigste EC_{50} $1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$), da keine Daten für zusätzliche marine taxonomische Gruppen vorlagen. Für die Ableitung von $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ wurde der Bewertungsfaktor 100 verwendet und ein Qualitätsstandard $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,01 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ abgeleitet.

15.5 AA- QS_{water} Umweltqualitätsnormen

15.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

15.5.1.1 Bewertungsfaktor (AF) Methode

Die niedrigste Langzeit-Testkonzentration ohne beobachtete schädliche Wirkung (NOEC) von $0,024 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ wurde für Insekten (*Caenis horaria*) ermittelt, der für die AA-QS-Ableitung herangezogen wurde. Da Langzeitergebnisse (NOECs) für drei Spezies aus drei Trophiestufen (Fische, Daphnien und Algen) vorlagen, wurde unter Verwendung des Bewertungsfaktors 10 eine $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,0024 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ abgeleitet.

15.5.1.2 Betrachtung der Mesokosmos-Studien bei der Qualitätsnormen Herleitung

Ergebnisse aus Mesokosmos-Studien wurden von der EFSA (2008b) bewertet und veröffentlicht (EFSA, 2006, 2008 a,b). Der NOEC über alle Endpunkte von $0,6 \mu\text{g a.s. L}^{-1}$ aus der Mesokosmos-Studie von Ratte und Memmert (2003) wurde unter Verwendung des Sicherheitsfaktors 1 von der EFSA für die Risikobewertung der beantragten Pflanzenschutzmittelanwendung akzeptiert.

Diese Studie ist ein Ökosystem-Modell zur Erfassung der Effekte auf die empfindlichsten Taxa (Chironomidae und Baetidae) durch die beantragte Pflanzenschutzmittelanwendung. Für die Ableitung eines Langzeit Qualitätsstandards für kontinuierliche Exposition unter Verwendung des

Bewertungsfaktors 3 und des NOEC von $0,6 \mu\text{g a.s. L}^{-1}$ ergäbe sich ein vorläufiger Qualität Standard von $0,2 \mu\text{g.L}^{-1}$.

15.5.1.3 Art-Empfindlichkeitsverteilung (SSD)-Methode

Erwartungsgemäß stellen Insekten und Crustacean für das Insektizid Imidacloprid die empfindlichsten Organismengruppen dar. Die Daten aus Kurzzeittests für Krebstiere und Insekten wurden für eine HC_5 Berechnung mittels Art-Empfindlichkeitsverteilung (SSD)-Methode verwendet. Alle entsprechenden Langzeit Daten wurden für die Berechnung herangezogen, mit Ausnahme des hohen Daphnienwertes. Der Datensatz für die SSD-Methode enthält somit 11 Werte ($\text{NOEC}/\text{LC}_{10}/\text{EC}_{10}$) aus chronischen Studien. Die Berechnung mittels ETX 2.0 Software ergab einen medianen HC_5 von $0,029 \mu\text{g.L}^{-1}$.

Die Prüfungen nach dem Anderson-Liebling, Kolmogorov-Smirnov und Cramer von Mises Tests ($p = 0,1$) bestätigten die Normalverteilung der Daten.

Unter Verwendung des Bewertungsfaktors 3 wurde aus der medianen HC_5 von $0,029 \mu\text{g.L}^{-1}$ ein $\text{AAC-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,01 \mu\text{g.L}^{-1}$ berechnet.

Für die $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ wird der mit dem Bewertungsfaktor abgeleitete Wert von $0,0024 \mu\text{g.L}^{-1}$ verwendet, der einen „worst-case“ darstellt.

15.5.2 Meeresumwelt

Es liegen nur Langzeitdaten für Süßwasserarten vor, die drei Trophiestufen präsentieren. Der Bewertungsfaktor 100 wurde auf den niedrigsten NOEC-Wert von $0,024 \mu\text{g.L}^{-1}$ für *Caenis horaria* angewandt. Daraus ergibt sich ein $\text{AA-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,0024 \mu\text{g.L}^{-1}$.

15.6 Ableitung von $\text{QS}_{\text{sediment}}$ zum Schutz der benthischen Organismen

Obwohl der Adsorptionskoeffizient (Mittelwert $K_{oc}=225$) mit Werten zwischen 109 - 411 unter dem kritischen Schwellenwert für erhöhtes Adsorptionspotential von 500-1000 L.kg^{-1} liegt, werden im Sediment lebenden Organismen als besonders gefährdet angesehen. Dies erfordert eine Bewertung möglicher Effekte auf Sedimentorganismen.

Es liegt eine belastbare Studie mit Sedimentlebewesen vor, die mit dotierter Wasserphase durchgeführt wurde. Deshalb erfolgte die Ermittlung der Qualitätsnormen anhand des Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten-Ansatzes (Equilibrium Partitioning approach). Gemäß dem „Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) wurde ein $\text{QS}_{\text{sediment, fw EqP}}$ von $0,031 \mu\text{g.kg}^{-1}$ (TG) und ein $\text{QS}_{\text{sediment, sw EqP}}$ von $0,0031 \mu\text{g.kg}^{-1}$ (TG) abgeleitet.

15.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höhere Trophiestufen

Der BCF von 3,2 deutet auf ein sehr geringes Potenzial von Imidacloprid zur Bioakkumulation in der Nahrungskette hin. Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz der Organismen höheren Trophiestufen sind nicht erfüllt. Ein $\text{QS}_{\text{biota, sec pois}}$ wurde nicht abgeleitet.

15.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Eine Bewertung für Rückstände in aquatischen Biota im Hinblick auf die menschliche Gesundheit wurde durchgeführt, da Imidacloprid die toxikologischen Kriterien für „Akute Toxizität oral,

Kategorie 4 (Acute Tox. 4) H302“ erfüllt. Die $QS_{\text{biota, hh food}}$ wurde auf Grundlage des verfügbaren ADI-Wertes von $60 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1} \text{ bw}\cdot\text{d}^{-1}$ (EFSA, 2008) abgeleitet. Da kein BMF oder BAF zur Verfügung stand, wurde ein BMF von 1 gemäß der Leitlinie zur UQN Ableitung (EC, 2011) angenommen. Die $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $3652 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ wurde auf Basis folgender Annahmen abgeleitet: 70 kg Körpergewicht und $0,115 \text{ kg}\cdot\text{d}^{-1}$ Verzehr von Fischerei Erzeugnissen.

Bei einem BCF von 3,2 entspricht die $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $3652 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ einer Wasserkonzentration von $1141 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

15.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Weitgehende Beschränkung der Anwendungen ab 1.12.2013 für mind. 2 Jahre (Regulation (EU) No 485/2013), insbesondere: keine Anwendungen an bienenattraktiven Kulturen, keine Spritzanwendungen in Getreide, keine Saatgut-anwendung in Sommergetreide, keine Anwendungen durch nicht-berufliche Verwender (Haus- und Kleingarten). Neben den genannten Pflanzenschutzmittel-Anwendungen wird auch das Inverkehrbringen und Aussäen von behandeltem Saatgut bei bestimmten Kulturpflanzen verboten.
Biozide (98/8/EC)	Anhang 1 der RL 2011/69/EU
PBT Substanzen	Keine PBT oder vPvB Substanz, Kriterien vP und T sind erfüllt (Verordnung (EU) No 253/2011, Anhang XIII): <u>Persistenz</u> DT ₅₀ (Wasser) = 628 d (vP Schwellenwert > 60 d) DT ₅₀ (Wasser/Sediment) = 186 d (vP Schwellenwert _{Sediment} > 180 d) DT ₅₀ (Boden) = 40 – 1333 d (vP Schwellenwert > 180 d) (288 d, - verwendet von EFSA als ein “ worst case”) <u>Bioakkumulation</u> BCF = 3.2 (Schwellenwert < 2000, B) <u>Toxizität</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1 oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß der CLP (2008). Es gibt keine Hinweise der chronischen Toxizität oder Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholte Exposition (STOT RE Kategorie 1 oder 2). Kriterium für „T Substanz“ erfüllt: Aquatische NOEC Werte sind < $10 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
Stoffe mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein

POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Nicht untersucht, basierend auf den verfügbaren Informationen

15.10 Existierende Qualitätsstandards für Imidacloprid

Für Imidacloprid wird der generell für Pestizide geltende Trinkwasser-Standard der Trinkwasser-richtlinie der Europäischen Gemeinschaft (EG Richtlinie 98/83/EG (EU, 1998)) mit $0,1 \mu\text{g.L}^{-1}$ verwendet.

MAC-EQ _{freshwater, eco}	0,2 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Smit, 2014
MAC-EQS	0,1 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Junghans et al., 2011
MAC _{eco, water}	0,2 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Posthuma-Doodeman, 2008
MAC-EQ _{saltwater, eco}	0,02 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Smit, 2014
MAC _{eco, saltwater}	0,36 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Posthuma-Doodeman, 2008
AA-EQS	0,0134 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Junghans et al., 2011
AA-EQ _{freshwater, eco}	0,0083 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Smit, 2014
MPC _{eco, water} *	0,067 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Posthuma-Doodeman, 2008
AA-EQ _{saltwater, eco}	0,00083 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Smit, 2014
MPC _{eco, saltwater} **	0,003.6 $\mu\text{g.L}^{-1}$	Posthuma-Doodeman, 2008

* MPC_{eco, water} = equivalent to AA-QS_{freshwater, eco}.

** MPC_{eco, saltwater} = equivalent to AA-QS_{saltwater, eco}.

16 Kupfer Zusammenfassung

16.1 Chemische Identität

Name	Kupfer
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	Kupfer
CAS Name	Kupfer
Chemical class	Metall (Übergangsmetall)
CAS Nummer	7440-50-8
EC Nummer	231-159-6
Summenformel	Cu
Strukturformel	-
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	63,55

Eine ausführliche Substanz-Evaluierung und Risikobewertung von Kupfer wurde unter der Altstoffverordnung (EEC) No. 793/93 erforderlich. Die Kupferindustrie unter Leitung des Europäischen Kupferinstituts verpflichtete sich zu einer freiwilligen Risikoanalyse (VRA) für Kupfer und die gelisteten Kupferverbindungen (Cu, CuO, Cu₂O, CuSO₄ and Cu₂Cl(OH)₃, deren umfassender Risikobewertungsentwurf 2005 vorgelegt wurde. Die 2008 veröffentlichte Version berücksichtigt die Kommentare der EU-Mitgliedsstaaten, die in enger Zusammenarbeit mit dem „Review Country“ Italien in die aktuelle Version übernommen wurden. Die Endfassung wurde 2008 veröffentlicht (ECI, 2008).

In der Zwischenzeit liegen für die betrachteten Stoffe die Stoffdatendossiers für die Registrierung unter REACH vor (ECHA, 2014), sowie für einige der Verbindungen Bewertungsberichte aus der Biozidzulassung.

16.2 Verhalten in der Umwelt

Kupfer ist ein in der Erdkruste weit verbreitetes Übergangsmetall und kommt geogen bedingt in unterschiedlichen Konzentrationen in Gewässern vor. Kupfer ist in geringen Konzentrationen ein essentielles Spurenelement für sämtliche Organismen.

In Deutschland lag der Verbrauch an raffiniertem Kupfer im Jahr 2001 bei 1,1 Millionen Tonnen (Mio. t) bzw. für Kupfer einschließlich Legierungen bei 1,70 Mio. t in 2001. Kupfer wird in verschiedenen Bereichen der Landwirtschaft als Fungizid eingesetzt. Die heute üblicherweise verwendeten Wirkstoffe sind Kupferoxychlorid und Kupferhydroxid (Hillenbrand et al., 2005).

Metallisches Kupfer besitzt eine sehr geringe Löslichkeit in Wasser (< 1 mg.L⁻¹). Kupfersalze sind dagegen im Allgemeinen gut wasserlöslich, z.B. Kupfersulfat Pentahydrat mit 220 g.L⁻¹.

Kupfer adsorbiert an Sedimente und Schwebstoffe (mittlerer $\log K_d$ Wert zwischen 4,39 und 5,12 $L \cdot kg^{-1}$). Bioakkumulation in aquatischen Organismen und innerhalb der Nahrungskette ist für Kupfer, wie generell für Metalle, nicht relevant.

16.3 Ableitung der Qualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den generischen jährlichen Mittelwert (annual average) $AA-QS_{freshwater, eco}$ für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Süßwasser-Organismen nach WRRL, Anhang 5 (EC, 2011) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen ($AA-QS_{freshwater, eco}$ $1,1 \mu g \cdot L^{-1}$) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie zur QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC- $QS_{freshwater, eco, generic}$	SSD akute Daten, generisch, nicht-normalisiert HC ₅ : 7,1 $\mu g \cdot L^{-1}$	3 ¹	2,4 $\mu g \cdot L^{-1}$
MAC- $QS_{saltwater, eco, generic}^2$			
AA- $QS_{freshwater, eco, generic}$	SSD chronische Daten, generisch, nicht-normalisiert HC ₅ : 5,7 $\mu g \cdot L^{-1}$	5	1,1 $\mu g \cdot L^{-1}$
AA- $QS_{saltwater, eco, generic}$	SSD chronische Daten, generisch, nicht-normalisiert HC ₅ : 3,5 $\mu g \cdot L^{-1}$	5	0,7 $\mu g \cdot L^{-1}$
QS _{sediment, freshwater}	SSD chronische Daten, normalisiert auf 5 % OC HC ₅ : 87000 $\mu g \cdot kg^{-1}_{dw}$ (ECI, 2008)	1	87000 $\mu g \cdot kg^{-1}_{dw}^3$
QS _{sediment, saltwater}	PNEC _{saltwater, eco} : 2,6 $\mu g \cdot L^{-1}$ (ECI, 2008)	EqP	338000 $\mu g \cdot kg^{-1}_{dw}^3$
QS _{sediment, saltwater}	PNEC _{estuarine water, eco} : 2,6 $\mu g \cdot L^{-1}$ (ECI, 2008)	EqP	144000 $\mu g \cdot kg^{-1}_{dw}^3$
QS _{blota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{blota, hh food}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{blota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich -
QS _{blota, hh food}	-	-	Nicht erforderlich

¹ Geringer als der AF 10, empfohlen im Guidance Document No. 27 (EC, 2011) wegen des geringen Verhältnisses der akuten zu chronischen Effektkonzentrationen (vgl. USEPA (2007): „Final acute chronic ratio (FACR) of 3.22 was calculated as the geometric

mean of the ACRs for sensitive freshwater species, *C. dubia*, *D. magna*, *D. pulex*, *O. tshawytscha*, and *O. mykiss* along with the one saltwater ACR for *C. variegatus*².

² Die Qualitätsnorm für Süßwasser wird als schützend für marines Gewässer angesehen, da Süßwasserorganismen generell empfindlicher auf Kupfer reagieren als Salzwasserorganismen (ECI, 2008d).

³ nach dem Bewertungsansatz des ECI (2008c, d). European Voluntary Risk Assessment.

16.4 MAC-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

16.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Daten zur akuten Toxizität von Kupfer gegenüber Süßwasserorganismen liegen in ausreichender Qualität für 72 Spezies aus 11 taxonomischen Gruppen vor (Amphibien, Fische, Kleinkrebse, Insekten, Moostierchen, Rädertiere, Mollusken, Anneliden, Algen, Makrophyten und Cyanobakterien). Den empfindlichsten EC₅₀ Wert von 3,0 µg.L⁻¹ weist die Grünalge *Chlorella sp.* auf.

Spezies-spezifische L/EC₅₀-Werte wurden ohne Normalisierung hinsichtlich der physiko-chemischen Wasserparameter in einer SSD verwendet. Dabei wurde eine generische HC₅ von 7,1 µg.L⁻¹ Gesamtkupfer berechnet, die 95 % der betrachteten Spezies schützt.

Die Quantität der Daten, die taxonomische Diversität und die Berücksichtigung des geringen Verhältnisses von akuten zu chronischen Effekten (Faktor für akut/chronisch liegt bei ca. 3 (vgl. US EPA, 2007)) erlauben, dass ein Bewertungsfaktor von 3 verwendet werden kann. Damit liegt der für Kupfer vorgeschlagene generische MAC-QS_{freshwater, eco, generic} bei 2,4 µg.L⁻¹.

16.4.2 Meeresumwelt

Die Qualitätsnorm für Süßwasser wird als schützend für marine Gewässer angesehen, da Süßwasserorganismen generell eher empfindlicher auf Kupfer reagieren als Salzwasserorganismen (ECI, 2008d)

Demzufolge wird für die generische MAC-QS_{saltwater, eco} ebenfalls eine Konzentration von 2,4 µg.L⁻¹ vorgeschlagen.

16.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

16.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Daten zur chronischen Toxizität von Kupfer gegenüber Süßwasserorganismen liegen in ausreichender Qualität für 30 Spezies aus acht taxonomischen Gruppen vor (Amphibien, Fische, Kleinkrebse, Insekten, Rädertiere, Mollusken und Algen). Den empfindlichsten NOEC von 2,75 µg.L⁻¹ weist die Grünalge *Scenedesmus acutus* auf.

Spezies-spezifische NOEC-Werte wurden ohne Normalisierung hinsichtlich der physiko-chemischen Wasserparameter in einer SSD verwendet. Dabei wurde eine generische HC₅ von 5,7 µg.L⁻¹ Gesamt-Kupfer berechnet, die 95 % der betrachteten Spezies schützt.

Die nicht normalisierten Toxizitätsdaten weisen teilweise eine hohe Intraspezies-Variabilität auf, so dass der entsprechende Spezies Mittelwert sowie die abgeleitete HC₅-Konzentration einer relativ hohen Unsicherheit unterliegen. Deshalb wird ein Bewertungsfaktor von 5 verwendet und für Kupfer eine generische AA-QS_{freshwater, eco, generic} von 1,1 µg.L⁻¹ vorgeschlagen.

16.5.2 Meeresumwelt

Daten zur chronischen Toxizität von Kupfer gegenüber marinen Organismen liegen in ausreichender Qualität für 38 marine Spezies aus acht taxonomischen Gruppen vor (Fische, Kleinkrebse, Algen, Mollusken, Polychaeten, Echinoderma, Coelenterata und Cnidaria), die die Durchführung einer SSD nur mit marinen Daten erlauben. Den empfindlichsten NOEC von $0,8 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ weist die Kieselalge *Nitzschia closterium* auf.

Spezies-spezifische NOECs wurden ohne Normalisierung hinsichtlich der physiko-chemischen Wasserparameter verwendet. Dabei wurde eine generische HC_5 von $3,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ berechnet, die etwas geringer als der NOEC von $5,7 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ aus der Mesokosmosstudie von Foekema et al. (2010) ist.

Da aber die nicht normalisierten Toxizitätsdaten teilweise eine hohe Intraspezies-Variabilität aufweisen, so dass der entsprechende Spezies Mittelwert sowie die abgeleitete HC_5 -Konzentration einer relativ hohen Unsicherheit unterliegen, wurde ein Bewertungsfaktor von 5 verwendet und für Kupfer eine generische $\text{AA-QS}_{\text{saltwater, eco, generic}}$ von $0,7 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ abgeleitet.

16.6 Ableitung von $\text{QS}_{\text{sediment}}$ zum Schutz der benthischen Organismen

16.6.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Aus einem Datensatz von 106 qualitätsgeprüften Testergebnissen wurden im Rahmen des „Voluntary Risk Assessments“ unter Federführung des Europäischen Kupferinstituts (ECI, 2008) 63 NOEC Werte für sechs Sedimentspezies aus Untersuchungen, die unter „worst-case“ Bedingungen durchgeführt wurden (in Sedimenten mit einem geringen Anteil säureflüchtigen Schwefels (AVS)), ausgewählt und auf organischen Kohlenstoff (OC) normalisiert.

Bei den Spezies handelt es sich um *Hyalella azteca*, *Gammarus pulex*, *Tubifex tubifex*, *Lumbriculus variegatus*, *Chironomus riparius* sowie das Insekt *Hexagenia sp.*

Der niedrigste spezies-spezifische NOEC wurde für Wachstum von *Gammarus* mit $31,1 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ Sediment Trockengewicht bestimmt.

Die niedrigste $\text{HC}_5_{\text{sediment}}$ (benthic SSD) aus einer SSD (log normal Fit) betrug $1741 \text{ mg Cu}\cdot\text{kg}^{-1} \text{ OC}$. Die Berechnung der $\text{HC}_5_{\text{sediment}}$ (EqP) mit verschiedenen Ansätzen (WHAM Model, $K_d_{\text{suspended solid}}$, K_d_{sediment}) ergab HC_5 -Konzentrationen zwischen 1833 und $3808 \text{ mg Cu}\cdot\text{kg}^{-1} \text{ OC}$, die den aus den Sedimenttests abgeleiteten Wert bestätigten.

Ein Bewertungsfaktor >1 wurde von ECI (2008c) als nicht notwendig angesehen, u.a. aufgrund der hohen Anzahl qualitätsgeprüfter Testdaten und des geringen Vertrauensbereichs der HC_5 , daher wurde eine auf 5 % organischen Kohlenstoff normierte $\text{QS}_{\text{sediment, freshwater}}$ von $87000 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Sediment Trockengewicht angegeben.

16.6.2 Meeresumwelt

Die Qualitätsnorm für marine Sedimente wurde im Rahmen des VRAR (ECI, 2008) anhand des Verteilungs-Gleichgewichtsansatzes aus der $\text{PNEC}_{\text{marine}}$ von $2,6 \mu\text{g Cu}\cdot\text{L}^{-1}$ berechnet. Dieser Vorgehensweise stimmte das SCHER Komitee 2009 zu und bestätigte die $\text{PNEC}_{\text{sediment marin}}$ -Konzentrationen von $338\,000 \mu\text{g Cu}\cdot\text{kg}^{-1}$ Trockengewicht (marin) und $144\,000 \mu\text{g Cu}\cdot\text{kg}^{-1}$ Trockengewicht (Ästuar).

Dieser Wertebereich wird in diesem Projekt als $\text{QS}_{\text{sedimentsaltwater, EqP}}$ vorgeschlagen.

16.7 Ableitung der Biota-Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Bioakkumulation und Anreicherung entlang von Nahrungsketten ist für Kupfer nicht relevant. Ein $QS_{\text{sec pois}}$ wurde nicht abgeleitet.

16.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota Standards zum Schutz menschliche Gesundheit wird allein durch die intrinsischen toxischen Eigenschaften der Substanz beeinflusst. Nach dem TGD für UQN (EC, 2011) wurde keine Bewertung für Rückstände in aquatischen Biota im Hinblick auf die menschliche Gesundheit durchgeführt, da für Kupfer keine gentoxischen, karzinogenen oder reproduktions-toxischen Eigenschaften festgestellt wurden. Ein $QS_{\text{biota, hh food}}$ wurde nicht abgeleitet.

16.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt																																						
Altstoffverordnung (793/93/EC)	<p>Anhang 1 listet einige Kupferverbindungen auf:</p> <table> <thead> <tr> <th></th> <th>CAS</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Kupferoxid</td> <td>1317-38-0</td> </tr> <tr> <td>Dikupferoxid</td> <td>1317-39-1</td> </tr> <tr> <td>Naphtensäure, Kupfersalze</td> <td>1338-02-9</td> </tr> <tr> <td>Kupferdinitrat</td> <td>3251-23-8</td> </tr> <tr> <td>Kupfer</td> <td>7440-50-8</td> </tr> <tr> <td>Kupfersulfat</td> <td>7758-98-7</td> </tr> </tbody> </table>		CAS	Kupferoxid	1317-38-0	Dikupferoxid	1317-39-1	Naphtensäure, Kupfersalze	1338-02-9	Kupferdinitrat	3251-23-8	Kupfer	7440-50-8	Kupfersulfat	7758-98-7																								
	CAS																																						
Kupferoxid	1317-38-0																																						
Dikupferoxid	1317-39-1																																						
Naphtensäure, Kupfersalze	1338-02-9																																						
Kupferdinitrat	3251-23-8																																						
Kupfer	7440-50-8																																						
Kupfersulfat	7758-98-7																																						
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	<p>Anhang 1 listet einige Kupferverbindungen auf:</p> <table> <thead> <tr> <th></th> <th>CAS</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Kupfer (II) hydroxid</td> <td>20427-59-2</td> </tr> <tr> <td>Dikupferchlorid Trihydroxid</td> <td>1332-65-6 or 1332-40-7</td> </tr> </tbody> </table>		CAS	Kupfer (II) hydroxid	20427-59-2	Dikupferchlorid Trihydroxid	1332-65-6 or 1332-40-7																																
	CAS																																						
Kupfer (II) hydroxid	20427-59-2																																						
Dikupferchlorid Trihydroxid	1332-65-6 or 1332-40-7																																						
Biozide (98/8/EC)	<p>Anhang 1 listet Kupfer und einige seiner Verbindungen auf:</p> <table> <thead> <tr> <th></th> <th>CAS</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Kupfer</td> <td>7440-50-8</td> </tr> <tr> <td>Kupferthiocyanat</td> <td>1111-67-7</td> </tr> <tr> <td>Kupferoxid,</td> <td>1317-38-0</td> </tr> <tr> <td>Dikupferoxid</td> <td>1317-39-1</td> </tr> <tr> <td>Dikupferchlorid Trihydroxid</td> <td>1332-65-6</td> </tr> <tr> <td>Naphthensäuren, Kupfersalze</td> <td>1338-02-9</td> </tr> <tr> <td>Kupfer(II)chlorid</td> <td>1344-67-8</td> </tr> <tr> <td>Kupferdinitrat</td> <td>3251-23-8</td> </tr> <tr> <td>Kupferchlorid</td> <td>7758-89-6</td> </tr> <tr> <td>Kupfersulfat</td> <td>7758-98-7</td> </tr> <tr> <td>Kupfersulfat Pentahydrat</td> <td>7758-99-8</td> </tr> <tr> <td>Oxin-Kupfer</td> <td>10380-28-6</td> </tr> <tr> <td>Kupfer(II)carbonat-Kupfer(II)hydroxid (1:1)</td> <td>12069-69-1</td> </tr> <tr> <td>Bis(1-hydroxy-1H-pyridin-2-thionato-O,S)kupfer</td> <td>14915-37-8</td> </tr> <tr> <td>Kupferdihydroxid</td> <td>20427-59-2</td> </tr> <tr> <td>Bis(tetraamminkupfer)carbonat Dihydroxid</td> <td>68833-88-5</td> </tr> <tr> <td>Kupfer, EDTA-Komplexe</td> <td>90294-99-8</td> </tr> <tr> <td>Bis[1-cyclohexyl-1,2-di(hydroxy-.kappa.O) diazeniumato(2-)]-kupfer</td> <td>312600-89-8</td> </tr> </tbody> </table>		CAS	Kupfer	7440-50-8	Kupferthiocyanat	1111-67-7	Kupferoxid,	1317-38-0	Dikupferoxid	1317-39-1	Dikupferchlorid Trihydroxid	1332-65-6	Naphthensäuren, Kupfersalze	1338-02-9	Kupfer(II)chlorid	1344-67-8	Kupferdinitrat	3251-23-8	Kupferchlorid	7758-89-6	Kupfersulfat	7758-98-7	Kupfersulfat Pentahydrat	7758-99-8	Oxin-Kupfer	10380-28-6	Kupfer(II)carbonat-Kupfer(II)hydroxid (1:1)	12069-69-1	Bis(1-hydroxy-1H-pyridin-2-thionato-O,S)kupfer	14915-37-8	Kupferdihydroxid	20427-59-2	Bis(tetraamminkupfer)carbonat Dihydroxid	68833-88-5	Kupfer, EDTA-Komplexe	90294-99-8	Bis[1-cyclohexyl-1,2-di(hydroxy-.kappa.O) diazeniumato(2-)]-kupfer	312600-89-8
	CAS																																						
Kupfer	7440-50-8																																						
Kupferthiocyanat	1111-67-7																																						
Kupferoxid,	1317-38-0																																						
Dikupferoxid	1317-39-1																																						
Dikupferchlorid Trihydroxid	1332-65-6																																						
Naphthensäuren, Kupfersalze	1338-02-9																																						
Kupfer(II)chlorid	1344-67-8																																						
Kupferdinitrat	3251-23-8																																						
Kupferchlorid	7758-89-6																																						
Kupfersulfat	7758-98-7																																						
Kupfersulfat Pentahydrat	7758-99-8																																						
Oxin-Kupfer	10380-28-6																																						
Kupfer(II)carbonat-Kupfer(II)hydroxid (1:1)	12069-69-1																																						
Bis(1-hydroxy-1H-pyridin-2-thionato-O,S)kupfer	14915-37-8																																						
Kupferdihydroxid	20427-59-2																																						
Bis(tetraamminkupfer)carbonat Dihydroxid	68833-88-5																																						
Kupfer, EDTA-Komplexe	90294-99-8																																						
Bis[1-cyclohexyl-1,2-di(hydroxy-.kappa.O) diazeniumato(2-)]-kupfer	312600-89-8																																						

	<p>Bis(2,6-diacetyl-7,9-dihydroxy-8,9b-dimethyl-1,3 (2H,9bH)-dibenzofurandionato-02,03)kupfer 94246-73-8</p> <p>Aluminiumnatriumsilikat-Silberkupferkomplex/ Silber-Kupfer-Zeolith 130328-19-7</p>
PBT Substanzen	<p>Keine PBT Substanz, erfüllt das „T Kriterium“ (Verordnung (EU) No. 253/2011 Anhang XIII)</p> <p><u>Bioakkumulation</u> “Additional, it is useful to mention that the information on the mechanism of action, the homeostatic regulatory mechanisms, the comparison of the effects, data obtained from exposures through respectively water and food and the information on copper accumulations across trophic chains do not indicate towards concern from secondary poisoning nor trophic chain transfer” (ECI, 2008, Vol.: PNEC derivation for copper in freshwater sediments).</p> <p><u>Toxizität</u> Kupferverbindungen, bewertet in ECI (2008), sind eingestuft als “Akut toxisch beim Verschlucken, Kategorie 4, (H 302)“ nach CLP (2008).</p> <p>„T Kriterium“ ist erfüllt, weil: Aquatische Langzeitstudie mit NOEC/EC₁₀ < 10 µg.L⁻¹.</p>
Substanzen mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nicht aufgeführt
POPs (Stockholm Konvention)	Nicht aufgeführt
Endokriner Disruptor	Keine Hinweise basierend auf verfügbaren Informationen

16.10 Existierende UQN-Vorschläge

Süßwasser		
CMC (acute) ^{1 fw}	2,34 µg.L ⁻¹	US EPA, 2007 normalisiert auf Referenzwasser ²
CCC (chronic) ^{1 fw}	1,45 µg.L ⁻¹	US EPA, 2007 normalisiert auf Referenzwasser ²
AA-EQS _{generic, fw, eco} ³	0,6 µg.L ⁻¹	ECI, 2008 nicht-normalisiert, vollständige Bioverfügbarkeit des Metallions angenommen
AA-EQS _{reference, fw, eco}	7,8 µg.L ⁻¹	ECI, 2008 normalisiert auf pH 8.1, DOC 3,2 mg.L ⁻¹ , Na 14,2 mg.L ⁻¹ , Alkalinität 116 mg CaCO ₃ .L ⁻¹ , Härte 165 mg CaCO ₃ .L ⁻¹ , 90 % der Europäischen Ökoregionen schützend
PNEC ⁴ freshwater	7,8 µg.L ⁻¹	ECHA, 2014 (Registrierungsdossiers für Kupfer und Kupferverbindungen)
AA-EQS _{sediment, freshwater}	87000 µg.kg ⁻¹	ECI, 2008

PNEC⁴ sediment, freshwater	87000 µg.kg ⁻¹	ECHA, 2014, (Registrierungsdossiers für Kupfer und Kupferverbindungen)
Salzwasser		
AA-EQS reference, sw, eco	2,64 µg.L ⁻¹	Maycock, Merrington and Peters (2012) DOC normalisiert auf 1 mg.L ⁻¹
PNEC⁴ reference, sw	5,2 µg.L ⁻¹	ECHA, 2014, (Registrierungsdossiers für Kupfer und Kupferverbindungen) DOC normalisiert auf 2 mg.L ⁻¹
AA-EQS reference, sw, eco	2,6 µg.L ⁻¹	ECl, 2008 DOC normalisiert to 2 mg.L ⁻¹
AA-EQS reference, sw, eco	1,4 µg.L ⁻¹	ECl, 2008 DOC normalisiert auf 0,2 mg.L ⁻¹
AA-EQS sediment, saltwater, EqP	338000 µg.kg ⁻¹	ECl, 2008, Equil. Partitioning
AA-EQS sediment, estuarine, EqP	144000 µg.kg ⁻¹	ECl, 2008, Gleichgewichts-Verteilungs-Ansatz
PNEC⁴ sediment, saltwater	676000 µg.kg ⁻¹	ECHA, 2014, (Registrierungsdossiers für Kupfer und Kupferverbindungen)

¹ Criterion Maximum Concentration, berechnet aus dem "Final Acute Value" durch Division mit 2.

