

TEXTE

85/2014

Maßnahmen zur Verminderung des Eintrages von Mikroschadstoffen in die Gewässer

Materialanhang

TEXTE 85/2014

Umweltforschungsplan des
Bundesministeriums für Umwelt,
Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit

Forschungskennzahl 3712 21 225
UBA-FB 002037

Maßnahmen zur Verminderung des Eintrages von Mikroschadstoffen in die Gewässer

Materialanhang

von

Thomas Hillenbrand, Felix Tettenborn, Eve Menger-Krug,
Frank Marscheider-Weidemann
Fraunhofer-Institut für System- und Innovationsforschung (Fraunhofer ISI),
Karlsruhe

Stephan Fuchs, Snezhina Toshovski, Steffen Kittlaus
Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Institut für Wasser und
Gewässerentwicklung, Karlsruhe

Steffen Metzger, Imee Tjoeng
Kompetenzzentrum Spurenstoffe Baden-Württemberg (KomS), Stuttgart

Paul Wermter
Forschungsinstitut für Wasser- und Abfallwirtschaft an der RWTH Aachen
(FiW) e. V., Aachen

Michael Kersting
Ruhr-Forschungsinstitut für Innovations- und Strukturpolitik (RUFIS) e.V. ,
Bochum

Christian Abegglen
Plattform "Verfahrenstechnik Mikroverunreinigungen" VSA, Zürich

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 System- und Innovationsforschung ISI (Fraunhofer ISI),
Breslauer Str. 48, 76139 Karlsruhe

in Zusammenarbeit mit :

Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Institut für Wasser und Gewässerentwicklung,
Karlsruhe

Kompetenzzentrum Spurenstoffe Baden-Württemberg (KomS), Stuttgart

Forschungsinstitut für Wasser- und Abfallwirtschaft an der RWTH e. V., Aachen

Ruhr-Forschungsinstitut für Innovations- und Strukturpolitik (RUFIS) e.V. , Bochum

Plattform "Verfahrenstechnik Mikroverunreinigungen" VSA, Zürich

Abschlussdatum:

2014

Redaktion:

Fachgebiet II 2.1 Übergreifende Angelegenheiten Wasser und Boden
Cindy Mathan

Publikationen als pdf:

[http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/massnahmen-zur-
verminderung-des-eintrages-von](http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/massnahmen-zur-
verminderung-des-eintrages-von)

ISSN 1862-4804

Dessau-Roßlau, Januar 2015

Das diesem Bericht zu Grunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit unter der Forschungskennzahl 3712 21 225 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autorinnen und Autoren.

Inhaltsverzeichnis

Kurzbeschreibung	4
Anhang 1: Informationen zu Aktivitäten während der Projektlaufzeit	5
Fachgespräch am 30. September 2013.....	5
Abschluss-Workshop am 14. Mai 2014	8
Anhang 2: Stoffdaten als Ergänzung zu Kapitel 3 des Hauptberichts, Analyse, Quantifizierung und Relevanzbewertung der Quellen und Eintragspfade der ausgewählten Mikroschadstoffe in die Gewässer	11
Terbutryn.....	11
Triclosan.....	12
Tributylzinnverbindungen (TBT)	13
PFOS 14	
HBCDD	15
Anhang 3: Flussdiagramme der Stoffeintragsberechnung	16

Kurzbeschreibung

Im Folgenden werden zusätzliche Informationen zu dem Endbericht des Vorhabens des Umweltforschungsplans „Maßnahmen zur Verminderung des Eintrages von Mikroschadstoffen in die Gewässer“ (Forschungskennzahl 3712 21 225“) aufgeführt. Diese umfassen

- Informationen zu Veranstaltungen während der Projektlaufzeit
 - Fachgespräch am 30. September 2013
 - Abschluss-Workshop am 14. Mai 2014
- Ausgewählte Stoffdaten zu Kapitel 3 des Hauptberichts: Analyse, Quantifizierung und Relevanzbewertung der Quellen und Eintragspfade der betrachteten Mikroschadstoffe
- Flussdiagramme der Stoffeintragsberechnung

Anhang 1: Informationen zu Aktivitäten während der Projektlaufzeit

Fachgespräch am 30. September 2013

Im Rahmen eines Fachgesprächs wurden wichtige Inhalte und Zwischenergebnisse des Projekts vorgestellt und diskutiert. Die Tagesordnung zeigt Tabelle 1. Zu Beginn des Fachgesprächs wurden von Herrn Irmer (UBA) und Herrn Heidemeier (UBA) verschiedene Hintergründe des Forschungsvorhabens dargelegt. Danach besteht trotz zahlreicher, bereits bestehender Regelungen auf internationaler bzw. europäischer Ebene sowie auf nationaler Ebene Handlungsbedarf, um die stofflichen Probleme in den Gewässern lösen zu können. Dazu sind die Quellen der Belastungen zu erheben, die bestehenden Lücken der existierenden Regelungen zu identifizieren und zusätzlich mögliche Maßnahmen hinsichtlich ihrer Wirksamkeit zu bewerten. Dabei sind sowohl stoffspezifische Regelungen als auch End of Pipe Maßnahmen zu berücksichtigen.

Herr Hillenbrand (Fraunhofer ISI) stellte die übergeordnete Zielsetzung des Projektes sowie die verschiedenen Arbeitspakete vor. Im Rahmen des Fachgesprächs wurden

- ▶ die Datengrundlage der Stoffflussanalysen,
- ▶ die Schwerpunkte der Emissionsminderungsmaßnahmen,
- ▶ die Vorgehensweise und ersten Ergebnisse der Stoffeintragsmodellierung sowie
- ▶ die methodische Grundlage, die Datenbasis und Zwischenergebnisse der Kostenabschätzungen zur 4. Reinigungsstufe

am Beispiel ausgewählter Mikroschadstoffe vorgestellt und diskutiert.

Die Vorgehensweise und das Ergebnis bei der Auswahl relevanter Mikroschadstoffe wurden von Herrn Tettenborn (Fraunhofer ISI) beschrieben. Außerdem stellte er die Methodik der Stoffflussbetrachtung und für Terbutryn, Nonylphenol, die PAKs sowie verschiedene Arzneimittel die erzielten Ergebnisse vor.

Mögliche Emissionsminderungsmaßnahmen sowie Maßnahmenkombinationen für Mikroschadstoffe wurden anschließend von Herrn Hillenbrand (Fraunhofer ISI) näher betrachtet. Einige der Maßnahmenansätze wie die 4. Reinigungsstufe können bei allen näher betrachteten Stoffe eine Minderung der Gewässerbelastungen bewirken, zusätzlich sind jedoch auch sehr spezifische Ansätze möglich und sinnvoll wie z.B. die Stoffsubstitution oder Verkapselung bei der Verwendung von Terbutryn im Baubereich, ein Einfuhrverbot für Textilien, die mit NPEO behandelt wurden, oder die sichere Entsorgung von Arzneimittelresten. Für das Projekt relevant ist dabei jeweils die Unterscheidung zwischen bereits umgesetzten bzw. eingeleiteten sowie zusätzlichen Maßnahmen. Um eine ausreichende Kosten-Effizienz und Wirkung zu erreichen, werden Maßnahmenkombinationen notwendig werden. In der Diskussion wurde deutlich gemacht, dass für die prioritär gefährlichen Stoffe auf alle Fälle Maßnahmenprogramme notwendig sind. Bei der Kommission wird derzeit kein Bedarf für zusätzliche EU-weite Maßnahmen gesehen.

Herr Abegglen (VSA, Schweiz) stellte den Stand der Umsetzung von Maßnahmen zur Spurenstoffeliminierung in der Schweiz vor. Maßnahmen in den Abwasserreinigungsanlagen sollen bei großen Anlagen (Frachtreduktion, Oberliegerverantwortung), bei Anlagen an Gewässern mit hohem Abwasseranteil (Schutz von Ökosystemen) und bei Anlagen an Gewässern, die für die Trinkwassergewinnung relevant sind (vorsorglicher Trinkwasserschutz) umgesetzt werden. Davon wären etwa 100 (von 700) Anlagen bzw. 50 – 60% des Abwassers betroffen. Nach jetzigem Stand könnten die dazu notwendigen Änderungen des Gewässerschutzgesetzes (GSchG) Ende 2014 in Kraft treten. Hinsichtlich des Eintrags über diffuse Quellen laufen derzeit Projekte zur Quantifizierung und Relevanzbewertung unterschiedlicher Eintragspfade. In der Diskussion wurde die Bildung von Nebenprodukten bei der Ozonung als 4. Reinigungsstufe angesprochen. Erforderlich ist eine Nachbehandlungsstufe.

Erste Ergebnisse der Modellierung der Stoffeinträge über das Modell MoRE präsentierte Herr Fuchs (KIT). Beschrieben wurden dazu die Berechnungsansätze, die verfügbaren Daten sowie vorhandene Datenlücken. Für das Neckar-Gebiet sowie das Rems-Gebiet wurde damit beispielhaft das Reduktionspotential für Diclo-

fenac über eine 4. Reinigungsstufe aufgezeigt. Diskutiert wurden die richtige Bezugsgröße hinsichtlich der Wassermenge des Gewässers (MNQ, Vorgehensweise in NRW) sowie der Umgang mit den Schwankungen der Eingangsdaten. Die ebenfalls angesprochene Validierung der Berechnungen anhand von Gütedaten ist im weiteren Projektverlauf vorgesehen.

Im abschließenden Vortrag berichteten Herr Metzger (KOMS) und Herr Kersting (RUFIS) über die Rahmenbedingungen und Kostenschätzungen für eine 4. Reinigungsstufe. Nach einer Übersicht über die verschiedenen technischen Verfahren zur Spurenstoffelimination auf kommunalen Kläranlagen (mit unterschiedlichen Eliminationsleistungen für die verschiedenen Spurenstoff-Gruppen) wurde die Vorgehensweise zur Kostenhochrechnung für Kläranlagen Größenklasse 4 und 5 dargestellt. Dazu wurden Literaturdaten ausgewertet, bei unterschiedlichen Währungen und Bezugsjahren Preiskorrekturen vorgenommen und die Einzeldaten den verschiedenen Eliminationsverfahren zugeordnet. Daraus konnten Gesamtkosten bzw. Jahreskosten für unterschiedliche Kläranlagengrößen in den Größenklassen 4 und 5 berechnet werden. Bei den Ergebnissen sind jedoch die bestehenden „Unschärfen“ der Kostenkennzahlen zu berücksichtigen, sowohl hinsichtlich der statistischen Unsicherheiten der Kostenschätzungen als auch hinsichtlich des geforderten Umfangs der Reinigungsleistung und den sich daraus ergebenden Konsequenzen für die Ausbaugröße bzw. die notwendigen Betriebskosten (Ozon- bzw. Aktivkohle-Bedarf). In der Diskussion angesprochen wurde der mögliche Zusatznutzen einer 4. Stufe, bspw. durch die (fast) vollständige Entfernung der Partikel, sowie eine mögliche Verrechnung der Investitionen mit der Abwasserabgabe.

