

## **Abschlussbericht**

Länderfinanzierungsprogramm

Wasser und Boden 2007

**Projekt-Nr. O 05.07**

## **Entwicklung von Umweltqualitätsnormen für Schadstoffe des Anhanges VIII WRRL**

Analytisches Laboratorium für Umweltuntersuchungen und Auftragsforschung  
Dr. rer. nat. T. Herbst, Dipl. Chem. & Dr. rer. nat. M. Nendza, Toxikologin  
24816 Luhnstedt, Bahnhofstr. 1  
Tel. 04875 388, FAX 04875 585, Email AL-Luhnstedt@t-online.de

Luhnstedt, 17. März 2010

## Inhaltsübersicht

1.	Einleitung und Zielsetzung .....	3
2.	Auswahl von 15 relevanten Schadstoffen zur UQN-V Ableitung .....	4
2.1.	Recherchen zur aquatischen Toxizität in Datenbanken .....	4
2.2.	Anwendung von geeigneten QSAR Modellen .....	5
2.3.	Auswertung von vorläufigen Wirkwerten relativ zu Monitoring-Daten der LAWA .....	5
3.	Ableitung von UQN-Vorschlägen für 15 relevante Stoffe .....	10
3.1.	Zusammenfassung und Kommentierung der UQN-Vorschläge .....	12
3.2.	Vergleich der schutzgutübergreifenden UQN-Vorschläge mit den Monitoring- Daten der LAWA .....	17
4.	Literatur .....	20

### Anhang 1: Charakterisierung der Stoffidentitäten

### Anhang 2: Stoffdatenblätter für 15 relevante Stoffe

1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether (CAS-Nr. 59440-90-3)  
2,4-Dinitrophenol (CAS-Nr. 51-28-5)  
Aluminium Kation (CAS-Nr. 14903-36-7)  
Bensulfuron-methyl (CAS-Nr. 83055-99-6)  
beta-Sitosterol (CAS-Nr. 83-46-5)  
Bis(1,3-dichlor-2-propyl)ether (CAS-Nr. 59440-89-0)  
Bis(2,3-dichlor-1-propyl)ether (CAS-Nr. 7774-68-7)  
Clarithromycin (CAS-Nr. 81103-11-9)  
Dimethachlor (CAS-Nr. 50563-36-5)  
Flufenacet (CAS-Nr. 142459-58-3)  
Flurtamone (CAS-Nr. 96525-23-4)  
Monobutylzinn-Kation (CAS-Nr. 78763-54-9)  
PFOS (CAS-Nr. 1763-23-1)  
Pyren (CAS-Nr. 129-00-0)  
Triclosan (CAS-Nr. 3380-34-5)

## **1. Einleitung und Zielsetzung**

Die EU-Wasserrahmenrichtlinie 60/2000/EG (WRRL) verpflichtet die Mitgliedsstaaten zur Überprüfung des angestrebten guten Zustandes der Oberflächengewässer [1]. Aus den in Artikel 4 der WRRL festgelegten Umweltzielen ergibt sich die Forderung nach Qualitätsnormen für relevante Stoffe, die über die 33 prioritären Stoffe im Bereich der Wasserpolitik der EU hinausgeht. Ein nichterschöpfendes Verzeichnis der wichtigsten Schadstoffe enthält Anhang VIII der WRRL.

Nach Art. 2 der WRRL entspricht eine Umweltqualitätsnorm (UQN) derjenigen Konzentration eines bestimmten Schadstoffes oder einer bestimmten Schadstoffgruppe, die in Wasser, Sedimenten oder Biota aus Gründen des Gesundheits- und Umweltschutzes nicht überschritten werden darf (JD: Jahresdurchschnitt; ZHK: zulässige Höchstkonzentration). Bei der Ableitung von Umweltqualitätsnormen ist dem Grundsatz der Vorsorge Rechnung zu tragen auf der Basis einer wissenschaftlichen Bewertung des Risikos.

Ziel des Vorhabens war es, zunächst aus einer Auswahlliste von 37 Substanzen diejenigen 15 Schadstoffe auszuwählen, für die von einer Gewässerrelevanz im Hinblick auf mögliche Wirkungen relativ zu ihrer Exposition auszugehen ist. Anschließend wurden für diese 15 Schadstoffe UQN-Vorschläge entwickelt. Das methodische Vorgehen zur Entwicklung von Qualitätsnormen ist weitgehend in Anhang V Nr. 1.2.6 der WRRL [1] festgelegt und im Draft-Dokument 'Chemicals and the Water Framework Directive: Technical guidance for deriving environmental quality standards' präzisiert. Weitere Vorgaben zur Ableitung der Qualitätsnormen ergeben sich aus dem TGD zur Stoffbewertung [2] sowie der Vorgehensweise zur UQN-Ableitung für die 33 prioritären Stoffe der WRRL [3,4].

## **2. Auswahl von 15 relevanten Schadstoffen zur UQN-V Ableitung**

Vom Auftraggeber wurde eine Liste mit 35 Stoffen vorgegeben. Zwei weitere Stoffe (ID-Nr. 36 und 37) waren von der Bearbeitung zurückgestellt. Im Hinblick auf qualifizierte Recherchen zur aquatischen Toxizität in Datenbanken und die Anwendung von geeigneten QSAR Modellen, falls keine experimentellen Daten einfach auffindbar waren, waren zunächst die eindeutigen Stoffidentitäten festzustellen. Im Anhang 1 sind die Stoffidentitäten dokumentiert anhand von:

- ID-Nr.
- Name
- CAS-Nr.
- EINECS-Nr.
- ETOX-Nr.
- Bund/Länder Kennnummer
- Annex I-Nr.
- GSBL-Nr.
- MW (Molekulargewicht)
- Summenformel
- SMILES-Code

### **2.1. Recherchen zur aquatischen Toxizität in Datenbanken**

Für die 35 Schadstoffe der Auswahlliste wurde eine Recherche zur aquatischen Toxizität in Datenbanken durchgeführt. Abfragen der ökotoxikologischen Wirkungsdaten erfolgte für alle Kandidaten in:

- ETOX (<http://webetox.uba.de/webETOX/>),
- ECOTOX (<http://www.epa.gov/ecotox>),
- ESIS (<http://ecb.jrc.it/esis/>).

Für Pflanzenschutzmittel wurden auch spezielle Datenbanken, z.B. Pesticide Properties Database (<http://wizard.arsusda.gov/acsl/>), durchsucht. Vorliegende Wirkdaten aus der Datenbank ICS wurden vom UBA zur Verfügung gestellt. Zusätzlich wurde die Datenbank der OECD Toolbox [5] abgefragt und, wenn die Datenbanken nicht ergiebig waren, in begrenztem Umfang Fachliteratur recherchiert. Die jeweils niedrigsten gefundenen Wirkwerte wurden für die Stoffauswahl (Tabelle 1) verwendet. An dieser Stelle erfolgte keine explizite Qualitätskontrolle der recherchierten Daten zur aquatischen Toxizität.

## **2.2. Anwendung von geeigneten QSAR Modellen**

Zur Abschätzung von Wirkungswerten bei fehlenden Testdaten zur aquatischen Ökotoxizität bieten QSARs erhebliche Möglichkeiten [6]. Es wurden für die 35 Schadstoffe der Auswahlliste sowohl klassische QSARs zur aquatischen Toxizität aus EcoSAR [7] und PropertEst [8] als auch Read-across anhand der OECD QSAR Application Toolbox [5] angewandt. Für die Stoffe, für die auch experimentelle Daten zur aquatischen Toxizität vorliegen, zeigen die Schätzwerte eine gute Übereinstimmung innerhalb der gleichen Größenordnung. Konventionell wurden die QSAR-Abschätzungen nur zur Stoffauswahl (Tabelle 1) herangezogen, wenn keine experimentellen ökotoxikologischen Wirkungsdaten vorlagen.

Wenn QSAR-Abschätzungen bei der Ableitung eines UQN-Vorschlags eingesetzt wurden, ist die Vorgehensweise im jeweiligen Datenblatt ausführlich begründet.