² EPA Formulierung für mittelhartes rekonstituiertes Wasser(20°C), pH = 7,5, DOC = 0,5 mg/L, Ca = 14,0 mg/L, Mg = 12,1 mg/L, Na = 26,3 mg/L, K = 2,1 mg/L, SO₄ = 81,4 mg/L, Cl = 1,90 mg/L, Alkalinität = 65,0 mg/L und S = 0,0003 mg/L.

⁴ PNEC - abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentration (gleichwertig dem AA-QS_{freshwater, eco})

³ generischer QS_{bioavailable} abgeleitet unter Annahme der vollständigen Bioverfügbarkeit des Metallions.

17 Metoprolol Zusammenfassung

17.1 Chemische Identität

Name	Metoprolol
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	1-[4-(2-methoxyethyl)phenoxy]-3-(propan-2-ylamino)propan-2-ol
CAS Name	Metoprolol
Chemische Klasse	N-alkylierte Phenoxypropanolamine
CAS Nummer	37350-58-6
EC Nummer	253-483-7
Summenformel	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O
SMILES	CC(C)NCC(COC1=CC=C(C=C1)CCOC)O
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	267,37

Metoprolol ist ein Arzneistoff aus der Gruppe der selektiven β_1 -Adrenorezeptorenblocker (Beta-blocker) und wird zur Behandlung des Bluthochdrucks, der koronaren Herzkrankheit, von Herzrhythmusstörungen und zur Akutbehandlung des Herzinfarktes verwendet. Ein weiteres Anwendungsgebiet ist die Migräneprophylaxe.

Der Arzneistoff Metoprolol wurde 2005 in Deutschland in einer Gesamtmenge von 115,8 Tonnen eingesetzt (Kümmerer et al., 2009). 2012 wurden in Deutschland 157 Tonnen Metoprolol verkauft (Ebert and Hein 2013). Anhand technischer Herstellerangaben schätzten Kümmerer et al. (2009) dass jährlich 11,3 Tonnen als nicht-metabolisierte Ausgangssubstanz und 104,5 Tonnen in metabolisierter Form ausgeschieden werden. In Oberflächengewässern wurden von der LAWA Konzentrationen von $<0,005 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ bis $2,9 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ mit einem maximalen Mittelwert von $1,59 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ zwischen 2009 und 2011 mitgeteilt (Ebert and Hein, 2013).

17.2 Verhalten in der Umwelt

Kommunale Kläranlagen stellen den Haupteintragspfad für Metoprolol in die Umwelt dar.

Metoprolol ist sehr gut wasserlöslich ($16,9 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$) und wird wenig an Sediment und Klärschlamm adsorbiert ($K_{oc} = 18 - 110 \text{ L}\cdot\text{kg}^{-1}$). K_{oc} -Werte für Metoprolol für Schwebstoffe liegen nicht vor,

aber auch hier ist die Adsorption gering und 81% verbleiben in der Wasserphase (BLAC, 2003). Transformation im Sediment ist vernachlässigbar (Grung et al., 2008).

Metoprolol wird bei üblicher Abwasserbehandlung zu 20% bis 70% abgebaut (Sundstøl Eriksen et al., 2009) und gilt als schwierig zu entfernen (Smit and Wuijts, 2012). Der Eliminierungsgrad von Metoprolol in Kläranlagen liegt bei 50% - 90% bei konventioneller Behandlung und bei 50% - >90 % nach Ozonierung (LANUV NRW, 2007). Die Elimination von Metoprolol in Kläranlagen mittels Aktivkohle ist durch die geringe Sorption eingeschränkt (Metzger et al., 2003).

Im Boden ist für Metoprolol eine mittlere Mobilität zu erwarten ($K_{oc} = 560 - 3770 \text{ L.kg}^{-1}$). Experimentelle Informationen zur Abbaubarkeit von Metoprolol in Boden liegen kaum vor, allerdings weisen Schätzwerte auf eine geringe Bioabbaubarkeit hin und damit auf mögliche Persistenz (Ortiz de Garcia et al., 2013).

Weil Metoprolol nicht flüchtig ist, ist ein möglicher atmosphärischer Abbau (US EPA, 2012a) nicht relevant.

Experimentelle Informationen zur Bioakkumulation von Metoprolol in Fischen liegen nicht vor. Eine 20-fache Anreicherung in Süßwassermuscheln (*Dreissena polymorpha*) (Contardo-Jara et al., 2010) passt zu niedrigen berechneten BCF-Werten (4.5 - 57). Der experimentelle $\log K_{ow}$ von 1.88 weist ebenfalls auf $BCF < 100$.

17.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die zur Ableitung der Umweltqualitätsnorm herangezogenen Daten werden als valide angesehen. Die kritischen Daten wurden einer GLP-Studie mit der Zielsetzung der Ableitung von Zielvorgaben in Oberflächengewässern bestimmt (Bruns and Knacker, 1998) und als Klimisch 1 (valide ohne Einschränkungen (Klimisch et al., 1997)) beurteilt. Weitere Daten sind in Quellen mit Gutachterverfahren publiziert und im Rahmen einer Studie zur Ausarbeitung von Vorschlägen für akute und chronische Qualitätskriterien für ausgewählte schweizrelevante Substanzen (Oekotoxzentrum, 2013) als Klimisch 2 (valide mit (geringen) Einschränkungen (Klimisch et al., 1997)) beurteilt. Bei den Toxizitätstest der GLP-Studie (Bruns and Knacker, 1998) wurden die Prüfsubstanzkonzentrationen während der Tests analytisch bestimmt. Signifikante Abweichungen zwischen nominalen und gemessenen Toxizitätswerten sind für das schlecht abbaubare Metoprolol unwahrscheinlich.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen ($AA-QS_{\text{freshwater, eco}} 43 \mu\text{g.L}^{-1}$) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	Algen, <i>Desmodesmus subspicatus</i> Wachstum	10	180 $\mu\text{g.L}^{-1}$
MAC _{saltwater, eco}	96 h $E_b C_{50} = 1800 \mu\text{g.L}^{-1}$	100	18 $\mu\text{g.L}^{-1}$
AA-QS _{freshwater, eco}	Algen, <i>Desmodesmus subspicatus</i> Wachstum	10	43 $\mu\text{g.L}^{-1}$
AA-QS _{saltwater, eco}	96 h NOEC = 430 $\mu\text{g.L}^{-1}$	100	4,3 $\mu\text{g.L}^{-1}$

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
QS _{sediment, freshwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{sediment, saltwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, sec pois}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	-	-	Nicht erforderlich

1.9 MAC-QS Umweltqualitätsnorm

1.9.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Daten zur akuten Toxizität liegen für mindestens drei Arten aus drei Trophieebenen vor. Die empfindlichsten Arten sind Algen. Aquatische Pflanzen, Fische, Kleinkrebse und Bakterien sind weniger empfindlich. Das niedrigste akute Ergebnis ist die 96 h EC₅₀ von 1800 µg.L⁻¹ (*Desmodesmus subspicatus* (Bruns and Knacker, 1998)), das mit einem Bewertungsfaktor von 10 eine MAC-QS_{freshwater, eco} von 180 µg.L⁻¹ ergibt.

1.9.2 Meeresumwelt

Für Salzwasserorganismen sind keine Kurzzeit-Testergebnisse verfügbar, so dass der Bewertungsfaktor 100 für die Ableitung der MAC-QS_{saltwater, eco} angewendet wird. Daraus ergibt sich ein Qualitätsstandard von 18 µg.L⁻¹.

1.10 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnorm

1.10.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Langzeitergebnisse liegen für repräsentative Arten (Fische, wirbellose Tiere und Algen) aus 3 trophischen Ebenen vor. Bei den konventionellen Endpunkten sind Algen (*Desmodesmus subspicatus* 72, 96 h NOEC = 430 µg.L⁻¹ (Bruns and Knacker, 1998)) empfindlicher als Kleinkrebse (*Daphnia magna* 9 d NOEC = 3200 µg.L⁻¹ (Dzialowski et al., 2006)) und Fische (*Oncorhynchus mykiss* mortality 28 d NOEC = 18700 µg.L⁻¹ (Bruns and Knacker, 1998)). Zytopathologische Endpunkte bei Fischen (*Oncorhynchus mykiss*) erweisen sich gegenüber Metoprolol als wesentlich empfindlicher mit 28 d LOEC/NOEC zwischen 1 und 20 µg.L⁻¹ (Triebskorn et al., 2007). Weil die klinisch-chemischen Veränderungen reversibel sind (Schwaiger, 2014) und die Populationsrelevanz dieser Endpunkte für Fische noch nicht abschließend geklärt ist, werden diese Daten nicht für QS-Ableitungen verwendet. Weitere Auswertungen der Studien von (Triebskorn et al., 2007) können aber eine Überarbeitung dieser Ableitungen veranlassen.

Das niedrigste chronische Ergebnis ist die NOEC von 430 µg.L⁻¹ (*Desmodesmus subspicatus* (Bruns and Knacker, 1998)), das mit einem Bewertungsfaktor von 10 eine AA-QS_{freshwater, eco} von 43 µg.L⁻¹ ergibt.

1.10.2 Meeresumwelt

Für Salzwasserorganismen sind keine Langzeit-Testergebnisse verfügbar, so dass der Bewertungsfaktor 100 für die Ableitung der AA-QS_{saltwater, eco} angewendet wird. Daraus ergibt sich ein Qualitätsstandard von 4,3 µg.L⁻¹.

1.11 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz benthischer Organismen nach dem TGD für UQN (EC, 2011) sind nicht erfüllt. QS_{sediment, freshwater} und QS_{sediment, saltwater} wurden nicht bestimmt.

1.12 Ableitung der Biota-Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Es wurde keine Bewertung der Rückstände in aquatischen Biota im Hinblick auf Nahrungsnetze durchgeführt, da für Metoprolol die entsprechenden Kriterien nach dem TGD für UQN (EC, 2011) (Bioakkumulationspotential) nicht erfüllt sind. QS_{biota, sec pois} wurde nicht bestimmt.

1.13 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Es wurde keine Bewertung der Rückstände in aquatischen Biota im Hinblick auf die menschliche Gesundheit durchgeführt, da für Metoprolol die entsprechenden Kriterien nach dem TGD für UQN (EC, 2011) nicht erfüllt sind. QS_{biota, hh food} wurde nicht bestimmt.

1.14 Metabolite

Metoprolol wird fast vollständig in der Leber metabolisiert (first-pass effect). Der Hauptmetabolit bei Menschen ist das durch Oxidation gebildete α-Hydroxymetoprolol (Kümmerer et al., 2009). Der Hauptmetabolit in der Umwelt ist Atenololsäure (LANUV NRW, 2007). Kümmerer et al. (2009) führen fünf Hauptmetabolite auf:

alpha-Hydroxymetoprolol	[CAS 56392-16-6]
O-Demethylmetoprolol	[CAS 62572-94-5]
Atenololsäure	[CAS 56392-14-4]
2-Hydroxy-3-[4-(2-methoxyethyl)phenoxy]propansäure (deaminiertes Metoprolol)	[CAS 56392-15-5]
N-Nitrosometoprolol (potentiell)	[CAS 134720-05-1]

17.4 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

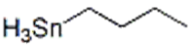
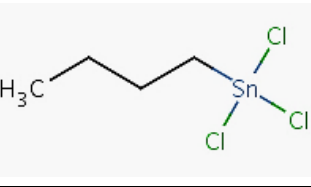
Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (7933/93/EC)	Nicht anwendbar
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt in Anhang I Nicht aufgeführt
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt in Anhang I
PBT Substanzen	<p>Nicht gekennzeichnet als PBT Substanz (gemäß Verordnung (EU) No. 253/2011 Anhang XIII (European Union, 2011))</p> <p><u>Persistenz</u> Nicht abbaubar (Schwellenwert >120 d)</p> <p><u>Bioakkumulation</u> BCF <100 (Schwellenwert >2000)</p> <p><u>Toxizität</u> (nach Verordnung (EC) No 1272/2008 Anhang VI): aquatische NOEC Werte <10 µg.L⁻¹: z.B. Fisch, <i>Oncorhynchus mykiss</i> Kiemen Zytopathologie 28 d NOEC = 5 µg.L⁻¹</p> <p>Die Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifizierung als Karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), Mutagen (Kategorie 1 oder 1B), oder Reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (European Commission, 2008).</p>
Stoffe mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Nicht untersucht, basierend auf den verfügbaren Informationen
Wassergefährdungsklasse (WGK)	2

17.5 Existierende UQN Vorschläge für Metoprolol

AAC-QS	64 µg.L ⁻¹	Schweiz, Vorschlag, Oekotoxzentrum, 2013
MAC-QS	76 µg.L ⁻¹	Schweiz, Vorschlag, Oekotoxzentrum, 2013
AQL QN-V	7,3 µg.L ⁻¹	Deutschland, Vorschlag, Jahnelt and et al., 2006
Zielwert für Pharmazeutika in Oberflächen-gewässern zur Gewinnung von Trinkwasser	0,1 µg.L ⁻¹	Niederlande, van der Aa et al., 2011

18 Monobutylzinnkation Zusammenfassung

18.1 Chemische Identität

Name	Monobutylzinn-Kation
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	Butylzinn(3+)
CAS Name	Butylzinn(3+)
Stoffgruppe	Zinnorganische Verbindungen
CAS Nummer	78763-54-9
EC Nummer	-
Summenformel	C_4H_9Sn
Strukturformel	
Molekulare Masse ($g \cdot mol^{-1}$)	175,8
Common name	Monobutylzintrichlorid
Chemical name (IUPAC)	n-Butylzintrichlorid
CAS name	-
Chemical class	organische Verbindung
CAS number	1118-46-3
EC number	214-263-6
Molecular formula	$C_4H_9Cl_3Sn$
Molecular structure	
Molecular weight ($g \cdot mol^{-1}$)	282,2

Mono- und Diorganozinnverbindungen werden in großem Umfang als Wärme- und Lichtstabilisatoren bei der Herstellung von Polyvinylchlorid (PVC) verwendet (BfR, 2011).

18.2 Verhalten in der Umwelt

Für Monobutylzinn-Kation sind nur wenige Daten zum Verhalten in der Umwelt verfügbar. Das am meisten verwendete Monobutylzinnchlorid (CAS 1118-46-3) dissoziiert in Wasser rasch zu Monobutylzinn-Kationen und Chlorid (HSDB, 2007). Die vorliegende Bewertung wurde deshalb auf Basis der Daten zu Monobutylzinnchlorid vorgenommen.

Monobutylzinnchlorid ist mit $8,2 \text{ g.L}^{-1}$ bei 20 °C mäßig wasserlöslich (WHO, 2006). Aufgrund dessen, dass Monobutylzinn primär als Kation vorliegt, wird eine hohe Adsorption an Schwebstoffe und Sediment angenommen.

In Versuchen gemäß OECD TG 301F ist Monobutylzinn leicht biologisch abbaubar (ECHA, 2013). Aufgrund der ermittelten Henry's Law Konstante kann es in der Wasserphase zu einer Verflüchtigung in die Atmosphäre kommen.

18.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Mehrzahl der aufgeführten Daten wurde aus Literatur und existierenden Bewertungen entnommen. Effektkonzentrationen für Monobutylzintrichlorid (MBTC) wurden mit dem Faktor 0,623 (Verhältnis der Molekularmasse MBTC/MBT) in Monobutylzinn-Kation (MBT)-Konzentrationen umgewandelt.

Der Bewertung liegen Daten aus Kurzzeit-Toxizitätstests für verschiedene Arten der drei Trophiestufen (Fisch, wirbellose Tiere und Algen) zugrunde. Die Algen reagierten am empfindlichsten in den Akuttests auf Monobutylzintrichlorid. Das niedrigste Kurzeitergebnis wurde für die marine Grünalge *Platymonas sp.* ermittelt. Hier lag die 96-h $E_{yC_{50}}$ bei $0,056 \mu\text{g MBT.L}^{-1}$. Die Süßwassergrünalge *Scenedesmus obliquus* weist mit einer 96-h $E_{yC_{50}}$ von $0,059 \mu\text{g MBT.L}^{-1}$ eine vergleichbare Sensitivität auf (Huang et al., 1996). Ein mit der Grünalge *Desmodesmus subspicatus* durchgeführter, aktueller Test lieferte weniger kritische Daten. Hier ergab sich ein 72-h $E_{rC_{50}}$ von $193 \mu\text{g MBT.L}^{-1}$ (ECHA, 2013).

Die drei für Grünalgenarten vorhandenen Daten (zwei Süßwasser und einer marinen Grünalgenart) weisen einen sehr großen Sensitivitätsunterschied auf. Die EC_{50} Werte von Huang et al. (1996) für die Süßwasser- und Salzwasseralge, die vergleichbare EC_{50} Werte aufweisen, sind um etwa das 1000-fache niedriger, als die im REACH Registrierungsossier für MBTC, aus einer validen GLP Studie mit *Desmodesmus subspicatus*, aufgeführten Werte.

Die von Huang et al. (1996) präsentierten Werte für MBTC wurden ebenfalls als verlässlich eingestuft. Eine direkte Überprüfung der Testdaten war allerdings nicht möglich.

Zu Abklärung des Sensitivitätsunterschieds zwischen den verschiedenen Grünalgentests wird empfohlen, weitere Algentests nach OECD Richtlinie durchzuführen. Basierend auf der vorhandenen, unsicheren Datenlage erscheint die Ableitung einer endgültigen verlässlichen Umweltqualitätsnorm zurzeit nicht sinnvoll.

Die im Folgenden durchgeführten Ableitungen der verschiedenen QS für Süß- und Salzwasserorganismen wurde auf Basis der vorhandenen Daten durchgeführt. Hierbei wurde angenommen, dass die Daten von Huang et al. (1996) valide sind. Es wurde der „worst case“ betrachtet. Ebenso wurde aber auch eine Ableitung auf Basis der ECHA Daten (ECHA, 2013) durchgeführt.

Zum Schutz aquatischer Süßwasser-Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen ($AA\text{-}QS_{\text{freshwater, eco}} 0,0006 \mu\text{g.L}^{-1}$) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie zur QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN *
MAC _{freshwater, eco}	<i>Platymonas sp.</i> / 96 h	10	0,0056 µg.L ⁻¹ worst case
MAC _{saltwater, eco}	E _Y C ₅₀ : 0,056 (µg MBT.L ⁻¹)	10	0,0056 µg.L ⁻¹ worst case
MAC-QS _{freshwater, eco}	<i>D. subspicatus</i> / 72 h	10	19,3 µg.L ⁻¹
MAC-QS _{saltwater, eco}	E _r C ₅₀ : 193,1 (µg MBT.L ⁻¹)	100	1,93 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Platymonas sp.</i> / 96 h	100	0,0006 µg.L ⁻¹ worst case
AA-QS _{saltwater, eco}	E _Y C ₅₀ : 0,056 (µg MBT.L ⁻¹)	1000	0,0006 µg.L ⁻¹ worst case
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>D. subspicatus</i> / 72 h	10	0,75 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}	NOEC : 7,5 (µg MBT.L ⁻¹)	100	0,075 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	AA-QS _{freshwater} = 0,0006 µg.L ⁻¹	EqP	1,4 µg.kg ⁻¹ _{ww} worst case 3,6 µg.kg ⁻¹ _{dw} worst case
QS _{sediment, saltwater}	AA-QS _{saltwater} = 0,0006 µg.L ⁻¹	EqP	1,4 µg.kg ⁻¹ _{ww} worst case 0,36 µg.kg ⁻¹ _{dw} worst case
QS _{sediment, freshwater}	AA-QS _{freshwater} = 0,75 µg.L ⁻¹	EqP	1,4 µg.kg ⁻¹ _{ww} worst case 3,6 µg.kg ⁻¹ _{dw} worst case
QS _{sediment, saltwater}	AA-QS _{saltwater} = 0,075 µg.L ⁻¹	EqP	1,4 µg.kg ⁻¹ _{ww} worst case 3,6 µg.kg ⁻¹ _{dw} worst case

* Zu Abklärung des Sensitivitätsunterschieds zwischen den verschiedenen Grünalgentests wird empfohlen, weitere Algentests nach OECD Richtlinie durchzuführen.

18.4 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

18.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Von der vorhandenen Datenlage ausgehend wurde für die Ableitung der MAC-QS_{freshwater, eco} aus dem vereinten Datensatz die niedrigste EC₅₀ für die marine Alge *Platymonas sp.* verwendet. Die E_YC₅₀ lag in diesem Versuch bei 0,056 µg MBT.L⁻¹. Für MBT liegt ein kompletter Datensatz zur akuten Wirkung auf Organismen dreier trophischer Ebenen vor. In diesem Datensatz sind die Algen eindeutig die empfindlichste Spezies, die demnach besonders sensitiv auf die Zellmembran/Zytoskelett beeinflussende Wirkung des MBT reagieren. Gemäß dem TGD für UQN wird auf dieser Grundlage ein Bewertungsfaktor von 10 für die Ableitung der MAC-QS_{freshwater, eco} verwendet. Mit dem Bewertungsfaktor von 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium MAC-QS_{freshwater, eco} von 0,0056 µg.L⁻¹, gerundet 0,006 µg.L⁻¹.

Unter der Annahme, dass die Ergebnisse von Huang et al. (1996) einen Ausreißer darstellen könnten, stellt die E_rC_{50} von $193,1 \mu\text{g MBT}\cdot\text{L}^{-1}$ den niedrigsten Wert für die Ableitung der MAC- $QS_{\text{freshwater, eco}}$ dar. Unter Berücksichtigung der vorhandenen Datenlage würde gemäß des TGD für UQN Ableitungen (EC, 2011) ein Bewertungsfaktor von 10 angewandt (siehe oben). Hieraus würde sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium MAC- $QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $19,3 \mu\text{g MBT}\cdot\text{L}^{-1}$ für Süßwasser und für den marinen Bereich ergeben.

18.4.2 Meeresumwelt

Die repräsentative Spezies für marine aquatische Organismen ist mit der marinen Alge *Platymonas sp.* in dem Gesamtdatensatz zur Ableitung der MAC-QS enthalten. Aufgrund dessen, dass die empfindlichste taxonomische Gruppe in dem Datensatz enthalten ist, wurde der Bewertungsfaktor 10 ebenfalls für die Ableitung der marinen Qualitätsnorm angewandt. Daraus ergibt sich ein MAC- $QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,0056 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, gerundet $0,006 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

18.5 AA- QS_{water} Umweltqualitätsnormen

18.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für Ableitung der AA- $QS_{\text{freshwater, eco}}$ waren Langzeitergebnisse aus chronischen Studie mit Algen und Daphnien verfügbar. Die niedrigste NOEC ist die 72-h NOEC von $7,5 \mu\text{g MBT}\cdot\text{L}^{-1}$ aus einer Studie mit der Grünalge *Desmodesmus subspicatus* (ECHA, 2013). Diese NOEC liegt über dem 96-h EC_{50} von $0,056 \mu\text{g MBT}\cdot\text{L}^{-1}$ aus einer Studie zur akuten Wirkung von MBT mit der marinen Alge *Platymonas sp.* (Huang et al. 1996).

Nach dem Bewertungsansatz des TGD für UQN (EC, 2011) muss dann für die AA- $QS_{\text{freshwater, eco}}$ die niedrigste akute Wirkungskonzentration (96-h EC_{50} von $0,056 \mu\text{g MBT}\cdot\text{L}^{-1}$ für *Platymonas sp.*) der Studie von Huang et al. (1996) verwendet werden und ein Bewertungsfaktor von 100 für die Ableitung herangezogen werden.

Hieraus ergibt sich ein AA- $QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,00056 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, gerundet $0,0006 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Basierend auf der vorhandenen, unsicheren Datenlage erscheint die Ableitung einer endgültigen verlässlichen Umweltqualitätsnorm zurzeit nicht sinnvoll.

18.5.2 Meeresumwelt

Die Ableitung der MAC- $QS_{\text{saltwater, eco}}$ wurde auf Basis der niedrigsten akuten Wirkkonzentration durchgeführt. Gemäß des TGD für UQN (EC, 2011) wurde eine Bewertungsfaktor von 1000 gewählt, der 10x höher als der verwendete Bewertungsfaktor für die Ableitung der AA- $QS_{\text{freshwater, eco}}$ war.

Hieraus ergibt sich ein AA- $QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,000056 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, gerundet $0,00006 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

Unter der Annahme, dass die Ergebnisse von Huang et al. (1996) einen Ausreißer darstellen, wurde auf die 72-h NOEC von $7,5 \mu\text{g MBT}\cdot\text{L}^{-1}$, aus der Studie mit der Grünalge *Desmodesmus subspicatus*, ein Bewertungsfaktor von 10 angewendet. Der Bewertungsfaktor ist darin begründet, dass zwei NOEC Werte für die empfindlichste Spezies vorliegen. Es ergibt sich eine AA- $QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,75 \mu\text{g MBT}\cdot\text{L}^{-1}$ und eine AA- $QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,075 \mu\text{g MBT}\cdot\text{L}^{-1}$.

Der AA- $QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,75 \mu\text{g MBT}\cdot\text{L}^{-1}$ ist vergleichbar mit dem von Environment Canada (2009) abgeleiteten PNEC von $1,6 \mu\text{g MBT}\cdot\text{L}^{-1}$ und liegt unter der PNEC der WHO (2006) und der RPA (2003).

18.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz benthischer Organismen, basierend auf dem $\log K_{ow}$, sind nicht erfüllt. Die $\log K_{ow}$ Werte von 0,09 - 0,41 liegen unter dem Schwellenwert von 3. Allerdings deuten die verfügbaren Adsorptionskoeffizienten (K_{oc} und K_d Werte) auf eine Adsorption an Schwebstoffe und Sediment aufgrund des kationischen Charakters von MBT hin.

Weil für Sedimentorganismen keine Testergebnisse aus Langzeit- oder Kurzzeittoxizitätstests vorlagen, wurde die Ermittlung der Qualitätsnormen QS_{sediment} anhand des Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten-Ansatzes (Equilibrium Partitioning, EqP) nach dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) durchgeführt. Es wurde mit den „worst-case“ $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,0006 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ und $AA-QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,00006 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ sowie einem mittleren K_d -Wert von $3000 \text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$ ein $QS_{\text{sediment, fw, EqP}}$ von $3,6 \mu\text{g MBT}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG) für Süßwasser und entsprechend ein $QS_{\text{sediment, sw, EqP}}$ von $0,36 \mu\text{g MBT}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG) für den marinen Bereich abgeleitet.

Die entsprechenden Berechnungen mit den „best case“ $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,75 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ und $AA-QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,075 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ sowie dem mittleren K_d of $3000 \text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$, ergaben für Süßwassersedimente einen $QS_{\text{sediment, fw, EqP}}$ von $4500 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG) und für den marinen Bereich einen $QS_{\text{sediment, sw, EqP}}$ of $450 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG).

18.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Der BCF von MBT liegt in einem Bereich von 3 bis 126. Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung im Hinblick auf den Schutz vor einer sekundären Vergiftung innerhalb der Nahrungskette sind erfüllt, da der Schwellenwert von > 100 überschritten ist. Eine mögliche Bioakkumulation von Monobutylzinn in der Nahrungskette kann nicht ausgeschlossen werden.

Für die Ableitung einer $QS_{\text{biota, sec pois}}$ wurde der NOAEL von $96\,000 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1} \text{KG}\cdot\text{d}^{-1}$ aus der Studie „Combined Repeated Dose Toxicity Study with the Reproduction/Developmental Toxicity Screening Test“ (ECHA, 2013) herangezogen. Die Ableitung von $QS_{\text{biota, sec pois}}$ wurde gemäß der Leitlinie „Technical Guidance for Deriving Environmental Quality Standards, Guidance Document No. 27, Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC)“ (EC, 2011) durchgeführt. Dabei wurde für die Umrechnung von NOAEL (Dosis) in NOEC (Konzentration) der Umrechnungsfaktor 10 angewandt. Hieraus ergab sich ein $NOEC_{\text{oral}}$ von $960\,000 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ und bezogen auf MBT eine $NOEC_{\text{oral}}$ von $596\,000 \mu\text{g MBT}\cdot\text{kg}^{-1}$.

Die $QS_{\text{biota, sec pois}}$ wurde auf Basis des Standardansatzes nach dem Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) bestimmt. Ein Bewertungsfaktor von 90 wurde angewandt, da die Dauer der Studie 13 Wochen betrug. Es ergab sich ein $QS_{\text{biota, sec pois}}$ von $6622 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ $_{\text{biota ww}}$.