Tabelle 1: Tagesordnung des Fachgesprächs am 30. September 2013








Fachgespräch

zum Forschungs- und Entwicklungsvorhaben des Umweltbundesamtes
**„Maßnahmen zur Verminderung des Eintrages von
Mikroschadstoffen in die Gewässer“** (FKZ: 3712 21 225)

Datum: 30.09.2013 **Ort:** Raum 1134,
Zeit: 10:00-16:30 Uhr Bismarckplatz 1, Berlin

Agenda

10:00	Begrüßung <i>(UBA)</i>
10:05	Ziele des Projektes <i>Dr. Joachim Heidemeier (UBA)</i>
10:15	Konzeption und Überblick über das Projekt <i>Dr.-Ing. Thomas Hillenbrand (Fraunhofer ISI)</i>
10:30	Emissionsmuster und Stoffflussanalysen für ausgewählte Mikroschadstoffe <i>Dr.-Ing. Felix Tettenborn (Fraunhofer ISI)</i>
Diskussion	
11:15	Mögliche Maßnahmen bzw. Maßnahmenkombinationen zur Emissionsminderung bei Mikroschadstoffen <i>Dr.-Ing. Thomas Hillenbrand (Fraunhofer ISI)</i>
12:00	Erfahrungen aus der Schweiz bei der Umsetzung von Maßnahmen <i>Dr. Christian Abegglen (VSA)</i>
Mittagspause	
13:30	Modellierung der Umsetzung von Maßnahmen in dem Stoffeintragsmodell MoRE <i>Dr.-Ing. Stephan Fuchs (KIT-IWG)</i>
Diskussion	
Kaffeepause	
15:00	Rahmenbedingungen und Kostenschätzung für eine 4. Reinigungsstufe <i>Dr. Steffen Metzger (KomS)</i> <i>Dr. Michael Kersting (RUFIS)</i> <i>Hr. Paul Wermter (FIW)</i>
Abschlussdiskussion	
16:30	Ende der Veranstaltung



**Umwelt
Bundes
Amt**
Für Mensch und Umwelt

Abschluss-Workshop am 14. Mai 2014

Auf dem Abschluss-Workshop am 14. Mai 2014 in Berlin waren zahlreiche Akteure aus Wasserwirtschaft, Verbänden, Behörden, Pharmaindustrie vertreten. Im Rahmen der in Tabelle 2 aufgeführten Tagesordnung wurden wichtige Ergebnisse des Projektes vorgestellt. Die jeweils sich anschließenden Diskussionen waren angeregt, aber sachlich. Einige der diskutierten Aspekte sind im Folgenden beschrieben:

Vielzahl der (potentiellen) Mikroschadstoffe: Angesichts der Vielzahl der (potentiellen) Mikroschadstoffe stellt sich die Frage, wie mit der Komplexität umgegangen werden kann. Einzelstoffbetrachtung, Betrachtung von Substanzklassen, und die holistische Betrachtung der Thematik über alle Mikroschadstoffe und Umweltkompartimente müssen sich ergänzen. Einzelstoffbetrachtung hilft, kosteneffiziente quellenorientierte Maßnahmen zu identifizieren und zu bewerten. Dagegen kann die Kosteneffizienz von Maßnahmen auf der Kläranlage nur unter Einbezug aller (potentiellen) Mikroschadstoffe (Breitbandeffekt der Maßnahmen) bewertet werden. Daraus ergibt sich die Frage, wie sich die verschiedenen Stoffe miteinander vergleichen lassen. Ein Vergleich auf Fracht-Basis ist ein erster Ansatz, ein Vergleich auf Basis der prozentualen Emissionen bzw. Emissionsminderung (in % der Emissionen zu Wasser bzw. in die Umwelt) würde jedoch zusätzliche Informationen liefern. Dies erfordert allerdings eine gute Datengrundlage (bspw. über detaillierte Substanz- bzw. Stoffflussanalysen) für jeden Stoff.

Vergleichbarkeit der Wirkung von Maßnahmen: Analog wurde die Frage nach der Vergleichbarkeit der Wirkung der Anlagen/Verfahren (z.B. Aktivkohle und Ozonierung) diskutiert, ebenso die Unterschiede in der Wirkung von quellenorientierten Maßnahmen und End-of-Pipe Maßnahmen (4. Reinigungsstufe). Die Substitution ist spezifisch für jeden Stoff bzw. jede Anwendung. Sie hat eine Verzögerung bis sie wirksam wird (F&E, Demonstration, Diffusion, Umweltwirkung) und kann dann allerdings eine 100%ige Reduktion des substituierten Stoffs erreichen. Dabei ist die Umweltrelevanz der Substitute zu berücksichtigen. Die Zusammenarbeit mit der Industrie (Produktion und Anwendung) ist wichtig. Dagegen erfasst die 4. Reinigungsstufe eine Vielzahl von Stoffen und kann, abgesehen von den Zeiten für die politische Rahmgestaltung und den anlagenbezogenen Planungs- und Bauzeiten, sehr direkt zu einer Reduktion führen. So können sich beide Maßnahmenansätze ergänzen.

Vielzahl der Humanarzneistoffe (HAS): Auch die HAS sind eine diverse Gruppe. Viele zeigen ökotoxikologische Effekte, aber bspw. Röntgenkontrastmittel sind inert und zeigen keine wirkungsseitigen Effekte. Aber sie werden in großen Mengen eingesetzt und sind trinkwasserrelevant (Uferfiltrat-gängig). Im Bereich der HAS ist es besonders wichtig, Industrie und Vertreter aus dem Gesundheitswesen einzubeziehen. In Schweden gibt es die „Wise List“, eine holistische Strategie im schwedischen Gesundheitssystem mit dem Ziel:

- ▶ Maximierung des Nutzens für den Patienten und
- ▶ Minimierung von Nebenwirkungen, Kosten und *Umweltwirkungen*.

(<http://www.janusinfo.se/In-English/>)

Es wurde diskutiert, ob und wie sich das vorgestellte Szenario „minus 20% Verbrauch von Diclofenac“ realisieren lässt. Dabei sind sowohl reduzierte Verkaufsmengen wie auch eine verbesserte Entsorgung (Rücknahme Restbestände, keine Entsorgung über Toilette/Ausguss) zu berücksichtigen.

Im Bereich der HAS sind Substitutionen ein besonders sensibles Thema. Der Nutzen für den Patienten sollte im Vordergrund stehen. Die Entwicklung „Grüner Wirkstoffe“ ist langwierig und kostenintensiv (lange Innovationszyklen). Es gibt Beispiele von Zytostatika, bei denen bessere Verträglichkeit für den Patienten und bessere Umweltverträglichkeit Hand in Hand gehen. Auch die finanziellen Interessen der Pharmaindustrie sind zu berücksichtigen. Einerseits kann ggf. mit „Grünen Wirkstoffen“ ein größerer Marktanteil gewonnen werden, andererseits bedeutet die Entwicklung und Zulassung einen hohen Aufwand.

Verursacherprinzip, Kosten und Akzeptanz: Es wurde diskutiert, dass eine Einführung der 4. Reinigungsstufe das Verursacherprinzip missachtet. Neben einer verbesserten Abwasserreinigung sind quellenorientierte Maßnahmen mit zu berücksichtigen, auch um die Akzeptanz in der Bevölkerung zu erhöhen. Allerdings ist

zu beachten, dass auch die Bevölkerung durch ihren Konsum als Verursacher gelten kann (Reinigungsmittel, Haushaltschemikalien, Medikamente etc.). Es wurde angesprochen, dass die komplexe Problematik der Mikroschadstoffe ein gemeinsames Handeln unter Einbezug der Gesellschaft, Industrie und Politik erfordert. Auch die Bedeutung der Landwirtschaft wurde hervorgehoben.

Selbstverständnis der Wasserwirtschaft: Die Wasserwirtschaft sieht sich als Sammelsystem und Barriere für Emissionen zu Wasser bzw. in die Umwelt. Kläranlagen sind nicht „Verursacher“ der Emissionen. Dieses positive Image sollte auch in der Bevölkerung verankert werden.

Kalkulatorische Kosten für die Betreiber: Für die Betreiber ist es wichtig, die betrieblichen Kosten zur Verfügung zu haben (Aufteilung Betriebskosten – Investitionen, Kostenberechnung nach LAWA). Es stellt sich die Frage, wie die Kosten dann in den Tarifen abgebildet werden und wie die Akzeptanz der Kunden ist.

In stärker technisch orientierten Fragen wurde die Notwendigkeit einer Nachbehandlung nach der 4. Reinigungsstufe sowie der durch eine 4. Stufe verursachte Energieverbrauch angesprochen.

Tabelle 2: Tagesordnung des Abschlussworkshops



Abschlussworkshop

zum UFOPLAN-Vorhaben
„Maßnahmen zur Verminderung des Eintrages von
Mikroschadstoffen in die Gewässer“ (FKZ: 3712 21 225)

Datum: 14.05.2014
Zeit: 10:00-16:00 Uhr
Ort: Raum 4 im Presse- und Besucherzentrum des BPA,
Eingang Reichstagufer 14, 10117 Berlin-Mitte

Agenda

- 10:00 Begrüßung *Dr. Ulrich Imer (UBA)*
- 10:05 Ziele und Hintergründe des Projektes *Dr. Joachim Heidemeier (UBA)*
- 10:15 Überblick über das Projekt und methodische Vorgehensweise
Dr.-Ing. Thomas Hillenbrand (Fraunhofer ISI)
- 10:45 Stoffauswahl, Emissionsmuster und Stoffflussanalysen ausgewählter
Mikroschadstoffe *Dr.-Ing. Felix Tettenborn (Fraunhofer ISI)*
- 11:15 Ansätze für (stoff- und produktspezifische) Emissionsminderungsmaßnahmen
Dr.-Ing. Thomas Hillenbrand (Fraunhofer ISI)
- 11:45 Umgang mit Mikroschadstoffen in der Schweiz
Dr. Christian Abegglen (VSA)
- Diskussion
- Mittagspause
- 13:30 Kosten und Effizienz einer 4. Reinigungsstufe
Dr. Steffen Metzger (Koms), Dr. Michael Kersting (RUFIS)
- 14:00 Maßnahmenkombinationen zur Emissionsminderung bei Mikroschadstoffen
Dr.-Ing. Felix Tettenborn (Fraunhofer ISI)
- Diskussion
- Kaffeepause
- 15:00 Stoffeintragsmodellierung am Fallbeispiel Neckar
Dr.-Ing. Stephan Fuchs (KIT-IWG); Paul Wermter (RWTH Aachen, FiW)
- 15:30 Schlussfolgerungen *Dr.-Ing. Thomas Hillenbrand (Fraunhofer ISI)*
- Abschlussdiskussion
- 16:00 Ende der Veranstaltung



Anhang 2: Stoffdaten als Ergänzung zu Kapitel 3 des Hauptberichts, Analyse, Quantifizierung und Relevanzbewertung der Quellen und Eintragspfade der ausgewählten Mikroschadstoffe in die Gewässer

Terbutryn

Tabelle 3: Stoffdaten zu Terbutryn

Hauptname	Terbutryn
CAS- Nummer	886-50-0
IUPAC- Name	2-(Ethylamino)-4-(tert-butylamino)-6-(methylthio)-1,3,5-triazin
Chemische Klasse	Triazine
EG-Nummer	212-950-5
Summenformel	C ₁₀ H ₁₉ N ₅ S
Molekulargewicht	241,36 g/mol
Aggregatzustand	fest
<i>Chemisch-physikalische Stoffeigenschaften</i>	
Wasserlöslichkeit	25 mg/l (20°C)
Schmelzpunkt	104 °C
Siedepunkt	154-160°C (0,08 mbar)
Brennbarkeit	brennbar; Zündtemperatur: 460°C
Explosivität	Staub kann mit Luft explosionsfähige Mischungen bilden
Sorptionsverhalten (K _{oc} -Wert Boden) (Meller 2002)	800-11660
Bioakkumulation (Meller 2002)	BCF (Asellus aquaticus) ≈ 30 BCF (Gammarus fossarum) ≈ 13 BCF (Lumbriculus variegatus) ≈ 9
aquatische Toxizität	LC50 Fisch (96 Stunden) 3 mg/l
<i>Einstufung</i>	
Klassifizierung	Xn Gesundheitsschädlich; N Umweltgefährlich
Wassergefährdungsklasse	WGK 2
MAK-Wert	20 mg/m ³

Quellen: Terbutryn EQS dossier (2011) und GESTIS (2014)¹

¹ <http://gestis.itrust.de/nxt/gateway.dll?f=id&id=490296&t=document-frameset.htm&3.0&p=>

Triclosan

Tabelle 4: Stoffeigenschaften von Triclosan

Hauptname	Triclosan
Weitere Bezeichnungen	2,4,4'-Trichlor-2'-hydroxydiphenylether; 5-Chlor-2-(2,4-dichlorphenoxy)phenol; Irgasan (Handelsname)
Stoffgruppe	polychloriertes Phenoxyphenol
Summenformel	C ₁₂ H ₇ Cl ₃ O ₂
CAS-Nummer	3380-34-5
EG-Nummer	222-182-2
Molekulargewicht in g/mol	289,6
Schmelzpunkt in °C	54-57
Wasserlöslichkeit in g/l (20°C)	< 0,01
Fettlöslichkeit als log K _{ow}	4,66-4,8 (pH abhängig)
Sorptionsverhalten als K _{oc} (für Belebtschlamm, pH 7)	47.500
Biokonzentrationsfaktor BCF in L/kg	1.500 (Mittelwert, bestimmt für Muskelge- webe, bezogen auf Frischgewicht)
Flüchtigkeit als Dampfdruck in Pa (20°C)	0,0005-0,0007
Henry-Koeffizient in Pa*m ³ /mol	5,07*10 ⁻²
pKa	7,9-8,14 (20°C)

Quellen: GESTIS Stoffdatenbank (2014), Rüdel et al. (2004)², Luhnstedt (2010), Eisenbrand und Schreier (2006), Orvos, David R., Versteeg, Donald J. et al. (2001)

² Zitiert aus

CIBA 1990, CIBA 1997 (zitiert in REISS, R., N. MACKAY, C. HABIG, J. GRIFFIN (2002): An ecological risk assessment for triclosan in lotic systems following discharge from wastewater treatment plants in the United States. Environ. Toxicol. Chem. 21(11), 2483-2492.)

