

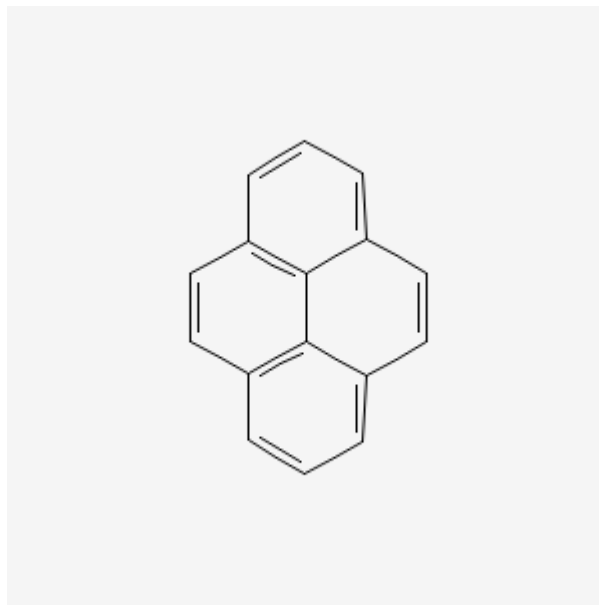
Stoffdatenblatt

Pyren

(129-00-0)

Stand: 17.03.2010

Erstellt von: AL-Luhnstedt



1 Substanz

Name:	Pyren
EG-Name:	Pyren
IUPAC-Name:	Pyren
CAS-Nummer:	129-00-0
EG-Nummer:	204-927-3
ETOX-Nummer:	1946
Molgewicht:	202,25 g/mol
EG Richtlinie 67/548/EWG Annex I Index:	---
Summenformel:	C ₁₆ H ₁₀
Stoffgruppe:	Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe

2 Vorschlag für eine Umweltqualitätsnorm

2.1 Schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm (UQN)

Schutzgut	JD-UQN	ZHK-UQN	Anmerkung
Binnenoberflächengewässer (Flüsse und Seen)	0,0023 µg/L	0,023 µg/L	Vorläufiger Wert
Sonstige Oberflächengewässer (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer)	0,0023 µg/L	0,023 µg/L	Vorläufiger Wert

JD: Jahresdurchschnitt; ZHK: zulässige Höchstkonzentration

2.2 Spezifische Umweltqualitätsnorm (UQN)

Schutzgut	UQN	Anmerkung
Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser)	JD-UQN: 0,0023 µg/L ZHK-UQN: 0,023 µg/L	Siehe 8.1
Aquatische Lebensgemeinschaften (Küsten- und Übergangsgewässer)	JD-UQN: 0,0023 µg/L ZHK-UQN: 0,023 µg/L	Siehe 8.1
Benthische Lebensgemeinschaften (Süßwasser)	UQN _{sediment_FW} : 2,8/ mg/kg TS	Siehe 8.2
Benthische Lebensgemeinschaften (Salzwasser)	UQN _{sediment_SW} : 1,4 mg/kg TS	Siehe 8.2
Secondary poisoning	UQN _{biota.Top Predators} : 12,5 mg/kg	Siehe 8.3
Fischkonsum	UQN _{biota.Human} : 1,8 mg/kg	Siehe 8.4
Trinkwasserversorgung	UQN _{dw} : 0,1 µg/L	Siehe 8.5

3 Allgemeine Stoffinformationen

3.1 Klassifikation und Kennzeichnung

R-Satz und Kennzeichnung / GHS	Quelle
N; R50/53	ECHA [1]
---	http://www.ghs-konverter.de

3.2 Verfügbare Qualitätsanforderungen für Oberflächengewässer

Land	Status	Schutzgut	Bezeichnung	Wert	Bemerkung	Quelle
Canada	Environmental quality guideline	Aquat. Lebensgemeinschaften Süßwasser	GL	0,025 µg/L		ETOX [2]
USA	Preventive Action Limit for water quality	Grundwasser	PAL	50 µg/L		Wisconsin [3]
USA	Enforcement standard for water quality	Grundwasser	ES	250 µg/L		Wisconsin [3]
USA	National recommended water quality criteria for priority toxic pollutants	Menschl. Konsum von Wasser und aquat. Organismen	WQC	830 µg/L		US EPA [4]
USA	National recommended water quality criteria for priority toxic pollutants	Menschl. Konsum von aquat. Organismen	WQC	4000 µg/L		US EPA [4]

3.3 Wirkungsweise und Verwendung

Wirkweise: unspezifisch toxisch, photosensibilisierend [5]; ACHTUNG: Pyren ist phototoxisch!