## **2.3. Auswertung von vorläufigen Wirkwerten relativ zu Monitoring-Daten der LAWA**

Aus den recherchierten Daten zur aquatischen Toxizität und ergänzt durch entsprechende QSAR-Schätzwerte wurden mittels Sicherheitsfaktoren vorläufige akute und chronische Wirkwerte extrapoliert (Tabelle 1). Diese vorläufigen Wirkwerte stellen ausdrücklich **keine PNEC** (predicted no effect concentration) dar und dienen lediglich einem Ranking der potentiellen Schadstoffe für eine informierte Stoffauswahl. Weil die Datenrecherche bis hierher nicht notwendigerweise erschöpfend war und insbesondere weil noch keine explizite Qualitätskontrolle der recherchierten Daten zur aquatischen Toxizität erfolgte, können die vorläufigen Wirkwerte erheblich von den tatsächlichen PNEC-Werten, wie sie anschließend abgeleitet und in den Stoffdatenblättern dokumentiert wurden, abweichen.

Den vorläufigen Wirkwerten gegenübergestellt wurden Monitoringdaten der LAWA in Form der Jahresmittelwerte (max JMW) und der maximalen Werte (max Wert). Durch Quotientenbildung konnten damit Hinweise auf größere oder kleinere Wahrscheinlichkeiten für eventuelle akute (Q\_MAX) und/oder chronische (Q\_JD) Auswirkungen auf aquatische Ökosysteme erhalten werden.

Die Auswahl von 15 relevanten Schadstoffen zur UQN-V Ableitung erfolgte in Absprache mit der Projektbegleitung der LAWA und des UBA anhand der Quotienten: Es wurden jene 15 Stoffe ausgewählt, für die die höchsten Quotienten berechnet worden waren (gelb markiert).

Für einen Stoff (2,4-Dinitrophenol (CAS-Nr. 51-28-5)) ergab sich im Verlauf der Stoffdatenblatterstellung, dass die bei der Auswahl verwendeten Daten fehlerhaft waren (Übertragungsfehler von der Primärliteratur in die ETOX-Datenbank). Die Korrektur erhöhte den Wirkwert von 3,51 µg/L auf 3510 µg/L und damit reduzierte sich der zugehörige Quotient erheblich von 2,0 auf 0,002. In Tabelle 1 ist in diesem Fall nicht der bei der Auswahl verwendete Werte angegeben, sondern der nach der Überprüfung korrigierte Werte. Die Korrektur führte in diesem einen Fall dazu, dass auch für einen Stoff mit geringem Gefährdungspotential ein ausführliches Stoffdatenblatt erarbeitet und UQN-Vorschläge abgeleitet wurden. Änderungen der entsprechenden Werte, die im Laufe der Projektbearbeitung notwendig wurden, sind ggf. im Feld 'Basis/Quelle der geschätzten Wirkwerte' dokumentiert.

**Tabelle 1. Auswahl von 15 relevanten Schadstoffen zur UQN-V Ableitung anhand vorläufiger Wirkwerte relativ zu Monitoring-Daten der LAWA.**

Nr.	CAS-Nr.	Stoffname	LAWA Monitoring [ng/L]		geschätzter Wirkwert [ng/L]		Quotient		Basis/Quelle der geschätzten Wirkwerte
			max JMW	max Wert	chron.	akut	Q_JD	Q_MAX	
1	59440-90-3	1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether	197,5	620	200	2200	<b>0,99</b>	0,28	Kleinster QSAR-Schätzwert (2.200 µg/L) und AF 10000 → vorläufige PNEC: 0,2 µg/L
2	51-28-5	2,4-Dinitrophenol	70	640	35000	350000	<b>0,002</b>	<b>0,002</b>	Kleinster Wert aus ETOX (3510 µg/L) und AF 100 → vorläufige PNEC: 35 µg/L (BEACHTE: Der zunächst extrahierte Wirkwert war in ETOX um einen Faktor von 1000 zu niedrig angegeben (3,51 µg/L statt 3510 µg/L), sodass bei der Stoffauswahl ein <b>Quotient von 2,0</b> vorlag.)
3	50-78-2	Acetylsalicylsäure	91,9	360	168000	168000	0,001	0,002	Schowaneck [9]: PNEC: 168 µg/L
4	14903-36-7	Aluminium Kation	1631667	5580000	50	250	<b>33000</b>	<b>22000</b>	UK Environ. Agency: PNEC freshwater, longterm: 0,05 µg/L (unterhalb der natürlichen Hintergrundkonzentration, nicht messbar!)
5	117-96-4	Amidotrioesäure	44	290	800	8000	0,055	0,036	Kleinster QSAR-Schätzwert (8.000 µg/L) und AF 10000 → vorläufige PNEC: 0,8 µg/L
6	131860-33-8	Azoxistrobin	90	120	3800	---	0,024	---	Kleinster NOEC Wert aus ICS (38 µg/L) und AF 10 → vorläufige PNEC: 3,8 µg/L
7	71626-11-4	Benalaxyl	---	250	1000	5900	---	0,042	Kleinster NOEC Wert aus ICS (10 µg/L) und AF 10 → vorläufige PNEC: 1 µg/L
8	83055-99-6	Bensulfuron-methyl	60	560	1	---	<b>60</b>	---	Algen NOEC [10] (0,1 µg/L; Herbizid) und AF 100 → vorläufige PNEC: 0,001 µg/L
9	95-14-7	Benzotriazol	463	810	30000	---	0,015	---	EAWAG [11] : PNEC: 30 µg/L
10	83-46-5	beta-Sitosterol	---	12000	10	100	---	<b>120</b>	Schätzwert des OECD Toolbox Read-Across (100 µg/L) und AF 10000 → vorläufige PNEC: 0,01 µg/L
11	59440-89-0	Bis(1,3-dichlor-2-propyl)ether	82,5	320	40	400	<b>2,06</b>	<b>0,80</b>	Kleinster QSAR-Schätzwert (400 µg/L) und AF 10000 → vorläufige PNEC: 0,04 µg/L
12	7774-68-7	Bis(2,3-dichlor-1-propyl)ether	77,5	300	40	400	<b>1,94</b>	<b>0,75</b>	Kleinster QSAR-Schätzwert (400 µg/L) und AF 10000 → vorläufige PNEC: 0,04 µg/L

Nr.	CAS-Nr.	Stoffname	LAWA Monitoring [ng/L]		geschätzter Wirkwert [ng/L]		Quotient		Basis/Quelle der geschätzten Wirkwerte
			max JMW	max Wert	chron.	akut	Q_JD	Q_MAX	
13	111-91-1	Bis(2-chlorethoxy)methan	3000	900	155000	---	0,019	---	Kleinster Wert aus ETOX (155.000 µg/L) und AF 1000 → vorläufige PNEC: 155 µg/L
14	188425-85-6	Boscalid	150	690	12500	---	0,012	---	FR_C'ETPAU [12]: PNEC: 12,5 µg/L
15	81103-11-9	Clarithromycin	11,5	23	6	---	<b>1,92</b>	---	EAWAG [11]: PNEC: 0,006 µg/L
16	81777-89-1	Clomacron	---	3200	5000	10000	---	0,320	Kleinster NOEC Wert aus ICS (50 µg/L) und AF 10 → vorläufige PNEC: 5 µg/L; Kleinster EC50 aus ICS = 100 µg/l und AF 10: ZHK-UQN = 10 µg/L
17	50563-36-5	Dimethachlor	---	61000	240	350	---	<b>174</b>	Kleinster NOEC Wert aus ICS (2,4 µg/L) und AF 10 → vorläufige PNEC: 0,24µg/L; Kleinster EC50 aus ICS = 35 µg/l und AF 100: ZHK-UQN = 0,35 µg/L
18	142459-58-3	Flufenacet	500	500	40	---	<b>12,5</b>	---	Kleinster NOEC Wert aus ICS (0,4 µg/L) und AF 10 → vorläufige PNEC: 0,04µg/L
19	96525-23-4	Flurtamone	41	1300	130	1100	0,32	<b>1,18</b>	Kleinster NOEC Wert aus ICS (1,3 µg/L) und AF 10 → vorläufige PNEC: 0,13 µg/L; Kleinster Wert aus ICS (11µg/l) und AF 10 (abgemindert) → ZHK-UQN = 1,1 µg/L
20	85509-19-9	Flusilazol	36	57	330	4200	0,11	0,014	Kleinster NOEC Wert aus ICS (3,3 µg/L) und AF 10 → vorläufige PNEC: 0,33 µg/L; Kleinster LC50 aus ICS (420 µg/L) und AF 100 → ZHK-UQN = 4,2 µg/L
21	25812-30-0	Gemfibrozil (Blutfettsenker)	---	---	1500	---	---	---	Kleinster Wert aus AQUIRE (7.410 µ/L) und AF 500 → vorläufige PNEC: 15 µg/L
22	73334-07-3	Iopromid	400	500	10000000	---	< 0,0001	---	BLAC [13]: PNEC: >10.000 µg/L
23	72-33-3	Mestranol	---	---	7	---	---	---	Kleinster QSAR-Schätzwert (67 µg/L) und AF 10000 → vorläufige PNEC: 0,007 µg/L
24	74-89-5	Methylamin	---	---	1100	---	---	---	LAWA: Dimethylamin: alle Messungen < Bestimmungsgrenze; Kleinster Wert aus AQUIRE (110 µ/L) und AF 100 → vorläufige PNEC: 1,1 µg/L