MITI 1992 (zitiert in SFT - STATENS FORUNSNINGSTILSYN (NORWEGISCHE SCHADSTOFFKONTROLLBEHÖRDE) (2002a): Classification Proposal for Triclosan. Abrufbar unter http://www.sft.no/nyheter/dokumenter/Classificationproposal_triclosan.pdf)

CIBA 2001a (zitiert in MORRALL, D., D. MCAVOY, B. SCHATOWITZ, J. INAUE, M. JACOB, A. HAUKE, W. ECKHOFF (2004): A field study of triclosan loss rates in river water (Cibolo Creek, TX). Chemosphere 54(5), 653-660.)

CIBA SAFETY DATA SHEET (1999): IRGASAN DP 300 (Triclosan), Product-Ident-No. 030249.0, Date: 29.07.1999.

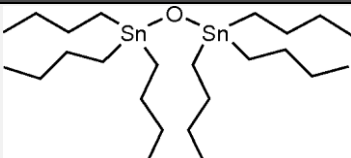
CIBA 1998 (zitiert in WIND T, U. WERNER, M. JACOB, A. HAUKE (2004): Environmental concentrations of boron, LAS, EDTA, NTA and Triclosan simulated with GREAT-ER in the river Itter. Chemosphere 54(8), 1135-44.)

SCC 2002, SCHMIDT 1990 (zitiert in SCHETTGEN, C. (2000): Bioakkumulation von Triclosan bei verschiedenen pH-Werten des Wassers und der Pyrethroide Cyfluthrin, Cypermethrin, Deltamethrin und Permethrin. Dissertation, Universität Oldenburg 2000. Abrufbar unter <http://docserver.bis.uni-oldenburg.de/publikationen/dissertation/2000/schbio00/schbio00.html>.)

TIXIER, C., H. P. SINGER, S. CANONICA, S. R. MÜLLER (2002): Phototransformation of triclosan in surface waters: A relevant elimination process for this widely used biocide - Laboratory studies, field measurements, and modelling. Environ. Sci. Technol. 36, 3482-3489.

Tributylzinnverbindungen (TBT)

Tabelle 5: Stoffeigenschaften von TBT

Hauptname	Tributylzinnoxid (TBTO)
Strukturformel	
Stoffgruppe	Zinnorganische Verbindungen
Summenformel	$C_{24}H_{54}OSn_2$
CAS-Nummer	56-35-9 TBT (Kation): 36643-28-4
EG-Nummer	200-268-0
Molekulargewicht in g/mol	596,11
Schmelzpunkt in °C	< -45
Wasserlöslichkeit in mg/l (20°C)	0,75 (pH 6 – 6,6); 4 (pH 7, 20°C)
Fettlöslichkeit als log K_{ow}	3,2-3,8
Sorptionsverhalten als K_{oc}	Sediment: 1.030 – 3.750 l/kg
Bioakkumulation in aquatischen Organismen als Bioakkumulationsfaktor BCF in L/kg	hoch (Biokonzentrationsfaktoren > 1.000)
Flüchtigkeit als Dampfdruck in Pa (20°C)	ca. 0,001 (für das technische Produkt)
Henry-Koeffizient in Pa*m ³ /mol	0,02

Quellen: Nehring, 2001; UBA, 2000; Kuch/ Ballschmiter, 1999; Krinitz/Stachel, 1999; GESTIS, 2006; BUA, 2003

PFOS³

Tabelle 6: Stoffdaten PFOS

Hauptname:	Perfluorooctansulfonat (PFOS)
CAS- Nummer	1763-23-1 (acid) 2795-39-3 (potassium salt) 29081-56-9 (ammonium salt) 29457-72-5 (lithium salt) 70225-39-5 (diethanolamine salt) 56773-42-3 (tetraethyl-ammonium salt) 251099-16-8 (didecyldimethyl-ammonium salt)
Chemische Klasse	Perfluorierte Substanzen
EG-Nummer	217-179-8 (acid) 220-527-1 (potassium salt) 249-415-0 (ammonium salt) 249-644-6 (lithium salt)
Summenformel	C ₈ F ₁₇ SO ₃
Molekulargewicht in g/mol	500 (acid) 538 (potassium salt)
Chemisch-physikalische Stoffeigenschaften	
Wasserlöslichkeit in mg/l (20°C)	570
Schmelzpunkt	≥ 400°C
Siedepunkt	unbekannt
Fettlöslichkeit als log K _{ow}	keine verlässlichen Angaben vorhanden
Sorptionsverhalten als K _{oc}	66 (basierend auf unsicheren Daten)
Bioakkumulation in aquatischen Organismen als Bioakkumulationsfaktor BCF	2796
Toxizität als NOEC	< 0,01 mg/l (Oryzias latipes / 14 d)
Flüchtigkeit als Dampfdruck in Pa	3,31 *10 ⁻⁴
Löslichkeit eines Gases in einer Flüssigkeiten als Henry - Konstante in Pa*m ³ /mol (20°C)	3.19x10 ⁻⁴ Pa

Quelle: PFOS EQS dossier (2011)

³ Basierend u.a. auf der Arbeit „Neue prioritäre/prioritär gefährliche Stoffe der Richtlinie 2013/39/EU des Europäischen Parlaments und des Rates - Stoffdatenblätter“ im Rahmen des parallelen Vorhabens „Entwicklung europäischer Leitlinien für die Bestandsaufnahme der Emissionen, Einleitungen und Verluste gemäß Art. 5(1) und 5(6) der Tochterrichtlinie zu prioritären Stoffen“ (Forschungskennzahl 3709 67 219).

HBCDD⁴

Tabelle 7: Stoffdaten zu HBCDD

Hauptname:	Hexabromcyclododecan
CAS- Nummer	3194-55-6
IUPAC- Name	602-109-00-4
EG-Nummer	221-695-9
Summenformel	C₁₂H₁₈Br₆
Molekulargewicht	641,7 g/mol
Aggregatzustand	fest
Wasserlöslichkeit	0,08 mg/l bei 20°C (praktisch unlöslich)
Oktanol-Wasser- Verteilungskoeffizient K_{ow}	5,1-5,6
Sorptionsverhalten (log K_{oc}-Wert Boden)	4,66
BCF (Fisch)	18.100
Toxizität (NOEC)	3,1 µg/l (Daphnien)
Persistenz (DT₅₀)	> 120 (belüfteter Boden)
Einstufung	
Klassifizierung	Xn
Wassergefährdungsklasse	2 - wassergefährdend

Quellen: HBCDD EQS dossier (2011) und GESTIS (2014)⁵

⁴ Basierend u.a. auf der Arbeit „Neue prioritäre/prioritär gefährliche Stoffe der Richtlinie 2013/39/EU des Europäischen Parlaments und des Rates - Stoffdatenblätter“ im Rahmen des parallelen Vorhabens „Entwicklung europäischer Leitlinien für die Bestandsaufnahme der Emissionen, Einleitungen und Verluste gemäß Art. 5(1) und 5(6) der Tochterrichtlinie zu prioritären Stoffen“ (Forschungskennzahl 3709 67 219).

⁵ [http://gestis.itrust.de/nxt/gateway.dll?f=id&id=024410&t=document-frameset.htm\\$3.0&p=](http://gestis.itrust.de/nxt/gateway.dll?f=id&id=024410&t=document-frameset.htm$3.0&p=)

Anhang 3: Flussdiagramme der Stoffeintragsberechnung

Inhaltsverzeichnis Anhang 3

Anleitung für Flussdiagramme	17
Legende	17
PAK	18
Einträge über kommunale Kläranlagen	18
Einträge über atmosphärische Deposition auf die Gewässeroberfläche	23
Einträge über Binnenschifffahrt	25
Einträge über Oberflächenabfluss	27
Einträge über Erosion	29
Einträge über Grundwasser	36
Einträge über Drainagen	37
Einträge über Kanalisationssysteme	40
Nonylphenol	46
Einträge über kommunale Kläranlagen	46
Einträge über Kanalisationssysteme	51
Arzneimittel	57
Einträge über kommunale Kläranlagen	57
Einträge über Kanalisationssysteme	70
Einwohner	75
Flächen	77
Wasserbilanz	86

Anleitung für Flussdiagramme:

Die Flussdiagramme dienen zur Dokumentation der in MoRE angelegten Rechenschritte für die Berechnung der Stoffeinträge. Zudem veranschaulichen sie die Berechnungsansätze, die zum Teil sehr komplex und ohne eine graphische Darstellung schwer nachvollziehbar sein können.

Die Flussdiagramme sind immer von links nach rechts zu lesen. Auf der linken Seite sind die Variablen, die verwendet werden, um eine neue Variable zu berechnen. Mittig und auf der rechten Seite stehen die Variablen, die in diesem Rechenschritt berechnet werden.

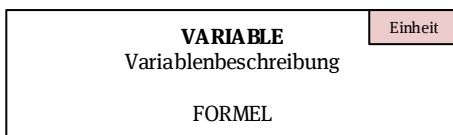
Die Flussdiagramme beziehen sich jeweils auf Stoffgruppen, nicht auf die einzelnen zu betrachtenden Stoffe.

In der Legende unten ist die Bedeutung der verwendeten Formen erklärt.

Legende:



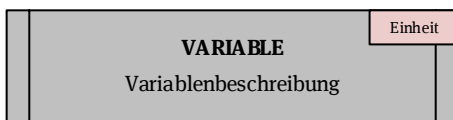
Enthält die Eingangsdaten für die Berechnung. Sie können Modellkonstanten, raumbezogene, raum- und zeitbezogene und punkt- und zeitbezogenen Variablen sein.



Enthält die Variablen, die anhand von Eingangsdaten oder Zwischenergebnissen berechnet werden. Der Berechnungsansatz bzw. die Formel wird ebenfalls angezeigt.



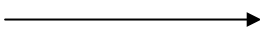
Enthält Variablen, die in einem vorherigen Rechenschritt aus dem gleichen Rechenstapel schon berechnet wurden.



Enthält Variablen, die in einem anderen Rechenstapel berechnet werden.



Enthält die Variablen, die ein Endergebnis sind.