Für die Ableitung der $QS_{\text{biota, sec pois}}$ für den marinen Bereich wurde ein Default-BMF von 1 gemäß der Leitlinie angewandt. Daraus ergab sich ein $QS_{\text{biota, sec pois, sw}}$ von $6622 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ $_{\text{biota ww}}$. Bezogen auf die Wasserphase ergibt sich mit einem BCF von 126 entsprechend ein $QS_{\text{biota, sec pois}}$ von $52,6 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für Süß- und Salzwasserorganismen.

18.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota Standards zum Schutz menschliche Gesundheit wird allein durch die intrinsischen toxischen Eigenschaften der Substanz beeinflusst. Es gibt keine Hinweise auf eine Fortpflanzungsschädigung, eine mutagene oder karzinogene Wirkung (ECHA, 2013).

Eine Bewertung für Rückstände in aquatischen Biota im Hinblick auf die menschliche Gesundheit wurde nicht durchgeführt (EC, 2011), da keine Sekundärvergiftung für Menschen durch den Verzehr von Fischerei-Produkten erwartet wird.

18.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt
PBT Substanzen	<p>Keine PBT Substanz, erfüllt T Kriterium (nach Verordnung (EU) No. 253/2011 Anhang XIII (EU. 2011))</p> <p>Die Substanz ist leicht biologisch abbaubar</p> <p><u>Persistenz:</u> DT₅₀ (Wasser): keine Daten DT₅₀ (Wasser/Sediment): keine Daten DT₅₀ (Boden): keine Daten</p> <p><u>Bioakkumulation</u> BCF = 126 (Schwellenwert > 2000)</p> <p><u>Toxizität</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1A oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008). Es gibt keine Hinweise der chronischen Toxizität oder Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholter Exposition (STOT RE Kategorie 1 oder 2).</p> <p>Kriterium für „T Substanz“ erfüllt: Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L⁻¹</p>
Substanz mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Nein

18.10 Existierende UQN-Vorschläge

PNEC¹	1,6 µg.L ⁻¹ (dargestellt für MBT)	Environment Canada, 2009
PNEC¹	25 µg.L ⁻¹ (MBTC) 15,6 µg.L ⁻¹ (dargestellt für MBT)	WHO, 2006
PNEC¹	10,5 µg.L ⁻¹ (Sn) 25 µg.L ⁻¹ (MBTC) 15,6 µg.L ⁻¹ (dargestellt für MBT)	RPA, 2003
JD-UQN² (vorläufiger Wert)	0,0006 µg.L ⁻¹ Süßwasser 0,0006 µg.L ⁻¹ Salzwasser	Nendza, 2010
ZHK-UQN³ (vorläufiger Wert)	0,006 µg.L ⁻¹ Süßwasser 0,006 µg.L ⁻¹ Salzwasser	
UQN_{sediment} (vorläufiger Wert)	1,8 µg.kg ⁻¹ Sediment TG	

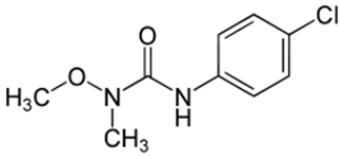
¹ PNEC - abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentration (gleichwertig dem AA-QS_{freshwater, eco})

² JD-UQN oberirdische Gewässer einschließlich Übergangsgewässer sowie Küstengewässer nach § 7 Absatz 5 Satz des Wasserhaushaltsgesetzes (gleichwertig dem AA-QS)

³ ZHK-UQN oberirdische Gewässer einschließlich Übergangsgewässer sowie Küstengewässer nach § 7 Absatz 5 Satz des Wasserhaushaltsgesetzes (gleichwertig dem AA-QS)

19 Monolinuron Zusammenfassung

19.1 Chemische Identität

Name	Monolinuron
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	3-(4-Chlorophenyl)-1-methoxy-1-methylurea
CAS Name	N'-(4-chlorophenyl)-N-methoxy-N-methylurea
Stoffgruppe	Harnstoffderivat
CAS Nummer	1746-81-2
EC Nummer	217-129-5
Summenformel	C ₉ H ₁₁ ClN ₂ O ₂
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	214,6

Monolinuron ist ein Herbizid. Eine Risikobewertung für Monolinuron wurde von der Europäischen Behörde für Lebensmittelsicherheit (EFSA) unter der EU-Direktive 91/414/EEC durchgeführt und in „Draft Assessment Reports (DAR)“ Berichten zusammengefasst (EC, 1996).

Qualitätsstandards für Monolinuron wurden vom RIVM (Scheepmaker and Vonk, 2008), gestützt auf die Daten der EFSA und zusätzlicher Literatur, abgeleitet. Aufgrund dessen, dass die DAR Berichte für Monolinuron zurzeit nicht verfügbar sind, wurden die DAR Daten des RIVM-Berichtes (Scheepmaker und Vonk, 2008) übernommen.

Eine Risikobewertung für Monolinuron wurde außerdem von der US Environmental Protection Agency (Kegley et al., 2010) durchgeführt. Aus der UBA internen Datenbank (ICS, 2013) standen ebenfalls Werte zur ökotoxikologischen Wirkung von Monolinuron für die Ableitung von Qualitätsstandards zur Verfügung.

Diese Bewertungen und die zugehörigen Daten wurden bereits einem gründlichen Gutachterverfahren unterzogen und werden als valide betrachtet.

19.2 Verhalten in der Umwelt

Die Untersuchungen zur biologischen Abbaubarkeit im Boden ergaben Halbwertszeiten (DT₅₀) zwischen 33 und 66 Tagen. Es erfolgt ein relativ langsamer Abbau von Monolinuron im Boden. Der organische Kohlenstoff-Adsorptionskoeffizient K_{oc} von < 500 L.kg⁻¹ deutet auf eine gemäßigte Mobilität der Substanz im Boden hin (HSDB, 2007). In einigen Literaturquellen wurden K_{oc} Wert von 2025 L.kg⁻¹ gefunden (HSDB, 2007). In solchen Böden wird eine höhere Sorption erwartet.

Die Wasserlöslichkeit von Monolinuron beträgt 0,74 g.L⁻¹ bei 25 °C (EC, 1997). Die Substanz ist hydrolytisch stabil. Es wurden Halbwertszeiten (DT₅₀) im Wasser/Sediment System von 22 Tagen berichtet (EC, 1997). Bei einer Freisetzung von Monolinuron in Wasser wird aufgrund des niedrigen log K_{ow} eine geringe Adsorption an Sediment und Schwebpartikel erwartet.

Eine Verflüchtigung von Monolinuron ist wegen des niedrigen Dampfdrucks und der niedrigen Henry's Law Konstante ebenfalls nicht zu erwarten.

Der BCF Wert von 14,8 liegt unterhalb des Schwellenwertes für eine potentielle Bioakkumulation und deutet auf keine Anreicherung der Substanz in der Nahrungskette hin.

19.3 Metaboliten

N-(chlorophenyl)-N'-methylurea (max. 40 % nach 30 Tage (Sediment und Wasser)) wurde als relevanter Metabolit identifiziert (Scheepmaker und Vonk, 2008). Zu dem Metaboliten von Monolinuron sind keine weiteren Informationen verfügbar.

19.4 Ableitung der Qualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) AA-QS_{freshwater, eco} für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 0,15 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen.

Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Chlorella sp.</i> / 96 h	10	20 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}	ErC ₅₀ : 200 µg.L ⁻¹	100	2 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Desmodesmus subspicatus</i> / 72 h	10	0,15 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}	NOEC: 1,5 µg.L ⁻¹	100	0,015 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{sediment, saltwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	3 µg.kg ⁻¹ _{bw.d} ⁻¹ (ADI)	-	182,6 µg.kg ⁻¹ _{biota ww} 12,3 µg.L ⁻¹

19.5 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

19.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für mindestens drei Arten aus drei Trophiestufen sind Kurzzeit-Toxizitätsdaten verfügbar. Die niedrigste E_bC_{50} aus einem Versuch mit Grünalgen (*Chlamydomonas reinhardtii*) liegt bei $43,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Dieser Wert basiert allerdings auf der Biomassereduktion. Für die Ableitung des MAC-QS wurde daher die auf der Wachstumsrate basierende E_rC_{50} von $200 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für die Grünalge *Chlorella* sp. eingesetzt. Der Bewertungsfaktor von 10 wurde als angemessen angesehen, da sowohl der Datensatz für Kurzzeit-Toxizität vollständig und der empfindlichste Organismus darin enthalten war, aber auch der spezifische Wirkmechanismus der Substanz bekannt war.

Mit dem Bewertungsfaktor 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium $\text{MAC-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ von $20 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

19.5.2 Meeresumwelt

Für die Beurteilung der Wirkung auf Salzwasserorganismen wurden die Kurzzeit-Toxizitätsdaten der Studien mit Süßwasserorganismen herangezogen, da keine Daten für marine taxonomische Gruppen vorliegen. Für die Ableitung der $\text{MAC-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ wurde gemäß des TGD für UQN (EC, 2011) der Bewertungsfaktor 100 angewandt. Hieraus ergibt sich ein Qualitätsstandard $\text{MAC-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ von $2,0 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

19.6 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

19.6.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Die niedrigste NOEC aus einer Studie zur chronischen Toxizität von Monolinuron ergab sich für die Grünalge *Desmodesmus subspicatus* mit $1,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Dieser Wert wurde für die AA-QS Ableitung herangezogen. Aufgrund dessen, dass Langzeitergebnisse (NOECs) für drei Spezies aus drei Trophiestufen (Fische, Daphnien und Algen) vorlagen, wurde der Bewertungsfaktor 10 für die Ableitung des $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ verwendet. Hieraus ergibt sich ein $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,15 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

19.6.2 Meeresumwelt

Es liegen nur Langzeit-Toxizitätsdaten für Süßwasserarten vor, die allerdings die drei Trophiestufen präsentieren. Gemäß des TGD für UQN (EC, 2011) ist in diesem Fall ein Bewertungsfaktor von 100 für die Ableitung der $\text{AA-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ zu wählen. Der Bewertungsfaktor 100 wurde auf den niedrigsten NOEC-Wert von $1,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für *Desmodesmus subspicatus* angewandt. Hieraus ergibt sich ein $\text{AA-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,015 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

19.7 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Es wurde keine Qualitätsnorm für den Sedimentbereich abgeleitet. Der auf organischen Kohlenstoff normierte Adsorptionskoeffizient (K_{oc}) für Monolinuron liegt weit unter dem Schwellenwert von $<500 - 1000 \text{ L}\cdot\text{kg}^{-1}$. Eine Adsorption der Substanz an Sediment ist unwahrscheinlich. Die $\log K_{oc}$ und $\log K_{ow}$ Werte sind kleiner als drei und unterschreiten die Triggerwerte, wodurch die Ableitung eines Qualitätsstandards für Sediment nicht durchgeführt werden muss. Zusätzlich gibt es keine Hinweise einer Toxizität von Monolinuron auf im Sediment lebende Organismen.

19.8 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höhere Trophiestufen

Es wurde keine Qualitätsnorm $QS_{\text{biota, sec pois}}$ abgeleitet. Der log Kow Wert ist kleiner als drei und unterschreitet den Triggerwert für die Ableitung eines Qualitätsstandards zum Schutz der Organismen höherer Trophiestufen vor einer sekundären Vergiftung.

19.9 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung eines Biota Standard für den Menschen ist ausschließlich auf den potentiell gefährlichen Eigenschaften der Chemikalie begründet. Monolinuron erfüllt die Kriterien für die Einstufung als STOT RE Kategorie 2 für Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholter Exposition. Somit wurde eine Bewertung für die menschliche Gesundheit durchgeführt und eine vorläufige $QS_{\text{biota, hh food}}$ auf Grundlage des verfügbaren ADI-Wertes ($3 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{bw}\cdot\text{d}^{-1}$) berechnet. Da weder BMF noch BAF zur Verfügung standen, wurde ein BMF von 1 gemäß dem TGD für UQN (EC, 2011) angenommen.

Die $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $182,6 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ wurde auf Basis folgender Annahmen abgeleitet: 70 kg Körpergewicht, $0,115 \text{kg}\cdot\text{d}^{-1}$ Verbrauch von Fischereierzeugnissen und gemessener BCF von 14,8. Die $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $182,6 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{\text{food}}$ entspricht einer Wasserkonzentration von $12,3 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Süß- und Meerwasser).

19.10 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Nicht gelistet in Anhang I zur Richtlinie 91/414/EWG. Nicht genehmigt.
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt im Anhang I
PBT Substanzen	Keine PBT, T Kriterien sind erfüllt (nach Verordnung (EU) No. 253/2011 Anhang XIII (EU, 2011)) <u>Persistenz</u> DT ₅₀ (Wasser/Sediment) = 22 d (vP Schwellenwert (Wasser) > 60 d) (P Schwellenwert (Sediment) > 120 d) DT ₅₀ (Boden) = 33 - 66 d (P Schwellenwert > 120 d) <u>Bioakkumulation</u> BCF = 14,8 - 70 (Schwellenwert > 2000) <u>Toxizität</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1A oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008).

	Folgende Kriterien für „T Substanz“ erfüllt: Substanz ist eingestuft als STOT RE Kategorie 2 für Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholter Exposition. Aquatische NOEC Werte sind < 10µg.L ⁻¹ .
Substanz mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Herbicide Resistance Classification (HRAC)	C2
Endokrin wirksam	Keine Daten

19.11 Existierende UQN-Vorschläge

MPC _{freshwater} ¹	0,15 µg.L ⁻¹	Scheepmaker and Vonk, 2008
MAC _{eco} ²	0,15 µg.L ⁻¹	Scheepmaker and Vonk, 2008
EQS	0,30 µg.L ⁻¹	Johnson and Cullingford, 2012

¹ MPC_{water} – höchstzulässige Konzentration im Wasser (gleichwertig dem AA-QS_{freshwater, eco})

² MAC_{eco} - Maximum Acceptable Concentration– the concentration protecting aquatic ecosystems from effects due to short-term exposure or concentration peaks

20 Nicosulfuron Zusammenfassung

20.1 Chemische Identität

Name	Nicosulfuron
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	2-[(4,6-dimethoxypyrimidin-2-ylcarbamoyl)sulfamoyl]- <i>N,N</i> -dimethylnicotinamide
CAS Name	-
Stoffgruppe	Sulfonylharnstoff
CAS Nummer	111991-09-4
EC Nummer	-
Summenformel	C ₁₅ H ₁₈ N ₆ O ₆ S
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	410,41

Eine ausführlich Evaluierung der Substanz wurde unter der EG-Richtlinie 1107/2009 und der Verordnung (EG) Nr. 396/2005 zur Änderung der Richtlinie 91/414/EWG durchgeführt und von der europäischen Behörde für Lebensmittelsicherheit (EFSA) veröffentlicht.

Auch die US Environmental Protection Agency (US EPA, 2004) und das deutsche Umweltbundesamt (UBA, 2013) bewerteten Nicosulfuron. Ebenso wurde Nicosulfuron von der Health Canada Pest Management Regulatory Agency untersucht und die Ergebnisse wurden im Bewertungsbericht „Proposed Re-evaluation Decision. Nicosulfuron“ im Jahr 2008 publiziert.

Nicosulfuron ist ein selektives, systemisches Sulfonylharnstoff-Herbizid, das für die Verwendung als „Nachauflauf-Herbizid zur Regulierung des Wachstums von Gräser in verschiedenen Maiskulturen“ registriert ist.

20.2 Verhalten in der Umwelt

Den Haupteintragspfad von Nicosulfuron in die Umwelt stellt aufgrund der Nutzung als Herbizid der Boden dar. Eine Verflüchtigung von Nicosulfuron ist aufgrund des niedrigen Dampfdrucks und der Henry-Konstante nicht zu erwarten.

Nicosulfuron weist aufgrund geringer, aber pH-Wert und Tongehalt abhängiger, K_{oc} Werte von <500 für neutrale Böden eine geringe bis mäßige Mobilität in Böden mit neutralem pH-Wert auf. Mobiler ist Nicosulfuron hingegen in alkalischen Böden und in Böden mit niedrigeren Gehalten an

organischer Substanz (HSDB, 2007; EFSA, 2007). Die Halbwertszeit für den photolytischen Abbau im Boden wurde mit < 30 Tagen bestimmt.

Die Halbwertszeit in Boden für biologischen Abbau liegt in einem Bereich zwischen 7 und 46,3 Tagen. Dies zeigt, dass ein Eintrag von Nicosulfuron in den aquatischen Bereich bzw. das Grundwasser durch Auswaschung aus Böden möglich ist.

Nicosulfuron besitzt eine geringe Wasserlöslichkeit, die mit steigenden pH Werten zunimmt (0,25 µg.L⁻¹ bis 76,4 µg.L⁻¹). In Wasser gelöst, adsorbiert Nicosulfuron nach bisherigen Erkenntnissen nicht an Schwebstoffen und Sedimenten aufgrund seines niedrigen K_{oc}. Eine der wichtigsten Abbauege für Nicosulfuron im aquatischen Bereich ist die Hydrolyse mit einer Halbwertszeit von 15 Tagen bei pH 5. Bei einer Erhöhung des pH-Wertes erhöht sich ebenso die Halbwertszeit. In Wasser-Sediment Studien, die bei pH 6,9 durchgeführt wurden, ergaben sich DT₅₀ Werte für den Abbau in der Wasserphase von 49,8 und 33,2 Tagen für Teichwasser.

Aufgrund des niedrigen Octanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten (log K_{ow} = 0,61) ist keine Bioakkumulation von Nicosulfuron im Nahrungsnetz zu erwarten. Ein gemessener BCF ist nicht verfügbar. Der Octanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten wird als Ersatz zur Einschätzung des geringen Bioakkumulationspotentials verwendet und durch den berechneten BCF von 3 (HSDB, 2007) unterstützt.

20.3 Ableitung der Qualitätsnorm für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) AA-QS_{freshwater, eco} für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 (WFD, 2000) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 0,0087 µg.L⁻¹) als ‘Gesamt’ UQN vorgeschlagen.

Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Lemna gibba</i> / 7 d / Frondfläche	10	0,085 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}	E _y C ₅₀ : 0,85 µg.L ⁻¹	100	0,0085 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Lemna gibba</i> / 7 d / Biomasse (Gewicht)	10	0,0087 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}	NOE:C : 0,087 µg.L ⁻¹	100	0,00087 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{sediment, saltwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	-	-	Nicht erforderlich

20.4 MAC-QS Umweltqualitätsnorm

20.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für mindestens drei Arten aus drei Trophiestufen sind Kurzzeit-Toxizitätsdaten verfügbar. Der niedrigste EC_{50} Wert liegt für die Wasserpflanze *Lemna gibba* vor 7-Tage EC_{50} (Frondegröße) $0,85 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) und identifiziert die aquatischen Makrophyten als die sensitivste Organismengruppe. Dieser Effektwert wurde für die MAC-QS Herleitung verwendet. Mit einem Bewertungsfaktor von 10 ergab sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium $MAC-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,085 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Der Bewertungsfaktor von 10 wurde angewandt, da der spezifische Wirkmechanismus bekannt ist und repräsentative Arten der empfindlichsten taxonomischen Gruppe in dem Datensatz enthalten waren.

20.4.2 Meeresumwelt

Bis auf einen Test mit einer Meereskieselalge sind keine Studien mit Salzwasserorganismen der verschiedenen taxonomischen Gruppen verfügbar. Demzufolge wurde die $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ auf Grundlage des Datensatzes für Süßwasserorganismen abgeleitet. Mit einem Bewertungsfaktor von 100 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,0085 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

20.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

20.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Es liegen Daten aus Langzeitstudien für mindestens drei Arten aus drei Trophiestufen vor. Die empfindlichste belastbare NOEC von $0,087 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ weist die Wasserpflanze (*Lemna gibba*) auf. Dieser Wert wurde für die Ableitung der AA-QS verwendet. Gemäß der Leitlinie zur UQN-Ableitung (EC, 2011) wurde ein Bewertungsfaktor von 10 angewandt, da der Wirkmechanismus bekannt ist und repräsentative Arten der empfindlichsten taxonomischen Gruppe in dem Datensatz enthalten sind. Mit einem Bewertungsfaktor von 10 ergibt sich ein Langzeit-Qualitätskriterium $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,0087 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

20.5.2 Meeresumwelt

Daten zu Langzeitstudien mit marinen Organismen sind nicht verfügbar. Es liegen nur Langzeitdaten für Süßwasserarten vor, die drei Trophiestufen repräsentieren. Der Bewertungsfaktor 100 wurde auf den niedrigsten NOEC-Wert von $0,087 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, der in der Studie mit Süßwasserorganismen erhoben wurde, angewandt.

Daraus ergibt sich ein $AA-QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,00087 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

20.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Es wurde keine Qualitätsnorm für den Sedimentbereich abgeleitet, weil eine Exposition des Sediments aufgrund des geringen Adsorptionspotentials von Nicosulfuron zu vernachlässigen ist. Der auf organischen Kohlenstoff normierte Adsorptionskoeffizient (K_{oc}) für Nicosulfuron liegt in Abhängigkeit von dem Umgebungs-pH-Wert zwischen 20,7 und 567,1.

Die $\log K_{ow}$ (0,61) und $\log Kow$ Werte sind niedriger als der Schwellenwert für eine Sedimentbewertung von ≥ 3 (EC, 2011). Nach dem Leitfaden zur UQN Ableitung (EC, 2011) sind die Kriterien für eine Bewertung für Sedimentorganismen somit nicht erfüllt.

20.7 Ableitung der Biota-Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Es ist keine Biota Bewertung erforderlich, da keine Gefahr einer Sekundärvergiftung für Raubtiere beim Fressen kontaminierter Beute erwartet wird. Ein niedriges Bioakkumulationspotential, basierend auf einem berechneten BCF von 3, zusammen mit der Tatsache, dass der Stoff über keine hohe, intrinsische Toxizität für Säugetiere und Vögel verfügt belegen diese Einschätzung.

20.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung eines Biota Standard für den Menschen ist ausschließlich auf den potentiell gefährlichen Eigenschaften der Chemikalie begründet. Für den Schutz der menschlichen Gesundheit ist keine Ableitung eines Biota-Standards erforderlich, da die Kriterien nach dem TGD für UQN (EC, 2011) nicht erfüllt sind. Es wird keine Sekundärvergiftung des Menschen durch den Verzehr von Fischereiprodukten erwartet.

20.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Aufgeführt in Anhang I
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt im Anhang I
PBT Substanzen	Keine PBT oder vPvB Substanz, Kriterien vP und T sind erfüllt (Verordnung (EU) No 253/2011, Anhang XIII (EU, 2011)) <u>Persistenz</u> DT ₅₀ (Wasser) = 63,9 - 66,2 d (vP Schwellenwert > 60 d) DT ₅₀ (Wasser/Sediment) = 33,2 - 49,8 d DT ₅₀ (Sediment) = 8,8 - 21,9 d (P Schwellenwert > 120 d) DT ₅₀ (Boden) = 7 - 46,3 d (P Schwellenwert > 120 d) <u>Bioakkumulation</u> BCF = 3 (Schwellenwert < 2000) <u>Toxizität</u> Nicht eingestuft bezüglich toxikologischer Effekte (EU Pesticides database). Folgende Kriterien für „T Substanz“ erfüllt: Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L ⁻¹

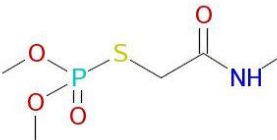
Stoffe mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Herbizid-Resistenzen (HRAC)	B
Endokrine Wirkung	Nein

20.10 Existierende UQN-Vorschläge für Nicosulfuron

Umweltqualitätsnormen anderer Länder für Nicosulfuron liegen zurzeit nicht vor.

21 Omethoat Zusammenfassung

21.1 Chemische Identität

Name	Omethoat
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	2-Dimethoxyphosphinoylthio-N-methylacetamid
CAS Name	<i>O,O</i> -Dimethyl- <i>S</i> -methylcarbamoylmethylthiophosphat
Chemische Klasse	Organophosphat
CAS Nummer	1113-02-6
EC Nummer	214-197-8
Summenformel	C ₅ H ₁₂ NO ₄ PS
Strukturformel	
Molare Masse (g.mol ⁻¹)	213,2

Omethoat ist ein Organophosphat und somit ein Inhibitor der Acetylcholinesterase. Omethoat ist der wichtigste toxikologisch relevante Boden- und Pflanzenmetabolit des Insektizids Dimethoat, eines phosphororganischen Insektizids mit akarizider Wirkung. Es wird zur Kontrolle einer Vielzahl von Schädlingen eingesetzt (EFSA, 2005a). In der Vergangenheit wurde Omethoat in der EU auch als Insektizid und Akarizid verwendet, allerdings wurde es 2002 nicht in die Liste der zulässigen Pflanzenschutzmittel-Wirkstoffe in Anhang I der Richtlinie 91/414/EWG aufgenommen (EC, 2002).

Als relevanter Boden- und Pflanzenmetabolit von Dimethoat wurde Omethoat im Rahmen der Risikobewertung von Dimethoat nach EU-Verordnung 91/414/EEC geprüft und die Bewertung im Bericht der Europäischen Agentur für Lebensmittelsicherheit (EFSA, 2005a; EFSA, 2011) veröffentlicht. Weiterhin liegt für Omethoat ein Bewertungsbericht der Umweltabteilung des „Pesticides Safety Directorate“ aus Großbritannien vor (PSD, 1993). Für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen stehen zusätzlich Daten zur Wirkung von Omethoat aus der internen Datenbank des Umweltbundesamtes (ICS, 2013) zur Verfügung.

21.2 Verhalten in der Umwelt

Der Haupteintrag von Omethoat in die Umwelt erfolgt über den Boden. Untersuchungen zur biologischen Abbaubarkeit unter Freilandbedingungen ergaben Halbwertszeiten (DT₅₀) zwischen 15,0 und 22,7 Tagen. Dies deutet auf einen schnellen Abbau der Substanz in Boden. Der geringe organische Kohlenstoff-Adsorptionskoeffizienten (K_{oc} Wert) zwischen 9,4 und 87 L.kg⁻¹ lässt auf eine sehr hohe Mobilität des Stoffes im Boden schließen.

Omethoat ist gut wasserlöslich ($> 200 \text{ g.L}^{-1}$ bei $20 \text{ }^\circ\text{C}$). In Wasser erfolgt die Zersetzung bei pH 6 durch Hydrolyse mit einer DT_{50} von 32,5 Tagen. Die geringen K_{oc} -Werte und der geringe Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizient ($\log K_{ow}$ Wert) von -0,74 bestätigen, dass die Bindung der Substanz an Sediment unwahrscheinlich ist. Auch eine Bioakkumulation des Omethoats in der Nahrungskette ist nicht zu erwarten, da der auf Basis des K_{ow} errechnete BCF von 3 keine Hinweise auf eine Anreicherung in der Nahrungskette liefert.

21.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen ($AA-QS_{\text{freshwater, eco}} 0,0042 \text{ } \mu\text{g.L}^{-1}$) als „Gesamt“ UQN vorgeschlagen.

Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN_{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungsfaktor	Vorläufige QN
$MAC_{\text{freshwater, eco}}$	<i>Daphnia magna</i> / 48 h / static EC ₅₀ : $21 \text{ } \mu\text{g.L}^{-1}$	10	$2,1 \text{ } \mu\text{g.L}^{-1}$
$MAC_{\text{saltwater, eco}}$		100	$0,21 \text{ } \mu\text{g.L}^{-1}$
$AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$	<i>Daphnia magna</i> / 21 d NOEC : $0,042 \text{ } \mu\text{g.L}^{-1}$	10	$0,0042 \text{ } \mu\text{g.L}^{-1}$
$AA-QS_{\text{saltwater, eco}}$		100	$0,00042 \text{ } \mu\text{g.L}^{-1}$
$QS_{\text{sediment, freshwater}}$	-	-	Nicht erforderlich
$QS_{\text{sediment, saltwater}}$	-	-	Nicht erforderlich
$QS_{\text{biota, sec pols}}$	-	-	Nicht erforderlich
$QS_{\text{biota, hh food}}$	$0,3 \text{ } \mu\text{g.kg}^{-1} \text{ bw.day}^{-1}$ (ADI)	-	$18,3 \text{ } \mu\text{g.kg}^{-1} \text{ biota ww}$ $6,1 \text{ } \mu\text{g.L}^{-1}$

21.4 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

21.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für mindestens drei Arten aus drei Trophieebenen liegen Kurzzeit-Toxizitätsdaten vor. Das niedrigste Ergebnis für eine akute Wirkung ist die EC_{50} von $21 \text{ } \mu\text{g.L}^{-1}$ für Invertebraten (*Daphnia magna*). Dieser Wert wurde mit einem Bewertungsfaktor von 10 für die MAC-QS Herleitung verwendet. Der Bewertungsfaktor wurde gewählt, weil der komplette Grunddatensatz vorliegt und es sich um einen Stoff mit bekanntem spezifischem Wirkmechanismus (Organophosphat) handelt (EC, 2011).

Mit dem Bewertungsfaktor 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium $MAC-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $2,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

21.4.2 Meeresumwelt

Zur Beurteilung der Wirkung auf Salzwasserorganismen sind zwei Kurzzeit-Testergebnisse vorhanden, die aber keine zusätzlichen taxonomischen Gruppen präsentieren. Es wurde das niedrigste Ergebnis für eine akute Wirkung aus einer Studie mit Süßwasserorganismen für die Ableitung der $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ genutzt. Dies ist die EC_{50} von $21 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für Invertebraten (*Daphnia magna*). Gemäß des TGD für UQN (EC, 2011) wurde ein Bewertungsfaktor von 100 für die Ableitung der $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ angewandt.

Hieraus ergibt sich ein $MAC-QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,21 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

21.5 AA- QS_{water} Umweltqualitätsnormen

21.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Langzeit-Toxizitätsdaten liegen für Fisch, Invertebraten und Algen vor. Invertebraten (vertreten durch *Daphnia magna*) sind die empfindlichste, identifizierte Organismengruppe. Dies wird durch die niedrigsten akuten Daten bestätigt. Das niedrigste, belastbare Langzeittestergebnis für *Daphnia magna* ist die 21-d NOEC von $0,042 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Dieser Wert wurde für die AA-QS Ableitung verwendet. Der Bewertungsfaktor von 10 wurde für die Ableitung der Qualitätsnorm angewandt, da die empfindlichste taxonomische Gruppe im Datensatz enthalten ist und der spezifische Wirkungstyp von Omethoat bekannt ist.