Nr.	CAS-Nr.	Stoffname	LAWA Monitoring [ng/L]		geschätzter Wirkwert [ng/L]		Quotient		Basis/Quelle der geschätzten Wirkwerte
			max JMW	max Wert	chron.	akut	Q_JD	Q_MAX	
25	78763-54-9	Monobutylzinn-Kation	6,43	86	0,1	---	<b>64</b>	---	Für n-Butylzintrichorid (CAS 1118-46-3): Kleinster Wert aus AQUIRE (0,04 µ/L) und AF 500 → vorläufige PNEC: 0,0001 µg/L
26	94410-07-8	Monooctylzinn-Kation	23,2	60,5	---	---	---	---	Es liegen keine Daten zur aquatischen Toxizität vor; Testsubstanz nicht eindeutig definiert (→ Berechnungen nicht möglich)
27	335-67-1	PFOA	1	---	570000	---	< 0,0001	---	UBA: PNEC aquatic: 570 µg/L
28	1763-23-1	PFOS	3	---	2	---	<b>1,50</b>	---	UBA: UQN biota(Fisch): 6,1 µg/kg wwt (≡ 0,002 µg/L)
29	67747-09-5	Prochloraz	---	---	800	---	---	---	Kleinster NOEC Wert aus ICS (8 µg/L) und AF 10 → vorläufige PNEC: 0,8 µg/L
30	23950-58-5	Propylamid	---	39	8000	80000	---	< 0,0001	Kleinster Wert aus AQUIRE (83 µg/L) und AF 10 → vorläufige PNEC: 8
31	129-00-0	Pyren	66,3	550	24	---	<b>2,76</b>	---	INERIS [14]: PNEC: 0,024 µg/L
32	80214-83-1	Roxythromycin	49,6	100	4000	---	0,012	---	EAWAG [11]: PNEC: 4 µg/L
33	78-51-3	Tri(2-butoxyethanol)phosphat	730	730	13000	---	0,056	---	RIVM [15]: PNEC: 13 µg/L
34	3380-34-5	Triclosan	---	300	50	500	---	<b>0,60</b>	NICNAS [16]: PNEC: 0,05 µg/L
35	13674-84-5	Tris-(2-chlorpropyl)-phosphat	122	220	120000	---	0,001	---	OECD SIDS [17]: PNEC: 120 µg/L

### **3. Ableitung von UQN-Vorschlägen für 15 relevante Schadstoffe**

Die Vorarbeiten zur Ableitung von UQN-Vorschlägen für 15 relevante Schadstoffe umfasste mehrere Schritte:

**Recherche der grundlegenden Stoffeigenschaften:** Die chemisch-physikalischen Stoffeigenschaften, das Abbauverhalten und die Bioakkumulation wurden für eine umfassende Bewertung des Umweltverhaltens und der Bioverfügbarkeit der Stoffe aus geeigneten Handbüchern, z.B. [18,19], Katalogen, z.B. [20,21], und Datenbanken, z.B. [22,23], zusammengestellt. Lagen für die 15 ausgewählten Stoffe nur unzureichende Daten zu ihren physikochemischen Eigenschaften, zum Abbau, möglicherweise relevanten Metaboliten und zur Bioakkumulation vor, wurden Abschätzungen mit verschiedenen bewährten QSAR-Modellen durchgeführt [24,25,23,26].

Relevante Richt- und Grenzwerte wurden im Internet von den Websites von Behörden verschiedener Länder recherchiert, z.B. [27,28,29,30,31,32,33,34,35,36,37,38,39].

**Qualifizierte Recherche zur aquatischen Toxizität in Datenbanken:** Der verfügbare Datenbestand zur aquatischen Toxizität der Schadstoffe der Auswahlliste (siehe 2.1. Recherchen zur aquatischen Toxizität in Datenbanken), wurde, wenn nötig, für die ausgewählten 15 relevanten Stoffe durch gezielte Recherchen ergänzt und in mehreren Schritten einer expliziten Qualitätskontrolle unterworfen.

**Beschaffung der relevanten Primärliteratur:** Die Beschaffung der relevanten Primärliteratur erfolgt online, direkt von den Autoren, über Bibliotheken und Fernleihsysteme.

**Prüfung der Originalstudien auf Validität und Plausibilität:** Daten für die 15 ausgewählten Stoffe aus Sekundärquellen (Datenbanken, Berichten, Monographien, etc.) wurden anhand der verfügbaren Primärliteratur überprüft und ihre Validität beurteilt. Ausschließlich als ausreichend valide beurteilte Daten wurden in die Stoffdatenblätter aufgenommen.

Die Qualität von Daten wird einerseits bestimmt von der Validität der verwendeten Methode für einen Endpunkt und der Verlässlichkeit des individuellen Resultats, d.h., die inhärente Qualität der Durchführung und Beschreibung einer Studie gemäß etabliertem Standardverfahren [40,41]. Die meisten Verfahren zur Beurteilung der Datenqualität lehnen sich an das Klimisch-Schema [40] an, so auch die Klassifizierung der Testbonität in ETOX:

1. Umfassende Beschreibung des untersuchten Stoffes, der Testorganismen, des Testsubstrates und der Versuchsdurchführung (möglichst in Anlehnung an bestehende Testvorschriften) sowie Angaben zur statistischen Auswertung, Bestimmung der Kon-

zentrationstufen mittels chemischer Analytik, angemessene Anzahl von Testorganismen und Parallelproben (Replikate).

2. Einzelne der unter 1 festgelegten Angaben fehlen.
3. Wichtige und/oder mehrere Angaben fehlen.
4. Die zitierte Untersuchung weicht in wesentlichen Punkten von den unter 1 genannten Angaben ab.

**Auswertung und wissenschaftliche Bewertung der Untersuchungen:** Während die inhärente Datenqualität objektiv beurteilt werden kann, ist es kontextabhängig, ob ein bestimmter Wert für einen gegebenen Zweck relevant ist, z.B. hinsichtlich Repräsentativität der Spezies, Expositionspfaden, Wirkungen auf die Biozönose.

Ein bemerkenswertes Beispiel bietet Aluminium, bei welchem einige Wirkungsdaten auf Toxizitäten im Bereich der natürlichen Hintergrundkonzentrationen, z.B. in UK durchschnittlich 6 µg/L [42], hinzuweisen scheinen. Derartige Befunde können für reale Gewässer nicht relevant sein, auch wenn die entsprechenden Studien inhärent valide sind.

Liegen für einen Stoff mehrere Daten vor, die, einzeln betrachtet, den Qualitätsanforderungen nicht genügen, so können sie doch gemeinsam im Sinne eines Weight-of-Evidence eine adäquate Bewertung erlauben.