Verbindungspfeile & Rechenrichtung



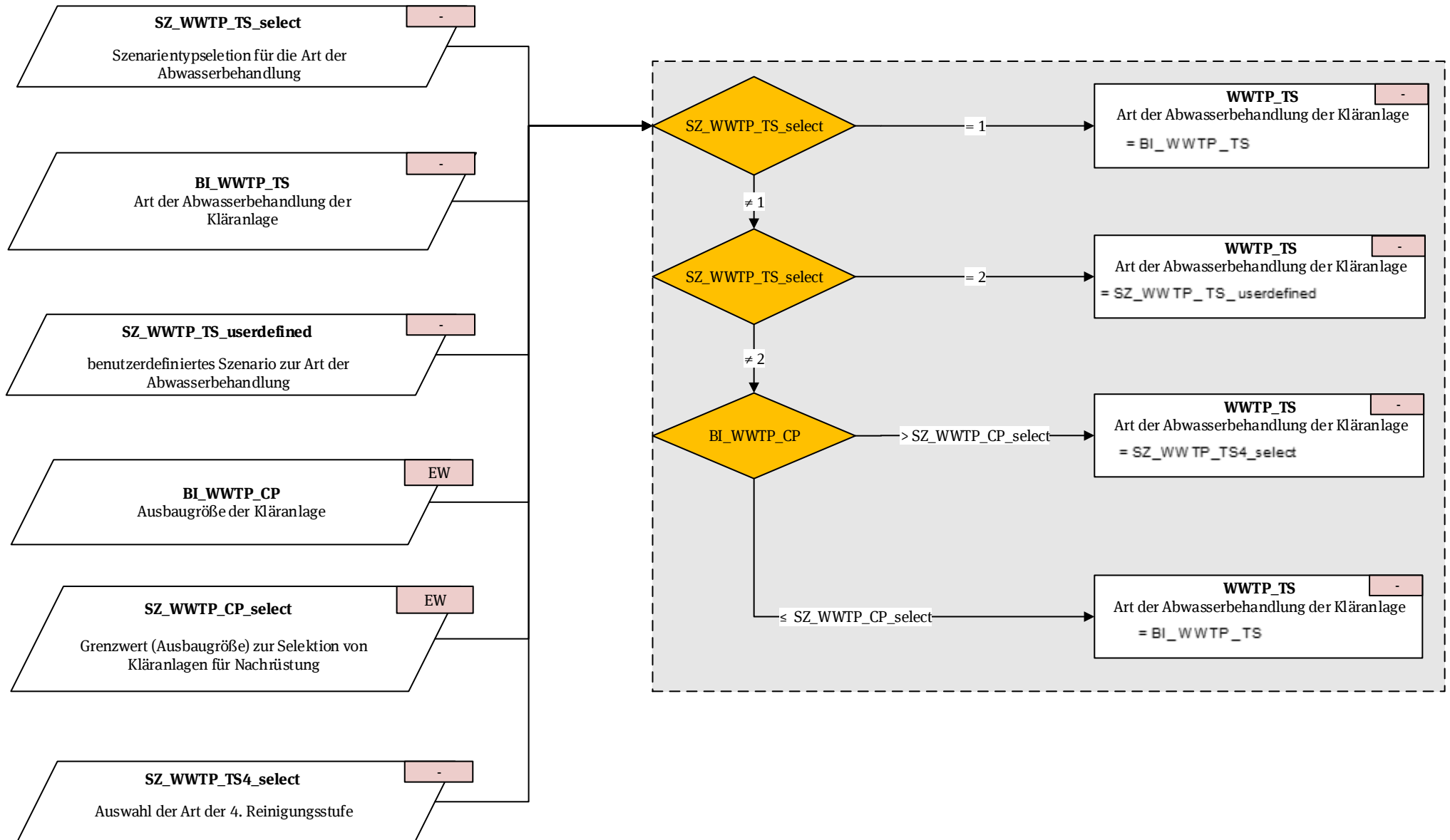
Zusammenfassung möglicher Ergebnisse



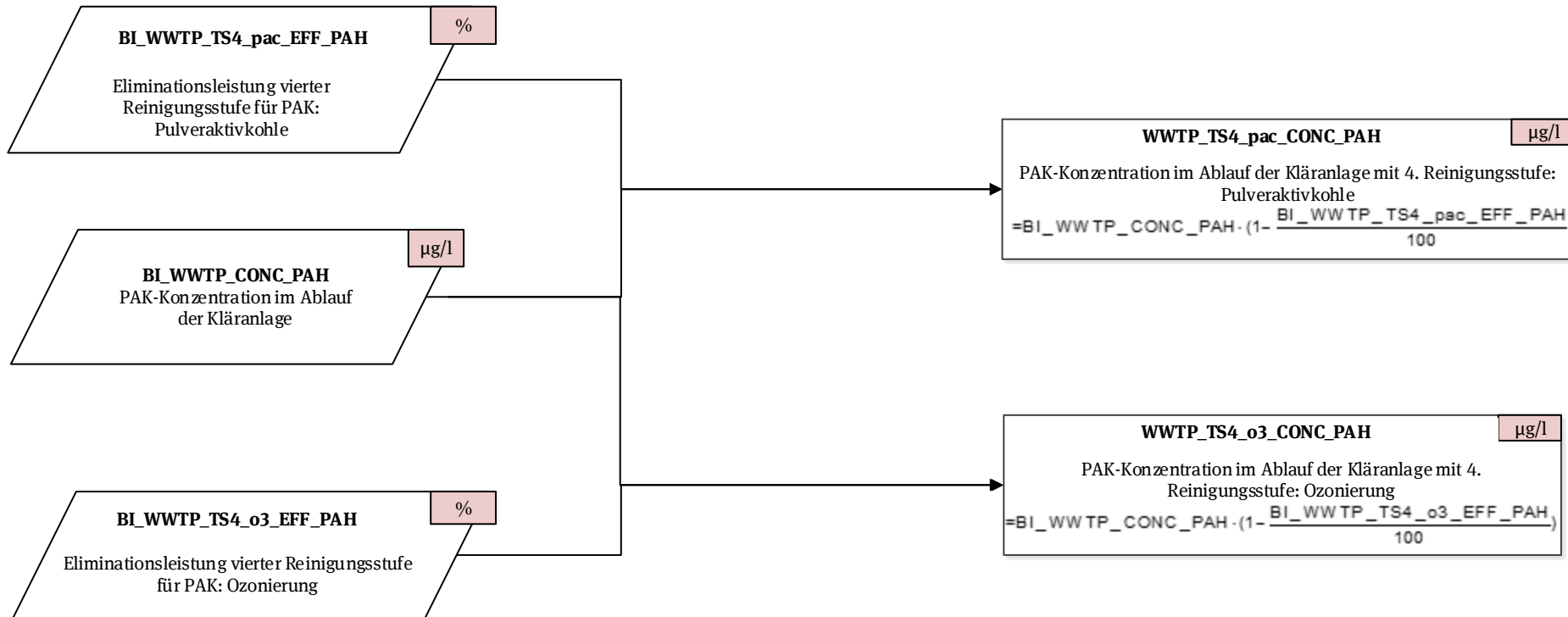
Entscheidungsfeld

Rechenstapel „PAK-Einträge über Kläranlagen“

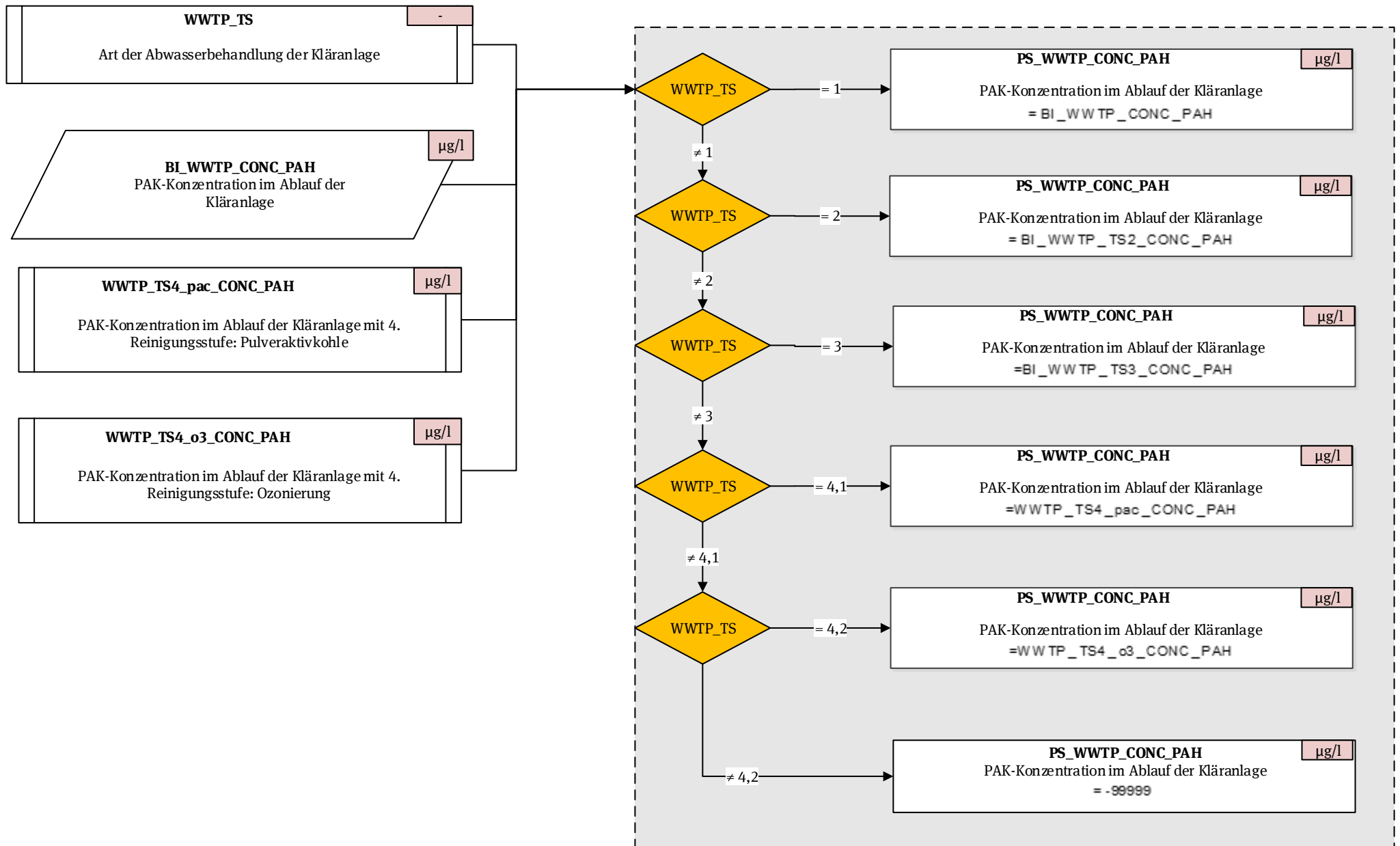
Einträge > PAK-Einträge über Kläranlagen auf Punktquellen-Ebene > Art der Abwasserbehandlung



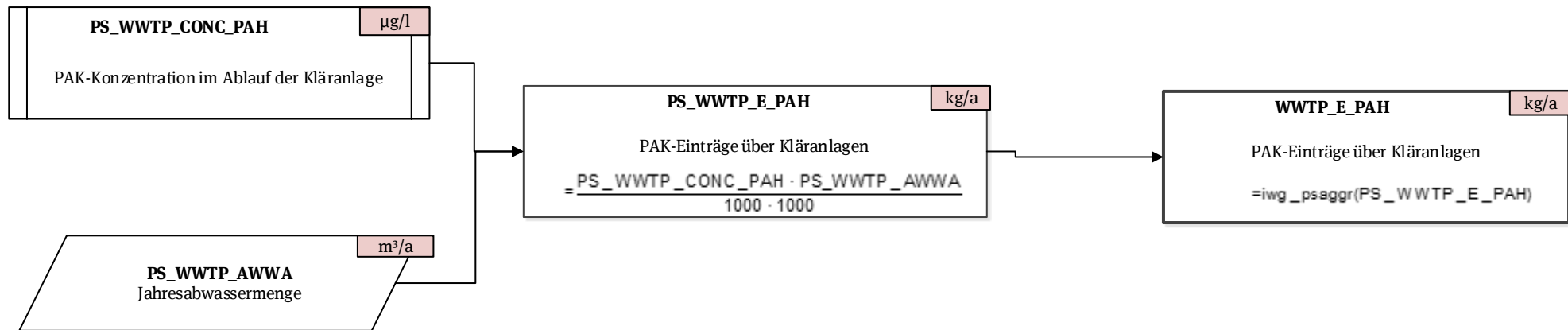
Einträge > PAK-Einträge über Kläranlagen auf Punktquellen-Ebene > Konzentration nach 4. Reinigungsstufe



Einträge > PAK-Einträge über Kläranlagen auf Punktquellen-Ebene > Ablaufkonzentration



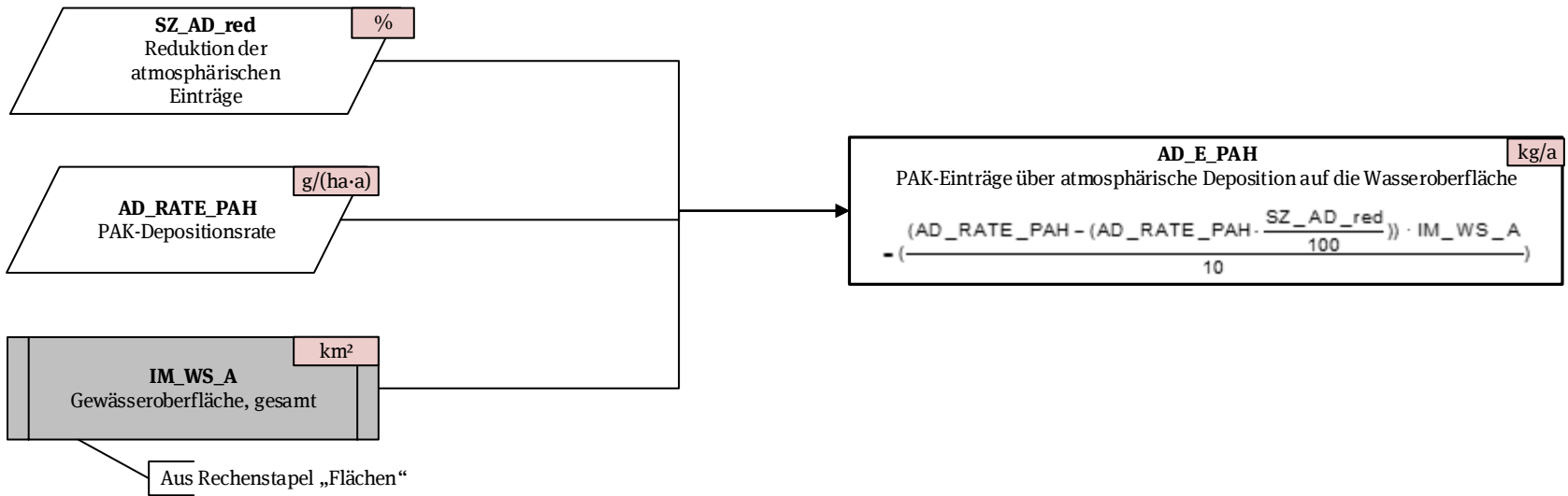
Einträge > PAK-Einträge über Kläranlagen auf Punktquellen-Ebene > PAK-Einträge über Kläranlagen (Punktquellen)