Bei Verwendung des Bewertungsfaktors von 10 ergibt sich ein $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,0042 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

21.5.2 Meeresumwelt

Aufgrund dessen, dass keine Langzeit-Toxizitätsdaten für Salzwasserorganismen verfügbar sind, wurde ein Bewertungsfaktor von 100 auf den Süßwasserwert (NOEC von $0,042 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) angewandt und eine $AA-QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,00042 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ abgeleitet.

21.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Omethoat hat nur ein geringes Potential an Schwebstoffe und/oder Sediment zu adsorbieren. Auch das Akkumulationspotential ist gering. Aufgrund des geringen Bioakkumulationspotentials ergibt sich ein nur geringes Risiko für benthische Organismen. Es wurde keine Bewertung für Sedimentorganismen durchgeführt und keine QS_{sediment} abgeleitet.

21.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höhere Trophie Stufen

In Anbetracht des niedrigen Bioakkumulationspotentials wurde keine Bewertung für Biota durchgeführt (EC, 2011). Es wurde kein $QS_{\text{biota, secpois}}$ abgeleitet.

21.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota Standards zum Schutz menschliche Gesundheit wird allein durch die potentiell gefährlichen Eigenschaften der Substanz beeinflusst. Obwohl kein gemessener BCF

vorliegt, kann auf Basis des berechneten BCF von 3 auf ein geringes Bioakkumulationspotential von Omethoat geschlossen werden. Für Omethoat wurden keine gentoxischen, karzinogenen oder reproduktionstoxischen Eigenschaften festgestellt. Omethoat ist jedoch im Fall einer oralen Aufnahme giftig (eingestuft als „Akute Tox. 3, H301“). Gemäß dem TGD für UQN (EC, 2011) muss eine Bewertung für gering bioakkumulierende Substanzen erfolgen, wenn diese mit H301 eingestuft ist. Es wurde eine Bewertung für die menschliche Gesundheit durchgeführt, und ein $QS_{\text{biota, hh food}}$, basierend auf dem verfügbaren ADI-Wert von $0,3 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{\text{bw}}\cdot\text{d}^{-1}$ (EFSA, 2011), abgeleitet.

Da weder BMF-nach BAF-Werte verfügbar waren, wurde ein BMF von 1 gemäß Guidance Document No. 27 (EC, 2011) angenommen. Die $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $18,3 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{\text{biota ww}}$ wurde auf Basis eines angenommenen Körpergewichts von 70 kg, einem Verbrauch von Fischereierzeugnissen von $0,115 \text{ kg}\cdot\text{d}^{-1}$ und einem berechneten BCF von 3 abgeleitet. Die $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $18,3 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{\text{biota ww}}$ entspricht bei Verwendung eines BCFs von 3 einer Wasserkonzentration von $6,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Süß und Meerwasser).

21.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht zutreffend
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC)	Nicht aufgeführt als aktive Substanz in Anhang I der Richtlinie 91/414/EEC
EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt im Anhang I der Richtlinie
PBT Substanzen	<p>Keine PBT Substanz, erfüllt das P und T Kriterium (nach Verordnung (EU) No. 253/2011, Anhang XIII (EU, 2011))</p> <p><u>Persistenz</u> DT_{50} (Wasser) = 60 - 69 d (Schwellenwert > 40 d) DT_{50} (Boden) = 88 - 401 d (Schwellenwert > 120 d) DT_{50} (Sediment) = 9.1 d (Schwellenwert > 120 d)</p> <p><u>Bioakkumulation</u> BCF = 3 (Schwellenwert > 2000)</p> <p><u>Toxizität</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1A oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008). Es gibt keine Hinweise der chronischen Toxizität oder Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholte Exposition (STOT RE Kategorie 1 oder 2).</p> <p>Einstufung als: Acute Tox. 3, H301 - Giftig bei Verschlucken Acute Tox. 4, H312 - Gesundheitsschädlich bei Hautkontakt</p>

	Aquatic Acute 1, H400 - Sehr giftig für Wasserorganismen Kriterium für „T Substanz“ erfüllt: Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L ⁻¹
Substanzen mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrin wirksam	Keine Informationen verfügbar.

21.10 Existierende Qualitätsstandards für Omethoat

Es liegen keine abgeleiteten EU- oder WHO- Trinkwasser-Standards vor. Der bevorzugte Regulierungsstandard für Pflanzenschutzmittel von 0,10 µg.L⁻¹ wurde übernommen.

JD-UQN ¹	0,01 µg.L ⁻¹	Österreich (QZV Chemie OG, 2006)
JD-UQN ²	0,10 µg.L ⁻¹	Deutschland, Oberflächengewässerverordnung – (OgewV, 2011)
JD-UQN ³	0,01 µg.L ⁻¹	Großbritannien, Chemical standard for the protection of aquatic life (UK, 2013)
MTR (totaal) OPPERVLAKTEWATER	1,2 µg.L ⁻¹	Niederlande (RIVM, 2014)

¹ JD-UQN - Jahresdurchschnitts-Umweltqualitätsnorm (entspricht AA-QS_{freshwater, eco})

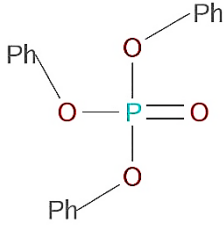
² UQN oberirdische Gewässer einschließlich Übergangsgewässer sowie Küstengewässer nach § 7 Absatz 5 Satz 2 des Wasserhaushaltsgesetzes

³ UK chemical standard for the protection of aquatic life: Annual mean classification of inland waters. UK Environment Agency, database for chemical standards (<http://evidence.environment-agency.gov.uk/ChemicalStandards/report.aspx?cid=264>)
Letzter Zugriff August 2013.

⁴ MTR - OPPERVLAKTEWATER ad hoc MTR (maximaal toelaatbaar risiconiveau = tolerable risk level) for concentration in water compartment (comparable to AA-QS_{freshwater, eco})

22 Phosphorsäuretriphenylester Zusammenfassung

22.1 Chemische Identität

Name	Triphenylphosphat
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	Phosphorsäure, triphenylester
CAS Name	Triphenylphosphat
Stoffgruppe	Phosphorsäureester Verbindung
CAS Nummer	115-86-6
EC Nummer	204-112-2
Summenformel	C ₁₈ H ₁₅ O ₄ P
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	326,29

Phosphorsäuretriphenylester wird zur Herstellung von Farben; Lacken und Anstrichmitteln verwendet. Es dient als nichtbrennbarer Ersatz für Kampfer in Celluloid. Es wird als Flammschutzmittel in der Kunststoffindustrie eingesetzt. Triphenylphosphat dient als Weichmacher für Cellulosen, Lacke, Firnislacke und Hochschmelz-Klebstoffe, zur Imprägnierung von Dachpappe und Polstermaterial, zum Auslassen von Acetylcellulose und Nitrocellulose, als Flugzeugtreibstoffadditiv (zur Stabilisierung und Feuerfestigkeit), als Kühlschmierstoff und dient als Schmierfähigkeitsverbesserer“, (LAWA, 2010, Brooke et al., 2009).

Die Mehrheit der präsentierten Daten wurde der frei zugänglichen Literatur, verschiedenen Bewertungsberichten (e.g. Brook et al., 2009 und öffentlich zugänglichen Datensätzen (IUCLID, 2001, ECHA, 2013) entnommen.

22.2 Verhalten in der Umwelt

Triphenylphosphat ist schwer wasserlöslich. Die Wasserlöslichkeit liegt zwischen 0,73 und 2.1 µg.L⁻¹. Die Substanz ist leicht biologisch abbaubar, allerdings blieb es unklar, ob das „10-Tage Fenster“ Kriterium zur Klassifizierung als „leicht biologisch abbaubar“ erfüllt wurde. Der schnelle Bioabbau von Triphenylphosphat spielt eine wichtige Rolle für die Verweilzeit der Substanz im wässrigen Milieu.

Aufgrund des $K_{\text{susp-water}}$ Wertes von 251 m³/m³ wird eine hohe Bindung an Sediment und Schwebstoffe erwartet.

Die Henry's Law Konstante von $0,21 \text{ Pa}\cdot\text{m}^3\cdot\text{mol}^{-1}$ lässt auf einen relativ leichten Übergang der Substanz von der Wasseroberfläche in die Atmosphäre schließen.

Bei einer Freisetzung von Triphenylphosphat im Boden ist wegen des hohen Adsorptionspotentials (K_{oc} Werte $2500 - 10000 \text{ L}\cdot\text{kg}^{-1}$) und der hohen Halbwertszeit (DT_{50} 100 Tage) mit einer geringen Mobilität und einem längeren Verbleib der Substanz in diesem Kompartiment zu rechnen.

Durch den geringen Dampfdruck ($0,8 \cdot 10^{-3}$ to $2,4 \cdot 10^{-3} \text{ Pa}$) erfolgt keine bedeutende Verdampfung von Triphenylphosphat in die Atmosphäre.

Für Triphenylphosphat wurden BCF Werte zwischen 132 und 1743 bestimmt, die auf eine Anreicherung der Substanz in der Nahrungskette hindeuten.

Als wichtiger Metabolit im Boden und im Flusssediment wurde Diphenylphosphat identifiziert.

22.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ für Süßwasser wurde mit $3,7 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ errechnet.

Zum Schutz von Tierarten, die sich von Fischen und anderen Wasserorganismen ernähren wurde ein $QS_{\text{biota, sec pois}}$ von $783 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Biota abgeleitet, der, mit einem BCF von 531 auf die Wasserphase übertragen, sowohl für Süß- als auch für Meerwasser eine UQN von $1,47 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ ergab.

Zum Schutz der Süßwasser-Organismen nach WRRL, Anhang 5 (WFD, 2000) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen ($QS_{\text{biota, sec pois}} 1,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) als „Gesamt“ UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN_{water}	Relevante Studie zur QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
$MAC_{\text{freshwater, eco}}$	<i>Oncorhynchus mykiss</i> / 96 h	10	$24 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
$MAC_{\text{saltwater, eco}}$	$EC_{50} : 240 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	100	$2,4 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
$AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$	<i>Oncorhynchus mykiss</i> / 30 d / growth	10	$3,7 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
$AA-QS_{\text{saltwater, eco}}$	$EC_{10} : 37 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	100	$0,37 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
$QS_{\text{biota, sec pois, fw}}$	Rat / 28 d / oral / repeated dose toxicity study $NOAEL : 23,5 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{bw}\cdot\text{d}^{-1}$	300	$783 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ $1,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ Gesamt-UQN
$QS_{\text{biota, sec pois, sw}}$	Rat / 28 d / oral / repeated dose toxicity study $NOAEL : 23,5 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{bw}\cdot\text{d}^{-1}$	300	$783 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ $1,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
$QS_{\text{biota, hh food}}$	-	-	Nicht erforderlich
$QS_{\text{sediment, freshwater}}$	$QS_{\text{fw}} = 3,7 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	EqP	$713,8 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{ww}$ $1856 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{dw}$
$QS_{\text{sediment, saltwater}}$	$QS_{\text{sw}} = 0,37 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	EqP	$71,4 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{ww}$ $186 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{dw}$

22.4 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

22.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

22.4.1.1 Bewertungsfaktor (AF)-Methode

Für die Ableitung des MAC-QS lag ein kompletter Grunddatensatz mit akuten Toxizitätsdaten von drei Arten aus drei Trophiestufen (Fische, wirbellose Tiere und Algen) vor. Zusätzlich waren Daten aus einer Akutstudie mit einer anderen taxonomischen Gruppe (Mollusca) verfügbar. Die Süßwasser- und marinen Organismen wurden gemeinsam betrachtet, da die Effektdaten in einer vergleichbaren Größenordnung lagen.

Die Sensitivitäten der Algen, Invertebraten und Fische zeigten keine signifikanten Unterschiede. Nur die Schnecke reagierte mit einer ca. 100-fach höheren LC_{50} deutlich unempfindlicher auf die Kurzzeit Exposition gegenüber Triphenylphosphat als die anderen taxonomischen Gruppen.

Die Vergleichbarkeit der Empfindlichkeiten der verschiedenen Spezies des Basisdatensatzes, d.h. mit Ausnahme der Schnecke, wurde nach dem Guidance Document No. 27 für EQS (EC, 2011) überprüft. Die Werte der verschiedenen Tests zur akuten Toxizität, sowohl aus dem Bereich des Süßwassers als auch des Salzwassers wurden logarithmisch transformiert (1 Wert pro Spezies) und die Standardabweichung bestimmt. Die Standardabweichung der log- transformierten LC_{50} - bzw. EC_{50} -Werte lag unterhalb von 0,5 und erlaubt damit die Verwendung eines Bewertungsfaktors von 10 (EC, 2011).

Der niedrigste Akutwert war die EC_{50} von $240 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ aus einem Versuch mit *Oncorhynchus mykiss*. Die EC_{50} aus einer Studie mit *Gammarus pseudolimnaeus* mit $250 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ markiert für die Invertebraten die niedrigste Effektkonzentration und liegt in einem vergleichbaren Bereich mit den Werten aus Tests mit *Mysidopsis bahia*, *Crangon crangon* und *Chironomus tentans*. Andere Invertebraten wie z.B. *Daphnia magna*, erwiesen sich als weniger empfindlich.

Mit dem Bewertungsfaktor von 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium $\text{MAC-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ von $24 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

22.4.1.2 Art-Empfindlichkeitsverteilung (SSD)-Methode

Als Zusatzinformation wurde mit den 14 Kurzzeit-Ergebnissen (Spezies Mittelwerte) aus vier taxonomischen Gruppen der HC_5 Wert mit einer Spezies-Empfindlichkeitsverteilung (SSD) berechnet. Aus den Daten für *Daphnia magna*, *Oncorhynchus mykiss* und *Pimephales promelas* wurde jeweils das geometrische Mittel gebildet. In den Fällen, in denen die LC_{50} als Bereich angegeben waren, wurden der geometrische Mittelwert der Minimum und Maximum Konzentrationen als LC_{50} in die SSD einbezogen.

Die Daten setzten sich aus verschiedenen Spezies aus den Gruppen der Algen (n=2), Krebstiere (n=4), Insekten (n=1) und Fische (n=7) zusammen. Der sehr hohe LC_{50} Wert für die Schnecke wurde nicht in der SSD berücksichtigt, da mit dem hohen Wert die Anforderungen an die Normalverteilung der Daten nicht erfüllt waren und der HC_5 Wert durch den flachen Kurvenverlauf zu einem eher unrealistisch niedrigem Werte verschoben wurde.

Die Berechnung mittels ETX 2.0 Software (Van Vlaardingen, 2003) ergab einen medianen HC_5 von $204 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Die Prüfung nach dem Anderson-Liebling Verfahren ($p = 0,1$) bestätigte die Normalverteilung der Daten.

Unter Verwendung des Bewertungsfaktors von 10 (da die SSD nicht die Standardanforderungen des TGD für UQN (EC, 2011) erfüllte), wurde aus der HC_5 von $204 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ ein $\text{MAC-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ von $20 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ berechnet, der den mit dem Bewertungsfaktor-Ansatz abgeleiteten Qualitätsstandard bestätigt.

Für die MAC-QS_{fw, eco} wird der mit dem Bewertungsfaktor-Ansatz abgeleitete Wert von 24 µg.L⁻¹ vorgeschlagen.

22.4.2 Meeresumwelt

Daten zur akuten Wirkung von Triphenylphosphat auf marine Organismen waren für Fische und Invertebraten vorhanden. Zusätzliche taxonomische Salzwassergruppen lagen nicht vor. Aufgrund der gegebenen Datenlage wurde für die Ableitung der MAC-QS_{sw, eco} ein Bewertungsfaktor von 100 und die Süßwasser-Fisch EC₅₀ von 240 µg.L⁻¹ verwendet.

Hieraus ergibt sich ein Qualitätsstandard MAC-QS_{sw, eco} von 2.4 µg.L⁻¹ für Triphenylphosphat.

22.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

22.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für die Beurteilung der Langzeitwirkung von Triphenylphosphat lagen Daten aus Studien mit Algen, Invertebraten und Fischen vor. Der empfindlichste, belastbare 30-d EC₁₀ von 37 µg.L⁻¹ stammte aus einer Studie mit *Oncorhynchus mykiss* (Fisch). Dieser Wert wurde für die Ableitung der AA-QS_{frshwater, eco} verwendet. Hierbei wurde ein Bewertungsfaktor von 10 angewandt, da der Basisdatensatz zur chronischen Toxizität von Triphenylphosphat komplett vorlag.

Für Triphenylphosphat ergab sich somit ein Langzeit-Qualitätskriterium AA-QS_{freshwater, eco} von 3.7 µg.L⁻¹.

Zusätzliche Informationen

In der Literatur wurde zusätzlich ein kritischer 90-d NOEC-Wert von >1.4 µg.L⁻¹ für *Oncorhynchus mykiss* gefunden (Mayer et al., 1981). Dieser Wert wurde allerdings für die Bewertung nicht genutzt, da gemäß der Aussage des Autors in dieser Studie in keiner der Prüfkonzentrationen eine Wirkung auf den Testorganismen beobachtet werden konnte. Anhand vergleichbarer Studien ist klar ersichtlich, dass ein realistischer NOEC Wert in einem höheren Konzentrationsbereich zu erwarten ist.

Außerdem ist in der Literatur eine NOEC von 3.2 µg.L⁻¹ für Invertebraten zu finden. Dieser Wert wurde im Rahmen einer Studie von Brooke et al. (2009) aus den verfügbaren Langzeitergebnissen für Triarylphosphate und dem berechneten log K_{ow} (EPISuite) nach folgender Regressionsgleichung berechnet:

$$\log(\text{measured NOEC}) = -0,2279 \times \log(\text{EPI, estimated } K_{ow}) - 5.9317 \quad (\text{Brooke et al., 2009})$$

Jüngsten Veröffentlichungen (ECHA, 2013; Baumann und Weiß, 2012) weiterer Langzeitergebnisse für wirbellose Tiere bestätigten nicht die berechnete NOEC für *Daphnia magna* von 3.2 µg.L⁻¹. Laut dieser Testdaten erwies sich *Daphnia magna* mit 21-d NOEC Werten von 52 und 254 µg.L⁻¹ als deutlich weniger empfindlich.

Für die AA-QS_{fw, eco} wird somit der aus der mit dem Bewertungsfaktor-Ansatz abgeleitete Wert von 3.7 µg.L⁻¹ vorgeschlagen.

Endokrine Wirkung

Triphenylphosphat zeigte Östrogenrezeptor (hERalpha) vermittelte Aktivität in verschiedenen in-vitro Tests (Zhang et al. 2014), in denen die relative östrogene Aktivität von Triphenylphosphat ungefähr drei bis vier Größenordnungen geringer war als die von 17β-Östradiol.

Liu et al. (2013) untersuchte mit geschlechtsreifen Zebrafischen (*Danio rerio*) reproduktionsrelevante Auswirkungen einer 21-tägigen Triphenylphosphat Exposition. Die NOEC für die empfindlichsten populationsrelevanten Effekte (Eiproduktion und Anzahl Eiablagen pro Weibchen; Schlupferfolg der Larven) lagen bei $40 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Unter Berücksichtigung des Bewertungsfaktors von 10 ergibt sich eine Gewässerkonzentration von $4 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, bei der keine Effekte zu erwarten sind.

Da die „Gesamt-UQN“ für Gewässer auf $1,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ festgelegt wurde, ist bei dieser Qualitätsnorm von einem ausreichenden Schutz für Fische gegen schädliche Auswirkungen auf die Reproduktion auszugehen.

22.5.2 Meeresumwelt

Es lagen nur Daten zur chronischen Wirkung von Triphenylphosphat für Süßwasserarten vor. Diese Daten repräsentieren allerdings drei verschiedene Trophiestufen. Gemäß dem technischen Leitfaden zur UQN Ableitung (EC, 2011) wurde ein Bewertungsfaktor 100 auf die niedrigste EC_{10} von $37 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für *Oncorhynchus mykiss* angewandt. Hieraus ergab sich ein $\text{AA-QS}_{\text{sw, eco}}$ von $0,37 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

22.6 Ableitung von $\text{QS}_{\text{sediment}}$ zum Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz benthischer Organismen sind erfüllt, da der $\log K_{\text{ow}}$ zwischen 3.15 und 4.76 liegt und den Triggerwert von 3 übersteigt. Eine Bewertung möglicher Effekte von Triphenylphosphat auf Sedimentorganismen wird dadurch notwendig. Es lagen aber keine belastbaren Studien mit Sedimentlebewesen vor. Die Ermittlung der Qualitätsnormen erfolgte deshalb anhand des Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten-Ansatzes (Equilibrium Partitioning, EqP). Die EqP Ermittlung basierte auf dem AA-QS_{fw} von $3,7 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (und dem entsprechenden AA-QS_{sw} von $0,37 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) und dem worst-case K_{oc} von $10000 \text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$. Gemäß dem „Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) wurde ein $\text{QS}_{\text{sediment fw, EqP}}$ von $714 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (FG) und $1856 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG) bzw. ein $\text{QS}_{\text{sediment sw, EqP}}$ von $71,4 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (FG) und $186 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG) für marine Sedimente abgeleitet.

22.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höhere Trophie Stufen

Eine Bioakkumulation von Triphenylphosphat in der Nahrungskette kann bei einem BCF zwischen 132 und 1743 nicht ausgeschlossen werden. Das Kriterium ($\text{BCF} > 100$) für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung innerhalb der Nahrungskette ist somit erfüllt. Für die Ableitung der $\text{QS}_{\text{biota, sec pois}}$ wurden eine NOAEL von $23500 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1} \text{KG pro Tag}$ herangezogen. Die Ableitung der $\text{QS}_{\text{biota, sec pois}}$ wurde gemäß des Leitfadens „Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) durchgeführt.

Für die Umrechnung der NOAEL (Dosis) aus dem Säugetierversuch in die entsprechende NOEC (Konzentration) wurde ein Umrechnungsfaktor von 10 angewendet. Hieraus ergab sich ein NOEC von $235000 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{\text{food}}$. Die Qualitätsnorm für Biota wurde auf Basis des Standardansatzes nach (ECHA, 2008) bestimmt. Ein Bewertungsfaktor von 300 wurde angewandt, da die Studiendauer 28 Tage betrug. Die $\text{QS}_{\text{biota, sec pois}}$ lag somit bei $783 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{\text{biota ww}}$.

Für die Ableitung einer entsprechenden Biota-Qualitätsnorm für die Wasserphase wurde der mittlere BCF von 531 und der mittlere $\log K_{\text{ow}}$ of 3.97 verwendet, wodurch der Standard BMF Wert von 1 ($\log K_{\text{ow}} < 4.5$ oder $\text{BCH} < 2000$) für die Berechnung nach dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) zum Tragen kam. Auf Basis der $\text{QS}_{\text{biota, sec pois}}$ von $783 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ ergab sich für die Wasserphase ein entsprechender $\text{QS}_{\text{biota sec pois}}$ von $1.47 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, sowohl für Süß- als auch für Salzwasser.

Die Abhängigkeit der extrapolierten Qualitätsnorm von den verwendeten BCF Werten demonstrieren die Berechnungen mit den minimalen und maximalen BCF Werten (und dem mittleren K_{ow} $3.97 \text{ L}\cdot\text{kg}^{-1}$): Der niedrigste BCF von 132 ergibt einen $QS_{\text{biota, sec pois}}$ von $5.9 \mu\cdot\text{L}^{-1}$ und der höchste BCF von 1743 eine $QS_{\text{biota, sec pois}}$ von $0,45 \mu\cdot\text{L}^{-1}$.

Als realistischer Qualitätsstandard wird der mit den Mittelwerten (BCF 531 und $\log K_{ow}$ 3.97) errechnete $QS_{\text{biota sec pois}}$ von $1.47 \mu\cdot\text{L}^{-1}$ zum Schutz von Süß- und Salzwasserorganismen vor einer sekundären Vergiftung vorgeschlagen.

22.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota-Standards zum Schutz der menschlichen Gesundheit wird allein durch die toxikologischen Substanzeigenschaften gesteuert. Die verfügbaren Daten deuten nicht auf eine mögliche Gefahr hin. Es ist keine nachteilige Wirkung von Triphenylphosphat auf die Fortpflanzung, Fruchtbarkeit oder embryonale Entwicklung bekannt. Für den Schutz der menschlichen Gesundheit ist keine Ableitung eines Biota-Standards erforderlich, da die Kriterien nach dem TGD für UQN (EC, 2011) nicht erfüllt sind. Eine Bewertung gesundheitsschädlicher Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten wurde somit gemäß EC (2011) nicht durchgeführt.

22.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nein
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Anhang I
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Nein
Biozide (98/8/EC)	Nein
PBT Substanzen	Keine PBT Substanz (Verordnung (EU) No 253/2011, Anhang XIII (EU, 2011)) <u>Persistenz:</u> Leicht biologisch abbaubar. DT ₅₀ (Wasser) < 1 d (P Schwellenwert > 40 d) DT ₅₀ (Wasser/Sediment) = 2,8 ± 0,7 bis 11,9 ± 4,9 d (P Schwellenwert > 120 d) DT ₅₀ (Boden) = 100 d (P Schwellenwert > 120 d) <u>Bioakkumulation:</u> BCF = 132-1743 (geom. Mittelwert 531) (Schwellenwert < 2000) <u>Toxizität:</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1 oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008).

	<p>Es gibt keine Hinweise der chronischen Toxizität oder Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholte Exposition (STOT RE Kategorie 1 oder 2).</p> <p>Kriterien für „T Substanz“ sind nicht erfüllt.</p>
Substanzen mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Östrogen Rezeptor Agonist

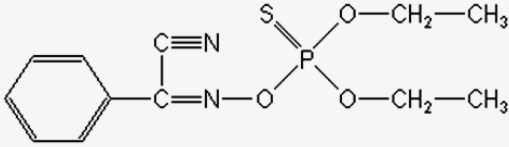
22.10 Existierende UQN-Vorschläge

PNEC ¹	3,7 µg.L ⁻¹	ECHA, 2013
PNEC ¹	0,74 µg.L ⁻¹	Brooke et al., 2009
PNEC _{aqua} ¹	0,74 µg.L ⁻¹	SIDS, 2002
AA-EQS	0,03 µg.L ⁻¹	LAWA, 2010

¹ PNEC - abgeschätzte Nicht-Effekt-Konzentration (gleichwertig dem AA-QS_{freshwater, eco})

23 Phoxim Zusammenfassung

23.1 Chemische Identität

Name	Phoxim
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	0,0-Diethyl-O-(alpha-cyanobenzylidenamino)monothiophosphat
CAS Name	4-Ethoxy-7-phenyl-3,5-dioxa-6-aza-4-phosphaoct-6-ene-8-nitrile 4-sulfid
Chemikalienklasse	Organophosphat
CAS Nummer	14816-18-3
EC Nummer	238-887-3
Summenformel	C ₁₂ H ₁₅ N ₂ O ₃ PS
Strukturformel	
Molare Masse (g.mol ⁻¹)	298,3

Phoxim ist ein phosphororganisches Insektizid mit niedriger akut oraler und dermaler Toxizität gegenüber Säugetieren, aber mit einer ausgesprochen selektiven Giftigkeit gegenüber Insekten.

Phoxim kann zur Insekten-Kontrolle bei gelagertem Korn, Erbsen, Bohnen, Reis, Tabak und Dörr-obst eingesetzt werden.

Die Mehrheit der präsentierten Daten stammt aus der PAN - Pesticide Database (Kegley et al., 2010) sowie aus der internen ICS-Datenbank des Umweltbundesamtes.

23.2 Verhalten in der Umwelt

Aufgrund der Nutzung als Insektizid erfolgt der Haupteintrag von Phoxim in die Umwelt über den Boden. Die Halbwertszeiten (DT₅₀) zwischen einem und zehn Tagen unter Laborbedingungen und zehn Tagen bis zweieinhalb Wochen unter Freilandbedingungen für den biologischen Abbau im Boden weisen auf einen möglicherweise schnellen bzw. mäßigen Abbau der Substanz im Boden hin. Aufgrund des organischen Kohlenstoff-Adsorptionskoeffizienten (K_{oc}) von 420 L.kg⁻¹ ist eine niedrige Mobilität des Stoffes im Boden zu erwarten.

Phoxim besitzt eine geringe Wasserlöslichkeit von 0,0015 bis 0,0041 g.L⁻¹. Der hydrolytische Abbau in Wasser erfolgt pH-abhängig mit zunehmender Hydrolyse und steigendem pH Wert. Bei pH 7 beträgt die DT₅₀ 7,2 Tage. Der K_{oc} von 420 deutet auf eine mögliche Bindung der Substanz an Sediment und/oder Schwebstoffe hin. Es sind keine Daten über leichte biologische Abbaubarkeit und die Abbaubarkeit in Wasser/Sediment-Systemen öffentlich verfügbar.

Der gemessene Biokonzentrationsfaktor (BCF) von 1610 und der log K_{ow} von 3,38 deuten auf eine mögliche Bioakkumulation in der Nahrungskette hin.

23.3 Ableitung der Qualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Zum Schutz aquatischer Organismen wurde nach der Wasserrahmenrichtlinie, Anhang 5 (WFD 2000/60/EC) die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 0,0007 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen.

Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QS _{water}	Einschlägige Studie zur QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Daphnia magna</i> / 48 h / static EC ₅₀ : 0,68 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	10	0,074 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
MAC _{saltwater, eco}	EC ₅₀ : 0,81 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ geometrisches Mittel: 0,74 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	100	0,007 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Daphnia magna</i> / 48 h / static EC ₅₀ : 0,68 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	1000	0,0007 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
AA-QS _{saltwater, eco}	EC ₅₀ : 0,81 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ geometrisches Mittel: 0,74 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	10000	0,00007 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
QS _{sediment, freshwater}	AA-QS _{freshwater, eco} 0,00074 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	EqP	0,006 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{ww}$ 0,017 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{dw}$
QS _{sediment, saltwater}	AA-QS _{saltwater, eco} 0,000074 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	EqP	0,0006 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{ww}$ 0,0017 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{dw}$
QS _{biota, sec pols}	Hund / orale Verabreichung / 2 Jahre/ Fütterungsstudie NOEL : 375 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}\text{bw}^{-1}\cdot\text{day}^{-1}$ NOEC : 15 000 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{food}$	30	500 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{biota ww}$ 0,31 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
QS _{biota, hh food}	ADI : 3.75 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{bw}$	-	228 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{biota ww}$ 0,14 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$

23.4 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

23.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für mindestens drei Arten, die drei Trophieebenen vertreten, sind Kurzzeitergebnisse verfügbar.