**Selektion der relevanten empfindlichen Toxizitätsdaten für die verschiedenen trophischen Ebenen der Gewässerbiozönose:** Das Gefährdungspotential von Stoffen für aquatische Lebensgemeinschaften wurde anhand von Toxizitätsparametern ( $EC_x$ ,  $LC_x$ , NOEC) gegenüber geeigneten Testspezies charakterisiert. Diese sollen sowohl sensitiv als auch repräsentativ für das jeweilige Gewässer sein. Gemäß WRRL [1] sollen, wenn möglich, für den Grundbestand der Taxa, die für den betreffenden Wasserkörpertyp von Belang sind, d.h. Algen und/oder Makrophyten, Daphnien oder Organismen, die für salzhaltiges Wasser repräsentativ sind, und Fische, wie auch für alle anderen aquatischen Taxa, für die Daten verfügbar sind, sowohl akute als auch chronische Daten herangezogen werden.

Für nachhaltige Qualitätsnormen wurden, wenn verfügbar, Daten zu chronischen Effekten herangezogen, die Konzentrationen von Stoffen/Stoffgruppen angeben, bei denen mit ausreichender Wahrscheinlichkeit auch bei langfristiger Exposition keine toxischen Wirkungen auftreten. Akute Daten wurden zur Plausibilitätsprüfung chronischer Daten und zur Ableitung maximal zulässiger Konzentrationen für kurzfristige Belastungen (MAC-QS) verwendet. Nur wenn keine ausreichenden Datenmengen zur Verfügung standen, dienten sie als Grundlage für die Extrapolation von chronischen Werten.

**Dokumentation aller relevanten Wirkungsdaten in der Datenbank ETOX:** Die recherchierten und als valide beurteilten Daten zur aquatischen Toxizität der 15 ausgewählten Stoffe wurden einschließlich Literatur in der ETOX-Datenbank des UBA dokumentiert (<http://webetox.uba.de/webETOX/>).

**Erstellung von Stoffdatenblättern:** Die für die 15 ausgewählten Stoffe recherchierten und als valide beurteilten Daten zum Umweltverhalten und zur aquatischen Toxizität wurden zur Nachvollziehbarkeit und als Grundlage für Revisionen bei neuen Erkenntnissen/neuer Datenlage in Stoffdatenblättern gemäß Vorgabe dokumentiert (Anhang 2). Wirkungen auf die menschliche Gesundheit wurden in Form allgemeiner Angaben, z.B. zur Mutagenität, aufgenommen. Die verwendete Literatur wurde in stoffspezifischen Literaturverzeichnissen zusammengestellt und in einer Referenzmanager<sup>®</sup>-Datenbank verwaltet.

### **3.1. Zusammenfassung und Kommentierung der UQN-Vorschläge**

Für 14 der ausgewählten Stoffe konnten jeweils Umweltqualitätsnormen für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) und aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) abgeleitet werden. Die JD- UQN-Vorschläge (Süßwasser und Salzwasser) liegen zwischen 0,0006 µg/L (Monobutylzinn-Kation) und 50 µg/L (Aluminium-Kation). Für  $\beta$ -Sitosterol konnten aufgrund der unzureichenden Datenlage keine UQN-Vorschläge für aquatische Lebensgemeinschaften abgeleitet werden.

UQN-Vorschläge für benthische Lebensgemeinschaften wurden für acht Stoffe abgeleitet (von 0,018 mg/kg für Monobutylzinn-Kation bis 6 mg/kg für die drei Chlorpropylether). Für sechs Stoffe ist das Schutzgut benthische Lebensgemeinschaften nicht relevant (der Triggerwert von  $\log K_{OC} \geq 3$  bzw.  $\log K_{OW} \geq 3$  ist nicht erreicht [43]). Für das Aluminium-Kation konnte aufgrund der unzureichenden Datenlage kein UQN-Vorschlag für benthische Lebensgemeinschaften abgeleitet werden.

UQN-Vorschläge für Secondary Poisoning wurden für fünf Stoffe abgeleitet (von 0,4 mg/kg für PFOS bis 12 mg/kg/d für Aluminium-Kation). Für sieben Stoffe ist das Schutzgut Secondary Poisoning nicht relevant (der Triggerwert von  $BCF \geq 100$  bzw.  $\log K_{OW} \geq 3$  ist nicht erreicht [43]) und für drei Stoffe (die drei Chlorpropylether) konnten mangels Daten keine vorläufigen UQN-Vorschläge abgeleitet werden.

Für das Schutzgut Fischkonsum wurden für acht Stoffe UQN-Vorschläge abgeleitet (von 0,006 mg/kg/d für Dimethachlor bis 13 mg/kg für Bensulfuron-methyl). Für zwei Stoffe ist das

Schutzgut Fischkonsum nicht relevant (humantoxische Eigenschaften sind nicht bekannt [43]) und für fünf Stoffe (die drei Chlorpropylether, Aluminium-Kation und Monobutylzinn-Kation) konnte mangels Daten keine vorläufigen UQN-Vorschläge abgeleitet werden.

Für das Schutzgut Trinkwasserversorgung liegen für elf Stoffe bisher keine spezifisch festgelegten Höchstwerte vor, sodass der pragmatische gesundheitliche Orientierungswert des Umweltbundesamtes (GOW) für schwach genotoxische Stoffe von 0,1 µg/L bzw. von 0,3 µg/L für nachweislich nicht genotoxische Stoffe (in Abwesenheit weiterer experimenteller Daten) [44] empfohlen wird. Für Pflanzenschutzmittel wird zum Schutz der Trinkwasserversorgung der nach der EG-Richtlinie 98/83/EG (vormals 80/778/EWG) festgelegte Höchstwert von 0,1 µg/L (gilt für einzelne Pestizide und Biozide) angesetzt. Für Aluminium liegt ein WHO Trinkwasserleitwert von 200 µg/L [45] vor und für 2,4-Dinitrophenol kann der Höchstwert von 0,001 mg/L gemäß EG-Richtlinie 75/440/EWG (für Summe Phenole) Anwendung finden. Für PFOS wird zum Schutz der Trinkwasserversorgung und des Trinkwassers der allgemeine Vorsorgewert von 0,1 µg/L des Umweltbundesamtes [46] bzw. der Trinkwasserkommission des Bundesministeriums für Gesundheit [47] zum Schutz des Trinkwassers und seiner Verbraucher vor perfluorierten Verbindungen empfohlen. Für  $\beta$ -Sitosterol ist das Schutzgut Trinkwasserversorgung nicht relevant.

Sämtliche verwendeten Informationen und Details der Ableitungen der UQN-Vorschläge sind jeweils in den Datenblättern (Anhang 2) ausführlich dargestellt und sollen an dieser Stelle nicht repetiert werden. Zwei Aspekte seien hier dennoch kommentiert:

1. Für die drei **Chlorpropylether** (1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether (CAS 59440-90-3), Bis(1,3-dichlor-2-propyl)ether (CAS 59440-89-0) und Bis(2,3-dichlor-1-propyl)ether (CAS 7774-68-7)) liegen keine individuellen Testdaten zu akuten oder chronischen Wirkungen auf aquatische Organismen vor, lediglich das Gemisch der drei Isomere wurde untersucht. Auch QSAR-Abschätzungen erlauben keine Differenzierung der Isomere. Weil die Chlorpropylether-Isomere als toxikologisch ähnlich einzuschätzen sind (unspezifisch toxisch entsprechend log *Kow*-abhängigen Baseline-Modellen), liegt eine gemeinsame Bewertung nahe. Es wird empfohlen die drei Chlorpropylether (1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether (CAS 59440-90-3), Bis(1,3-dichlor-2-propyl)ether (CAS 59440-89-0) und Bis(2,3-dichlor-1-propyl)ether (CAS 7774-68-7)) in einer Stoffgruppe zusammenzufassen.