Verwendung: Bestandteil von Erdöl und anderen fossilen Brennstoffen, verarbeitet z.B. in Schwarzdecken; Petroleumprodukten [5]

Stoffrechtliche Regelungen:

WGK: 2 [6]

Karzinogenität: Gruppe 3 (nicht klassifizierbar) [7]

PAK unterliegen dem POPs-UN/ECE Protokoll und somit der Verpflichtung der jährlichen Reduzierung.

4 Physikalisch-chemische Stoffeigenschaften

Eigenschaft		Quelle
Wasserlöslichkeit	0,105 - 0,150 mg/L	IFREMER [7]
	0,135 mg/L	Gestis [6] PhysProp-db [8]
	0,136 mg/L	[9]
	0,18 mg/L (berechnet)	SPARC [10]
	0,225 mg/L (berechnet)	EPISuite [8]
Dichte	1,271 g/cm ³	Gestis [6]
	1,21 g/cm ³	Merck [11]
	1,11 g/cm ³ (berechnet)	SPARC [10]
Dampfdruck	0,2 - 4,9 mPa	IFREMER [7]
	4.4x10 ⁻⁴ Pa	ECHA [1]
	4,50E-06 mm Hg	PhysProp-db [8]
	10E-7,54 atm (berechnet)	SPARC [10]
Henry-Konstante	0,9 - 2,0 (Pa m ³ mol ⁻¹)	IFREMER [7]
	1,19E-05 atm/(mol/m ³)	PhysProp-db [8]
	3,21E-05 atm/(mol/m ³) (berechnet)	SPARC [10]
	8,30E-06 atm/(mol/m ³) (berechnet)	EPISuite [8]

5 Verhalten und Verbleib in der Umwelt

Eigenschaft		Quelle
Biotischer und abiotischer Abbau		
	vP	ECHA [12]
Persistenz in Süßwasser	1-10 Jahre	INERIS [13]
Hydrolytische Stabilität (DT50)	---	
Photostabilität (DT50)	---	
Leicht biologisch abbaubar (ja/nein)	nein (berechnet)	EPISuite [8]
Metabolite	---	
Sorptionsverhalten		
log Kow	4,80 - 5,20	IFREMER [7]
	4,88	PhysProp-db [8]
	4,93 (berechnet)	EPISuite [8]
	5	Gestis [6]
	5,13	[9]
	5,18 (berechnet)	SPARC [10]
	5,23	INERIS [13]

Eigenschaft		Quelle
Koc	log Koc: 4,22 - 5,65	IFREMER [7]
	log Koc: 4,77	ECHA [1]
Kd	---	
Bioakkumulation		
BCF (Biokonzentration)	vB Fische: 11300 Daphnien: 2700	ECHA [12]
	Fische: 50-53	EURAS db [14]
	Fische: 771 (berechnet)	EPISuite [8]
	Kleinkrebse: > 10000 Fische: 4800 Mollusken: > 10000 Würmer: > 10000	ECOTOX [15] (max. Werte)
	Fische: 53 - 11300 Muscheln: 1054 - 37000	ECHA [1] (nur reliability score 1 oder 2)
	Fische: 4810 (8d) Fische: 55000-98000 (28d)	INERIS [13]
	Fische: 772 (berechnet)	EPISuite [8]
BAF (Bioakkumulation)	Fische: 772 (berechnet)	EPISuite [8]
BMF (Biomagnifikation)	---	

6 Wirkungsdaten

6.1 Aquatische Organismen

Für Pyren liegen Testdaten zur akuten (teilweise) und chronischen Wirkung auf Fische, Kleinkrebse, Algen und Mollusken vor (Anhang 1). Die meisten dieser Daten wurden im Rahmen eines Annex XV Reports zur Bewertung von PAK-Gemischen als SVHC (Substances of Very High Concern) durch die ECHA evaluiert [12]. Die Validität der Fisch-Daten [16] kann mangels ausreichender Informationen nicht beurteilt werden.

Pyren ist akut sehr phototoxisch, deshalb treten akute Wirkungen unter UV-Licht-Einfluss bereits bei niedrigeren Konzentrationen als die chronischen Effekte auf. Unterschiede in der Sensitivität von Süßwasserorganismen und marinen Organismen sind nicht signifikant [1]. Fische sind im Vergleich zu anderen Organismengruppen weniger sensitiv [1].

Die niedrigsten chronischen Werte sind mit 1,2 µg/L für *Pseudokirchneriella subcapitata* (Süßwasser, 72h EC10) und 0,5 µg/L für *Crassostrea gigas* (Salzwasser, 48h NOEC) berichtet. Der niedrigste akute Wert zur Phototoxizität liegt mit 0,23 µg/L für *Mulinia lateralis* (48h LC50) noch tiefer.