Das niedrigste Kurzzeitergebnis ist der EC₅₀ von 0,67 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für die Diptera Mücke (*Anopheles freeborni*). Da *Anopheles freeborni* nicht zu den Standard-Testtieren zählt, wurden bei der Bewertung die Daten für *Daphnia magna* verwendet. Die Ergebnisse (EC₅₀-Werte) der zwei Standardtests mit *Daphnia magna* sind vergleichbar sensitiv mit 0,68 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ und 0,81 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Das geometrische Mittel dieser beiden Werte (0,74 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) wurde für die MAC-QS-Ableitung mit einem Bewertungsfaktor von 10 verrechnet. Dieser Bewertungsfaktor wurde gewählt, weil der Grunddatensatz vorliegt und der Wirkmechanismus bekannt ist.

Mit dem Bewertungsfaktor 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium MAC-QS von 0,074 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

23.4.2 Meeresumwelt

Für Salzwasserorganismen sind Kurzzeittest-Daten für die drei trophischen Ebenen des Basisdatensatzes verfügbar. Es liegen keine Daten für zusätzliche marine taxonomische Gruppen vor. Da der spezifische Wirktyp bekannt ist, wurde daher die EC_{50} von $0,74 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ mit dem Bewertungsfaktor 100 für die Ableitung von $MAC\text{-}QS_{\text{saltwater, eco}}$ verrechnet. Hieraus ergab sich ein Qualitätsstandard $MAC\text{-}QS_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,0074 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (gerundet $0,007 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$).

23.5 AA- QS_{water} Umweltqualitätsnormen

23.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Langzeitergebnisse für das Insektizid Phoxim sind nur für Algen öffentlich verfügbar. Daher ist die Bewertung chronischer Effekte mit großen Unsicherheiten behaftet. Die einzigen verfügbaren Langzeitergebnisse (NOECs) stammen von Spezies, die in den Kurzzeittests nicht die niedrigsten $L(E)C_{50}$ zeigten. Somit beruht die Ermittlung schädlicher Langzeitwirkungen allein auf den Daten der empfindlichsten Arten der Kurzzeittests. Für die Ableitung des Gewässerstandards $AA\text{-}QS_{\text{freshwater, eco}}$ wurde gemäß dem „Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) der Bewertungsfaktor von 1000 angewandt und der $AA\text{-}QS_{\text{freshwater, eco}}$ mit $0,00074 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ errechnet.

23.5.2 Meeresumwelt

Wie oben beschrieben, beruht die Ermittlung schädlicher Langzeitwirkungen allein auf den Daten der empfindlichsten Arten der Kurzzeittests. Für die Ableitung des Gewässerstandards $AA\text{-}QS_{\text{saltwater, eco}}$ wurde nach dem „Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) der Bewertungsfaktor von 10000 angewandt. Die $AA\text{-}QS_{\text{saltwater, eco}}$ wurde mit $0,000074 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ berechnet.

23.6 Ableitung von QS_{sediment} für den Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz benthischer Organismen sind erfüllt. Obwohl der Adsorptionskoeffizient ($K_{oc}=420$) niedriger ist als der Triggerwert von $500\text{-}1000 \text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$, liegt der $\log K_{ow}$ mit 3,8 über dem Schwellenwert von $\log K_{ow} 3$, wodurch eine Bewertung möglicher Effekte auf Sedimentorganismen erforderlich wird.

Da für Sedimentlebewesen keine Testergebnisse vorliegen, wurde für die Ermittlung der Qualitätsnormen der Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten-Ansatz (Equilibrium Partitioning) gewählt. Nach dem „Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) wurde unter Verwendung des $AA\text{-}QS_{\text{fw}}$ von $0,00074 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ und des K_{oc} von $420 \text{L}\cdot\text{kg}^{-1}$ ein $QS_{\text{sediment, fw, EqP}}$ von $0,017 \mu\text{g}\cdot\text{kg}_{\text{sediment dw}}^{-1}$ (TG) und ein $QS_{\text{sediment, sw EqP}}$ von $0,0017 \mu\text{g}\cdot\text{kg}_{\text{sediment dw}}^{-1}$ (TG) abgeleitet (entsprechend $0,0064$ und $0,00064 \mu\text{g}\cdot\text{kg}_{\text{sediment ww}}^{-1}$ (FG)).

23.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höhere Trophie Stufen

Eine Bioakkumulation von Phoxim in der Nahrungskette kann mit einem BCF von 1610 nicht ausgeschlossen werden. Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung innerhalb der Nahrungskette sind somit erfüllt. Für die Ableitung von $QS_{\text{biota, sec pois}}$ wurden die Daten (NOAEL von $375 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1} \text{KG}/\text{Tag}$ aus der 2-Jahres-Fütterungsstudie mit Hunden), die für die Ableitung des ADI-Werts diente, herangezogen. Die Ableitung von $QS_{\text{biota, sec pois}}$ wurde gemäß der Leitlinie „Guidance Document No. 27“ (EC, 2011) durchgeführt. Dabei

wurde der Umrechnungsfaktor 40 für die Umrechnung von NOAEL (Dosis) aus dem Säugetierversuch in NOEC (Konzentration) angewandt. Daraus ergab sich ein NOEC von $15000 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$.

Die Qualitätsnorm für Biota wurde auf Basis des Standardansatzes nach dem Guidance Document No. 27" (EC, 2011) bestimmt. Nach dem gewählten Ansatz wurde der Bewertungsfaktor 30 angewandt; daraus ergab sich ein $QS_{\text{biota, sec pois, fw}}$ von $500 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$.

Für die Ableitung der Biota-Qualitätsnorm wurde ein Standard-BMF von 1 gemäß der Leitlinie angewandt. Daraus errechnete sich ein $QS_{\text{biota, sec pois, sw}}$ von $500 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ und mit dem BCF von 1610 entsprechend eine Gewässerkonzentration von $0,31 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für Süß- und Salzwasserorganismen.

23.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung des Biota Standards zum Schutz menschliche Gesundheit wird allein durch die intrinsischen toxischen Eigenschaften der Substanz beeinflusst. Eine Bioakkumulation von Phoxim in der Nahrungskette kann mit einem BCF von 1610 nicht ausgeschlossen werden. Phoxim ist klassifiziert als gesundheitsschädlich beim Verschlucken (Acute Tox. 4, H302) und vermutlich Fruchtbarkeits beeinträchtigend für den Menschen (Repr. 2, H361 f). Deshalb wurde nach dem TGD für UQN (EC, 2011) eine Bewertung zum Schutz des Menschen vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten durchgeführt.

Da weder BMF-noch BAF-Werte verfügbar waren, wurde ein BMF von 1 gemäß Guidance Document No. 27 (EC, 2011) angenommen. Die $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $228,3 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ wurde auf Basis des verfügbaren ADI-Wertes von $3,75 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1} \text{ bw}\cdot\text{d}^{-1}$ (EFSA, 2011), eines angenommenen Körpergewichts von 70 kg, einem Verbrauch von Fischereierzeugnissen von $0,115 \text{ kg}\cdot\text{d}^{-1}$ und dem BCF von 1610 abgeleitet. Die $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $228,3 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ entspricht einer Wasserkonzentration von $0,142 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Süß und Meerwasser).

23.9 Identifizierung von Problemen in Zusammenhang mit der Unsicherheit in Bezug auf die QS-Ableitung

Langzeitergebnisse sind nur für Algen öffentlich verfügbar. Folglich ist die Bewertung der chronischen Effekte mit großer Unsicherheit behaftet. Die Ableitung der Qualitätsnorm für chronische Effekte beruht deshalb auf den Daten der empfindlichsten Arten aus den Kurzzeittests unter Verwendung eines entsprechend hohen Sicherheitsfaktors.

Um eine realistische Gefahrenbewertung und QS-Ableitung für Langzeitwirkungen zu ermöglichen, müssten neue Daten erzeugt oder vertrauliche Daten verfügbar gemacht werden.

23.10 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Anhang I
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Aus dem Anhang I ausgeschlossen

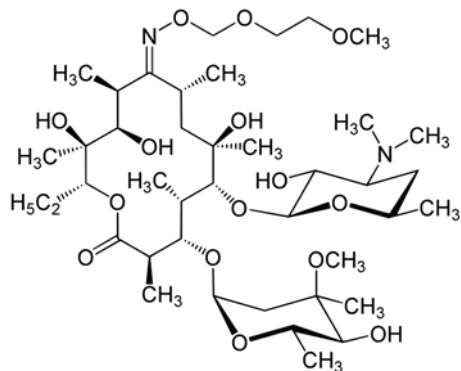
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt im Anhang I
PBT Substanzen	<p>Keine PBT Substanz, erfüllt T Kriterium (Verordnung (EU) No 253/2011, Anhang XIII)</p> <p><u>Persistenz</u> DT₅₀ (Boden) = 10 d – 2,5 Wochen (Schwellenwert > 120 d) DT₅₀ (Wasser) = keine Daten DT₅₀ (Sediment) = keine Daten</p> <p><u>Bioakkumulation</u> BCF = 1610 (Schwellenwert < 2000)</p> <p><u>Toxizität</u> Substanz erfüllt die Kriterien für die Klassifikation als - Repr. 2, H361 f (kann vermutlich die Fruchtbarkeit beeinträchtigen); - acute Tox. 4, H302 (Gesundheitsschädlich beim Verschlucken); - skin Sens. 1, H317 (kann allergische Hautreaktionen verursachen); - aquatic Acute 1, H400 (sehr giftig für Wasserorganismen); - aquatic Chronic 1, H410 (sehr giftig für Wasserorganismen mit langfristiger Wirkung) nach CLP (2008).</p> <p>Kriterien für „T Substanz“ erfüllt: Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L⁻¹</p>
Substanzen mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokriner Disruptor	Nicht untersucht, basierend auf den verfügbaren Informationen

23.11 Existierende Qualitätsstandards für Phoxim

AA-EQS	0,008 µg.L ⁻¹	NLWKN, 2013
--------	--------------------------	-------------

24 Roxithromycin Zusammenfassung

24.1 Chemische Identität

Name	Roxithromycin
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	(3R,4S,5S,6R,7R,9R,11S,12R,13S,14R)-6-[[[(2S,3R,4S,6R)-4-(dimethylamino)-3-hydroxy-6-methyloxan-2-yl]oxy]-14-ethyl-7,12,13-trihydroxy-4-[[[(2R,4R,5S,6S)-5-hydroxy-4-methoxy-4,6-dimethyloxan-2-yl]oxy]-3,5,7,9,11,13-hexamethyl-10-(2,4,7-trioxa-1-azaooctan-1-ylidene)-1-oxacyclotetradecan-2-one
Chemische Klasse	Makrolidantibiotika
CAS Nummer	80214-83-1
EC Nummer	-
Summenformel	C ₄₁ H ₇₆ N ₂ O ₁₅
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	837,05 (Monohydrat)

Roxithromycin gehört zur Wirkstoffgruppe der Makrolidantibiotika. In seiner Zusammensetzung, chemischen Struktur und seinem Wirkmechanismus ist es dem Erythromycin, Azithromycin und Clarithromycin sehr ähnlich. Roxithromycin hemmt das Bakterienwachstum durch Hemmung der Proteinsynthese als Folge der Bindung an die 50S-Untereinheit der Ribosomen.

In Deutschland wurden im Jahr 2012 nach Angaben in der MIDAS® Pharma Datenbank 4,3 Tonnen Roxithromycin verkauft (MIDAS, 2013). In deutschen Oberflächengewässern wurde für die Periode 2009 - 2011 ein maximaler Mittelwerte von 0,296 µg.L⁻¹ berichtet (Ebert and Hein, 2013).

24.2 Verhalten in der aquatischen Umwelt

Den Haupteintragspfad in die Umwelt für Roxithromycin als Humanarzneimittel stellen die kommunalen Kläranlagen dar. Roxithromycin ist zurzeit in zwei Formen erhältlich, als Monohydrat und als wasserfreies Roxithromycin (Liebenberg et al., 2013). Die berechnete Wasserlöslichkeit von Roxithromycin beträgt 18,9 µg.L⁻¹ bei 25 °C (US EPA, 2013). Die Berechnung erfolgte unter Verwendung des berechneten Log K_{ow} Wertes von 2,75. Das Molekül besitzt keine freien

Hydroxylgruppen, woraus sich eine geringe Wasserlöslichkeit ergibt. Liebenberg et al. (2013) berichten jedoch von einer deutlich höheren Löslichkeit von Roxithromycin Monohydrat mit $370,0 \pm 8,3 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$ in Acetat-Puffer (pH 4,5), als in Phosphat-Puffer (pH 6,8) mit $74,8 \pm 5,1 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$ und in destilliertem Wasser mit $1,7 \pm 0,6 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$. Für diese Bestimmungen wurde Roxithromycin Monohydrat in den entsprechenden Pufferlösungen 24 h bei 37°C inkubiert und nach Filtration ($0,45 \mu\text{m}$) mittels HPLC-UV (205 nm) analysiert.

Da die Angaben der berechneten und gemessenen Wasserlöslichkeiten stark schwanken, wird empfohlen, Wasserlöslichkeitsstudien mit Roxithromycin in seiner kommerziell verwendeten Form zu initiieren.

Gemessene physikalisch-chemische Daten sind für Roxithromycin ebenfalls kaum zu erhalten.

Die mittels Estimation Program Interface (EPI) Suite berechneten $\log K_{oc}$ Werte von 3,98 (MCI Methode) und 0,858 (K_{ow} Methode) lassen auf ein eher geringes Potential zur Adsorption an Schwebstoffe und Sediment schließen (US EPA, 2013). Eine Verflüchtigung von der Wasserberfläche ist laut berechneter Henry's Law Konstante nicht zu erwarten.

Roxithromycin ist stabil in Wasser. Es wurde eine Halbwertszeit in Wasser von 180 Tagen berichtet (Choi et al., 2008). Wie die Henry's Law Konstante wurde im Rahmen dieser Bewertung auch der BCF von 30 mittels (EPI) Suite berechnet (US EPA, 2013). Der BCF-Wert der Substanz zeigt, dass die Substanz kein Bioakkumulationspotential besitzt.

24.3 Ableitung der Qualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Für Roxithromycin sind nur wenige Daten erhältlich. In der frei verfügbaren Literatur wurden nur drei Artikel gefunden, die das Thema Ökotoxizität von Roxithromycin behandeln (Brian et al., 2004, Yang et al., 2008, Choi et al., 2008).

Die beschriebenen Testverfahren wurden nach oder in Anlehnung an OECD bzw. ASTM Richtlinien durchgeführt. Eine Validierung der Testkonzentrationen mit chemischer Analytik wurde nicht durchgeführt.

Anhand der Löslichkeitsangaben von Liebenberg et al. (2013) zeigt sich, dass die untersuchten Testkonzentrationen im Bereich der Wasserlöslichkeit lagen. Choi et al. (2008) verwendeten für die Testung DMSO als Lösungsvermittler, wodurch Konzentrationsbereiche im oberen Bereich der möglichen Löslichkeit von Roxithromycin ermöglicht wurden.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die präsentierten Daten als erste Information zur Abschätzung der Wirkung von Roxithromycin verwendet werden können. Allerdings fehlen Daten zu der vermutlich empfindlichsten Organismengruppe, den Cyanobakterien. Aufgrund der fehlenden analytischen Verifizierung der Testkonzentrationen und der Unsicherheiten bezüglich der Wasserlöslichkeit von Roxithromycin ergibt sich ein großer Unsicherheitsfaktor für die Verwendung der Ergebnisse. Diese Unsicherheiten schlagen bei der Ableitung der Qualitätsnormen in hohe Sicherheitsfaktoren und in der Kennzeichnung der Qualitätsnormen als „vorläufig“ nieder.

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) $AA-QS_{\text{freshwater, eco}}$ für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt. Diese „kritische Qualitätsnorm“ wurde für Roxithromycin auf Basis einer „worst-case“ Abschätzung, aufgrund der mangelnden Datenlage, durchgeführt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen ($AA-QS_{\text{freshwater, eco}} 0,047 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Die Gültigkeit dieser Qualitätsnorm muss durch Untersuchungen zur akuten und chronischen Wirkung von Roxithromycin auf Cyanobakterien validiert werden.

Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	Daten für eine Bewertung unzureichend	-	-
MAC _{saltwater, eco}		-	-
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> / 72 h EC ₅₀ : 47 µg.L ⁻¹	1000	0,047 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}		10000	0,0047 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	Daten für eine Bewertung unzureichend	-	-
QS _{sediment, saltwater}			
QS _{biota, sec pols}	-		Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	Daten für eine Bewertung unzureichend		

24.4 MAC-QS Umweltqualitätsnormen, vorläufig

24.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer und Meeresumwelt

Für drei Arten aus drei Trophiestufen (Fisch, Invertebraten und Grünalgen/Makrophyten) liegen Ergebnisse aus Kurzzeit-Toxizitätstests vor. Für eine worst-case Abschätzung wurden die Algen als empfindlichste Organismengruppe angenommen. Anhand der antimikrobiellen Wirkung von Roxithromycin ist von einer starken Wirkung auf Cyanobakterien auszugehen. Dies wird ebenfalls in einem der Bewertung beiliegenden, Sicherheitsdatenblatt für Roxithromycin angemerkt (MSDS, 2008). Effekt-Konzentrationen werden in diesem Sicherheitsdatenblatt jedoch nicht angegeben.

Durch das Fehlen von Effektdaten zu der voraussichtlich empfindlichsten Organismengruppe, den Cyanobakterien, liegt kein vollständiger Basisdatensatz für Roxithromycin vor. Nach dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) kann in diesem Fall keine MAC-QS_{freshwater, eco} abgeleitet werden.

Für eine verlässliche Ableitung eines Qualitätsstandards für Süßwasser und marine Systeme sind Effektkonzentrationen aus einem Wachstumshemmtest mit Algen bzw. Cyanobakterien mit analytischer Verifizierung der Testkonzentrationen erforderlich.

24.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen, vorläufig

24.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer und Meeresumwelt

Langzeitergebnisse waren nur für eine Grünalgen- und eine Makrophytenart verfügbar. Aufgrund des spezifischen Wirktyps (antibakterielle Wirkung) reagieren Cyanobakterien empfindlicher auf Antibiotika als Grünalgen. Aufgrund dessen, dass für die vermutlich sensitivsten Organismen keine Ergebnisse aus Kurz- und Langzeit-Toxizitätstests vorliegen, wird nach dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) ein Bewertungsfaktor von 1000 auf die niedrigste EC₅₀ aus den Kurzzeittests angewendet. Dieser hohe Faktor begründet sich auch durch die hohe Unsicherheit der Ergebnisse durch analytisch nicht verifizierte Testkonzentrationen und widersprüchliche Angaben zur Wasserlöslichkeit. Basierend auf dem vorhandenen Datensatz ist die 72 h-EC₅₀ aus einem Versuch mit der Grünalge *Pseudokirchneriella subcapitata* die niedrigste Effektkonzentration, die für die Ableitung der AA-QS_{freshwater, eco} genutzt wird.

Mit dem Faktor 1000 ergibt sich eine Qualitätsnorm AA-QS_{freshwater, eco} von 0,047 µg.L⁻¹ und unter Verwendung des Bewertungsfaktors 10 000 für den Bereich der Meeresumwelt entsprechend ein AA-QS_{saltwater, eco} von 0,0047 µg.L⁻¹.

24.5.2 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Roxithromycin hat nur ein geringes Potential an Schwebstoffe und/oder Sediment zu adsorbieren und hat nur ein geringes Akkumulationspotential. Der log K_{ow} von 2,75 liegt unterhalb des Schwellenwertes von 3. Die Kriterien zur Durchführung einer Bewertung zum Schutz benthischer Organismen sind somit nicht erfüllt. Eine QS_{sediment} wurde nicht abgeleitet.

24.6 Ableitung der Biota Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

In Anbetracht des niedrigen Bioakkumulationspotentials (errechneter BCF von 30) wurde keine Bewertung für Biota durchgeführt. Es wurde keine QS_{biota, sec pois} nach EC (2011) abgeleitet.

24.7 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung eines Biota Standard für den Menschen ist ausschließlich auf den potentiell gefährlichen Eigenschaften der Chemikalie begründet. Roxithromycin besitzt ein geringes Bioakkumulationspotential und keine karzinogenen, mutagenen, reproduktionstoxischen oder toxischen Eigenschaften, durch die die Ableitung eines QS_{biota, hh food} nach dem TGD für UQN Ableitung (EC, 2011) erforderlich wird. Es wurde keine QS_{biota, hh food} berechnet.

24.8 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittel-Richtlinie (91/414/EEC)	Nicht aufgeführt

EC-Richtlinie 1107/2009	
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt im Anhang I der Richtlinie
PBT-Substanzen	<p>Keine PBT Substanz, erfüllt vP Kriterien (nach Verordnung (EU) No. 253/2011, Anhang XIII (EU, 2011))</p> <p><u>Persistenz</u> DT₅₀ (Wasser) = 180 Tage (vP Schwellenwert > 60 Tage) DT₅₀ (Boden) = >120 Tage (P Schwellenwert > 120 Tage)</p> <p><u>Bioakkumulation</u> BCF = 30,3 (berechnet) (P Schwellenwert < 2000)</p> <p><u>Toxizität</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1A oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008). Es gibt keine Hinweise der chronischen Toxizität oder spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholter Exposition (STOT RE Kategorie 1 oder 2).</p>
Substanz mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokriner Disruptor	Keine Daten verfügbar

Die für Roxithromycin verfügbaren Daten und deren Qualität sind für eine Ableitung einer verlässlichen Qualitätsnorm nicht ausreichend. Gemessene physikalisch-chemische Parameter und Effektkonzentrationen aus Ökotoxizitätstests (speziell mit Cyanobakterien) mit analytisch verifizierten Testkonzentrationen sind dringend erforderlich.

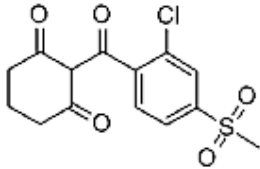
24.9 Existierende UQN-Vorschläge

Umweltqualitätsnormen anderer Länder für Roxithromycin liegen zurzeit nicht vor.

Trinkwasser-Standards für Roxithromycin gibt es von der Europäischen Union (EU, 1998). Nach der EU-Richtlinie 98/83/EG ergibt sich ein Trinkwassergrenzwert von 0,1 µg.L⁻¹.

25 Sulcotrion Zusammenfassung

25.1 Chemische Identität

Name	Sulcotrione
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	2-(2-chloro-4-mesylbenzoyl)cyclohexan-1,3-dion
CAS Name	2-[2-chloro-4-(methylsulfonyl)benzoyl]-1,3-cyclohexanedion
Stoffgruppe	Triketon
CAS Nummer	99105-77-8
EC Nummer	-
Summenformel	C ₁₄ H ₁₃ ClO ₅ S
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	328,77

Sulcotrione ist ein Herbizid mit systemischem Wirkstoff, der zur chemischen Gruppe der Triketone gehört und gegen zweikeimblättriges Unkraut eingesetzt wird.

Eine ausführliche Risikobewertung für Sulcotrione wurde von der Europäischen Behörde für Lebensmittelsicherheit (EFSA) unter der EU-Direktive 91/414/EEC durchgeführt und in DAR Berichten veröffentlicht (EFSA, 2006a-e, 2008). Die jüngste Risikobewertung wurde vom Ausschuss für Risikobeurteilung (Committee for Risk Assessment, RAC) der ECHA (Europäische Chemikalienagentur) angefertigt und im Bericht "Background document to the Opinion proposing harmonised classification and labelling at Community level of Sulcotrione" publiziert.

Diese Bewertungen und die zugehörigen Daten wurden bereits einem gründlichen Gutachterverfahren unterzogen und werden als valide betrachtet.

25.2 Verhalten in der Umwelt

Untersuchungen zur biologischen Abbaubarkeit im Boden ergaben Halbwertszeiten (DT₅₀) von 25,3 Tagen (geometrisches Mittel) in Laborstudien und 4,3 Tage (geometrisches Mittel) in Freilandversuchen. Dies weist auf einen schnellen Abbau der Substanz im Boden hin. Der organische Kohlenstoff-Adsorptionskoeffizient K_{oc} liegt zwischen 17 und 58 L.kg⁻¹ und deutet auf eine hohe Mobilität der Substanz im Boden hin. Bei einer Freisetzung der Substanz in Boden werden ein schneller Abbau oder eine Auswaschung erwartet.

Die Wasserlöslichkeit von Sulcotrione ist vom pH abhängig und beträgt 0,13 g.L⁻¹ bei einem pH von 3,6 und von >60 g.L⁻¹ bei einem pH von 9. Die Substanz erwies sich als hydrolytisch stabil bei

pH Werten von 5, 7 und 9. Es wurden Halbwertszeiten im Wasser (DT_{50}) von 9,5 Tagen und im Wasser/Sediment System von 63,9 Tagen berichtet. Bei einer Freisetzung in Gewässer wird eine geringe Bindung an Sediment und Schwebpartikel erwartet. Die photolytische Halbwertszeit in wässriger Phase wurde zwischen 4 Tagen im Sommer und 210 Tagen im Winter bei pH 7 berichtet.

Eine Verflüchtigung von Sulcotrione ist wegen des niedrigen Dampfdrucks und der niedrigen Henry's Law Konstante (5×10^{-6} Pa and 1.0×10^{-5} Pa.m³.mol⁻¹, entsprechend) nicht zu erwarten. Es wurde eine photolytische Halbwertszeit von 100 Tagen berichtet.

Eine Anreicherung der Substanz in der Nahrungskette wird ebenfalls nicht erwartet. Obwohl keine gemessenen BCF Werte vorliegen, deutet der $\log Pow < 3$ auf ein sehr geringes Anreicherungspotenzial hin. Außerdem ist aus Studien zur Kinetik in Säugern bekannt, dass Sulcotrione schnell metabolisiert und ausgeschieden werden.

25.3 Metaboliten

Als Hauptmetabolite im Wasser und Boden wurde 2- chlor- 4-(methylsulfonyl) benzoessäure (CMBA) identifiziert. „Er ist jedoch nicht herbizid wirksam im Sinn der Muttersubstanz und toxikologisch und ökotoxikologisch nicht relevant“ (BVL, 2012).

25.4 Ableitung der Qualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) AA-QS_{freshwater, eco} für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 0,1 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Lemna gibba</i> / 7 Tage	10	5,1 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}	E _b C ₅₀ : 51 µg.L ⁻¹ E _r C ₅₀ : 560 µg.L ⁻¹	50	1,0 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Lemna gibba</i> / 7 Tage / Biomasse	10	0,1 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}	NOEC : 1,0 µg.L ⁻¹	100	0,01 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{sediment, saltwater}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	ADI : 0,4 µg.kg ⁻¹ .bw.d ⁻¹	-	24,3 µg.kg ⁻¹ biota ww 10,5 µg.L ⁻¹

25.5 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

25.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für mindestens drei Arten aus drei Trophiestufen sind Kurzzeit-Toxizitätsdaten verfügbar. Das niedrigste akute Ergebnis, die E_bC_{50} von $51 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, wurde für Wasserpflanze (*Lemna gibba*) bestimmt. Dieser Wert wurde für die Ableitung der $\text{MAC-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ eingesetzt. Der Bewertungsfaktor von 10 wurde als angemessen angesehen, da der Datensatz für Kurzzeit-Toxizität vollständig, der spezifische Wirkmechanismus der Substanz bekannt und die empfindlichste Organismengruppe im Datensatz enthalten ist.

Mit dem Bewertungsfaktor 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium $\text{MAC-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ von $5,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

25.5.2 Meeresumwelt

Für die Beurteilung der Wirkung auf Salzwasserorganismen liegen die Daten für drei Arten aus drei Trophiestufen der Süßwasserstudien und das Ergebnis (IC_{50}) einer Kurzzeitstudie für eine zusätzliche marine taxonomische Gruppe vor. Für die Ableitung der $\text{MAC-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ wurde das niedrigste akute Ergebnis, die E_bC_{50} von $51 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, für Wasserpflanze (*Lemna gibba*), herangezogen. Dieser Wert wurde mit einem Bewertungsfaktor 50 für die Ableitung der $\text{MAC-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ eingesetzt. Es ergibt sich ein Qualitätsstandard $\text{MAC-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ von $1,0 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ abgeleitet.

25.6 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

25.6.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Die niedrigste, ermittelte Konzentration einer Langzeitstudie bei der keine Wirkung auf den Testorganismus beobachtet wurde (NOEC), stammt aus einer Studie mit der Wasserpflanze *Lemna gibba* und lag bei $1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

Dieser Wert wurde für die AA-QS Ableitung herangezogen. Langzeitergebnisse (NOECs) für drei Spezies aus drei Trophiestufen (Fische, Daphnien und Algen) liegen zur Ableitung vor. Ein Bewertungsfaktor von 10 wurde für die Ableitung des $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ herangezogen. Es ergibt sich ein $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

25.6.2 Meeresumwelt

Es liegen nur Langzeitdaten für Süßwasserarten vor, die allerdings drei Trophiestufen präsentieren. Ein Bewertungsfaktor von 100 wurde auf den niedrigsten NOEC-Wert von $1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für *Lemna gibba* angewandt. Daraus ergibt sich ein $\text{AA-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,01 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

25.7 Ableitung von $\text{QS}_{\text{sediment}}$ zum Schutz der benthischen Organismen

Es wurde keine Qualitätsnorm für den Sedimentbereich abgeleitet, da eine Exposition des Sediments aufgrund der vorhandenen Datenlage zu vernachlässigen ist. Der auf organischen Kohlenstoff normierte Adsorptionskoeffizient (K_{oc}) für Sulcotrione liegt zwischen 17 und 58. Der $\log K_{ow}$ befindet sich zwischen 0,2 und -2,0 (in Abhängigkeit des pH Wertes) und ist somit niedriger als der Schwellenwert von 3 (EC, 2011). Nach dem TGD für UQN (EC, 2011) sind die Kriterien für eine Bewertung für Sedimentorganismen somit nicht erfüllt.

25.8 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höhere Trophiestufen

Es liegt kein gemessene BCF Wert vor, allerdings deutet der ermittelte $\log P_{ow}$ von < 3 auf ein sehr geringes Potential zur Bioakkumulation in der Nahrungskette hin. Außerdem ist aus den biokinetischen Studien in Säugetieren bekannt, dass Sulcotrione schnell metabolisiert und ausgeschieden werden.

Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz der Organismen höherer Trophiestufen sind nicht erfüllt. Ein $QS_{biota, sec\ pois}$ wurde nicht abgeleitet.

25.9 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung eines Biota Standard für den Menschen ist ausschließlich auf den potentiell gefährlichen Eigenschaften der Chemikalie begründet. Sulcotrione erfüllt die Kriterien für die Einstufung als STOT RE Kategorie 2 für Spezifische Zielorgan-Toxizität (Niere) nach wiederholter Exposition und als Reproduktionstoxisch (Kategorie 2). Somit wurde eine Bewertung für die menschliche Gesundheit durchgeführt und eine vorläufige $QS_{biota, hh\ food}$ auf Grundlage des verfügbaren ADI-Wertes ($0,4 \mu g \cdot kg^{-1}_{bw} \cdot d^{-1}$), der von der EFSA (2008) abgeleitet wurde, berechnet.