Rechenstapel „PAK-Einträge über atmosphärische Deposition auf Gewässeroberflächen“

Benötigt wird der Rechenstapel „Flächen“

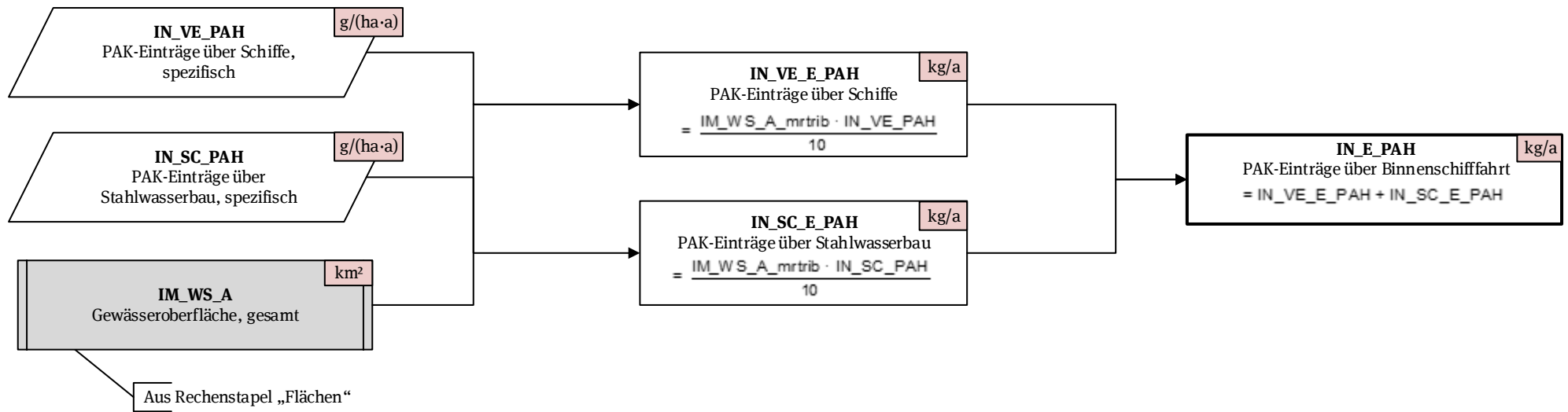
Einträge > PAK-Einträge über atmosphärische Deposition auf Gewässeroberflächen



Rechenstapel „PAK-Einträge über Binnenschifffahrt“

Benötigt wird der Rechenstapel „Flächen“

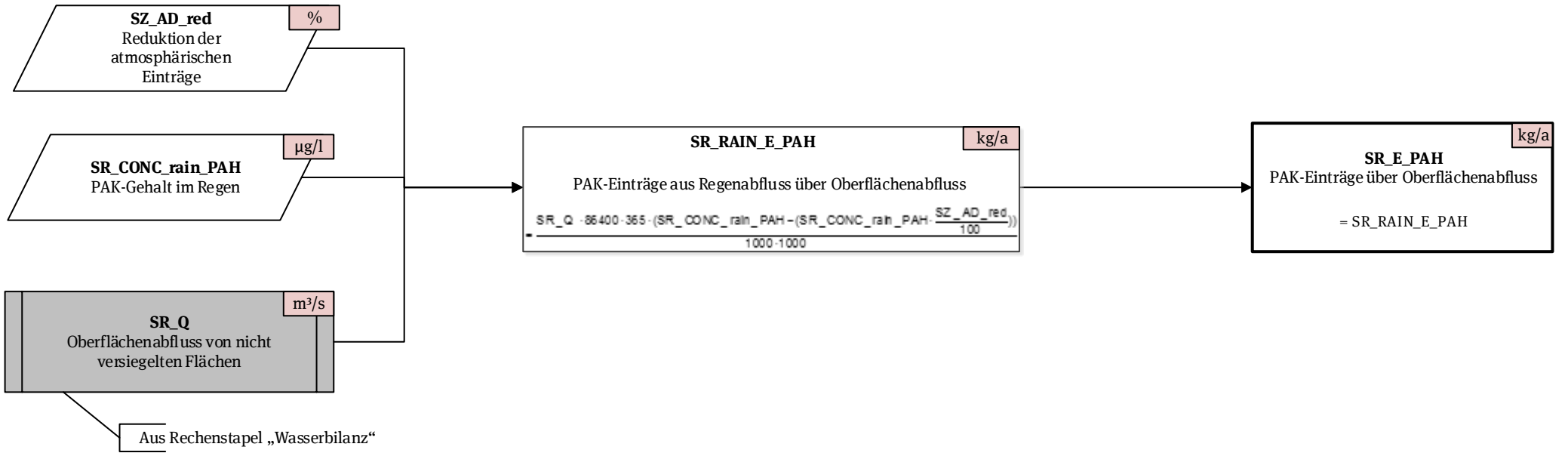
Einträge > PAK-Einträge über Binnenschifffahrt



Rechenstapel „PAK-Einträge über Oberflächenabfluss“

Benötigt wird der Rechenstapel „Wasserbilanz“

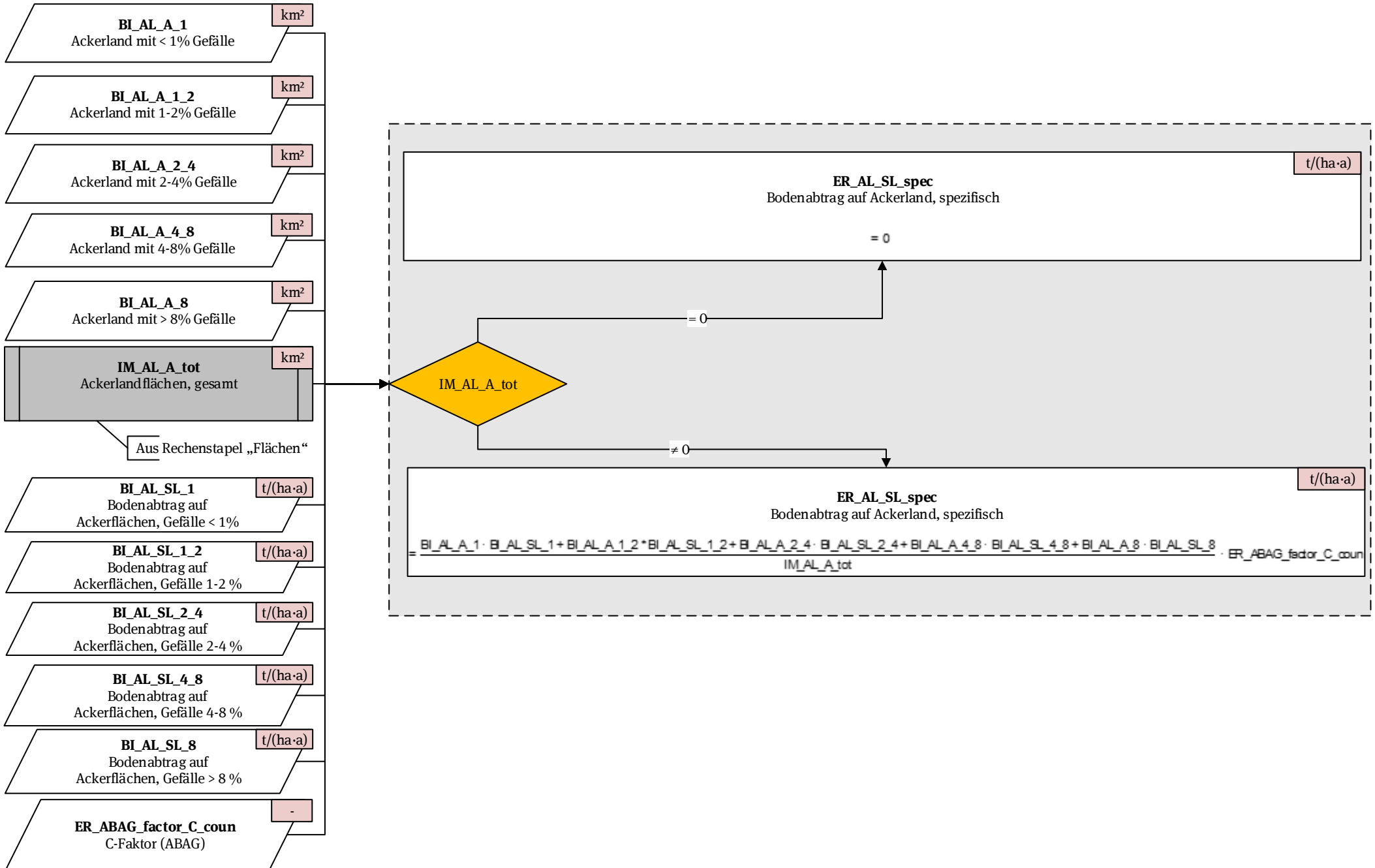
Einträge > PAK-Einträge über Oberflächenabfluss > Einträge über Oberflächenabfluss, gesamt



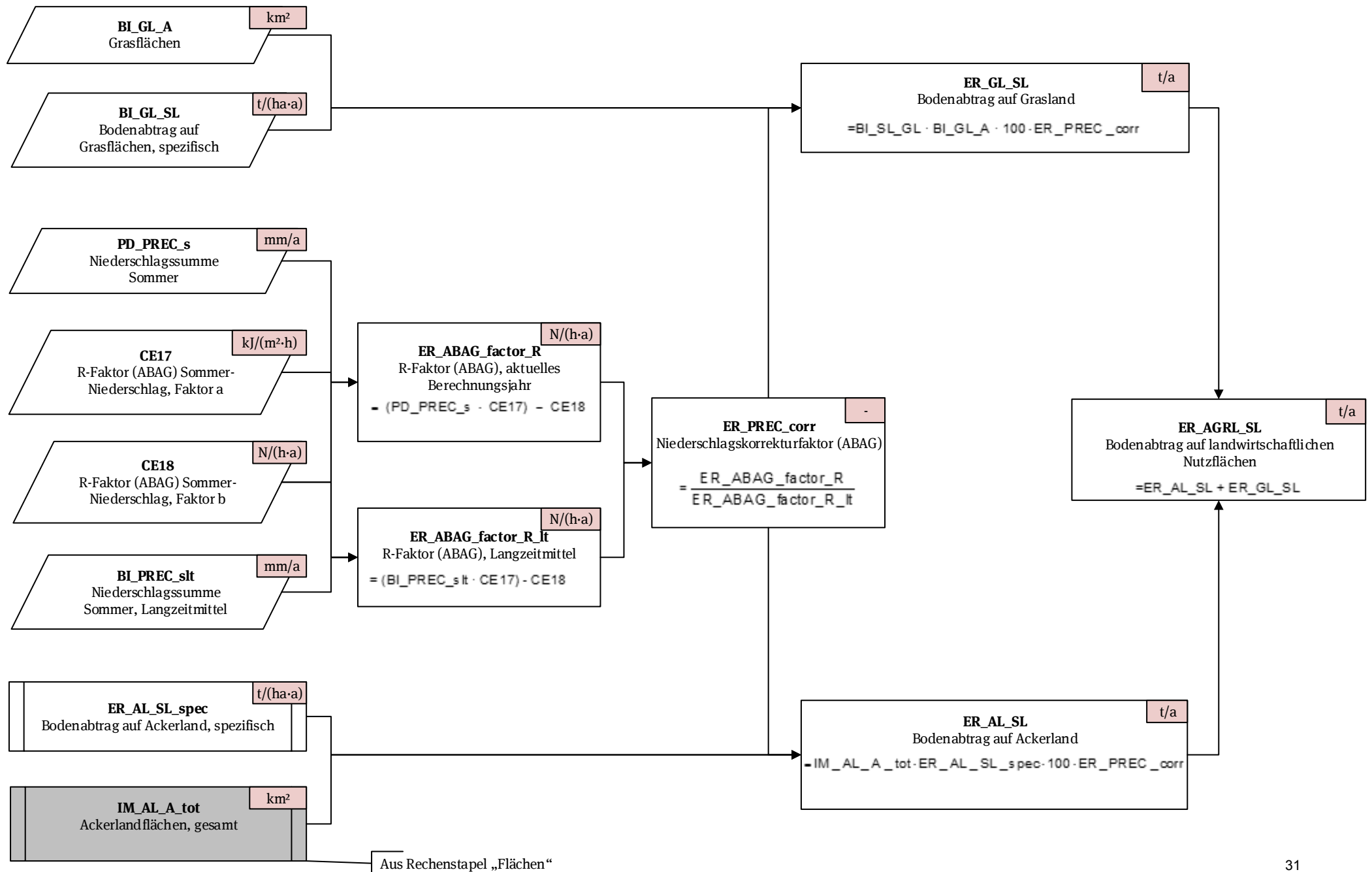
Rechenstapel „PAK-Einträge über Erosion“