Weiterhin wird dringend empfohlen, für diese Stoffe experimentelle Untersuchungen zur aquatischen Toxizität, z.B. Fisch-ELS unter Einbeziehung des angedeuteten endokrinen Potentials, zu veranlassen, um anhand dieser Befunde die vorläufige Bewertung der drei Chlorpropylether zu überprüfen und, ggf., zu korrigieren.

**Tabelle 2. Übersicht der Vorschläge für Schutzgut-spezifische Umweltqualitätsnormen für 15 relevanten Schadstoffe.**

Nr.	CAS-Nr.	Stoffname	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser)	Aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser)	Benthische Lebensgemeinschaften	Secondary Poisoning (Top Predators)	Fischkonsum	Trinkwasserversorgung
1	59440-90-3	1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether	JD-UQN: 1 µg/L ZHK-UQN: 10 µg/L	JD-UQN: 0,1 µg/L ZHK-UQN: 1 µg/L	UQN <sub>sediment</sub> : 6 mg/kg OC	keine Daten	keine Daten	UQN <sub>dw</sub> : 0,1 µg/L
2	51-28-5	2,4-Dinitrophenol	JD-UQN: 10 µg/L ZHK-UQN: 74 µg/L	JD-UQN: 1 µg/L ZHK-UQN: 8,5 µg/L	nicht relevant	nicht relevant	UQN <sub>biota.Human</sub> : 120 µg/kg	UQN <sub>dw</sub> : 1 µg/L
4	14903-36-7	Aluminium-Kation	JD-UQN: 50 µg/L ZHK-UQN: 250 µg/L	JD-UQN: 50 µg/L ZHK-UQN: 250 µg/L	keine Daten	UQN <sub>biota.TP</sub> : 13 mg/kg	keine Daten	UQN <sub>dw</sub> : 200 µg/L
8	83055-99-6	Bensulfuron-methyl	JD-UQN: 0,01 µg/L ZHK-UQN: 0,08 µg/L	JD-UQN: 0,001 µg/L ZHK-UQN: 0,008 µg/L	nicht relevant	nicht relevant	UQN <sub>biota.Human</sub> : 12 mg/kg	UQN <sub>dw</sub> : 0,1 µg/L
10	83-46-5	beta-Sitosterol	Unzureichende Datenbasis	Unzureichende Datenbasis	nicht relevant	nicht relevant	nicht relevant	nicht relevant
11	59440-89-0	Bis(1,3-dichlor-2-propyl)ether	JD-UQN: 1 µg/L ZHK-UQN: 10 µg/L	JD-UQN: 0,1 µg/L ZHK-UQN: 1 µg/L	UQN <sub>sediment</sub> : 6 mg/kg OC	keine Daten	keine Daten	UQN <sub>dw</sub> : 0,1 µg/L
12	7774-68-7	Bis(2,3-dichlor-1-propyl)ether	JD-UQN: 1 µg/L ZHK-UQN: 10 µg/L	JD-UQN: 0,1 µg/L ZHK-UQN: 1 µg/L	UQN <sub>sediment</sub> : 6 mg/kg OC	keine Daten	keine Daten	UQN <sub>dw</sub> : 0,1 µg/L
15	81103-11-9	Clarithromycin	JD-UQN: 0,02 µg/L ZHK-UQN: 0,2 µg/L	JD-UQN: 0,002 µg/L ZHK-UQN: 0,02 µg/L	UQN <sub>sediment</sub> : 5 µg/kg	nicht relevant	nicht relevant	UQN <sub>dw</sub> : 0,3 µg/L
17	50563-36-5	Dimethachlor	JD-UQN: 0,05 µg/L ZHK-UQN: 0,35 µg/L	JD-UQN: 0,005 µg/L ZHK-UQN: 0,35 µg/L	nicht relevant	nicht relevant	UQN <sub>biota.Human</sub> : 6 µg/kg	UQN <sub>dw</sub> : 0,1 µg/L
18	142459-58-3	Flufenacet	JD-UQN: 0,04 µg/L ZHK-UQN: 0,2 µg/L	JD-UQN: 0,004 µg/L ZHK-UQN: 0,02 µg/L	nicht relevant	nicht relevant	UQN <sub>biota.Human</sub> : 300 µg/kg	UQN <sub>dw</sub> : 0,1 µg/L
19	96525-23-4	Flurtamone	JD-UQN: 0,1 µg/L ZHK-UQN: 1 µg/L	JD-UQN: 0,01 µg/L ZHK-UQN: 0,1 µg/L	nicht relevant	nicht relevant	UQN <sub>biota.Human</sub> : 1800 µg/kg	UQN <sub>dw</sub> : 0,1 µg/L
25	78763-54-9	Monobutylzinn-Kation	JD-UQN: 0,0006 µg/L ZHK-UQN: 0,006 µg/L	JD-UQN: 0,0006 µg/L ZHK-UQN: 0,006 µg/L	UQN <sub>sediment</sub> : 1,8 µg/kg	UQN <sub>biota.TP</sub> : 900 mg/kg	keine Daten	UQN <sub>dw</sub> : 0,3 µg/L
28	1763-23-1	PFOS	JD-UQN: 2 µg/L ZHK-UQN: 36 µg/L	JD-UQN: 0,2 µg/L ZHK-UQN: 3,6 µg/L	UQN <sub>sediment</sub> : 0,05 mg/kg	UQN <sub>biota.TP</sub> : 0,04 µg/L	UQN <sub>biota.Human</sub> : 9 µg/kg	UQN <sub>dw</sub> : 0,1 µg/L
31	129-00-0	Pyren	JD-UQN: 0,0023 µg/L ZHK-UQN: 0,023 µg/L	JD-UQN: 0,0023 µg/L ZHK-UQN: 0,023 µg/L	UQN <sub>sediment_FW</sub> : 2,8 mg/kg TS UQN <sub>sediment_SW</sub> : 1,4 mg/kg TS	UQN <sub>biota.TP</sub> : 12,5 mg/kg	UQN <sub>biota.Human</sub> : 1,8 mg/kg	UQN <sub>dw</sub> : 0,1 µg/L
34	3380-34-5	Triclosan	JD-UQN: 0,02 µg/L ZHK-UQN: 0,07 µg/L	JD-UQN: 0,002 µg/L ZHK-UQN: 0,007 µg/L	UQN <sub>sediment_FW</sub> : 2 mg/kg TS UQN <sub>sediment_SW</sub> : 1 mg/kg TS	UQN <sub>biota.TP</sub> : 4 mg/kg	UQN <sub>biota.Human</sub> : 18 µg/kg	UQN <sub>dw</sub> : 0,1 µg/L

2. Für **Aluminium** wurde die eminente Bedeutung der pH-Abhängigkeit nicht nur im Hinblick auf die chemische Speziation und Löslichkeit deutlich, sondern auch für (molekular-)toxikologische Wirkmechanismen.

Die pH-Abhängigkeit der Speziation des Aluminiums erfordert individuelle Umweltqualitätsnormen für drei pH-Bereiche, die die unterschiedlichen Wirkprinzipien darstellen:

pH < 5,5: vorwiegend positiv geladene Aluminiumhydroxid- und Aluminiumfluorid-Komplexe, nur in diesem pH-Bereich liegen erhebliche Anteile als freie  $\text{Al}^{3+}$ -Kationen vor;

pH 5,5 – 7: vorwiegend ungeladene Aluminiumkomplexe und Mikrokolloide (Achtung: diese haben ein völlig anderes Wirkprinzip als ionische Komplexe!);

pH > 7: vorwiegend negativ geladene Aluminiumhydroxid-Komplexe.

Die gleichzeitig in unterschiedlichen Mengen vorliegenden verschiedenen Aluminium-Komplexe tragen in unterschiedlichem Ausmaß zur Gesamt-Toxizität bei, wobei dem  $\text{Al}^{3+}$ -Kation die stärkste Wirkung zugeschrieben wird [42,48]. Dabei ist zu beachten, dass freie  $\text{Al}^{3+}$ -Kationen nur bei pH-Werten < 5,5 in erheblichen Anteilen vorliegen. Unter diesen pH-Bedingungen werden Organismen auch durch das saure Medium geschädigt, d.h. die beobachteten Wirkungen beruhen auf einer Kombination der Stressoren pH-Wert und  $\text{Al}^{3+}$ -Kation.