Da weder BMF noch BAF Werte zur Verfügung standen, wurde ein BMF von 1 gemäß dem TGD für UQN (EC, 2011) angenommen. Die $QS_{biota, hh\ food}$ von $24,3 \mu g \cdot kg^{-1}_{biota\ ww}$ wurde auf Basis folgender Annahmen abgeleitet: 70 kg Körpergewicht, $0,115 kg \cdot d^{-1}$ Verbrauch von Fischereierzeugnissen und ein gemessener BCF von 2,31. Die $QS_{biota, hh\ food}$ von $24,3 \mu g \cdot kg^{-1}$ entspricht einer Wasserkonzentration von $10,54 \mu g \cdot L^{-1}$ (Süß- und Meerwasser).

25.10 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Anhang I
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt im Anhang I
PBT Substanzen	Keine PBT oder vPvB Substanz, T Kriterien sind erfüllt <u>Persistenz</u> DT ₅₀ (Wasser) = 9,5 d (P Schwellenwert (Wasser) > 40 d) DT ₅₀ (Sediment) = 63,9 (P Schwellenwert (Sediment) > 120 d) DT ₅₀ (Boden) = 25,3 d (P Schwellenwert > 120 d) <u>Bioakkumulation</u> BCF = 2,31 (Schwellenwert < 2000) <u>Toxizität</u> Verordnung (EU) No 253/2011, Anhang XIII): Nicht eingestuft (EU Pesticides database).

	<p>Folgende Kriterien für „T Substanz“ erfüllt:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Substanz ist eingestuft als STOT RE Kategorie 2 für Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholter Exposition und reproduktionstoxisch (Kategorie 2). - Akute und chronische Toxizität für Wasserlebewesen (Aquatisch Akut 1, Aquatisch Chronisch 1) <p>Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1 oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß der CLP Verordnung.</p>
Substanz mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Herbicide Resistance Classification (HRAC)	F2
Endokrine Wirkung	Keine Daten

25.11 Existierende UQN-Vorschläge

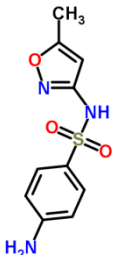
Da weder Standardwerte für das Trinkwasser von der EU noch der WHO verfügbar waren, gilt der bevorzugte Regulierungsstandard von 0,1 µg.L⁻¹ gemäß der europäischen Trinkwasserrichtlinie.

MTR ¹	13 µg.L ⁻¹	RIVM, 2014
------------------	-----------------------	------------

¹ MTR – OPPERVLAKTEWATER ad hoc MTR (maximaal toelaatba ar risiconiveau = tolerable risk level) For concentration in water compartment (comparable to AA-QS_{freshwater, eco})

26 Sulfamethoxazol Zusammenfassung

26.1 Chemische Identität

Name	Sulfamethoxazol
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	4-Amino-N-(5-methyl-1,2-oxazol-3-yl) benzensulfonamid
CAS Name	Sulfamethoxazol
Chemische Klasse	Sulfonamid
CAS Nummer	723-46-6
EC Nummer	211-963-3
Summenformel	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S ₁
SMILES	CC1=CC(=N01)NS(=O)(=O)C2=CC=C(C=C2)N
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	253,28

Sulfamethoxazol ist ein Arzneistoff aus der Gruppe der Sulfonamid-Antibiotika und wird zur systemischen Therapie von Infektionskrankheiten durch gram-positive und gram-negative Erreger verwendet. Sulfamethoxazol wird als Antibiotikum in der Human- und Veterinär Medizin eingesetzt.

Der Arzneistoff Sulfamethoxazol wird in Deutschland häufig in Kombination mit Trimethoprim (Verhältnis 5:1) eingesetzt. 2005 wurden 26,9 Tonnen Sulfamethoxazol verwendet (Kümmerer et al., 2009). In 2012 wurden in Deutschland 26,1 Tonnen Sulfamethoxazol verkauft (Ebert and Hein, 2013). Anhand technischer Herstellerinformationen schätzten Kümmerer et al. (2009), dass jährlich 6,5 Tonnen Sulfamethoxazol als nicht-metabolisierte Ausgangssubstanz und 20,4 Tonnen in metabolisierter Form ausgeschieden werden. Die jährliche Produktionsmenge in der EU ist 245 Tonnen (Kümmerer, 2003).

Ebert and Hein (2013) berichten, dass Sulfamethoxazol ubiquitär in von Abwasser beeinflussten Gewässern gefunden wird. In Oberflächengewässern wurden von der LAWA Konzentrationen von 0,007 µg.L⁻¹ bis 1,2 µg.L⁻¹ mit einem maximalen Mittelwert von 0,423 µg.L⁻¹ zwischen 2009 und 2011 mitgeteilt (Ebert and Hein, 2013). Sulfamethoxazolkonzentrationen sind 0,41 µg.L⁻¹ (Uferfiltration) und 0,47 µg.L⁻¹ im Grundwasser und 0,023 µg.L⁻¹ im Trinkwasser (Ebert and Hein, 2013).

26.2 Verhalten in der Umwelt

Kommunale Kläranlagen stellen den Haupteintragspfad für Sulfamethoxazol in die Umwelt dar. Sulfamethoxazol ist wasserlöslich ($0,6 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$) und wird mäßig an Sediment und Klärschlamm adsorbiert ($K_{oc} = 35 - 610 \text{ l}\cdot\text{kg}^{-1}$). K_{oc} -Werte für Sulfamethoxazol für Schwebstoffe liegen wesentlich höher ($\log K_{oc} \sim 3$). Sehr starke Sorption wurde an Kolloide beobachtet, die eine Senke für Sulfamethoxazol in der Umwelt darstellen können (Maskaoui and Zhou, 2010).

Sulfamethoxazol wird bei üblicher Abwasserbehandlung nicht vollständig abgebaut. Zwei Abbauprodukte des persistenten Sulfamethoxazol unter denitrifizierenden Bedingungen, 4-nitro-N-(5-methylisoxazol-3-yl)-benzensulfonamid und N-(5-methylisoxazol-3-yl)-benzensulfonamid, wurden im Experiment und in Umweltproben festgestellt. Allerdings wurde unter anoxischen Bedingungen auch eine Rücktransformation zum Sulfamethoxazol beobachtet (Nödler et al., 2012).

Im Boden ist für Sulfamethoxazol eine mittlere Mobilität zu erwarten ($K_{oc} = 200 - 600 \text{ L}\cdot\text{kg}^{-1}$). Experimentelle Informationen zur Abbaubarkeit von Sulfamethoxazol in Boden liegen kaum vor, allerdings weisen Schätzwerte auf eine geringe Bioabbaubarkeit hin und damit auf mögliche Persistenz (Ortiz de Garcia et al., 2013).

Weil Sulfamethoxazol nicht flüchtig ist, ist ein möglicher atmosphärischer Abbau (US EPA, 2012a) nicht relevant.

Sulfamethoxazol weist vermutlich ein geringes Bioakkumulationspotential auf. Aus dem niedrigen $\log K_{ow}$ (0,89) wird auch nur ein geringer BCF abgeschätzt.

26.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} $0,6 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Die zur Ableitung der Umweltqualitätsnormen herangezogenen Daten werden als valide angesehen. Diese Daten sind in Quellen mit Peer-Review publiziert und im Rahmen einer Studie zur Ausarbeitung von Vorschlägen für akute und chronische Qualitätskriterien für ausgewählte schweizrelevante Substanzen (Oekotoxzentrum 2013) als Klimisch 2 (valide mit (geringen) Einschränkungen (Klimisch et al., 1997)) beurteilt.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN Ableitung	Bewertungsfaktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	Cyanobakterien <i>Synechococcus leopolensis</i> Wachstum	10	2,7 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
MAC _{saltwater, eco}	EC ₅₀ = 26,8 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Ferrari et al., 2004)	100	0,27 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
AA-QS _{freshwater, eco}	Cyanobakterien <i>Synechococcus leopolensis</i> Wachstum	10	0,6 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
AA-QS _{saltwater, eco}	96 h NOEC = 5,9 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Ferrari et al., 2004)	100	0,06 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
QS _{sediment, freshwater}	---	---	Nicht erforderlich

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN Ableitung	Bewertungsfaktor	Vorläufige QN
QS _{sediment, saltwater}	---	---	Nicht erforderlich
QS _{biota, sec pois}	---	---	Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	---	---	Nicht erforderlich

1.15 MAC-QS Umweltqualitätsnorm

1.15.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Daten zur akuten Toxizität liegen für mindestens drei Arten aus drei Trophieebenen vor. Die empfindlichsten Arten sind Algen und aquatische Pflanzen. Fische, Kleinkrebse und Bakterien sind weniger empfindlich. Das niedrigste akute Ergebnis ist die EC₅₀ von 26.8 µg.L⁻¹ für Cyanobakterien (*Synechococcus leopolensis* (Ferrari et al., 2004)), das mit einem Bewertungsfaktor von 10 eine MAC-QS_{freshwater, eco} von 2,7 µg.L⁻¹ ergibt.

1.15.2 Meeresumwelt

Für Salzwasserorganismen sind keine Kurzzeit-Testergebnisse verfügbar, so dass der Bewertungsfaktor 100 für die Ableitung der MAC-QS_{saltwater, eco} angewendet wird. Daraus ergibt sich ein Qualitätsstandard von 0,27 µg.L⁻¹.

1.16 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnorm

1.16.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Langzeitergebnisse liegen für repräsentative Arten (Fische, wirbellose Tiere und Algen) aus 3 trophischen Ebenen vor. Algen und aquatische Pflanzen erweisen sich gegenüber Sulfamethoxazol als empfindlicher im Vergleich zu Kleinkrebsen und Fischen. Das niedrigste chronische Ergebnis ist die NOEC von 5,9 µg.L⁻¹ für Cyanobakterien (*Synechococcus leopolensis* (Ferrari et al., 2004)), das mit einem Bewertungsfaktor von 10 eine AA-QS_{freshwater, eco} von 0,6 µg.L⁻¹ ergibt.

1.16.2 Meeresumwelt

Für Salzwasserorganismen sind keine Langzeit-Testergebnisse verfügbar, so dass der Bewertungsfaktor 100 für die Ableitung der AA-QS_{saltwater, eco} angewendet wird. Daraus ergibt sich ein Qualitätsstandard von 0,06 µg.L⁻¹.

1.17 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung zum Schutz benthischer Organismen sind nicht erfüllt. QS_{sediment, fw} und QS_{sediment, sw} wurden nicht bestimmt.

1.18 Ableitung der Biota-Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Es wurde keine Bewertung für Rückstände in aquatischen Biota im Hinblick auf Nahrungsnetze durchgeführt, da für Sulfamethoxazol die entsprechenden Kriterien nach den TGD für UQN (EC, 2011) nicht erfüllt sind. Eine $QS_{\text{biota, sec pois}}$ wurde nicht bestimmt.

1.19 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Es wurde keine Bewertung für Rückstände in aquatischen Biota im Hinblick auf die menschliche Gesundheit durchgeführt, da für Sulfamethoxazol die entsprechenden Kriterien nach den TGD für UQN (EC, 2011) nicht erfüllt sind. Eine $QS_{\text{biota, hh food}}$ wurde nicht bestimmt.

26.4 Metabolite

Sulfamethoxazol wird vorwiegend durch Hydroxylierung, Acetylierung und Konjugation mit Glucuronsäure metabolisiert. Im Menschen wird als Hauptmetabolit N-4-Acetylsulfamethoxazol gebildet. Kümmerer et al. (2009) führen fünf Hauptmetabolite auf:

Sulfamethoxazolhydroxylamin	[CAS 114438-33-4]
4-Nitrososulfamethoxazol	[CAS 131549-85-4]
N-Acetoxy-sulfamethoxazol	[CAS 169306-48-3]
N-1-Acetylsulfamethoxazol	[CAS 18607-98-2]
N-4-Acetylsulfamethoxazol	[CAS 21312-10-7]

26.5 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht anwendbar
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt in Anhang I Nicht aufgeführt
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt in Anhang I
PBT Substanzen	Nicht gekennzeichnet als PBT Substanz (gemäß Verordnung (EU) No. 253/2011 Anhang XIII (European Union, 2011)) <u>Persistenz</u> Nicht abbaubar (Schwellenwert >120 d) <u>Bioakkumulation</u> BCF <100 (Schwellenwert >2000) <u>Toxizität</u> (nach Verordnung (EC) No 1272/2008 Anhang VI): aquatische NOEC Werte <10 µg.L ⁻¹ : z.B. Cyanobakterien Die Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifizierung als Karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), Mutagen (Kategorie 1 oder 1B), oder

	Reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (European Commission, 2008).
Stoffe mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Nicht untersucht, basierend auf den verfügbaren Informationen
Wassergefährdungsklasse (WGK)	2

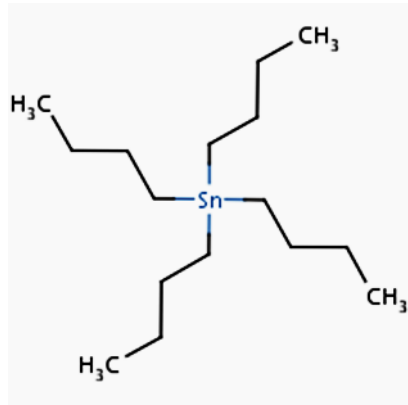
26.6 Existierende UQN Vorschläge für Sulfamethoxazol

AA-QS	0,6 µg.L ⁻¹	Schweiz, Vorschlag, Oekotoxzentrum, 2013
MAC-QS	2,7 µg.L ⁻¹	Schweiz, Vorschlag, Oekotoxzentrum, 2013
AQL QN-V	0,15 µg.L ⁻¹	Deutschland, Vorschlag, Janel and et al., 2006
Zielwert	0,1 µg.L ⁻¹	Niederlande, van der Aa et al., 2011
(Trinkwassergewinnung) Trinkwasser	75 - 455 µg.L ⁻¹	Niederlande, van der Aa et al., 2011
Fischverzehr	120 µg.L ⁻¹	Niederlande, van der Aa et al., 2011

UQN Vorschläge anderer Länder liegen zurzeit nicht vor.

27 Tetrabutylzinn Zusammenfassung

27.1 Chemische Identität

Name	Tetrabutylzinn
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	Tetrabutylzinn, Tetrabutylstannan, Stannan, tetrabutyl
Andere Namen	Tetrabutylstannan, Zinntetrabutyl, Tetra-n-butylzinn
Chemische Klasse	Zinnorganische Verbindungen
CAS Nummer	1461-25-2
EC Nummer	215-960-8
Summenformel	C ₁₆ H ₃₆ Sn
Strukturformel	
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	347,17

Laut Bericht von Risk & Policy Analysts Limited (RPA, 2005) wird Tetrabutylzinn in Europa ausschließlich als Zwischenprodukt bei der Synthese anderer organischer Chemikalien verwendet.

27.2 Verhalten in der aquatischen Umwelt

Tetrabutylzinn besitzt eine geringe Wasserlöslichkeit ($< 9,64 \times 10^{-5} \text{ g.L}^{-1}$ bei $20 \text{ }^\circ\text{C}$). Der K_{oc} von $1,014 \times 10^5 \text{ L.kg}^{-1}$ lässt auf ein großes Potential zur Adsorption an Schwebstoffe und Sediment schließen. Tetrabutylzinn ist beständig gegenüber Hydrolyse (Crompton Corp., 2004) und ist biologisch nicht leicht abbaubar. Im Test nach OECD 301 D wurden nach 28 Tagen 2 % der Substanz abgebaut (ECHA, 2013). Die Verflüchtigung von der Wasseroberfläche soll laut berechneter Henry's Law Konstante zu einer wesentlichen Abgabe an die Atmosphäre führen. Die Halbwertszeit im Wasser beträgt 208 Stunden.

27.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen

Zum Schutz aquatischer Organismen wurde nach der Wasserrahmenrichtlinie, Anhang 5 (WFD 2000/60/EC) eine Qualitätsnorm AA-QS_{freshwater, eco} 0,14 µg.L⁻¹ abgeleitet. Zum Schutz von Tierarten, die sich von Fischen und anderen Wasserorganismen ernähren (secondary poisoning) wurde eine QS_{biota, sec pois, fw} von 16,7 µg.kg⁻¹ Biota abgeleitet, die, mit einem BCF von 1200 auf die Wasserphase übertragen, sowohl für Süß- als auch Meerwasser eine AA-UQN von 0,014 µg.L⁻¹ ergibt. Diese wird als 'Gesamt' UQN für den Jahresmittelwert vorgeschlagen.

Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie zur QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Skeletonema costatum</i> / 72 h (marine diatom)	50	0,34 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}	EyC ₅₀ : 17 µg.L ⁻¹	100	0,17 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Daphnia magna</i> / 21 d / Reproduktion NOEC : 14 µg.L ⁻¹	100	0,14 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}		1000	0,014 µg.L ⁻¹
AA-QS _{biota, sec pois}	Ratte / orale Verabreichung / Reproduktion NOEC 5000 µg.kg ⁻¹ _{food}	300	16,7 µg.kg ⁻¹ 0,014 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	QS _{fw} = 0,14 µg.L ⁻¹	EqP	273 µg.kg ⁻¹ _{ww} 710 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{sediment, saltwater}	QS _{sw} = 0,014 µg.L ⁻¹	EqP	27,3 µg.kg ⁻¹ _{ww} 71 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{biota, sec pois}	Ratte / orale Verabreichung / kombinierte Studie: Toxizität bei wiederholter Verabreichung mit Reproduktion / Entwicklungstoxizität, Screening Test NOAEL: 500 - 800 µg.kg ⁻¹ _{bw} .d ⁻¹ (F) NOEC : 5000 µg.kg ⁻¹ _{food} NOAEL: 600 - 700 µg.kg ⁻¹ _{bw} .d ⁻¹ (M)	300	16,7 µg.kg ⁻¹ _{biota ww} 0,014 µg.L⁻¹ Gesamt-UQN
QS _{biota, hh food}	-	-	Nicht erforderlich

27.4 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

27.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Kurzzeitergebnisse sind für Arten der drei Trophiestufen Fisch, wirbellose Tiere und Algen verfügbar. Für die Ableitung der zum Schutz der pelagischen Organismen maximal zulässigen Umweltkonzentration (MAC-QS) wurde ein E_yC_{50} von $17 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für marine Diatomeen (*Skeletonema costatum*) verwendet. Mit dem Bewertungsfaktor von 50 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium MAC-QS von $0,34 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Der Bewertungsfaktor von 50 wurde gewählt, da aufgrund der großen Schwankungsbreite der Daphnien- und Fischtestergebnisse nicht sichergestellt werden konnte, dass die empfindlichste Spezies berücksichtigt wurde.

27.4.2 Meeresumwelt

Kurzzeitergebnisse sind für Salzwasser Diatomeen verfügbar. Da diese keine zusätzliche spezifische taxonomische Gruppe darstellen, wurde für die MAC-QS_{saltwater, eco}-Ableitung der Bewertungsfaktor 100 angewendet. Daraus ergibt sich ein MAC-QS_{saltwater, eco} von $0,17 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

27.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnormen

27.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer und Meeresumwelt

Zuverlässige Langzeitergebnisse liegen nur für Krebstiere vor. Das niedrigste Langzeitergebnis ist ein 21-d NOEC von $14 \mu\text{g L}^{-1}$ für die *Daphnia magna*. Da nur für Spezies einer Trophiestufe Daten vorliegen, wurden die Bewertungsfaktoren 100 für Süßwasser und 1000 für den marinen Bereich herangezogen. Daraus ergibt sich eine AA-QS_{freshwater, eco} von $0,14 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ und eine AA-QS_{saltwater, eco} von $0,014 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

27.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung im Hinblick auf den Schutz benthischer Organismen sind erfüllt; es wird ein berechneter Adsorptionskoeffizient von $1,014 \times 10^5 \text{ L}\cdot\text{kg}^{-1}$ berichtet (ECHA, 2013).

Da für Sedimentorganismen keine Testergebnisse vorliegen, wurde zur Ermittlung der Qualitätsnormen der Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten-Ansatz (Equilibrium Partitioning) gewählt. Gemäß dem Guidance Document No. 27 (EC, 2011) wurde ein QS_{sediment, fw EqP} von $710 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG) und ein QS_{sediment, sw EqP} von $71 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG) abgeleitet.

27.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Bei einem BCF von 1200 ± 300 kann eine Bioakkumulation von Tetrabutylzinn in der Nahrungskette nicht ausgeschlossen werden. Die Kriterien für die Durchführung einer Bewertung im Hinblick auf den Schutz vor einer sekundären Vergiftung innerhalb der Nahrungskette sind damit erfüllt. Für die Ableitung von QS_{biota, sec pois} wurde der niedrigste NOEL von $500 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{bw}\cdot\text{d}^{-1}$ aus der Studie „Combined Repeated Dose Toxicity Study with the Reproduction / Developmental Toxicity Screening Test“ (ECHA, (2013) herangezogen. Die Ableitung von QS_{biota, sec pois} wurde gemäß „Technical Guidance for Deriving Environmental Quality Standards, Guidance Document

No. 27“ (EC, 2011) durchgeführt. Dabei wurde für die Umrechnung von NOAEL (Dosis) aus dem Säugetierversuch in NOEC (Konzentration) der Umrechnungsfaktor 10 angewandt. Daraus ergab sich ein NOEC von $5000 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{\text{food}}$.

Die Qualitätsnorm für Biota wurde auf Basis des Standardansatzes nach dem Guidance Document (EC, 2011) mit einem Bewertungsfaktor von 300 für eine 28 d Studie (konservativer Faktor, Studiendauer war >28 und < 90 d) berechnet, wodurch sich ein $QS_{\text{biota, sec pois}}$ von $16,7 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{\text{biota}}$ ergab.

Für die Ableitung der entsprechenden Gewässer-Qualitätsnorm wurde ein Default-BMF von 1 (BCF < 2000 oder $K_{\text{ow}} < 4,7 \text{ L}\cdot\text{kg}^{-1}$) gemäß der Leitlinie verwendet und unter Berücksichtigung des höchsten BCFs von 1200 für *Chironomus* ein $QS_{\text{biota, sec pois}}$ von $0,014 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für Süß- und Salzwasserorganismen berechnet.

27.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Die Ableitung eines Biota Standard für den Menschen ist ausschließlich auf den potentiell gefährlichen Eigenschaften der Chemikalie begründet. Tetrabutylzinn besitzt keine karzinogenen, mutagenen, reproduktionstoxischen oder toxischen Eigenschaften, durch die die Ableitung eines $QS_{\text{biota, hh food}}$ nach dem TGD für UQN Ableitung (EC, 2011) erforderlich wird. Deshalb wurde kein Qualitätsstandard zum Schutz des Menschen vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten abgeleitet.

27.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Aufgeführt
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt im Anhang I der Richtlinie
PBT Substanzen	<p>Tetrabutyltin wird als eine mit PBT verunreinigte und PBT-Stoffe bildende Substanz betrachtet. (PBT Working Group, 2008). Erfüllt das T-Kriterium für Toxizität</p> <p><u>Persistenz</u> DT_{50} (Wasser) = 208 h (P Schwellenwert > 40 Tage) DT_{50} (Wasser/Sediment) = 20 – 40 d (P Schwellenwert_{sed} > 120 Tage) DT_{50} (Boden) = 416 h (Schwellenwert > 120 Tage)</p> <p><u>Bioakkumulation</u> BCF = 1200 ± 300 (<i>Chironomus</i>) (Schwellenwert < 2000)</p> <p><u>Toxizität</u> Der Stoff ist nicht klassifiziert gemäß der Richtlinie 67/548/EEC”</p>

	(PBT Working group, 2008) Kriterien für „T Substanz“ erfüllt: Aquatische NOEC Werte sind < 10 µg.L ⁻¹
Substanz mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Ja (Imposex in mariner Schnecke <i>Nucella lapillus</i> , Moltmann et al., 2007))

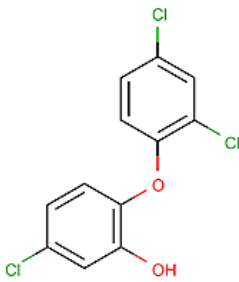
27.10 Existierende UQN-Vorschläge

OPPERVLAKTEWATER wettelijk MTR ¹ (totaal)	1,6 µg.L ⁻¹	RIVM, 2014
OPPERVLAKTEWATER streefwaarde (totaal)	0,016 µg.L ⁻¹	RIVM, 2014
GRONDWATER streefwaarde (opgelost)	0,016 µg.L ⁻¹	RIVM, 2014
ZWEVEND STOF MTR	156 µg.kg ⁻¹ droge stof	RIVM, 2014
SEDIMENT (droge stof) MTR	78 µg kg ⁻¹ s.b.	RIVM, 2014
SEDIMENT + GROND (droge stof) streefwaarde	0,8 µg kg ⁻¹ s.b.	RIVM, 2014
OPPERVLAKTEWATER wettelijk MTR (totaal)	0,017 µg.L ⁻¹	RIVM, 2014
OPPERVLAKTEWATER streefwaarde (totaal)	0,0002 µg.L ⁻¹	RIVM, 2014
ZWEVEND STOF MTR	0,016 µg.L ⁻¹	RIVM, 2014
SEDIMENT (droge stof) MTR	0,8 µg.kg ⁻¹ s.b.	RIVM, 2014
SEDIMENT + GROND (droge stof) streefwaarde	0,008 µg.kg ⁻¹ s.b.	RIVM, 2014
EQS (tentative)	0,002 µg Sn.L ⁻¹ 0,006 µg TBT.L ⁻¹	Moltmann et al., 2007

¹ MTR - Maximaal Toelaatbaar Risiconiveau, (MTR = MTT + Cb: MTT: Maximaal Toelaatbare Toevoeging (als gevolg van antropogene emissies), Cb: achtergrondconcentratie)

28 Triclosan Zusammenfassung

28.1 Chemische Identität

Name	Triclosan
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	5-chloro-2-(2,4-dichlorophenoxy)phenol
CAS Name	2,4,4'-Trichlor-2'-hydroxydiphenylether
Chemikalienklasse	chlorierte Biphenylether
CAS Nummer	3380-34-5
EC Nummer	222-182-2
Summenformel	C ₁₂ H ₇ Cl ₃ O ₂
Strukturformel	
Molare Masse (g.mol ⁻¹)	289,55

Triclosan ist ein Biozid aus der Gruppe der chlorierten Biphenylether und wird wegen seiner Breitbandwirkung gegen Bakterien, Schimmelpilze und Hefen (Hemmung der Lipid Biosynthese) in verschiedenen medizinischen und nichtmedizinischen Produkten verwendet. Dazu gehören unter anderem Hygieneprodukte wie Mundspülungen, Zahnpasta und Deodorants, dekorative Kosmetik wie Augenmakeup, Textilien wie Sportsocken, außerdem Kissen, Handtücher und Polstermöbel, Plastikprodukte wie Toilettensitze und Zahnbürsten und PVC Teppiche, medizinische Desinfektionsmittel, Pickelcremes und Gele zur Behandlung von Verbrennungen (Health & Environment Canada, 2012).

Für Triclosan wurde, zur Ableitung einer Umweltqualitätsnorm, von dem LAWA-Expertenkreis „Stoffe“ ein Stoffdatenblatt (LAWA, 2010) erstellt. Ebenso wurde in der Schweiz ein Stoffdatenblatt für Triclosan mit abgeleiteten Umweltqualitätsnormen angefertigt (Oekotoxzentrum, 2013). In diesem Gutachten wurden verschiedene Studien zur Wirkung von Triclosan in der Umwelt geprüft und veröffentlicht. Weiterhin liegt ein Bewertungsbericht der UK Technical Advisory Group on the Water Framework Directive zur Erstellung von Umweltqualitätsnormen für spezifische Schadstoffe u.a. Triclosan vor (Aldous et al, 2013.). In Kanada wurde ein Bewertungsbericht für Triclosan durch Health Canada und Environment Canada erstellt (Health & Environment Canada, 2012). Des Weiteren liegt ein Bericht zum Verbleib von Triclosan in der Umwelt von US Environmental Protection Agency vor (US EPA, 2008a) und es wurden Daten aus der ECHA Datenbank (ECHA, 2013) für die QS Ableitung genutzt.

28.2 Verhalten in der Umwelt

Die chlororganische, phenolische Verbindung ist nur mäßig persistent und nur gering bioakkumulierend, aber aufgrund der Toxizität gegenüber aquatischen Organismen in der EU als „umweltgefährlich“ eingestuft. Durch den Einsatz von Triclosan in verschiedenen Produkten wie z.B. Hygieneprodukten erreicht Triclosan letztlich die Kläranlage. Hier wird Triclosan zu großen Teilen (95%) mit dem Klärschlamm entfernt, verlässt die Kläranlage in geringen Konzentrationen aber auch über den Kläranlagenauslauf in das Oberflächengewässer (Health & Environment Canada, 2012). Triclosan gelangt somit sowohl über den Abwasserpfad in Oberflächengewässer als auch mit dem Klärschlamm im Rahmen der Düngung von landwirtschaftlichen Flächen auf Boden und kann dann ins Gewässer gelangen (Health & Environment Canada, 2012).

Triclosan ist in wässrigem Milieu bei pH Werten von 4, 7 und 9 und einer Temperatur von 50 °C stabil (US EPA, 2008a). Ebenso ist Triclosan gegenüber starken Säuren und Basen stabil (Singer et al., 2002). Die Henry Konstante von Triclosan liegt zwischen $1,5 \times 10^{-7}$ atm/(mol.m³) (US EPA, 2008b) und $4,99 \times 10^{-9}$ atm/(mol.m³) (US EPA, 2008b). Aufgrund der geringen Henry Konstante und einer geringen Wasserlöslichkeit von 1,7 - 17 mg.L⁻¹ ist das Potential einer Verflüchtigung aus Oberflächengewässern gering.

In Gewässern mit einem pH < 8.0 adsorbiert Triclosan basierend auf einem geschätzten K_{oc} von 9200 (berechnet aus einem log K_{ow} von 4,76) an Schwebstoffe und Sedimentpartikel. Auf Grundlage der berichteten Biokonzentrationsfaktoren für Triclosan ist eine signifikante Bioakkumulation im Nahrungsnetz zu erwarten. Der geschätzte Biokonzentrationsfaktor von 44 bis 4200 stützt diese Hypothese.