Benötigt wird der Rechenstapel „Flächen“

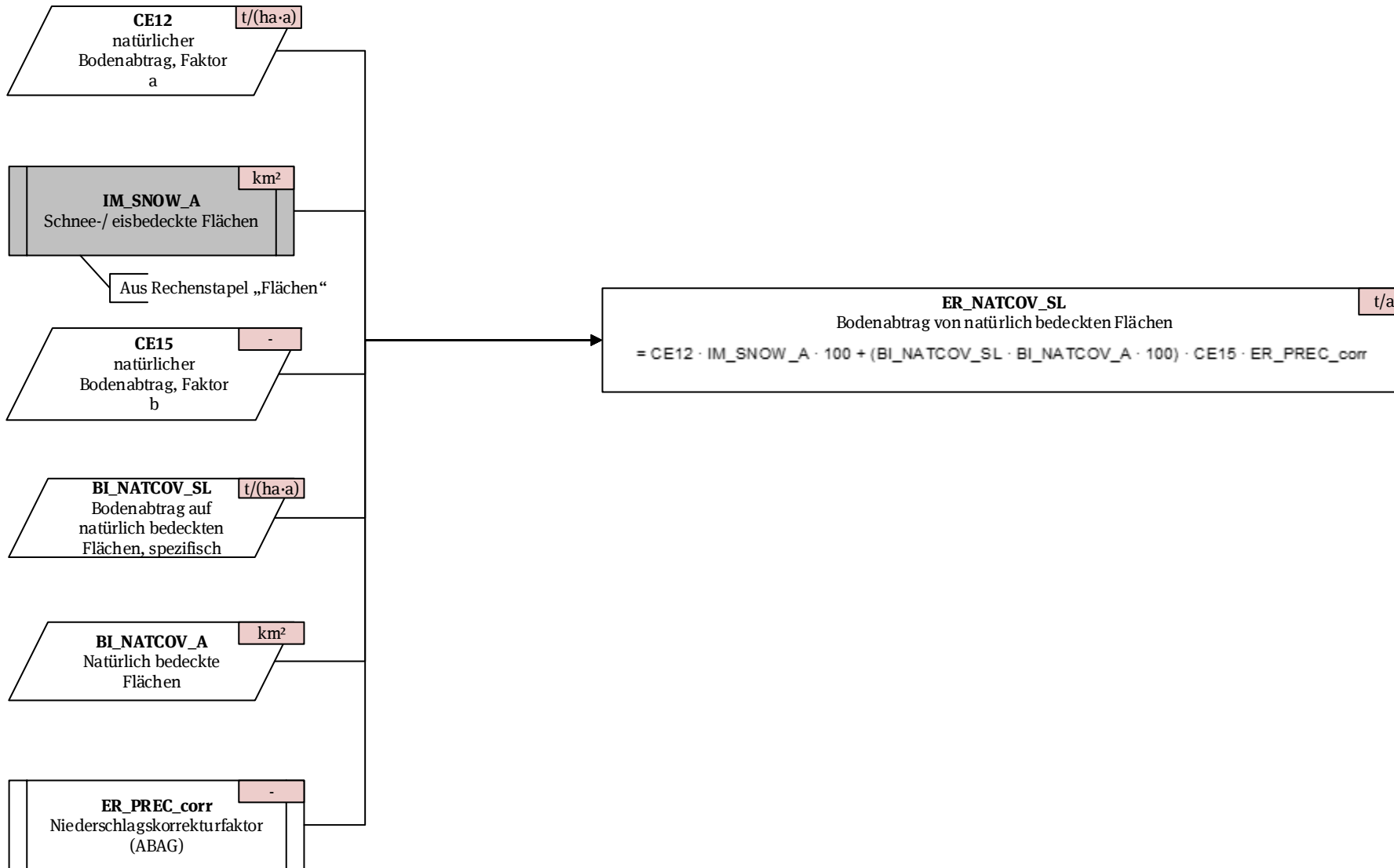
Einträge > Einträge über Erosion > Bodenabtrag auf landwirtschaftlichen Nutzflächen (1)



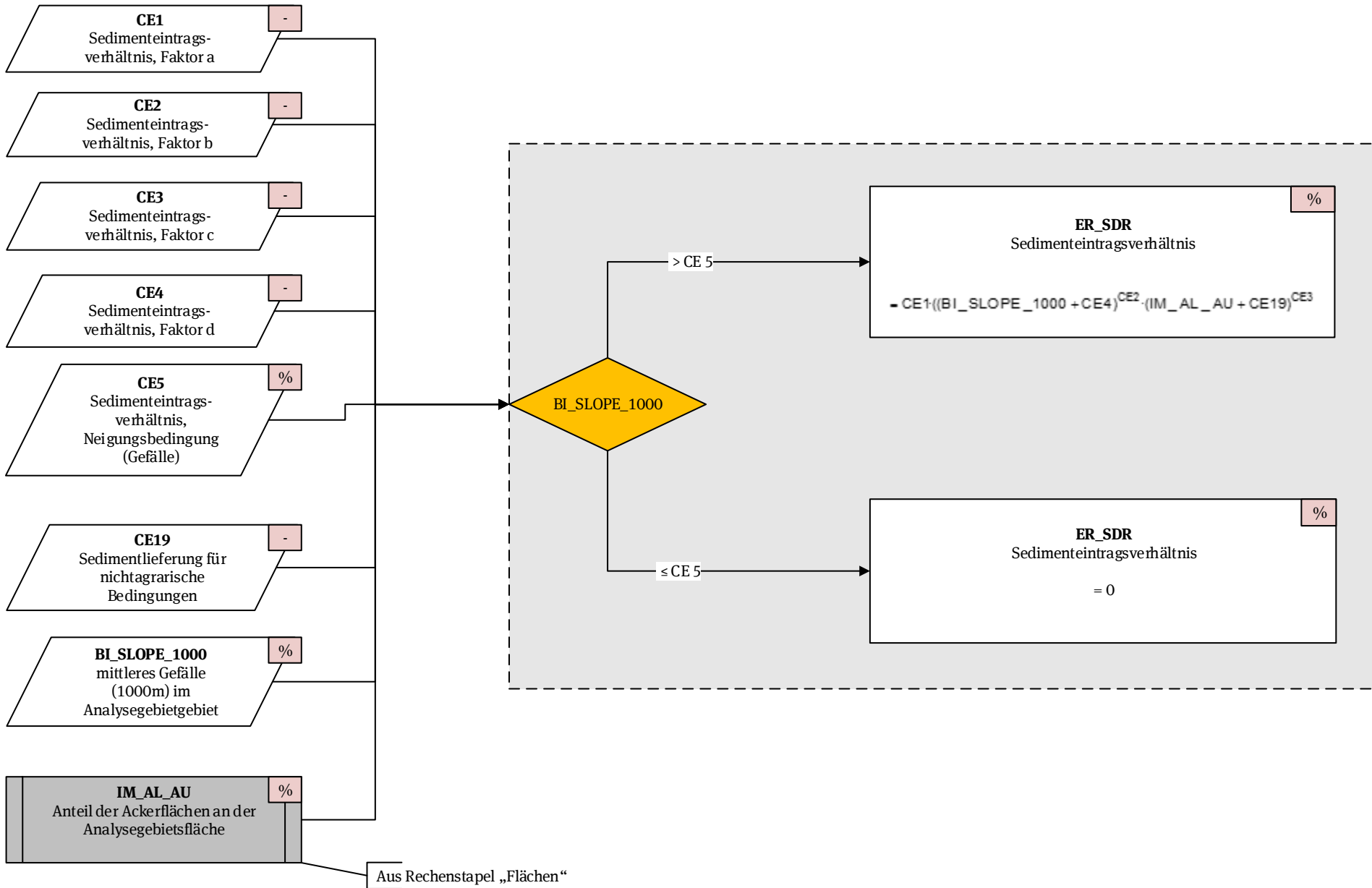
Einträge > Einträge über Erosion > Bodenabtrag auf landwirtschaftlichen Nutzflächen (2)



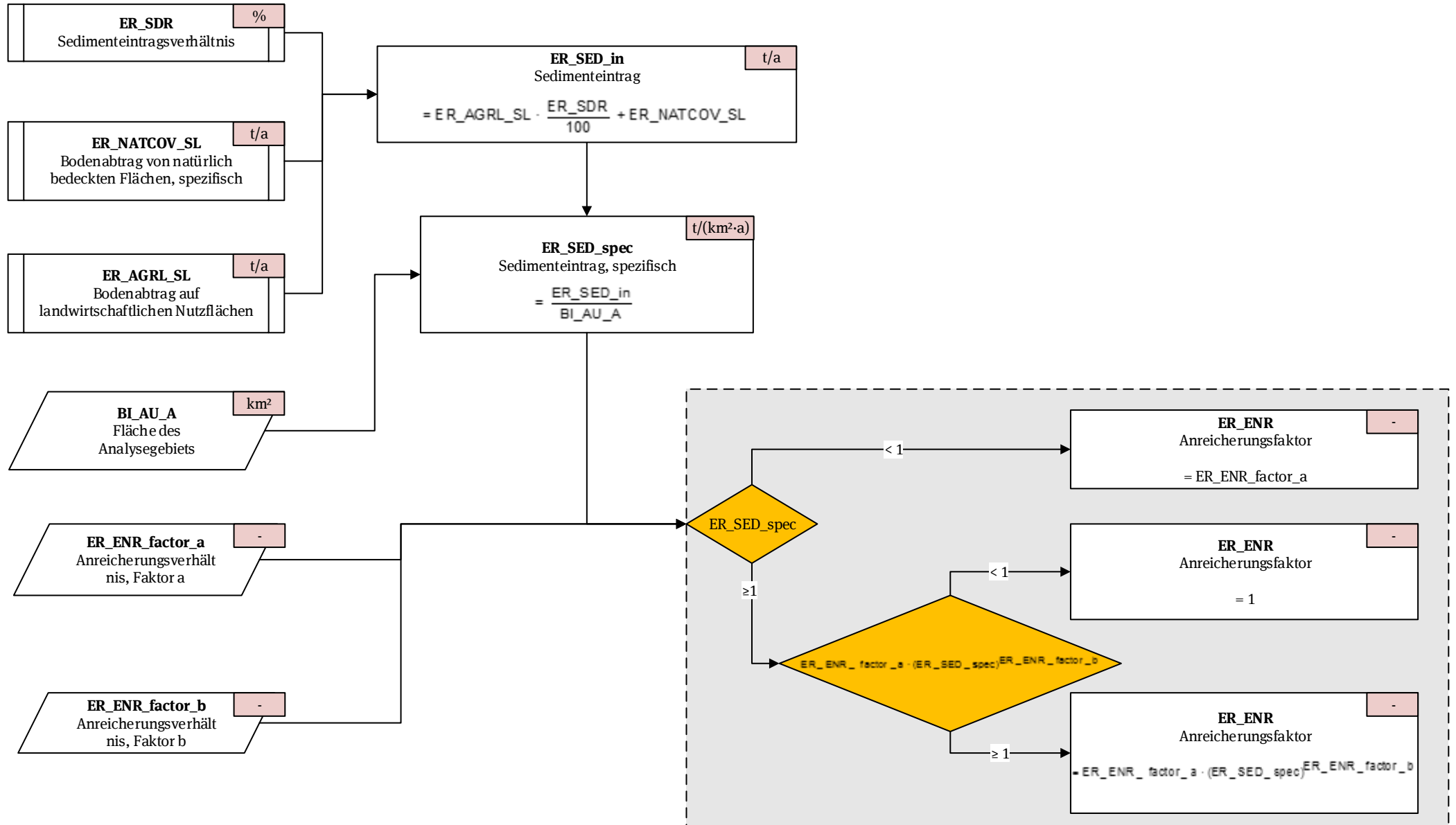
Einträge > Einträge über Erosion > Bodenabtrag von natürlich bedeckten Flächen