Die Bioverfügbarkeit der verschiedenen Aluminium-Spezies muss pH-abhängig differenziert betrachtet werden: Während die adversen Effekte bei pH-Werten unter 5,5 und über 7 vorwiegend durch interne (intrazelluläre) Konzentrationen löslicher Al-Spezies hervorgerufen werden, handelt es sich im pH-Bereich zwischen 5,5 und 7 vorwiegend um externe (physikalische) Interaktionen mit Kiemenoberflächen, die nicht mit den Methoden der klassischen Toxikologie quantifiziert werden können. Daraus ergibt sich, dass die wirksamen Aluminium-Fractionen größer als die internen Body-Burden, aber kleiner als die Gesamtkonzentration im Gewässer sein können.

Die Bewertung der physikalisch-mechanischen Effekte von Al-Mikrokolloiden, die nur eine geringe Wasserlöslichkeit und Membrangängigkeit aufweisen, sollte analog zu gallertartigen  $\text{Fe}(\text{OH})_3$ -Kolloiden, die bei Fischen durch eine Verstopfung der Kiemen und der Poren bei Fischeiern zum Ersticken von Organismen führen könnten [49], erfolgen.

Für die intrinsischen und externen (physikalischen) toxischen Wirkungen von Gemischen verschiedener Aluminium-Spezies kann nicht von einer (Quasi-)Additivität im Zusammenspiel mit pH-Effekten ausgegangen werden. Dies ist von besonderer Bedeutung im Hinblick auf die Notwendigkeit differenzierter Umweltqualitätsnormen, die das Zusammenwirken der

multiplen Stressoren abbilden sollen, welches aber noch nicht mit entsprechender Genauigkeit verstanden ist und daher noch nicht modelliert werden kann.

Weiterhin bemerkenswert ist, dass einige Wirkungsdaten auf Toxizitäten von Aluminium-Spezies im Bereich der natürlichen Hintergrundkonzentrationen, z.B. in UK durchschnittlich 6 µg/L [42], hinzuweisen scheinen. Derartige Befunde können für reale Gewässer nicht relevant sein, auch wenn die Studien inhärent valide sind. Im Hinblick auf eine sinnvolle Umsetzbarkeit werden entsprechende Wirkungsdaten im Kapitel 6 des Datenblatts aufgelistet, aber nicht zur Ableitung von Qualitätsnorm-Vorschlägen verwendet. Es ist davon auszugehen, dass die verwendeten Wirkungsdaten möglicherweise Artefakte sind, die durch den Bezug auf die falsche Aluminium-Spezies entstanden sein könnten.

Zur Überwindung der aufgezeigten Schwierigkeiten wird empfohlen:

1. Identifizierung der multiplen Wirkmechanismen von Aluminium-Spezies auf aquatische Organismen unter Berücksichtigung der pH-Abhängigkeit;
2. Identifizierung der jeweils wirksamen multiplen Aluminium-Spezies unter Berücksichtigung der pH-Abhängigkeit;
3. Bestimmung des Ausmaßes der multiplen Wirkungen der verschiedenen Aluminium-Spezies auf aquatische Organismen unter Berücksichtigung der pH-Abhängigkeit;
4. Bestimmung der (Nicht-)Additivität der intrinsischen und externen (physikalischen) toxischen Wirkungen von Gemischen verschiedener Aluminium-Spezies unter Berücksichtigung der pH-Abhängigkeit;
5. Ableitung differenzierter Umweltqualitätsnormen für Aluminium unter Berücksichtigung der pH-abhängigen Speziation.

Als pragmatische Übergangslösung wird vorgeschlagen, das von Environment Canada 2001 überarbeitete Qualitätskriterium für chronische Wirkungen auf limnische Lebensgemeinschaften von 50 µg Al/L [50] als Jahresdurchschnitts-Umweltqualitätsnorm (JD-UQN) für aquatische Lebensgemeinschaften zu übernehmen. Der Wert für den ZHK-UQN-Vorschlag wird um einen Faktor von 5 höher angesetzt und beträgt 250 µg Al/L. Diese Werte relativ zu den vorliegenden Wirkungsdaten und dem Trinkwasserleitwert der WHO von 200 µg Al/L [45] ist in Abbildung 3 des Datenblatts dargestellt.

Mit fortschreitender Überprüfung, Überarbeitung und Ergänzung der vorliegenden Toxizitätsdaten hinsichtlich des effektiven Wirkprinzips ist es vorstellbar, die UQN-Vorschläge für Aluminium pH-abhängig anzuheben. In der folgenden Abbildung ist der Verlauf für einen pH-abhängigen JD-UQN-Vorschlag exemplarisch skizziert.



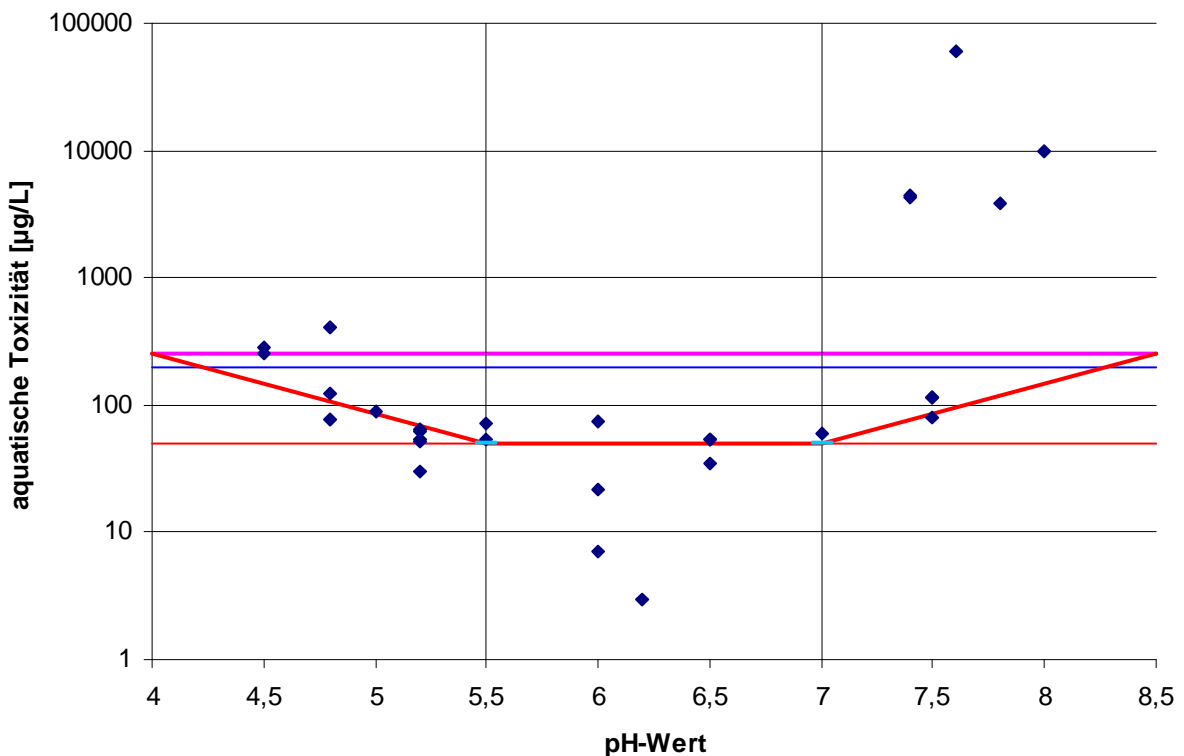


Abbildung: Vorschlag für eine pH-abhängige JD-UQN (rote Linie) relativ zum ZHK-UQN-Vorschlag von 250 µg Al/L (rosa Linie), Trinkwasserleitwert der WHO von 200 µg Al/L [45] (blaue Linie) und den vorliegenden Wirkungsdaten für Aluminium.