Triclosan ist unter aeroben Bedingungen nicht persistent in Luft, Wasser, Boden oder Sediment. Aquatische Metabolismusstudien unter aeroben Bedingungen führten zu einer Halbwertszeit beim Abbau (DT₅₀) zwischen 1,2 - 1,4 Tagen in Wasser und 57,3 - 60,3 Tagen in Sediment. Die berichteten Werte deuten auf einen raschen Abbau von Triclosan im wässrigen Kompartiment hin. Die in dieser Studie betrachtete biologische Abbaubarkeit von Triclosan belegt, dass, basierend auf den Kriterien der Richtlinien für Persistenzen und Bioakkumulation (DT₅₀ in Wasser ≥ 182 Tage), Triclosan nicht persistent in Wasser ist (Health & Environment Canada, 2012).

Triclosan hat einen pKa von 7,9 - 8,1 und wird leicht bei Umgebungs-pH ionisiert. Vorwiegend in seiner neutralen Form tritt Triclosan bei einem pH von 7,0, in seiner ionisierten Form bei 8,5 auf. Für organische Moleküle hat sich gezeigt, dass Lipidmembranen seltener passiert werden, wenn sie in ihrer ionisierten Form vorliegen. Dies steht im Einklang mit der hohen Bioakkumulation, die für aquatische Organismen gefunden wurde, die Triclosan bei einem pH unterhalb des pKa ausgesetzt waren. In Gewässern mit einem pH Wert über 8, in dem Triclosan vorwiegend in seiner ionisierten Form vorliegt, war die Bioakkumulation von Triclosan in aquatischen Organismen geringer (UK TAG, 2013).

28.3 Ableitung der Qualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Die Qualitätsnorm für den jährlichen Mittelwert (annual average) AA-QS_{freshwater, eco} für Süßwasser wurde als „kritische Qualitätsnorm“ für die Ableitung der Umweltqualitätsnormen bestimmt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 0,02 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QS _{water}	Relevante Studie für QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Desmodesmus subspicatus</i> / 96 h E _r C ₅₀ : 1,61 µg.L ⁻¹	10	0,16 µg.L ⁻¹
MAC _{saltwater, eco}	<i>Desmodesmus subspicatus</i> / 96 h E _r C ₅₀ : 1,61 µg.L ⁻¹	100	0,016 µg.L ⁻¹
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> / 72 h NOEC : 0,2 µg.L ⁻¹	10	0,02 µg.L ⁻¹
AA-QS _{saltwater, eco}		100	0,002 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, freshwater}	<i>Chironomus riparius</i> / 28 d NOEC : 100 000 µg.kg ⁻¹	50	2000 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{sediment, freshwater, EqP}	QS _{sediment, eco} : 2000 µg.kg ⁻¹ _{dw}	-	0,85 µg.L ⁻¹
QS _{sediment, saltwater}	<i>Chironomus riparius</i> / 28 d NOEC : 100 000 µg.kg ⁻¹	1000	100 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{biota, sec pols}	Maus / oral / 90 d / wiederholte Verabreichung LOAEL : 25 000 µg.kg ⁻¹ _{bw.d⁻¹} NOEC : 125 000 µg.kg ⁻¹ _{food}	30	4166 µg.kg ⁻¹ _{biota ww} 0,48 µg.L ⁻¹
QS _{biota, human, food}	RfD Wert 300 µg.kg ⁻¹ _{bw.d⁻¹}	-	18300 µg.kg ⁻¹ _{biota ww} 2,1 µg.L ⁻¹

28.4 MAC-QS Umweltqualitätsnorm

28.4.1 Binnen-/ Oberflächengewässer

Es wurde eine Bewertung zum Schutz der pelagischen Organismen durchgeführt. Für Arten aus mindestens drei Trophieebenen sind Kurzzeit-Toxizitätsdaten verfügbar. Das niedrigste akute Ergebnis ist die E_rC₅₀ von 0,53 µg.L⁻¹ für Algen (*Pseudokirchneriella subcapitata*). Der hierbei angegebene EC₅₀ bezieht sich auf die Biomasse. Im Rahmen der QS Ableitung sollen, falls vorhanden, Effektkonzentrationen genutzt werden, die sich auf die Wachstumsrate beziehen. Daher wurde für die QS Ableitung für Triclosan ein E_rC₅₀ von 1,61 µg.L⁻¹ aus einem Versuch mit *Desmodesmus subspicatus* über 96 h herangezogen (ECHA, 2013). Dieser Wert wurde mit einem Bewertungsfaktor von 10 für die MAC-QS_{freshwater, eco} Herleitung verwendet. Dieser Bewertungsfaktor wurde gewählt, da ein Grunddatensatz an Studien vorliegt und der spezifische Wirkmechanismus des Biozids Triclosan bekannt ist. Mit dem Bewertungsfaktor 10 ergibt sich ein Kurzzeit-Qualitätskriterium MAC-QS_{freshwater, eco} von 0,16 µg.L⁻¹.

28.4.2 Meeresumwelt

Zur Beurteilung der Wirkung auf Salzwasserorganismen lagen Kurzzeit-Toxizitätsdaten zu mindestens drei Arten aus drei Trophieebenen vor, die aber keine zusätzlichen taxonomischen Gruppen präsentieren. Somit wurde der Bewertungsfaktor 100 für die Ableitung von MAC-QS_{saltwater, eco} auf die E_rC₅₀ von 1,61 µg.L⁻¹ aus dem Versuch mit *Desmodesmus subspicatus* über 96 h angewendet. Daraus ergibt sich ein Umweltqualitätsstandard MAC-QS_{saltwater, eco} von 0,016 µg.L⁻¹.

28.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnorm

28.5.1 Binnen-/ Oberflächengewässer

Ergebnisse aus Studien zur chronischen Wirkung von Triclosan sind für Fische, Kleinkrebse, Insekten, Algen und Amphibien verfügbar. Weiterhin sind Informationen über Effekte von Triclosan auf die Lebensgemeinschaft eines künstlichen Fließgewässers (stream mesocosm) erhältlich (NOEC: 0,10 µg.L⁻¹). In den Einzelspezietests erwiesen sich die Algen (vertreten durch *Pseudokirchneriella subcapitata*) als die empfindlichste identifizierte Organismengruppe, bestätigt durch die niedrigsten akuten Daten. Das niedrigste belastbare Langzeittestergebnis für *Pseudokirchneriella subcapitata* ist die NOEC von 0,2 µg.L⁻¹. Dieser Wert wurde für die AA-QS Ableitung verwendet.

Da Langzeitergebnisse (NOECs) für drei trophische Ebenen (Fisch, Invertebraten und Algen) verfügbar sind, wurde ein Bewertungsfaktor von 10 angewandt. Die Algen wurden in den akuten Tests eindeutig als die empfindlichste taxonomische Gruppe identifiziert (um einen von Faktor von ca. 200 sensitiver als Fische und wirbellose Tiere), und es kann aufgrund des vermeintlichen spezifischen Wirktyps von Triclosan als Biozid davon ausgegangen werden, dass mit den Algen die sensitivste Organismengruppe in der Langzeittestung enthalten war. Bei Verwendung des Bewertungsfaktors von 10 ergibt sich ein AA-QS_{freshwater, eco} von 0,02 µg.L⁻¹.

Die NOEC von 0,1 µg.L⁻¹ aus der Fließgewässer Mesokosmos Studie (Nietch et al. 2013), aus der sich unter Verwendung eines Bewertungsfaktors von 5 eine AA-QS_{freshwater, eco} von 0,02 µg.L⁻¹ ableiten lässt, stützt zusätzlich die Ableitung auf Grundlage von Einzelspezietests.

28.5.2 Meeresumwelt

Für Salzwasserorganismen lagen lediglich Langzeitdaten aus Versuchen mit zwei Algenarten vor, die weniger sensitiv waren als die Süßwasser-algen. Es wurde der Bewertungsfaktor 100 auf die Algen-Süßwasser NOEC von 0,2 µg.L⁻¹ angewandt und eine AA-QS_{saltwater, eco} von 0,002 µg.L⁻¹ abgeleitet.

28.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

28.6.1 Binnen-/ Oberflächengewässer

Weiterhin wurde eine Bewertung zum Schutz der Sedimentorganismen durchgeführt.

Verschiedene Langzeit-Toxizitätsdaten lagen der Ableitung einer QS_{sediment, fw} zugrunde. Eine NOEC von 100 000 µg.kg⁻¹ TG ergab sich in einem Versuch mit *Chironomus riparius* über 28 Tage in dem das Sediment mit Triclosan versetzt wurde (Memmert, 2006). Zusätzlich lagen NOEC Werte aus Studien mit *Chironomus tentans* und *Hyalella azteca* vor, in denen die Organismen über 10 Tage über die Wasserphase mit Triclosan exponiert wurden (Dussault et al., 2008). Die NOEC lag bei 20 µg.L⁻¹ in dem Versuch mit *Chironomus tentans* und 5 µg.L⁻¹ in dem Versuch mit *Hyalella azteca*.

Auf Grundlage der chronischen Daten aus zwei verschiedenen trophischen Ebenen wurde ein Bewertungsfaktor von 50 für die AA-QS Ableitung verwendet. Zunächst wurde ein QS auf Basis der Daten der Toxizität gegenüber Sedimentorganismen bei sedimentbürtiger Exposition bestimmt. Der NOEC lag hier bei 100 000 µg/kg⁻¹ TG, wodurch sich unter Anwendung des Bewertungsfaktors von 50 ein QS_{sediment, fw} von 2000 µg.kg⁻¹ TG ergibt. Daraus berechnet sich anhand der Gleichge-

wichtsverteilung (Gleichungen 6 - 8 aus EC, 2011) unter Berücksichtigung eines K_{oc} Wertes von 47000 L.kg^{-1} eine $QS_{\text{sediment, fw, EqP}}$ von $0,85 \text{ µg.L}^{-1}$.

Aufgrund der stärkeren Toxizität bei Exposition über die Wasserphase wurde ebenfalls eine AA- $QS_{\text{sediment, fw, EqP}}$ für diesen Expositionspfad bestimmt. Die Konzentration im Sediment und im Wasser wurden anhand der Gleichgewichtsverteilung nach EC (2011) ineinander umgerechnet. Mit der NOEC von 5 µg.L^{-1} aus einem 10 Tage Test (Dussault et al., 2008) mit *Hyalella azteca* und unter der Annahme eines K_{oc} von 47000 ergibt sich eine NOEC für die Triclosan-Wirkung in Sediment von $11\,758 \text{ µg.kg}^{-1} \text{ TG}$. Unter Anwendung des Bewertungsfaktors von 50 ergibt sich ein $QS_{\text{sediment, fw, EqP}}$ von $235 \text{ µg.kg}^{-1} \text{ TG}$.

Bezüglich der Gewässerkonzentration werden die Sedimentorganismen werden durch die niedrigere „kritische UQN“, die AA- $QS_{\text{freshwater, fw}}$ von $0,02 \text{ µg.L}^{-1}$, geschützt.

Für den Schutz benthischer Organismen wird der Qualitätsstandard $QS_{\text{sediment, fw}}$ von $2000 \text{ µg.kg}^{-1} \text{ TG}$ vorgeschlagen, der aus dem Test mit Sedimentexposition abgeleitet wurde, da dieser den Expositionspfad Sediment - Organismus direkt widerspiegelt.

28.6.2 Meeresumwelt

Zur Beurteilung der Wirkung auf Salzwasserorganismen wurde ebenfalls der Versuch mit *Chironomus riparius* genutzt. In diesem Fall wurde ein Bewertungsfaktor von 1000 verwendet, und es ergab sich eine AA-QS von 100 µg.kg^{-1} Trockenmasse Sediment.

28.7 Ableitung der Biota-Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Auch eine Biota-Bewertung war für Triclosan erforderlich, da die Gefahr einer Sekundärvergiftung für Tiere beim Fressen kontaminierter Beute zu erwarten ist. Die Biokonzentrationsfaktoren (BCF) für Fische weisen jedoch eine große Spannweite (2,7 bis 8700) und sind vom pH-Wert abhängig (Aldous et al., 2013). Es wurde ein $QS_{\text{biota, sec pois}}$ abgeleitet. Anhand der vorliegenden Studien mit Mäusen, Hamstern, Kaninchen, Hunden und Pavianen konnte gezeigt werden, dass Mäuse am sensitivsten auf Triclosan reagieren (NICNAS, 2009). In einer Studie über 13 Wochen wurde eine Toxizität bei Mäusen (hämatologische Parameter, Lebergewicht und Gesamtcholesterin) mit einem NOAEL von $25000 \text{ µg.kg}^{-1} \text{ dw}^{-1}$ bestimmt (NICNAS, 2009). Vögel reagierten weniger stark auf Triclosan. In einer 5-tägigen Studie, in der Wachteln Triclosan über Futter aufnahmen, ergab sich ein NOAEL von $179000 \text{ µg.kg}^{-1} \text{ bw.d}^{-1}$ für den Endpunkt Mortalität (NICNAS, 2009). Im Fall der Untersuchungen mit Vögeln lagen hierbei Werte für die beiden bevorzugt zu untersuchenden Arten *Anas platyrhynchos* und *Colinus virginianus* vor. Die Ergebnisse dieser Studien ergaben, dass Triclosan relativ gering toxisch auf Vögel wirkt.

Für die Ableitung des $QS_{\text{biota, sec pois}}$ wurde gemäß des Technical Guidance for Deriving Environmental Quality Standards (EC, 2011) der LOAEL von $25000 \text{ µg.kg}^{-1} \text{ bw}$ einer Studie mit Mäusen (NICNAS, 2009), die über 90 Tage oral mit Triclosan exponiert wurden, mit einem Faktor 5 in eine NOEC von $125000 \text{ µg.kg}^{-1} \text{ food}$ umgewandelt und im Anschluss mit einem Bewertungsfaktor von 30 für eine 90 Tage Studie in einen $QS_{\text{biota, sec pois}}$ von $4167 \text{ µg.kg}^{-1} \text{ biota}$ umgerechnet.

Unter Verwendung eines maximalen BCF von 8700 kann eine korrespondierende Wasserkonzentration $QS_{\text{biota, wasser}}$ von $0,48 \text{ µg.L}^{-1}$ berechnet werden.

28.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Für Triclosan wurden keine gentoxischen, karzinogenen oder reproduktionstoxischen Eigenschaften festgestellt.

Triclosan weist ein nicht vernachlässigbares Akkumulationspotential in der Nahrungskette auf. Bei einem gemessenen BCF von 44 - 8700 ergibt sich eine klare Tendenz zur Bioakkumulation. Zusätzlich führt die Substanz bei Kontakt zu Irritationen der Haut und der Augen (klassifiziert als H315 und H319). Es wurde eine Bewertung für die menschliche Gesundheit durchgeführt und ein vorläufiger $QS_{\text{biota, hh food}}$ basierend auf dem verfügbaren RfD-Wert von $300 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{\text{bw}}^{-1}$ (US EPA, 2008 a) abgeleitet. Die $QS_{\text{biota, hh food}}$ lag in diesem Fall bei $18\,300 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{\text{biota ww}}$.

Unter Verwendung eines maximalen BCF von 8700 kann eine korrespondierende Wasserkonzentration $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $2,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ berechnet werden.

28.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt
Pflanzenschutzmittelrichtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt als aktive Substanz in Anhang I der Richtlinie 91/414/EEC Nicht aufgeführt
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt in Anhang I der Richtlinie
PBT Substanzen	Keine PBT Substanz, erfüllt B und T Kriterien (nach Verordnung (EU) No. 253/2011, Anhang XIII (EU, 2011)) <u>Persistenz</u> DT ₅₀ (Wasser) = 1,2 - 1,4 d (P Schwellenwert > 40 d) DT ₅₀ (Sediment) = 53,7 - 137 d (P Schwellenwert > 120 d, Sed.) DT ₅₀ (Wasser-Sediment) = 39,8 - 194 d (Schwellenwert Wasser > 40 d P; > 60 d vP) <u>Bioakkumulation</u> BCF = 2,7 - 8700 (Schwellenwert > 2000) Log K _{ow} = 4,66 - 5,19 (Schwellenwert > 4,5) <u>Toxizität</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen (Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1A oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008). Es gibt keine Hinweise der chronischen Toxizität oder Spezifische Zielorgan-Toxizität nach wiederholte Exposition (STOT RE Kategorie 1 oder 2). Kriterien für „T Substanz“ erfüllt: Aquatische NOEC Werte < $10 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
Substanzen mit besonderer Besorgnis (SVHC)	Nein

(1907/2006/EC)	
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokriner Disruptor	Es gibt Anzeichen auf endokrine Wirkung. Vermutung, dass Triclosan Schilddrüsenhormone von Amphibien beeinflusst

28.10 Existierende UQN Vorschläge

Es liegen keine abgeleiteten EU- oder WHO-Trinkwasser-Standards vor; es gilt der bevorzugte Regulierungsstandard von $0,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

AA-EQS (Aquatic, Freshwater)	$0,02 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	LAWA expert group (LAWA, 2010)
AA-EQS (Aquatic, Freshwater)	$0,02 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Switzerland (Oekotoxzentrum, 2013)
AA-EQS (Aquatic, Freshwater)	$0,05 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Klima-OG Forurensningsdirektoratet (2013)
AA-EQS (Aquatic, Freshwater)	$0,058 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	NICNAS (2009)
AA-EQS (Aquatic, Freshwater)	$0,10 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Aldous et al. (2013)
AA-EQS (Coastal waters)	$0,002 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	LAWA expert group (LAWA, 2010)
AA-EQS (Coastal waters)	$0,005 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Klima-OG Forurensningsdirektoratet (2013)
AA-EQS (Saltwater)	$0,10 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Aldous et al. (2013)
AA-EQS (Sediment, Freshwater)	$24 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$	Klima-OG Forurensningsdirektoratet (2013)
AA-EQS (Sediment, Coastal waters)	$2,4 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$	Klima-OG Forurensningsdirektoratet (2013)
MAC-EQS (Aquatic, Freshwater)	$0,02 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Switzerland (Oekotoxzentrum, 2013)
MAC-EQS (Aquatic, Freshwater)	$0,28 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Aldous et al. (2013)
MAC-EQS (Aquatic, Freshwater)	$0,53 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	NICNAS (2009)
MAC-EQS (Aquatic, Freshwater)	$0,5 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Klima-OG Forurensningsdirektoratet (2013)
MAC-EQS (Coastal waters)	$0,05 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Klima-OG Forurensningsdirektoratet (2013)
MAC-EQS (Saltwater)	$0,28 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$	Aldous et al. (2013)
MAC-EQS (Sediment, Freshwater)	$24 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$	Klima-OG Forurensningsdirektoratet (2013)
MAC-EQS (Sediment, Coastal waters)	$240 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$	Klima-OG Forurensningsdirektoratet (2013)
EQS _{sediment_FW} (Benthic, Freshwater)	$2000 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{dw}$	LAWA expert group (LAWA, 2010)
EQS _{sediment_SW} (Benthic, Saltwater)	$1000 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{dw}$	LAWA expert group (LAWA, 2010)
EQS _{biota_Top Predators} (Secondary Poisoning)	$4000 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$	LAWA expert group (LAWA, 2010)

EQS (Secondary Poisoning)	3,8 µg.L⁻¹ 33000 mg.kg⁻¹	Aldous et al. (2013)
EQS_{biota_Human} (fish consumption)	18300 µg.kg⁻¹	LAWA expert group (LAWA, 2010)
EQS_{biota_Human} (fish consumption)	15000 µg.kg⁻¹	Klima-OG Forurensningsdirektoratet (2013)
EQS_{dw} (Drinking water regulation)	0,1 µg.L⁻¹	LAWA expert group (LAWA, 2010)

29 Uran Zusammenfassung

29.1 Chemische Identität

Name	URAN
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	Uranium
CAS Name	Uranium
Stoffgruppe	Metalle
CAS Nummer	7440-61-1
EC Nummer	231-170-6
Summenformel	-
Strukturformel	-
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	238,03

29.1.1 Auftretende Uranverbindungen

Name	CAS / EU Nummer	Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	Wasserlöslichkeit	Quelle
U(IV) Verbindungen				
UO ₂	CAS: 1244-57-6 EU: 215-700-3	270,03	Unlöslich	CRC, 1982
UF ₄	CAS: 10049-14-6 EU: 233-170-1	314,02	Geringe Löslichkeit	IUCLID, 2000
U(VI) Verbindungen				
UO ₂ (NO ₃) ₂	CAS: 10102-06-4 EU: 233-266-3	394,04	550 g.L ⁻¹	HVBG, 2002
UO ₂ (NO ₃) ₂ x 6 H ₂ O	CAS: 13520-83-7 EU: 233-266-3	502,13	550 g.L ⁻¹	HVBG, 2002
UO ₂ SO ₄	CAS: 1314-64-3	366,09	205 g.L ⁻¹	CRC, 1982
UO ₂ SO ₄ x 3 H ₂ O		420,14	205 g.L ⁻¹	CRC, 1982
UO ₂ (CH ₃ CO ₂) ₂	CAS: 541-09-3	388,12	77 g.L ⁻¹	HVBG, 2002

$\text{UO}_2(\text{CH}_3\text{CO}_2)_2 \times 2 \text{H}_2\text{O}$	CAS: 6159-44-0	424,15	76,94 g.L ⁻¹	CRC, 1982
UF_6	CAS: 7783-81-5	352,02	65,6% Zersetzung	HVBG, 2002 IUCLID, 2000

Daten in der Tabelle wurden LAWA (2010) entnommen.

Uran (CAS 7440-61-1, Atommasse 238,03 g.mol⁻¹) ist ein natürlich vorkommendes radioaktives Metall, das in drei isotopen Formen auftritt (CCME, 2011). In seiner elementaren Form kommt Uran in der Natur nicht vor. Stattdessen findet sich Uran als eine wichtige Komponente von etwa 155 Mineralien wie z.B. Oxiden, Phosphaten, Carbonaten, Silikaten und Molybdaten (Clark et al., 1997). Uran wird primär als Brennstoff in Kernkraftwerken eingesetzt. Einige Uranverbindungen werden ebenso als Katalysatoren und Farbpigmente verwendet (Berlin & Rudell, 1986). Uran wird häufig auch im militärischen Bereich genutzt (WHO, 2012). Uran ist in Form des Oxids und Mischoxids mit Plutonium derzeit der wichtigste Kernbrennstoff. Abgereichertes Uran wird hauptsächlich als Legierung mit 2-8 Gew-% Molybdän zur Verbesserung der Korrosionsbeständigkeit als Material hoher Dichte in der Luftfahrtindustrie, als Strahlenschutzmaterial, als Zusatz zu Katalysatoren oder Stahlsorten (Ferrouuran) verwendet (LAWA, 2010). Die weltweite Produktion und Nachfrage belief sich auf rund 18.915 t (1975), 42.790 t (1980), 34.575 t (1985) und 29.910 t (1990). Die Produktion und Reaktornachfrage von 1995 und 2000 wurde auf 38.250 t und 37.060 t geschätzt (Gerhartz, 2014).

Es wurden bereits detaillierte Bewertungen für Uran im Rahmen der LAWA-Expertengruppe "Stoffe" (LAWA, 2010), des kanadischen Umweltministerium (CCME, 2011) des dänischen Umweltministeriums (Miljøministeriet, 2011) und von Hund-Rinke et al. (2012) angefertigt. Trinkwasser-Standards im Rahmen der WHO-Richtlinien für Trinkwasserqualität (WHO, 2004) und der Deutschen Trinkwasserrichtlinie (TrinkwV, 2001) lagen ebenfalls zugrunde.

29.2 Verhalten in der Umwelt

Auch wenn Uran in vier verschiedenen Oxidationsstufen zu finden ist, so ist das Uranylion UO_2^{2+} mit Uran in der Oxidationsstufe +6 (d.h. VI) die häufigste in oxischen Wasser auftretende Form (Choppin und Stout 1989, Clark et al., 1997). Vergleichbar mit anderen Metallen kann Uran in verschiedenen physikalisch-chemischen Formen im Wasser vorkommen. Diese Formen schließen sowohl das freie Uranylion als auch komplexierte Formen wie $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$ ein. Als natürlich vorkommendes Element bedeutet das Vorkommen von Uran in Gewässern nicht zwingend eine Verschmutzung des Gewässers. Als Ergebnis geochemischer Prozesse, kann es in einige Bereichen zu natürlich entstandenen, erhöhten Konzentrationen an Uran in den zugrunde liegenden Böden und Gewässern kommen (CCME, 2011). Vergleichbar mit vielen anderen Metallen ist das Umweltverhalten von Uran abhängig von den abiotischen Faktoren wie pH-Wert, Härte, Alkalität und organischer Substanz. Diese Faktoren beeinflussen die Toxizität und Mobilität von Uran durch eine Veränderung der Spezierung oder der physikalisch-chemischen Eigenschaften von Uran in aquatischen Systemen (CCME, 2011). Für Uran gibt es Hinweise darauf, dass das freie Uranylion UO_2^{2+} die toxischste vorkommende Form darstellt, obwohl es ebenso Studien gibt, die daraufhin deuten, dass es Ausnahmen in Abhängigkeit des pH-Wertes gibt. (Fortin et al., 2004; Fournier et al., 2004, Gilbin et al., 2003). Der BCF für Uran liegt zwischen 0,0088 und 1033 und deutet auf eine mögliche Bioakkumulation hin (Labrot et al, 1999; Barilett et al, 2011). Dennoch muss dabei beachtet werden, dass die Ableitung eines BCF für Metalle und die darauf basierende Interpretation der Bioakkumulation für Metalle problematisch ist (McGeer et al., 2003).

Uran und seine Verbindungen sind mit H373 (Spezifische Zielorgan-Toxizität (wiederholte Exposition)) eingestuft. In Zusammenhang mit der sehr hohen Toxizität kann ein Risiko für Konsumenten aquatischer Biota somit nicht ausgeschlossen werden.

Zur Überprüfung der Plausibilität der UQN gegenüber vorhandener Hintergrundwerte wurden auch diese für Uran betrachtet. Es lagen sowohl einige gemessene Urankonzentrationen in Oberflächengewässern als auch in Bachsedimenten vor. Die gemessenen Hintergrundwerte in Oberflächengewässern lagen dabei zwischen $<0,002 - 21,4 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (FOREGS, 2005) und im Median bei $0,33 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (Birke, 2006). Sedimentkonzentrationen wurden zwischen $<1,0 - 98 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ (FOREGS, 2005) und im Median von $2,52 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ (Birke et al., 2006) ermittelt.

29.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Sechswertiges Uran ist die Uranverbindung, die vor allem in Süßwassersystemen vorhanden ist, und die vermeintlich am toxischsten auf aquatische Organismen wirkt. Auf Basis dieser Uranform wurden die bestimmt.

Allerdings wurden die MAC- und AA-QS Ableitung folgendermaßen aufgeteilt und betrachtet:

- "alle Daten" unter Berücksichtigung aller verfügbaren Daten zur akuten und chronischen Toxizität für Uran,
- "Uran" für den Fall, dass das verwendete Testsubstanz nicht klar definiert war
- "vier" und "sechs wertige" Uranverbindungen getrennt.

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen, die AA-QS_{biota, sec pois} von $0,02 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ für Uran (VI) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Laut Leitfaden Nr. 27 (EC, 2011) wurde der Gesamt AA-QS für Süßwasser von $0,02 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ mit dem 90. Perzentil- ($2,43 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) und dem Median-Hintergrundwert ($0,33 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) für Oberflächengewässer der FOREGS Datenbank (2005) verglichen. Da die Hintergrundwerte höher sind als die Gesamt AA-QS, sollte bevorzugt der „Added Risk Approach (ARA)“ verwendet werden (EC, 2011).

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie zur QN-Ableitung	Bewertungsfaktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	<i>Chlorella sp.</i> / 72 h / UO ₂ ²⁺ ErC ₅₀ : 33,9 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (geometric mean, n=4, geringe Wasserhärte)	10	3,4 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
MAC _{saltwaterwater, eco}		100	0,34 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
AA-QS _{freshwater, eco}	<i>Ceriodaphnia dubia</i> / 7 d / UO ₂ (NO ₃) ₂ NOEC : 4,35 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (geometric mean, n=3, geringe Wasserhärte)	10	0,44 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
AA-QS _{saltwaterwater, eco}		100	0,04 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$
QS _{sediment, freshwater}	AA-QS _{freshwater, eco} : 0,44 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ dw	EqP	1937 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ dw
QS _{biota, sec pois}	Kaninchen / 91 d / oral LOAEL : 50 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{bw d}^{-1}$ NOEC : 670 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$	90	7,4 $\mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}\text{biota ww}$ 0,02 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ Gesamt-UQN

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie zur QN-Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
QS _{biota, hh food}	TDI : 0,6 µg.kg ⁻¹ bw d ⁻¹	-	36,5 µg.kg ⁻¹ biota ww 0,07 µg.L ⁻¹

29.4 MAC-QS Umweltqualitätsnormen

29.4.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Die Ableitung der MAC-QS_{freshwater, eco} wurde anhand der vorhandenen Toxizitätsdaten akuter, aquatischer Studien durchgeführt. Die Ableitung der Umweltqualitätsnorm wurde jeweils einzeln für die verschiedenen Uranverbindungen vorgenommen. Für Uran zeigt sich, dass das Ion UO₂²⁺ die toxischste Form des Uran darstellt, auch wenn Studien daraufhin deuten, dass es Ausnahmen bei unterschiedlichen Umgebungs-pH-Werten gibt (Fortin et al., 2004, Fournier et al., 2004, Gilbin et al., 2003).

Die Ableitung erfolgte auf Grundlage der Daten zur akuten Toxizität von sechswertigem Uran auf Cyanobakterien, Algen, Makrophyte, Kleinkrebse, Fische, Insekten und Hydrozoa. Die niedrigste LC₅₀ aus Fischstudien lag bei 1670 µg.L⁻¹ aus einer Studie mit dem Sonnenbarsch (*Lepomis macrochirus*).

Im Bereich der Invertebraten (wirbellose Tiere) wurde ein EC₅₀ von 60 µg.L⁻¹ in einem Versuch mit *Ceriodaphnia dubia* ermittelt. Die Algen reagierten am sensitivsten auf sechswertiges Uran. In einer Studie mit *Chlorella sp.* ergab sich ein E_rC₅₀ von 33,9 µg.L⁻¹. In dieser Studie wurde der Einfluss der Wasserhärte auf die Toxizität untersucht. Der angegebene E_rC₅₀ von 33,9 µg.L⁻¹ stellt hierbei das Geomittel aus 3 ermittelten EC₅₀ Werten dar.