6.2 Sedimentorganismen

Das Schutzgut „Sedimentorganismen“ ist nach Berechnungen aus den Niederlanden [1] auf der Basis von zwei NOECs/EC10-Werten für Süßwasser-Oligochaeten und einem EC10-Wert für marine Krustaceen versorgt. Der niedrigste Wert von 140 mg/kg TS liegt für marine Spezies (*Rhepoxynius abronius*, 10d LC10) vor.

6.3 Nahrungskette Fisch – Vogel oder Säugetier (Secondary poisoning)

Es gibt einerseits Hinweise, dass PAKs sich aufgrund relativ rascher Metabolisierung und Exkretion nicht entlang von Nahrungsketten anreichern [1]. Andererseits weisen Untersuchungen auf eine mögliche Anreicherung von Metaboliten entlang von Nahrungsketten hin [1]. Gesicherte Erkenntnisse dazu liegen aber bisher nicht vor, so dass eine abschließende Bewertung nicht möglich ist.

7 Wirkung auf die menschliche Gesundheit

Die Klassifizierung und Kennzeichnung von Pyren (R 50-53 (Sehr giftig für Wasserorganismen)) liefert keine Hinweise auf erhebliche Wirkungen auf die menschliche Gesundheit. Für Pyren gibt es eine chronische Referenzdosis (RfD) von 30 µg/kg/d auf der Basis einer Studie zur chronischen Toxizität bei Mäusen [17]. Der Trinkwassergrenzwert liegt bei 0,1 µg/L als Σ PAK.

8 Berechnung der Umweltqualitätsnormen

8.1 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz der aquatischen Organismen

Binnenoberflächengewässer (Flüsse und Seen) und sonstige Oberflächengewässer (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer): Bei der Ableitung der Jahresdurchschnitts-Umweltqualitätsnorm (JD-UQN) für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser und Salzwasser) sollten, bei Vorliegen genügender Daten, drei verschiedene Verfahren zum Einsatz kommen [18]:

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

Die Datenlage erlaubt für Pyren nur die Anwendung der deterministischen Methode. Bei der Ableitung der JD-UQN gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [18] ist aufgrund des Vorliegens von chronischen NOEC-/EC10-Werten, die mindestens drei trophische Ebenen darstellen, ein Sicherheitsfaktor von 10 auf den niedrigsten Wert anzuwenden. Bei Verwendung des niedrigsten NOEC-Werts von 0,5 µg/L für Austern (*Crassostrea gigas*) und eines Sicherheitsfaktors von 10 ergibt die Berechnung des JD-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser und Salzwasser) 0,05 µg/L Pyren. Weil es aber einen niedrigeren akuten Toxizitätswert gibt (48h LC50 von 0,23 µg/L für *Mulinia lateralis*) und Berücksichtigung der Wirkungen unter UV-Licht-Einfluss, wird dieser als Basis des Qualitätsnorm-Vorschlags empfohlen. Bei Anwendung des 48h LC50 von 0,23 µg/L für *Mulinia lateralis* und eines Sicherheitsfaktors von 100 ergibt die Berechnung des JD-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser und Salzwasser) 0,0023 µg/L Pyren.

Für die Ableitung des ZHK-UQN-Vorschlags wird der gleiche 48h LC50-Wert von 0,23 µg/L für *Mulinia lateralis* und ein Sicherheitsfaktors von 10 empfohlen. Damit ergibt die Berechnung des ZHK-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser und Salzwasser) 0,023 µg/L Pyren.

Eine Durchführung von längerfristigen Toxizitätstests für empfindliche Arten unter realitätsnahem UV-Licht-Einfluss wird empfohlen.

8.2 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz der Sedimentorganismen

Der niedrigste Wert zur Toxizität gegenüber Sedimentorganismen von 140 mg/kg TS für *Rhepoxynius abronius* (10d LC10) wird als Basis für die PNEC-Ableitung empfohlen [1]. Als Sicherheitsfaktor für Süßwasser ist 50 angezeigt, weil chronische Daten für zwei verschiedene trophische Levels vorliegen. Bei Anwendung des 10d LC10 von 140 mg/kg TS für *Rhepoxynius abronius* und eines Sicherheitsfaktors von 50 ergibt die Berechnung einen UQN-Vorschlag für Sedimentorganismen (Süßwasser) von 2,8 mg/kg TS Pyren. Unter Verwendung des log Koc von 4,77 und Annahme $foc = 0,1$ kann eine korrespondierende Wasserkonzentration von etwa 0,5 µg/L berechnet werden.