### **3.2. Vergleich der schutzgutübergreifenden UQN-Vorschläge mit den Monitoring-Daten der LAWA**

Für die 15 ausgewählten Stoffe wurden die schutzgutübergreifenden UQN-Vorschläge den Monitoring-Daten der LAWA gegenübergestellt (Tabelle 3). Der Vergleich der Konzentrationen ergibt, dass für die meisten Stoffe der schutzgutübergreifende UQN-Vorschlag höher oder in der gleichen Größenordnung wie die Jahresmittelwerte des Monitorings der LAWA ist. Besonders besorgniserregend ist der Fall des **Dimethachlor**, für welches kein Jahresmittelwert vorliegt. Der verfügbare maximale Monitoring-Wert für Dimethachlor ist um mehr als einen Faktor von 1000 größer als der JD-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) von 0,05 µg/L.

Für **Aluminium-Kation, Pyren, Flufenacet, Monobutyl-Kation** und **Bensulfuron-Methyl** liegen die Jahresmittelwerte um etwa einen Faktor von 10 bis 30 höher als die jeweiligen JD-UQN-Vorschläge für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser).

Für **Triclosan** liegt kein Jahresmittelwert vor. Der verfügbare maximale Monitoring-Wert für Triclosan ist um einen Faktor von 15 größer als der JD-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) von 0,02 µg/L.

Für **PFOS** liegt der Jahresmittelwert in etwa der gleichen Größenordnung wie der JD-UQN-Vorschlag für Fischkonsum (umgerechnet mit einem minimalen und maximalen BAF-Wert von 500 bzw. 5000 L/kg in eine korrespondierende Wasserkonzentration) von etwa 0,002 µg/L bis 0,02 µg/L.

**Tabelle 3. Vergleich der schutzgutübergreifenden UQN-Vorschläge mit den Monitoring-Daten der LAWA.**

Nr.	CAS-Nr.	Stoffname	LAWA Monitoring [ng/L]		schutzgutübergreifender UQN-Vorschlag
			max JMW	max Wert	
1	59440-90-3	1,3-Dichlor-2-propyl-2,3-dichlor-1-propylether	197,5	620	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 1 µg/L
2	51-28-5	2,4-Dinitrophenol	70	640	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 10 µg/L
4	14903-36-7	Aluminium-Kation	1631667	5580000	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 50 µg/L
8	83055-99-6	Bensulfuron-methyl	60	560	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 0,01 µg/L
10	83-46-5	beta-Sitosterol	---	12000	Unzureichende Datenbasis
11	59440-89-0	Bis(1,3-dichlor-2-propyl)ether	82,5	320	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 1 µg/L
12	7774-68-7	Bis(2,3-dichlor-1-propyl)ether	77,5	300	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 1 µg/L
15	81103-11-9	Clarithromycin	11,5	23	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 0,02 µg/L
17	50563-36-5	Dimethachlor	---	61000	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 0,05 µg/L
18	142459-58-3	Flufenacet	500	500	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 0,04 µg/L
19	96525-23-4	Flurtamone	41	1300	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 1 µg/L
25	78763-54-9	Monobutylzinn-Kation	6,43	86	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 0,0006 µg/L
28	1763-23-1	PFOS	3	---	Fischkonsum: UQN <sub>biota.Human</sub> : 9 µg/kg Korrespondierende Wasserkonzentration: etwa 0,002 bis 0,020 µg/L
31	129-00-0	Pyren	66,3	550	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 0,0023 µg/L
34	3380-34-5	Triclosan	---	300	Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser): JD-UQN: 0,02 µg/L

Für **Clarithromycin** und **Flurtamone** liegen die Jahresmittelwerte zwar unterhalb, die verfügbaren maximalen Monitoring-Werte aber in der gleichen Größenordnung wie die jeweiligen JD-UQN-Vorschläge für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser).

Für die drei **Chlorpropylether** liegen die Jahresmittelwerte um etwa einen Faktor von 5 bis 10 niedriger als die jeweiligen JD-UQN-Vorschläge für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) von 1 µg/L. Allerdings sind diese JD-UQN-Vorschläge mit erheblicher Unsicherheit behaftet (siehe oben) und sollten anhand neuer experimenteller Befunde überprüft und, ggf., korrigiert werden.

**2,4-Dinitrophenol** ist der einzige untersuchte Stoff, der einen deutlichen Sicherheitsabstand (Quotient von 0,007) zwischen dem Jahresmittelwert und dem JD-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) von 10 µg/L aufweist.

Zu **β-Sitosterol** lassen sich aufgrund der unzureichenden Datenbasis keine Aussagen machen.

## **4. Literatur**

- [1] European Commission (2000). Richtlinie 2000/60/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 23. Oktober 2000 zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik. Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaften, 22.12.2000, L327/1-L327/72.
- [2] European Communities (2003). Technical guidance document on risk assessment in support of Commission Directive 93/67/EEC on risk assessment for new notified substances, Commission Regulation (EC) No 1488/94 on risk assessment for existing substances, Directive 98/8/EC of the European Parliament and of the Council concerning the placing of biocidal products on the market. European Commission, Joint Research Centre, Ispra, Italy.
- [3] Lepper, P. (2002). Towards the derivation of quality standards for priority substances in the context of the water framework directive. Final report of the study, Contract No. B4-30401/20001111/30637/MAR/E1, Fraunhofer-Institut Molecular Biology and Applied Ecology, Schmallenberg, Germany.
- [4] Lepper, P. (2005). Manual on the methodological framework to derive environmental quality standards for priority substances in accordance with article 16 of the water framework directive (2000/60/EC). Fraunhofer-Institut Molecular Biology and Applied Ecology, Schmallenberg, Germany.
- [5] OECD (2008). QSAR Application Toolbox. Paris.
- [6] Nendza, M. (1998). Structure-activity relationships in environmental sciences. Chapman & Hall, London, Great Britain.
- [7] U.S.EPA (2009). EPI Suite v4.0.  
<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedl.htm>. U.S.Environmental Protection Agency, Washington, DC.
- [8] Wiandt, S., Müller, M. (2004). PropertEst - a software system of environmental QSARs for chemical assessment. Poster at the 11th International Workshop on Quantitative Structure-Activity Relationships in Environmental Sciences (QSAR 2004), Liverpool, England, 9. - 13.5.2004,
- [9] Schowanek, D., Webb, S. (2009). Examples of exposure assessment simulation for pharmaceuticals in river basins with the GREAT-ER 1.0 system. Proceedings KVV Seminar 'Pharmaceuticals in the environment' March 9, 2000, Brussels,
- [10] Junghans, M. (2004). Studies on combination effects of environmentally relevant toxicants. Bremen University,
- [11] Blüm, W., McArdeall, C. S., Hoehn, E., Schaubhut, R., Labhart, W., Bertschi, S. (2005). Organische Spurenstoffe im Grundwasser des Limmattales - Ergebnisse der Untersuchungskampagne 2004. Baudirektion Kanton Zürich,
- [12] Commission d'etude de la toxicite des produits antiparasitaires a usage(s) agricole(s) et des produits assimilés (2004). Séance du 6 octobre 2004.
- [13] Bund/Länderausschuss für Chemikaliensicherheit (BLAC) (2003). Arzneimittel in der Umwelt: Auswertung der Untersuchungsergebnisse: Bericht an die 61. Umweltministerkonferenz (UMK) am 19./20. November 2003 in Hamburg.
- [14] INERIS (2004). Action Nationale de Recherche et de Réduction des Rejets de Substances Dangereuses dans les Eaux: PNEC des substances concernées par l'Action Nationale de Recherche et de Réduction des Rejets de Substances Dangereuses dans les Eaux et des substances supplémentaires quantifiées en Champagne-Ardenne.
- [15] Verbruggen, E. M., Rila, J. P., Traas, T. P., Posthuma-Doodeman, C. J. A. M., Posthumus, R. (2005). Environmental risk limits for several phosphate esters, with