Es lagen in diesem Fall Daten zu Akutstudien von mindestens drei trophischen Ebenen vor. Allerdings ist der spezifische Wirktyp von Uran nicht bekannt. Aufgrund der umfangreichen Datensammlung zur akuten Toxizität von Uran (7 taxonomische Gruppen, 18 Werte), der die sensitivsten Organismusgruppen umfassen sollte, wurde dennoch ein Bewertungsfaktor von 10 gewählt. Hieraus ergibt sich eine MAC-QS_{freshwater, eco} für Uranverbindungen von 3,4 µg.L⁻¹.

Mit den Daten des sechswertigen Urans wurde zusätzlich eine SSD durchgeführt. Aufgrund dessen, dass nur Toxizitätsdaten für 7 taxonomische Gruppen statt 8 wie im TGD (EC, 2011) gefordert, wurde die SSD allerdings nur als Zusatzinformation angefertigt. Es ergab sich hierbei ein HC₅ von 66,1 µg.L⁻¹. Unter Berücksichtigung eines Bewertungsfaktors von 10 ergibt sich hieraus eine MAC-QS_{freshwater, eco} von 6,6 µg.L⁻¹, die den Wert, der über den Bewertungsfaktor bestimmt wurde, bestätigt.

Die höchste Toxizität wurde mit sechswertigem Uran festgestellt. Deshalb wurde die mit Uran (VI) abgeleitete MAC-QS_{freshwater, eco} als repräsentativ für alle Uranverbindungen in der aquatischen Umwelt angesehen.

29.4.2 Meeresumwelt

Für die Ableitung der MAC-QS_{saltwater, eco} lagen keine Daten aus Akutstudien vor. Aufgrund der geringen Anzahl an Akutstudien mit Salzwasserorganismen wurde die Ableitung der MAC-QS_{saltwater, eco} auf Basis des Datensatzes aus Akutstudien von Süßwasserorganismen durchgeführt, der schon für die Ableitung der MAC-QS_{freshwater, eco} verwendet wurde. Die Alge *Chlorella sp.* reagierten am sensitivsten auf sechswertiges Uran. Es ergab sich eine mittlere E_rC₅₀ von 33,9

$\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. In Anlehnung an das TGD für EQS (EC, 2011) wurde für die Ableitung ein Bewertungsfaktor von 100 für die E_rC_{50} für *Ceriodaphnia dubia*) verwendet. Hieraus ergab sich ein $\text{MAC-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,34 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

29.5 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnorm

29.5.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Für die Ableitung der $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ lagen Daten zur Wirkung von Uran in Langzeitstudien für Cyanobakterien, Algen, Makrophyten, Kleinkrebse, Anneliden, Fische und Hydrozoen vor. Die niedrigste E_rC_{10} für die Algen ergab sich für *Chlorella sp.* in weichem Wasser mit $9,2 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (geometrisches Mittel aus vier E_rC_{50} Werten). Bei den Fischen reagierte die Regenbogenforelle (*Oncorhynchus mykiss*) in einem Versuch über 30 Tage bei einer Wasserhärte von 6 am sensitivsten auf sechswertiges Uran. Es ergab sich eine NOEC von $260 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Im Bereich der Invertebraten lagen dem geometrischen NOEC-Mittelwert von $4,35 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ drei NOEC Werte für *Ceriodaphnia dubia* zugrunde. Ebenso wurde der Effekt von sechswertigem Uran auf die Hydrozoe *Hydra viridissima* untersucht. Es ergab sich eine NOEC von $112 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (geometrisches Mittel aus vier E_rC_{50} Werten).

Aufgrund der umfangreichen Datenlage wurde für die Ableitung der $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ ein Bewertungsfaktor von 10 verwendet. Die NOEC von $4,35 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ aus den Versuchen mit der Daphnie *Ceriodaphnia dubia* wurde für die Ableitung der $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ genommen.

Hieraus ergibt sich eine $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ für Uranverbindungen von $0,44 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Aufgrund dessen, dass das sechswertige Uran am toxischsten ist wurde die abgeleitete $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ ebenso als Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten ausgewählt.

Mit den Daten des sechswertigen Urans wurde zusätzlich eine SSD durchgeführt. Aufgrund dessen, dass nur Toxizitätsdaten für 7 taxonomische Gruppen statt 8 wie im TGD (EC, 2011) gefordert, wurde die SSD allerdings nur als Zusatzinformation angefertigt. Es ergab sich hierbei ein HC_5 von $3,0 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. Unter Berücksichtigung eines Bewertungsfaktors von 10 ergibt sich hieraus eine $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ von $0,3 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$, die den Wert, der über den Bewertungsfaktor bestimmt wurde, bestätigt.

Die höchste Toxizität wurde mit sechswertigem Uran festgestellt. Deshalb wurde die mit Uran (VI) abgeleitete $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ als repräsentativ für alle Uranverbindungen in der aquatischen Umwelt angesehen.

29.5.2 Meeresumwelt

Für die Ableitung der $\text{AA-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ lagen keine Daten aus chronischen Studien vor. Aufgrund der geringen Anzahl an chronischen Studien mit Salzwasserorganismen wurde die Ableitung der $\text{AA-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ auf Basis des Datensatzes aus Studien von Süßwasserorganismen durchgeführt, der schon für die Ableitung der $\text{AA-QS}_{\text{freshwater, eco}}$ verwendet wurde.

Die Daphnien Spezies *Ceriodaphnia dubia* reagierte am sensitivsten auf sechswertiges Uran mit einer NOEC von $4,35 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. In Anlehnung an das TGD für EQS (EC, 2011) wurde ein Bewertungsfaktor von 100 auf die NOEC für *Ceriodaphnia dubia* für die Ableitung angewandt. Hieraus ergab sich ein $\text{AA-QS}_{\text{saltwater, eco}}$ von $0,044 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

29.6 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Die Ableitung des QS_{sediment} wurde auf der Grundlage der Gleichgewichtsverteilungsmethode (Equilibrium partitioning) durchgeführt, da die Datenlage chronischer und akuter Studien mit Sedimentorganismen nicht ausreichend für eine Ableitung der UQN auf Basis von Bewertungsfaktoren war (EC, 2011).

Die Gesamtumweltqualitätsnorm für Süßwasserorganismen ist die relevante Umweltqualitätsnorm und die QS_{sediment} wurde auf Basis der Gesamtumweltqualitätsnorm abgeleitet. Uran und seine Verbindungen adsorbieren an Schwebstoffe (K_D zwischen 2000 und 4200 $L \cdot kg^{-1}$) und Sedimente (K_D 4400 $L \cdot kg^{-1}$). Nach dem Bewertungsansatz des RIVM (van de Plassche, 1992) kann die Umweltqualitätsnormen unter der Annahme einer Gleichgewichtsverteilung im Sediment aus der entsprechenden Konzentration in der Wasserphase und dem Verteilungskoeffizienten Wasser / Sediment berechnet werden.

Die $QS_{\text{freshwater, eco}}$ für Uranverbindungen liegt bei 0,44 $\mu g \cdot L^{-1}$. Nach dem Ansatz des TGD (EC, 2011) ergibt sich für Uran bei einer $QS_{\text{freshwater, eco}}$ von 0,44 $\mu g \cdot L^{-1}$ und einem geschätzten K_D von 4400 $L \cdot kg^{-1}$ eine zulässige Sedimentkonzentration an Uran von 1931 $\mu g \cdot kg^{-1}$ TG (711 $\mu g \cdot kg^{-1}_{\text{ww}}$). Die QS_{sediment} für Uranverbindungen liegt somit bei 1937 $\mu g \cdot kg^{-1}$ TG.

Die Übertragung der EQS von der Wasserphase in eine entsprechende Konzentration an Schwebstoffe ist aufgrund der Schwankungen der K_D -Werte schwierig und somit immer mit einem hohen Maß an Unsicherheiten verbunden.

29.7 Ableitung der Biota- Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Der BCF für Uran liegt zwischen 0,0088 und 1033 (Labrot et al, 1999; Barillet et al, 2011). Im Fall von Uran muss beachtet werden, dass die Ableitung einer BCF für Metalle und die darauf basierende Interpretation der Bioakkumulation problematisch ist, da die BCF Werte von Metallen konzentrationsabhängig sind. Auf Grundlage dieser Tatsache sind die BCF-Werte von Metallen mit großer Vorsicht zu betrachten.

Die $QS_{\text{biota, sec pois}}$ wurde mit einem BCF von 495 (Mittelwert der 20 d BCF aus Barillet et al. 2011) durchgeführt, um ein „worst case“ Szenario darzustellen. Basierend auf einer Studie von Nielsen et al. (2008) wurde die $QS_{\text{biota, sec pois}}$ abgeleitet. In dieser Studie über 91 Tage mit Kaninchen ergab sich ein LOAEL von 0,05 $mg \cdot kg^{-1}_{\text{bw}} \cdot d^{-1}$. Dieser Wert wurde zunächst in die NOAEL (Umrechnungsfaktor von 3) und anschließend in die NOEC (Umrechnungsfaktor von 33.3) gemäß des TGD für UQN (EC, 2011) umgewandelt. Es ergab sich hierbei eine NOEC von 0,67 $mg \cdot kg^{-1}_{\text{food}}$. Auf die NOEC wurde ein Bewertungsfaktor von 90 (EC, 2011) angewandt, so dass sich eine $QS_{\text{biota, sec pois}}$ von 7,4 $\mu g \cdot kg^{-1}_{\text{biota}}$ ergab.

Eine Umrechnung der $QS_{\text{biota, sec pois}}$ auf die Konzentration in der Wasserphase ist aufgrund der großen Unsicherheiten bezogen auf die BCF Werte kritisch zu betrachten. In der vorliegenden Arbeit ergibt sich unter der Annahme eines BCFs von 495 als „worst case“ eine $QS_{\text{biota, sec pois}}$ bezogen auf die Wasserphase von 0,015 $\mu g \cdot L^{-1}$ (gerundet 0,02 $\mu g \cdot L^{-1}$).

Dieser Wert von 0,02 $\mu g \cdot L^{-1}$ ist niedriger als die Qualitätsnorm AA- $QS_{\text{freshwater, eco}}$ von 0,44 $\mu g \cdot L^{-1}$ des vorliegenden Berichts und wird deshalb als „Gesamt-UQN“ Wert für Süßwasser vorgeschlagen.

29.8 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Uran erfüllt die Kriterien für die Einstufung als krebserzeugend (Kategorie 2) nach CLP (2008) und erfüllt damit die Anforderungen zur Ableitung eines Biota Standards für den Menschen, der sich ausschließlich durch die potentiell gefährlichen Eigenschaften der Chemikalie begründet (EC, 2011).

Bei BCF Werten zwischen 0,0088 und 1033 (Labrot et al, 1999; Barillet et al, 2011) kann eine Auswirkung auf den Menschen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten nicht ausgeschlossen werden. Es muss allerdings beachtet werden, dass die Ableitung eines BCF für Metalle und die darauf basierende Interpretation der Bioakkumulation für Metalle problematisch ist, da die Herleitung des BCF für organische Schadstoffe entwickelt wurde. Auf Grundlage dieser Tatsache sind die BCF-Werte von Metallen, die konzentrationsabhängig sind, mit großer Vorsicht zu betrachten.

Die Ableitung eines $QS_{\text{biota, hh food}}$ wurde auf Basis des TDI als „worst case“ Szenario unter der Annahme eines BCF von 495 (Mittelwert der 20 d BCF aus Barillet et al. 2011) vorgenommen.

Der Ableitung lag ein TDI von $0,6 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}_{\text{bw}}\cdot\text{d}^{-1}$ zugrunde (WHO, 2012). Die Berechnung der $QS_{\text{biota, hh food}}$ erfolgte nach dem TGD für UQN (EC, 2011). Für eine Person mit 70 kg, die täglich 0,115 kg Fischereiprodukte zu sich nimmt, ergibt sich hieraus ein $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $36,5 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ Fischereiprodukt.

Unter der Annahme eines „worst case“ Szenarios wurde der BCF-Mittelwert von 495 (Barillet et al, 2011) für die Berechnung der entsprechenden Konzentration in der Wasserphase verwendet und ein $QS_{\text{biota, hh food}}$ von $0,07 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ errechnet.

29.9 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Nicht aufgeführt in Anhang I
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC) EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt in Anhang I
Biozide (98/8/EC)	Nicht aufgeführt in Anhang I
PBT Substanzen	Keine PBT Substanz, erfüllt T Kriterium (nach Verordnung (EU) No. 253/2011, Anhang XIII (EU, 2011)) <u>Persistenz</u> DT ₅₀ (Wasser): keine Daten DT ₅₀ (Wasser/Sediment): keine Daten <u>Bioakkumulation</u> BCF = 0,0088 – 495 (Schwellenwert > 2000) Uran und seine Verbindungen sind mit R33 (Gefahr kumulativer Wirkung) gekennzeichnet (LAWA, 2010). <u>Toxizität</u> Substanz erfüllt nicht die Kriterien für die Klassifikation als karzinogen

	(Kategorie 1A oder 1B), mutagen (Kategorie 1A oder 1B), oder reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B oder 2) gemäß CLP (2008). Kriterium für „T Substanz“ erfüllt: Uran ist klassifiziert als akut toxisch Kategorie 2 (Inhalation H330 und Oral H300). Zusätzlich zeigt sich bei wiederholter Exposition eine spezifische Zielorgantoxizität der Kategorie 2 (H373). Es gibt Hinweise darauf, dass Uran karzinogen (Kategorie 2) und mutagen (Kategorie 3A) ist. Toxizitätskriterium erfüllt: Aquatische NOEC-Wert bezogen auf Uran < 10 µg.L ⁻¹ .
Substanz mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein
POPs (Stockholm Konvention)	Nein
Endokrine Wirkung	Nein

29.10 Existierende UQN-Vorschläge

QS _{freshwater, eco}		0,07 µg.L ⁻¹	Dänemark	Miljøministeriet, 2011
QS _{saltwater, eco}		0,07 µg.L ⁻¹		
MAC _{freshwater, eco}		2,3 µg.L ⁻¹		
MAC _{saltwater, eco}		2,3 µg.L ⁻¹		
QS _{biota, sec pols}		7,4 µg.kg ⁻¹ food (0,015 µg.L ⁻¹)		
QS _{biota, hh food}		10 µg.kg ⁻¹ biota		
Oberflächen-gewässer	Zielwert	3 µg.L ⁻¹	Deutschland	Anonymus, 2003
Oberflächen-gewässer, Grundwasser	Maximal erlaubte Zugabe	1 µg.L ⁻¹	Niederlande	Van de Plassche et al., 1997
Oberflächen-gewässer, Grundwasser	Zielwert	0,01 µg.L ⁻¹	Niederlande	Van de Plassche et al., 1997
Grundwasser	Grundwasser-kriterium	21 µg.L ⁻¹	USA	Anonymus, 2002
Bewässerung	Richtlinie	10 µg.L ⁻¹	Kanada	CCME, 2007
Bewässerung	Richtlinie	10 µg.L ⁻¹	Australien	Environmental Protection Agency, 2002
Aquatische Lebensgemein-	Kurzzeit Exposition,	33 µg.L ⁻¹	Kanada	CCME, 2011

schaft	Richtlinie			
Aquatische Lebensgemeinschaft	Langzeit Exposition, Richtlinie	15 µg.L⁻¹	Kanada	CCME, 2011
Aquatische Lebensgemeinschaft	Vorübergehendes Qualitätsziel Ontario	5 µg.L⁻¹	Kanada	Ontario, 1999
Aquatische Lebensgemeinschaft	Monitoring Jahresdurchschnitt	1 µg.L⁻¹	Deutschland	LAWA, 2010
Trinkwasser	Richtlinie	10 µg.L⁻¹	Deutschland	TrinkwV (2011)
Trinkwasser	Richtlinie	15 µg.L⁻¹	WHO	WHO, 2004
Trinkwasser	Richtlinie	30 µg.L⁻¹	WHO	WHO, 2012

30 Zink Zusammenfassung

30.1 Chemische Identität

Name	Zink
Chemische Bezeichnung (IUPAC)	Zink (min.)
CAS Name	Zink
Chemische Klasse	Metall
CAS Nummer	7440-66-6
EC Nummer	231-175-3
Summenformel	Zn
Strukturformel	-
Molekulare Masse (g.mol ⁻¹)	65,38

Zink ist ein relativ häufiges Element und kommt in einer durchschnittlichen Konzentration von 76 mg.kg⁻¹ in der Erdkruste vor. In Böden findet man im allgemeinen Gehalte zwischen 50 und 100 mg.kg⁻¹. In Süßwasser sind die Hintergrundkonzentrationen meist zwischen 3 und 12 µg.L⁻¹ (Gesamtzink), in Sedimenten zwischen 70 und 90 mg.kg⁻¹. Natürliche Konzentrationen in Küstengewässern sind zwischen 0,5 und 1 µg.L⁻¹ berichtet. Die gelöste Hintergrundkonzentration im atlantischen Ozean ist mit 0,1±0,4 µg.L⁻¹ angegeben (European Union, 2010).

In der EU werden jährlich über zwei Millionen Tonnen Zink verwendet. Davon werden 38,8% zum Galvanisieren genutzt, 25,5% für die Messingproduktion, 12,4% für Gusslegierungen, 11,8 % für Zinkblech und Draht und 2,9% für Zinkpuder (European Union, 2010).

Zink ist ein essentielles Spurenelement für sämtliche Organismen.

30.2 Verhalten in der Umwelt

Zink ist ubiquitär und für sämtliche Organismen essentiell. Die Bioverfügbarkeit von Zink und seinen Verbindungen in Gewässern wird durch physiko-chemische Parameter (gelöster organischer Kohlenstoff, Calcium-Konzentration, pH-Wert) bestimmt. Im Süßwasserkompartiment ist eine Einschätzung der Bioverfügbarkeit mittels Biotic Ligand Model (BLM) möglich. BLM berücksichtigt die geringere Bioverfügbarkeit und die damit reduzierte Toxizität von komplex gebundenem Zink.

Zink und seine Verbindungen sind nicht flüchtig. Der Bioabbau ist für Metalle nicht relevant.

30.3 Ableitung der Umweltqualitätsnormen für den Schutz pelagischer Arten

Zum Schutz aquatischer Organismen nach WRRL, Anhang 5 WFD (2000/60/EC) wurde die niedrigste der Qualitätsnormen (AA-QS_{freshwater, eco} 10,9 µg.L⁻¹) als 'Gesamt' UQN vorgeschlagen. Es ist zu prüfen, ob zum Schutz des Rohwassers für die Trinkwassergewinnung ein separater Wert festzulegen ist.

Vorläufige QN _{water}	Relevante Studie für QN Ableitung	Bewertungs-faktor	Vorläufige QN
MAC _{freshwater, eco}	'generische' HC5 von 10,9 µg.L ⁻¹ bioverfügbares Zn (UK Environment Agency, 2010)	ACR = 3	33 µg.L ⁻¹ bioverfügbares Zn
MAC _{saltwater, eco}	HC5 = 6,1 µg.L ⁻¹	AF = 2 ACR = 3	9,0 µg.L ⁻¹ gelöstes Zn
AA-QS _{freshwater, eco}	'generische' HC5 von 10,9 µg.L ⁻¹ bioverfügbares Zn (UK Environment Agency, 2010)	1	10,9 µg.L ⁻¹ bioverfügbares Zn
AA-QS _{saltwater, eco}	HC5 = 6,1 µg.L ⁻¹	2	3,0 µg.L ⁻¹ gelöstes Zn
QS _{sediment, freshwater}	<i>Hyalella azteca</i> 6 w NOEC = 488000 µg.kg ⁻¹ _{dw}	10	49000 µg.kg ⁻¹ _{dw}
QS _{sediment, saltwater}	-	-	Keine Daten
QS _{biota, sec pols}	-	-	Nicht erforderlich
QS _{biota, hh food}	-	-	Nicht erforderlich

ACR = acute chronic ratio

Der MAC-QS_{freshwater} kann aus dem AA-EQS_{freshwater} als akut/chronisch Extrapolation berechnet werden. Mit dem AA-QS_{water} von 10,9 µg.L⁻¹ (UK Environment Agency 2010) und einem Verhältnis der akuten zu chronischen Tests von 3 (ACR) wird ein extrapoliertes MAC-QS_{water} von 33 µg.L⁻¹ bioverfügbares Zn erhalten.

Die Anwendung eines ACR von 3 auf den vorgeschlagenen AA-EQS_{saltwater, eco} von 3,0 µg.L⁻¹ (Bodar, 2007) ergibt einen extrapolierten MAC-QS_{saltwater, eco} von 9,0 µg.L⁻¹.

1.20 AA-QS_{water} Umweltqualitätsnorm

1.20.1 Binnen- / Oberflächengewässer

Daten zur chronischen Toxizität von Zink gegenüber Süßwasserorganismen liegen in ausreichender Qualität für 25 Spezies aus acht taxonomischen Gruppen vor: Algen, Amphibien, Kleinkrebse, Fische, Insekten, Mollusken, Rädertiere und Schwämme. Spezies-spezifische NOECs wurden nach Normalisierung hinsichtlich der physiko-chemischen Wasserparameter, die eine hohe Bioverfügbarkeit von Zink begünstigen (0,52 mg.L⁻¹ gelöster organischer Kohlenstoff, mittlere Ca Konzentration von 1,6 mg.L⁻¹ und mittlerer pH von 6,29) in einer SSD verwendet. Dabei wurde eine

‘generische’ HC5 von $10,9 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ bioverfügbares Zn berechnet, die 95% der sensitiven Regionen schützt (UK Environment Agency, 2010). Die Quantität der Daten, die taxonomische Diversität und die Berücksichtigung der Bioverfügbarkeit sowie entsprechende Daten aus Freiland und Mesokosmen zeigen, dass ein Bewertungsfaktor >1 nicht benötigt wird. Damit ist der vorgeschlagene AA-QS_{freshwater} $10,9 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

1.20.2 Meeresumwelt

Daten zur chronischen Toxizität von Zink gegenüber marinen Spezies liegen in ausreichender Qualität für sechs taxonomische Gruppen vor: Algen, Anneliden, Hohltiere, Kleinkrebse, Stachelhäuter und Mollusken. Bodar (2007) nutzte 28 Spezies-spezifische NOECs um eine HC5 von $6,1 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ gelöstes Zink in Salzwasser zu berechnen. Weil chronische Daten für marine Fische fehlen, diese aber anhand der akuten Toxizitätsdaten als wenig sensitiv eingeschätzt werden können, wird ein Bewertungsfaktor von 2 als ausreichend angesehen für die Ableitung des AA-QS_{saltwater} von $3,0 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$.

1.21 Ableitung von QS_{sediment} zum Schutz der benthischen Organismen

Der niedrigste chronische NOEC für die benthische Spezies *Hyallolella azteca* ($488000 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG)) und ein Bewertungsfaktor von 10 resultiert für Süßwasser in einem QS_{sediment} von $49000 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG). Dieser Wert liegt jedoch im Bereich der geogenen Hintergrundkonzentration. In Deutschland wurde für unbelastete Bachsedimente ein Median von $93200 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ (TG) ermittelt (Birke et al., 2006).

Weiterhin ist zu klären ob der vorgeschlagene AA-QS_{freshwater, eco} von $10,9 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ ausreichend protektiv für benthische Spezies ist oder ob zusätzlich ein EQS für Sediment und/oder Schwebstoffe benötigt wird.

1.22 Ableitung der Biota-Qualitätsnorm zum Schutz vor einer sekundären Vergiftung der Organismen höherer Trophiestufen

Bioakkumulation und Anreicherung entlang von Nahrungsketten ist für Zink nicht relevant. Ein QS_{biota, sec pois} wurde nicht abgeleitet.

1.23 Schutz vor gesundheitsschädlichen Auswirkungen durch den Verzehr von kontaminierten Fischereiprodukten

Gemäß dem TGD für UQN (EC, 2011) wurde keine Bewertung für Rückstände in aquatischen Biota im Hinblick auf die menschliche Gesundheit durchgeführt, da für Zink keine genotoxischen, karzinogenen oder reproduktionstoxischen Eigenschaften festgestellt wurden. Ein QS_{hh, biota food} wurde nicht abgeleitet.

30.4 Existierende Bewertungen und regulatorische Informationen

Anhang III UQN Richtlinie (2008/105/EC)	Nicht aufgeführt			
Altstoffverordnung (793/93/EC)	Anhang 1 listet Zink und einige seiner Verbindungen			
	Name	Formel	EU	CAS
	Zink	Zn	231-175-3	7440-66-6
	Zinkoxid	OZn	215-222-5	1314-13-2
	Zinkchlorid	Cl ₂ Zn	231-592-0	7646-85-7
	Zinkbromid	Br ₂ Zn	231-718-4	7699-45-8
	Zinksulfat	H ₂ O ₄ S.Zn	231-793-3	7733-02-0
	Zinkchromat	CrH ₂ O ₄ .Zn	236-878-9	13530-65-9
	Trizinkbis(orthophosphat)	H ₃ O ₄ P.3/2Zn	231-944-3	7779-90-0
	Naphthalinsäuren, Zinksalze		234-409-2	12001-85-3
	Zinkdistearat	C ₁₈ H ₃₆ O ₂ .½Zn	209-151-9	557-05-01
	Triammoniumpentachlorzinkat(3-)	Cl ₅ Zn.3H ₄ N	238-688-1	14639-98-6
Fritte, Chemikalien		266-047-6	65997-18-4	
Pflanzenschutzmittel Richtlinie (91/414/EEC)	Anhang 1 listet Zink und einige seiner Verbindungen			
	Nummer	Name, ID Nummer	IUPAC Name	
	54	Propineb CAS No 12071-83-9 (monomer), 9016-72-2 (homopolymer) CIPAC No: 177	Polymerisches Zink 1,2-Propylenbis(dithiocarbamat)	
	74	Ziram CAS No 137-30-4 CIPAC No 31	Zinkbis(dimethyldithiocarbamat)	
	115	Mancozeb CAS No 8018-01-7 (ehem. 8065-67-5) CIPAC No 34	Mangan ethylenbis (dithiocarbamat) Polymerkomplex mit Zinksalz	
	115	Metiram CAS No 9006-42-2 CIPAC No 478	Zinkammoniat ethylenbis (dithiocarbamat) – poly [ethylenbis(thiuramdisulfid)]	
319	Zinkphosphid CAS No 1314-84-7 CIPAC No 69	Trizinkdiphosphid		
EC Richtlinie 1107/2009	Nicht aufgeführt			
Biozide (98/8/EC)	Anhang 1 listet Zink und einige seiner Verbindungen			
PBT Substanzen	Nicht gekennzeichnet als PBT Substanz (gemäß Verordnung (EU) No. 253/2011 Anhang XIII (European Union, 2011))			
Stoffe mit besonderer Besorgnis (1907/2006/EC)	Nein			
POPs (Stockholm Konvention)	Nein			

Endokrine Wirkung	Nicht belegt, basierend auf den verfügbaren Informationen
-------------------	---

30.5 Existierende UQN Vorschläge für Zink

PNEC aquatic für gelöstes Zink in Süßwasser	7,8 µg.L ⁻¹	European Union, 2010
AA-UQN-Rhein für Süßwasser	7,8 µg.L ⁻¹	IKSR, 2009
AA-EQS für Süßwasser	10,9 µg.L ⁻¹	UK Environment Agency, 2010
AA-EQS für Meerwasser	3 µg.L ⁻¹	Bodar, 2007
AA-UQN-Rhein für Meerwasser	3 µg.L ⁻¹	IKSR, 2009
MAC-EQS für Süßwasser	23,4 µg.L ⁻¹	European Union, 2010
MAC-EQS für Süßwasser	33 µg.L ⁻¹	UK Environment Agency, 2010
Zielwert für SPM (Oberflächenwasser)	400 mg.kg ⁻¹	Anonymous, 2003
AA-UQN für SPM (Oberflächenwasser)	800 mg.kg ⁻¹	OGewV, 2011

31 Literatur

EC (2011). Common implementation strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC). Technical Report - 2011 - 055. Guidance Document No. 27. Technical Guidance for Deriving Environmental Quality Standards. European Communities, 2011.

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

Quellenangaben in den Zusammenfassungen der UQN-Ableitungen sind in den jeweiligen Datenblättern der Substanzen zu finden. Alle Datenblätter sind im Abschlussbericht (ca. 11 MB) enthalten, der über folgenden Link erhältlich ist:

<http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24195>

Die Datenblätter können jedoch auch einzeln abgerufen werden (s.u.).

Stoffname	CAS-Nr.	Titel mit Link zur Quelle und Download
2,4-D	94-75-7	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD 2,4 D ACID http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24235
Arsen	7440-38-2	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD ARSEN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24345
Bezafibrat	41859-67-0	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD BEZAFIBRATE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24265
Carbamazepin	298-46-4	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD CARBAMAZEPINE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24221
Carbendazim	10605-21-7	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD CARBENDAZIM http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24234
Chloressigsäure	79-11-8	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD CHLOROACETIC ACID http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24233
Chrom	7440-47-3	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD CHROMIUM http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24347
Dibutylzinn-Kation	14488-53-0	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD DIBUTYL TIN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24260
Dimethoat	60-51-5	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD DIMETHODATE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24232
Dimoxystrobin	149961-52-4	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD DIMOXYSTROBIN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24231
Epichlorhydrin	106-89-8	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD EPICHLORHYDRIN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24239
Erythromycin	114-07-8	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD ERYTHROMYCIN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24269
Flufenacet	142459-58-3	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD FLUFENACET http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24355
Flurtamone	96525-23-4	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD FLURTAMONE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24238
Imidacloprid	138261-41-3	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD IMIDACLOPRID http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24228
Kupfer	7440-50-8	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD COPPER http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24356
Metoprolol	37350-58-6	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD METOPROLOL http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24268
Monobutylzinnkation	78763-54-9	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD MONOBUTYL TIN CATION http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24357
Monolinuron	1746-81-2	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD MONOLINURON http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24230

Stoffname	CAS-Nr.	Titel mit Link zur Quelle und Download
Nicosulfuron	111991-09-4	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD NICOSULFURON http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24229
Omethoat	1113-02-6	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD OMETHOATE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24227
Phosphorsäuretriphenylester	115-86-6	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD TRIPHENYLPHOSPHATE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24358
Phoxim	14816-18-3	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD PHOXIM http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24359
Roxythromycin	80214-83-1	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD ROXITHROMYCIN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24360
Sulcotrion	99105-77-8	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD SULCOTRIONE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24222
Sulfamethoxazol	723-46-6	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD SULFAMETHOXAZOLE http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24270
Tetrabutylzinn	1461-25-2	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD TETRABUTYLZIN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24362
Triclosan	3380-34-5	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD TRICLOSAN http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24267
Uran	7440-61-1	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD URANIUM http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24363
Zink	7440-66-6	EQS DATASHEET: ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARD ZINC http://webetox.uba.de/webETOX/public/basics/literatur.do?id=24266