Für den Schutz von marinen Sedimentorganismen ist ein Sicherheitsfaktor von 100 empfohlen. Bei Verwendung des gleichen Toxizitätswerts (10d LC10 von 140 mg/kg TS für *Rhepoxynius abronius*) ergibt die Berechnung einen UQN-Vorschlag für Sedimentorganismen (Salzwasser) von 1,4 mg/kg TS Pyren. Unter Verwendung des log Koc von 4,77 und Annahme $foc = 0,1$ kann eine korrespondierende Wasserkonzentration von etwa 0,2 µg/L berechnet werden.

8.3 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz von „fischfressenden“ Tierarten

Es liegt eine Studie zur 90d Toxizität bei Mäusen (repeated-dose, oral), die einen LOAEL von 125 mg/kg/d und einen NOAEL von 75 mg/kg/d ergab. Gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [18] ist die folgende Formel zur Umrechnung anzuwenden:

$$NOEC_{oral} = NOAEL_{oral} \frac{bw}{DFI}$$

mit: NOEC_{oral} = No observed Effect Concentration [mg kg⁻¹ food]
NOAEL_{oral} = No Observed Adverse Effect Level [mg bw⁻¹ d⁻¹]
DFI = Daily Food Intake [g food d⁻¹]
bw = body weight [g bw]

Für den Term bw/DFI sind die folgenden Default-Werte angegeben [18]:

Tabelle der Umrechnungsfaktoren von NOAEL (dose) zu NOEC (concentration) für Toxizitätsstudien mit Säugetieren:

Species	Age/study	Conversion factor (bw/DFI)
Rat	28 d and 90 d	10
Rat	Two-generation study first mating	12.5
Rat	Two-generation study overall (females)	8.33
Mouse	28 d and 90 d	5.0
Dog	adult/all	40.0

Bei Verwendung des NOAEL-Werts von 75 mg/kg/d und dem für Mäuse angegebenen Umrechnungsfaktor von 5,0 ergibt sich eine NOEC von 375 mg/kg Futter.

Gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [18] kann die UQN_{biota.Top Predators} anhand der folgenden Formel berechnet werden:

$$QS_{biota.Top\ Predators} = \frac{TOX_{oral}}{AF_{oral}}$$

Für TOX_{oral} wird der NOEC-Wert von 375 mg/kg Futter eingesetzt, als AF_{oral} wird für Ableitungen auf der Basis von 90d Studien mit Säugetieren ein Faktor von 30 empfohlen. Damit ergibt sich für Pyren ein Vorschlag für eine $UQN_{biota.Top\ Predators}$ von 12,5 mg/kg. Für die $UQN_{biota.Top\ Predators}$ von 12,5 mg/kg kann mit einem minimal und maximal angegebenen BCF von 53 – 11300 L/kg eine korrespondierende Wasserkonzentration von etwa 1,1 bis 240 µg/L berechnet werden.

8.4 Berechnung der Umweltqualitätsnorm für den Fischkonsum

Gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [18] kann die $UQN_{biota.Human}$ anhand der folgenden Formel berechnet werden:

$$QS_{biota.Humans} = \frac{0.1 \cdot TL \cdot 70}{0.115}$$

Dabei wird angenommen, dass (1) 10% des relevanten Schwellenwertes (z.B. ADI) nicht überschritten werden sollen, (2) ein durchschnittlicher Erwachsener 70 kg wiegt und (3) 0,115 kg·d⁻¹ Fisch(erzeugnisse) verzehrt. Weil kein zuverlässiger ADI vorliegt, wird der RfD-Wert der US EPA von 30 µg/kg/d zum Schutz der menschlichen Gesundheit zur vorläufigen Verwendung empfohlen. Bei Verwendung des RfD von 30 µg/kg/d [17] ergibt sich ein $UQN_{biota.Human}$ -Vorschlag für den Fischkonsum von 1,8 mg/kg Pyren. Für die $UQN_{biota.Human}$ von 1800 µg/kg kann mit einem minimal und maximal angegebenen BCF von 53 – 11300 L/kg eine korrespondierende Wasserkonzentration von etwa 0,16 bis 34 µg/L berechnet werden.