- possible application as flame retardant. RIVM report 601501024/2005, National Institute for Public Health and the Environment, Bilthoven, the Netherlands.
- [16] Australian Government Department of Health and Ageing NICNAS (2008). Draft Priority Existing Chemical Assessment Report: Triclosan. [www.nicnas.gov.au](http://www.nicnas.gov.au).
- [17] OECD (2005). SIDS initial assessment report: Tris (1-chloro-2-propyl) phosphate CAS N°: 13674-84-5.
- [18] Industrieverband Agrar eV (1990). Wirkstoffe in Pflanzenschutz- und Schädlingsbekämpfungsmitteln. BLV Verlagsgesellschaft, München, Germany.
- [19] Merck (1989). Merck Index. Merck & Co Inc, Rahway, NJ.
- [20] Aldrich (2003). Katalog Handbuch Feinchemikalien und Laborgeräte. Sigma-Aldrich, Taufkirchen.
- [21] Merck (2003). Chemikalien Reagenzien 2003. Merck KGaA, Darmstadt.
- [22] EURAS (2007). CEFIC LRI Goldstandard Database. <http://ambit.acad.bg/ambit/php/euras.php>.
- [23] U.S.EPA (2005). EPI Suite v 3.12. <http://www.epa.gov/opptintr/exposure/docs/episuite.htm>. U.S.Environmental Protection Agency, Washington, DC.
- [24] Nendza, M., Müller, M. (2007). Literature study: Effects of molecular size and lipid solubility on bioaccumulation potential. Umweltbundesamt, Dessau.
- [25] SPARC (2002). SPARC on-line calculator. <http://ibmlc2.chem.uga.edu/sparc/>.
- [26] UM-BBD (2005). PredictBT. <http://umbbd.ahc.umn.edu/predictbt/>. University of Minnesota Predictive Biodegradation Project, Minneapolis, MN.
- [27] VROM (2001). Environmental quality standards in The Netherlands: A review of environmental quality standards and their policy framework in The Netherlands, 1999, Ministry of Housing, Spatial Planning and the Environment, Directorate General for Environmental Protection.
- [28] Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA) Unterausschuss Geringfügigkeitsschwellen (2003). Methodik und Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser, Anhang 3 Datenblätter Geringfügigkeitsschwellenwerte, Entwurf: Stand 17.09.2003.
- [29] WHO (2003). Guidelines for drinking water quality, 3rd ed. [http://www.who.int/docstore/water\\_sanitation\\_health/GDWQ/Updating/draftguidel/draftchap81.htm](http://www.who.int/docstore/water_sanitation_health/GDWQ/Updating/draftguidel/draftchap81.htm). World Health Organization, Geneva.
- [30] Anonymus (2001). Verordnung zur Novellierung der TRINKWASSERVERORDNUNG vom 21. Mai 2001. Bundesgesetzblatt Jahrgang 2001 Teil I Nr. 24 ausgegeben zu Bonn am 28. Mai 2001, Seite 959-981.
- [31] Anonymus (2003). Bericht der Bundesrepublik Deutschland zur Durchführung der Richtlinie 76/464/EWG und der Tochterrichtlinien betreffend die Verschmutzung infolge der Ableitung bestimmter gefährlicher Stoffe in die Gewässer der Gemeinschaft für den Zeitraum 1999 - 2001. Umweltbundesamt, Berlin.
- [32] Anonymus (2002). Florida water criteria. <http://www.dep.state.fl.us/labs/docs/watercriteria.pdf>.
- [33] BGVV (2001). Liste des BgVV zu ADI-Werten, DTA-Werten und gesundheitlichen Trinkwasser-Leitwerten für Pflanzenschutzmittel-Wirkstoffe, Ausgabe 10 (19.06.2001). [http://www.vis-ernaehrung.bayern.de/de/left/fachinformationen/praevention/pflanzenschutz/adi\\_werte.pdf](http://www.vis-ernaehrung.bayern.de/de/left/fachinformationen/praevention/pflanzenschutz/adi_werte.pdf).
- [34] DVGW (2001). Verordnung zur Novellierung der TRINKWASSERVERORDNUNG vom 21. Mai 2001. [www.dvgw.de](http://www.dvgw.de). Deutsche Vereinigung des Gas- und Wasserfaches e.V., Bonn, Germany.

- [35] Anonymus (2002). Summary of the available water quality criteria and guidelines for the protection of drinking water.  
<http://bordeaux.uwaterloo.ca/biology447/modules/module1/drinking.html>.
- [36] Environment Protection Agency (2002). South Australian reclaimed water guidelines.  
[www.denr.sa.gov.au/epa/pdfs/reclaimed.pdf](http://www.denr.sa.gov.au/epa/pdfs/reclaimed.pdf). Adelaide, Australia.
- [37] Environnement Québec (2002). Critères de qualité de l'eau de surface au Québec.  
[www.menv.gouv.qc.ca/eau/criteres\\_eau/critere\\_b2.htm](http://www.menv.gouv.qc.ca/eau/criteres_eau/critere_b2.htm).
- [38] Ontario (2002). Ontario Provincial Water Quality Objectives.  
[www.agatlabs.com/ontario1.htm](http://www.agatlabs.com/ontario1.htm).
- [39] UBA (2002). Wasser - Oberflächengewässer: Übersicht über Qualitätsanforderungen der EG, der internationalen Flußgebietsgemeinschaften und der LAWA.  
<http://www.umweltbundesamt.de/wasser/themen/>. Umweltbundesamt, Berlin, Germany.
- [40] Klimisch, H. J., Andrae, E., Tillmann, U. (1997). A systematic approach for evaluating the quality of experimental and ecotoxicological data. Regul. Toxicol. Pharmacol., 25, 1-5.
- [41] Zweers, P. G. P. C., Vermeire, T. G. (2007). Data: Needs, availability, sources and evaluation. 357-374. Springer, Dordrecht, The Netherlands.
- [42] Crane, M., Atkinson, C., Comber, S., Sorokin, N. (2007). Proposed EQS for Water Framework Directive Annex VIII substances: aluminium (inorganic monomeric). Environment Agency, UK,
- [43] Anonymus (2009). Chemicals and the water framework directive: Draft technical guidance for deriving environmental quality standards.
- [44] UBA (2003). Bewertung der Anwesenheit teil- oder nicht bewertbarer Stoffe im Trinkwasser aus gesundheitlicher Sicht. Empfehlung des Umweltbundesamtes nach Anhörung der Trinkwasserkommission des Bundesministeriums für Gesundheit. Bundesgesundheitsbl - Gesundheitsforsch - Gesundheitsschutz, 46, 249-251.  
[www.umweltbundesamt.de/wasser/themen/downloads/trinkwasser/Empfehlung-Nicht-bewertbare-Stoffe.pdf](http://www.umweltbundesamt.de/wasser/themen/downloads/trinkwasser/Empfehlung-Nicht-bewertbare-Stoffe.pdf).
- [45] WHO (1997). Environmental Health Criteria (EHC) 194: Aluminium. International Programme on Chemical Safety (IPCS), <http://www.who.int/ipcs/publications/ehc/en/>. Geneva.
- [46] UBA (2009). Grenzwerte, Leitwerte, Orientierungswerte, Maßnahmenwerte – Definitionen und Festlegungen mit Beispielen aus dem UBA.  
[http://www.umweltdaten.de/wasser/themen/trinkwassertoxikologie/grenzwerte\\_leitwert\\_e.pdf](http://www.umweltdaten.de/wasser/themen/trinkwassertoxikologie/grenzwerte_leitwert_e.pdf). Umweltbundesamt, Berlin, Germany.
- [47] Trinkwasserkommission des Bundesministeriums für Gesundheit (2007). Aktuelle gesundheitliche und gewässerhygienische Bewertung perfluorierter Verbindungen (PFC). <http://www.umweltdaten.de/wasser/themen/trinkwasserkommission/fazit-hbm-studie-pft.pdf>. Umweltbundesamt, Berlin, Germany.
- [48] Butcher, G. A. (1988). Water quality criteria for aluminum technical appendix.
- [49] Pacheco, M. A. W., Linton, T. K. (2005). Indirect effects of contaminants are here to stay. SETAC Globe, 6(2), 29-40.
- [50] Butcher, G. A. (2001). Water quality criteria for aluminum. Updated: August 7, 2001,