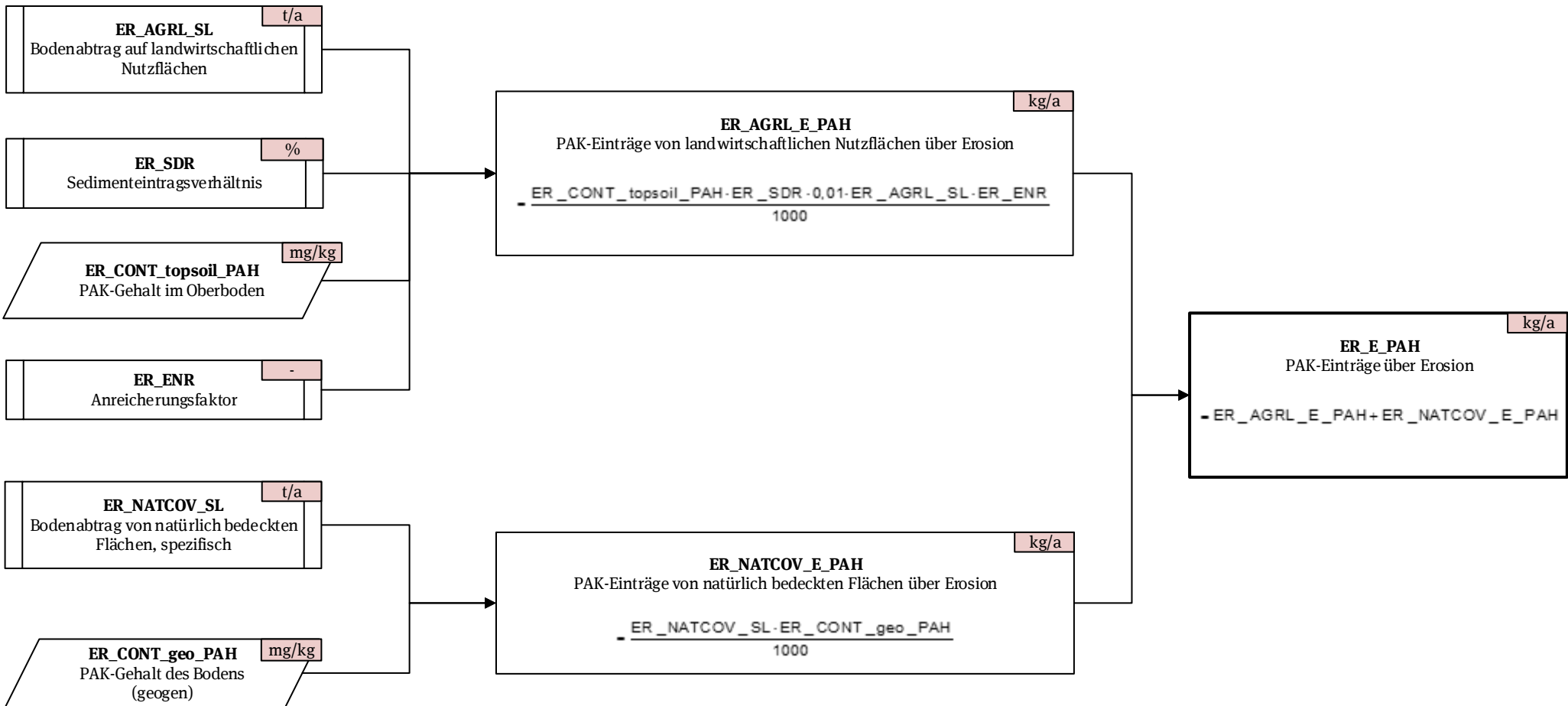
Einträge > Einträge über Erosion > Sedimenteintragsverhältnis



Einträge > Einträge über Erosion > Anreicherungsfaktor



Einträge > PAK-Einträge über Erosion > Einträge über Erosion



Rechenstapel „PAK-Einträge über Grundwasser“

Benötigt wird der Rechenstapel „Wasserbilanz“

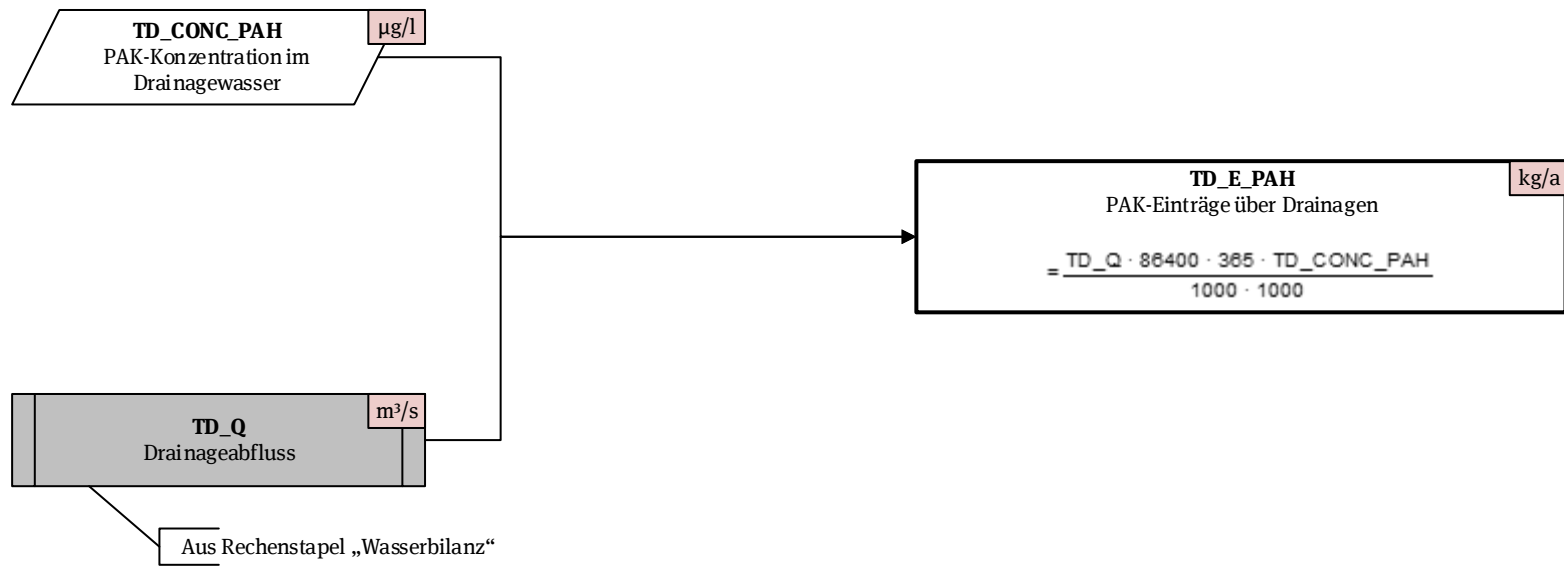
Einträge > PAK-Einträge über Grundwasser



Rechenstapel „PAK-Einträge über Drainagen“

Benötigt wird der Rechenstapel „Wasserbilanz“

Einträge > PAK-Einträge über Drainagen



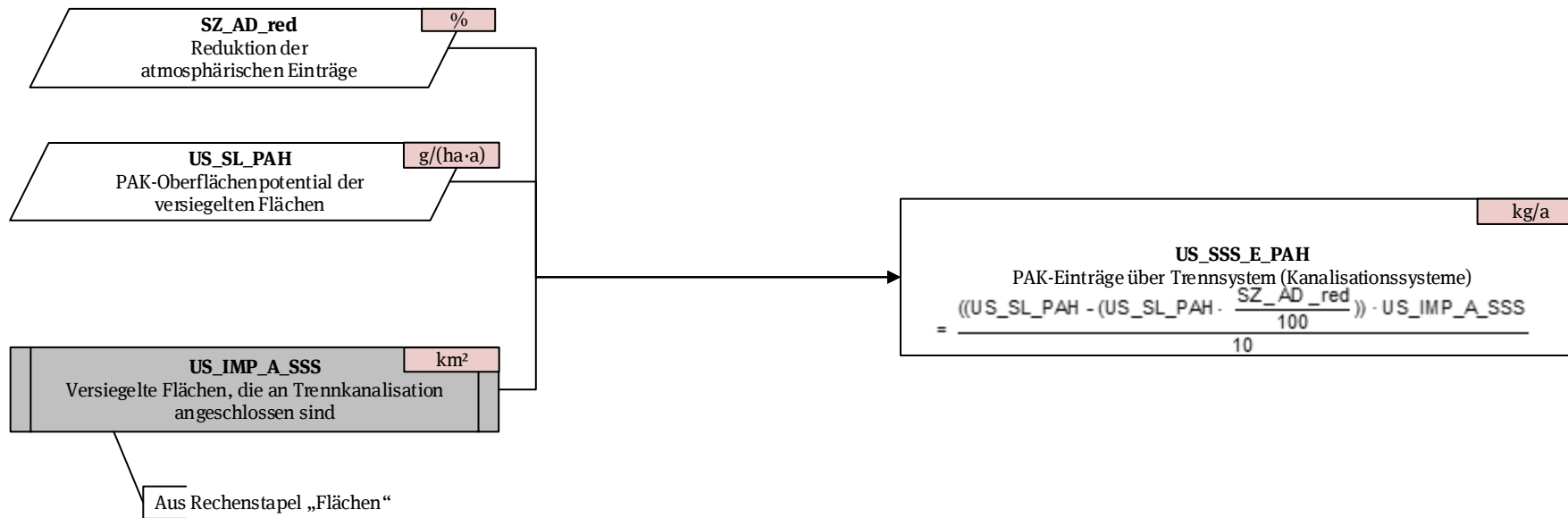
Rechenstapel „PAK-Einträge über Kanalisationssysteme“

Benötigt wird der Rechenstapel „Flächen“

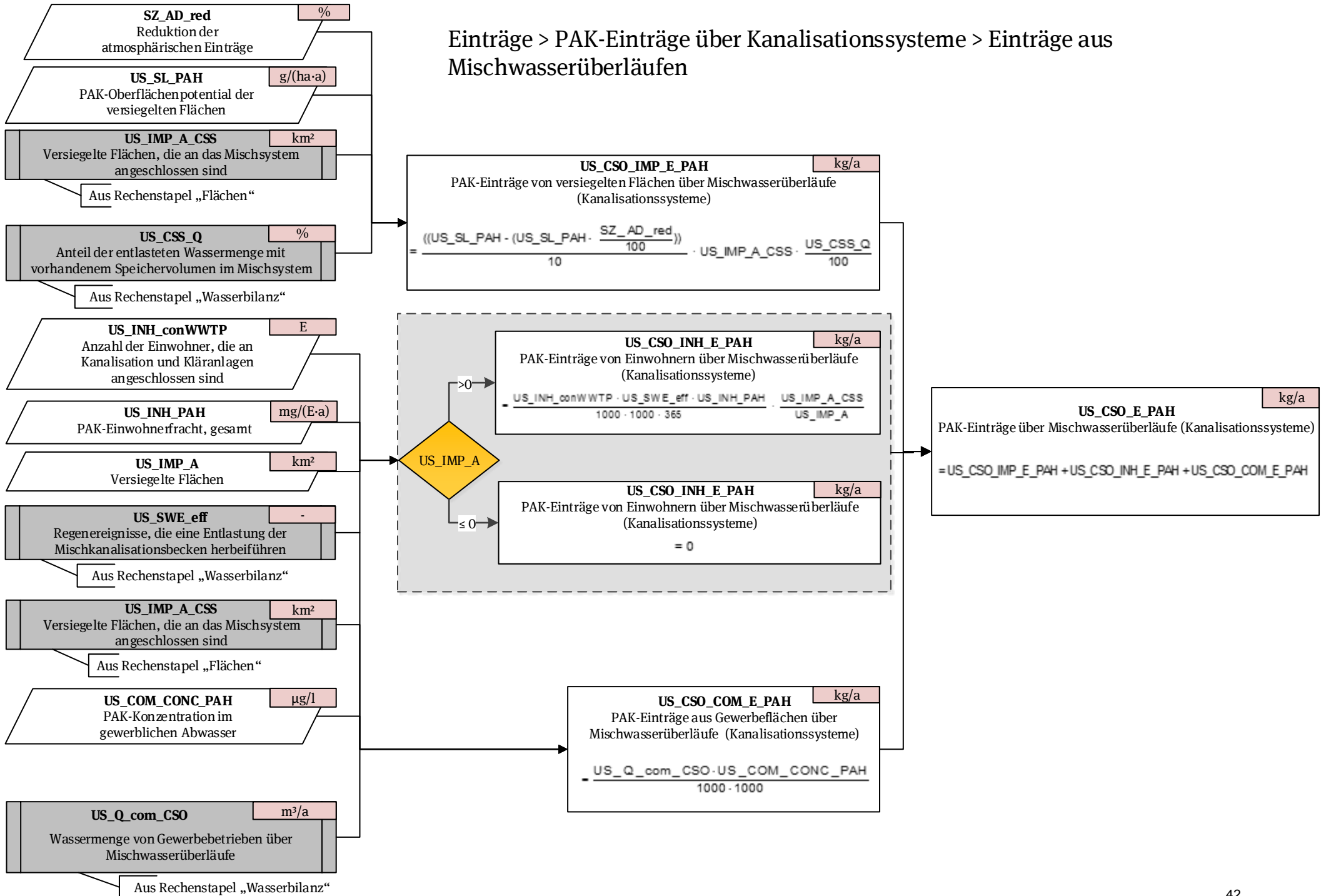
Benötigt wird der Rechenstapel „Wasserbilanz“