8.5 Umweltqualitätsnorm zum Schutz der Trinkwasserversorgung und des Trinkwassers

Für Pyren liegen keine deutschen oder europäischen Richtwerte zum Schutz der Trinkwasserversorgung vor. Die EG-Richtlinie 98/83/EG (vormals 80/778/EWG) legt Höchstwerte für die Summe von vier PAK (0,1 µg/L für Σ Benzo-(b)-fluoranthen, Benzo-(k)-fluoranthen, Benzo-(g,h,i)-perylen, Indeno-(1,2,3-cd)-pyren) und 0,01 µg/L für Benzo-(a)-pyren fest. Zum Schutz der Oberflächengewässer, die der Entnahme von Wasser für den menschlichen Gebrauch dienen, wird die Übernahme des Grenzwerts für Σ PAK von 0,1 µg/L auch für Pyren zur vorläufigen Verwendung empfohlen. Bei Verwendung des Höchstwerts von 0,1 µg/L ergibt sich gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [18] ein UQN_{dw} -Vorschlag zum Schutz der Trinkwasserversorgung von 0,1 µg/L Pyren.

8.6 Schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm

Die Vorschläge für Umweltqualitätsnormen zum Schutz aquatischer Organismen in Binnenoberflächengewässern (Flüsse und Seen) und sonstigen Oberflächengewässern (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer) sind die niedrigsten abgeleiteten Werte und werden daher gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [18] auch als schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm empfohlen.

Ein Abgleich dieses Werts (0,0023 µg/L) mit der verfügbaren Umweltqualitätsnorm für Oberflächengewässer in Canada (Environmental quality guideline für aquatische Lebensgemeinschaften, Süßwasser) von 0,025 µg/L sollte erfolgen.

9. Literatur

- [1] The Netherlands (2008). ANNEX XV Transitional dossier: Coal Tar Pitch, High Temperature. echa.europa.eu/doc/trd.../pitch.../trd_netherlands_pitch.pdf.
- [2] UBA (2009). ETOX. <http://webetox.uba.de/webETOX/index.do>. Umweltbundesamt, Berlin, Germany.
- [3] Wisconsin Department of Natural Resources (2008). Chapter NR 140 Groundwater quality. <http://www.legis.state.wi.us/rsb/code/nr/nr140.pdf>.
- [4] U.S.EPA (2009). National Recommended Water Quality Criteria. <http://www.epa.gov/ost/criteria/wqctable/>.
- [5] Pelletier, M. V., Burgess, R. M., Ho, K. T., Kuhn, A., McKinney, R. A., Ryba, S. A. (1997). Phototoxicity of individual polycyclic aromatic hydrocarbons and petroleum to marine invertebrate larvae and juveniles. *Environ. Toxicol. Chem.*, 16, 2190-2199.
- [6] DGUV (2009). GESTIS Stoffdatenbank. <http://www.dguv.de/bgja/stoffdatenbank>.
- [7] IFREMER (2006). Report on the experimental results from literature of selected chemicals on the dose-response relationships. www.thresholds-eu.org/public.../D4.1.2_ifremer.pdf.
- [8] U.S.EPA (2009). EPI Suite v4.0. <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedi.htm>. U.S.Environmental Protection Agency, Washington, DC.
- [9] Gourlay, C., Tusseau-Vuillemin, M. H., Garric, J., Mouchel, J. M. (2003). Effect of dissolved organic matter of various origins and biodegradabilities on the bioaccumulation of polycyclic aromatic hydrocarbons in *Daphnia magna*. *Environ. Toxicol. Chem.*, 22, 1288-1294.
- [10] SPARC (2002). SPARC on-line calculator. <http://ibmlc2.chem.uga.edu/sparc/>.
- [11] Merck (2009). <http://www.chemdat.info>.
- [12] ECHA (2009). Annex XV Report: Proposal for identification of a substance as a CMR, PBT, vPvB or a substance of an equivalent level of concern: Coal tar pitch, high temperature. echa.europa.eu/.../svhc_axvrep_echa_pbt_cmr_ctpht_20090831.pdf.
- [13] INERIS (2004). Dossier: Pyren. <http://chimie.ineris.fr/en/lien/basededonnees/environnementale/recherche/dossiers.php?id=175>.
- [14] EURAS (2007). CEFIC LRI Goldstandard Database. <http://ambit.acad.bg/ambit/php/euras.php>.
- [15] U.S.EPA (2009). ECOTOX. <http://www.epa.gov/ecotox/>. U.S.Environmental Protection Agency, Washington, DC.
- [16] CHEMI (2009). Results of Eco-toxicity tests of chemicals conducted by Ministry of the Environment in Japan (- March 2009). <http://www.env.go.jp/chemi/sesaku/02e.pdf>. Japan.
- [17] ORNL (2005). Toxicity Summary for PYRENE. http://rais.ornl.gov/tox/profiles/pyrene_f_V1.shtml.
- [18] Anonymus (2009). Chemicals and the water framework directive: Draft technical guidance for deriving environmental quality standards.