Benötigt wird der Rechenstapel „Einwohner“

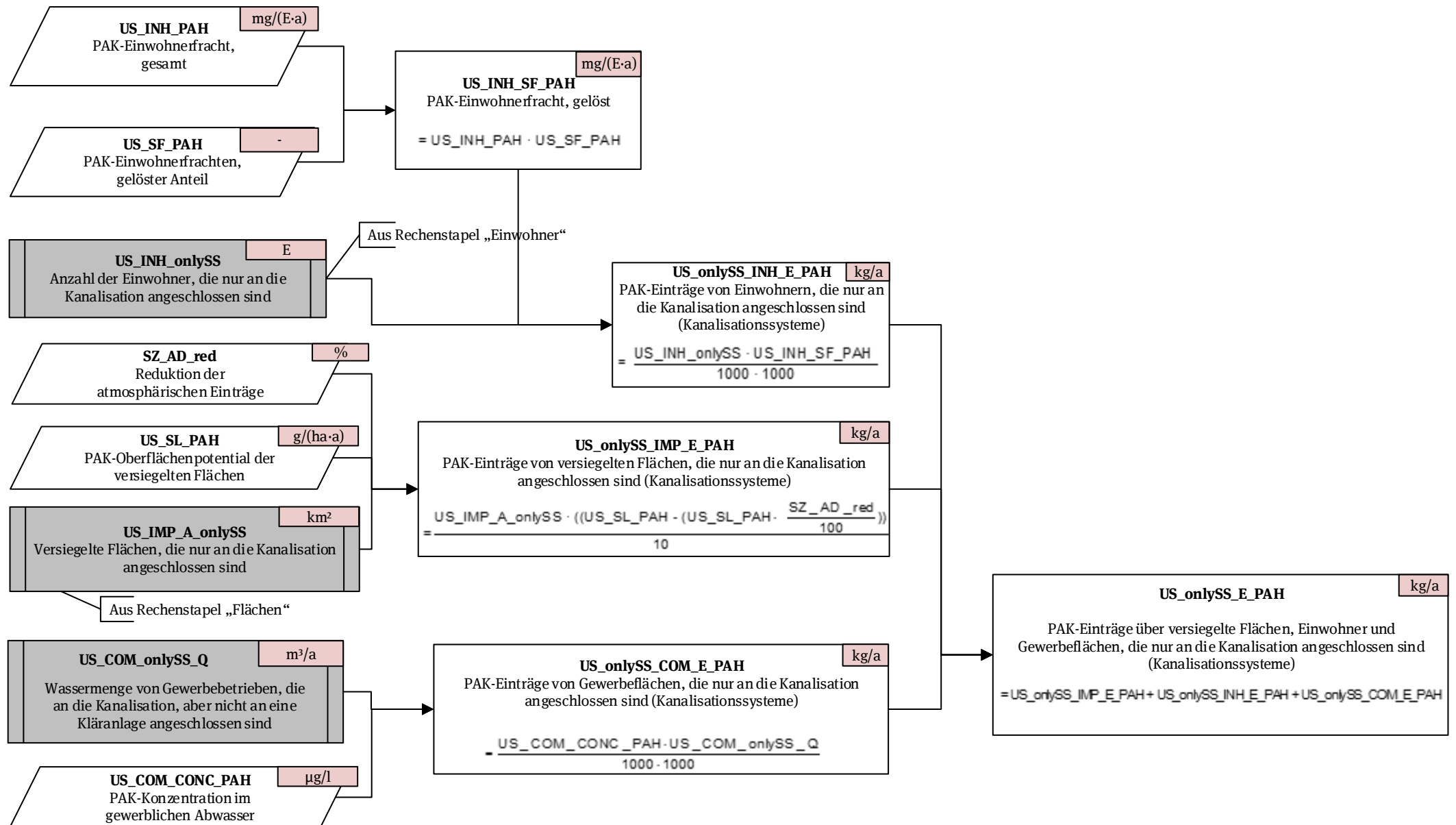
Einträge > PAK-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge aus dem Trennsystem



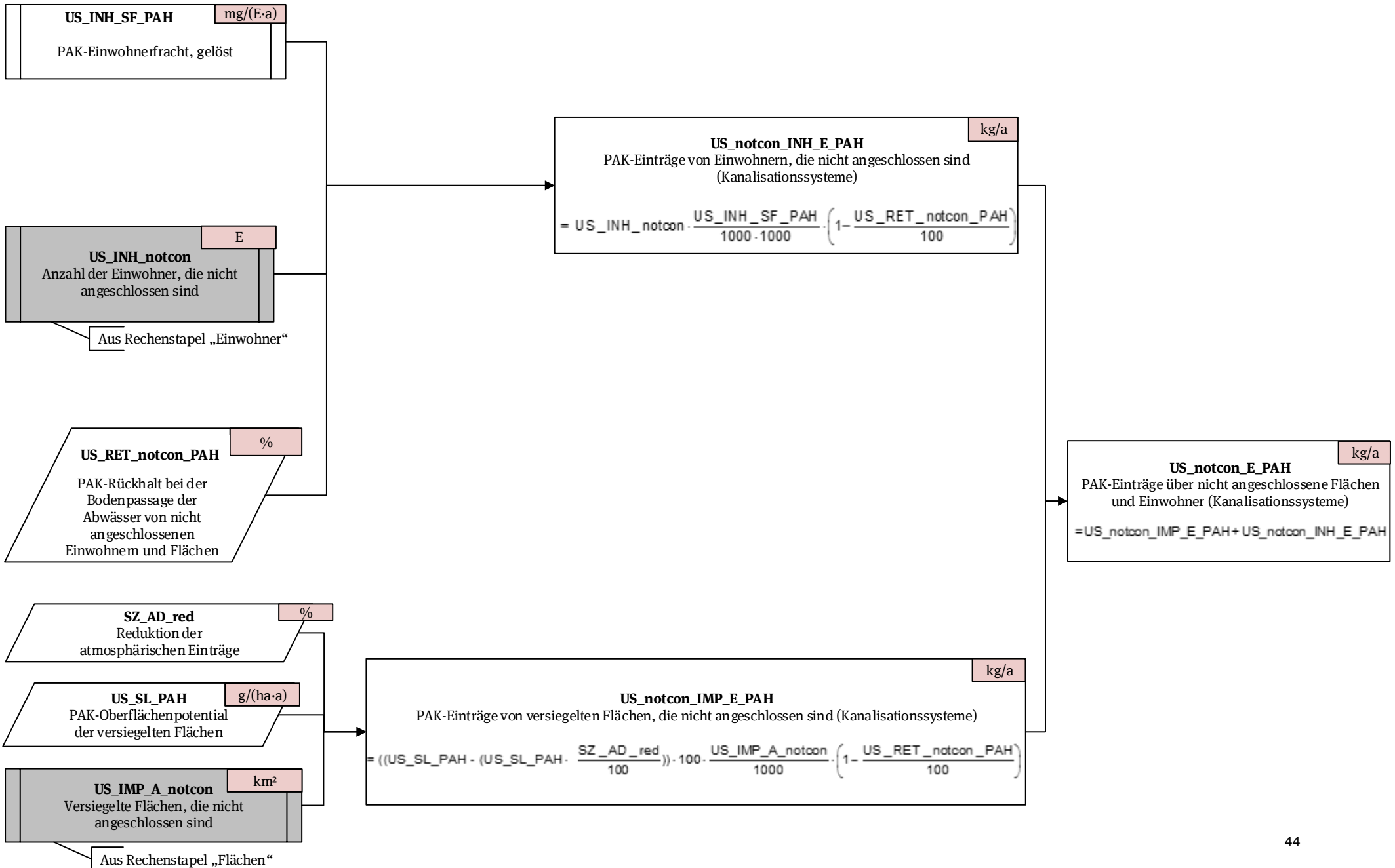
Einträge > PAK-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge aus Mischwasserüberläufen



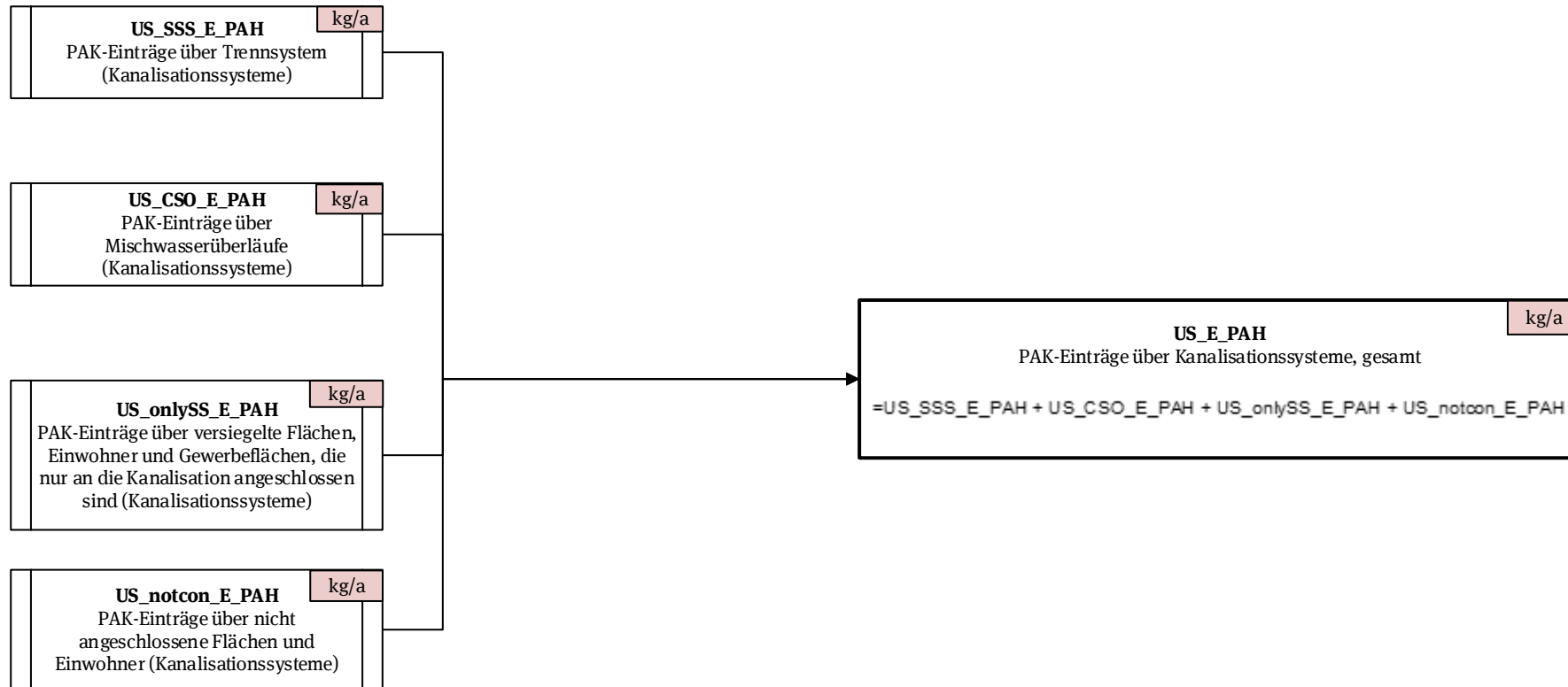
Einträge > PAK-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge von Flächen und Einwohnern, die an die Kanalisation angeschlossen sind, nicht aber an Kläranlagen



Einträge > PAK-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge von nicht angeschlossenen Flächen und Einwohnern

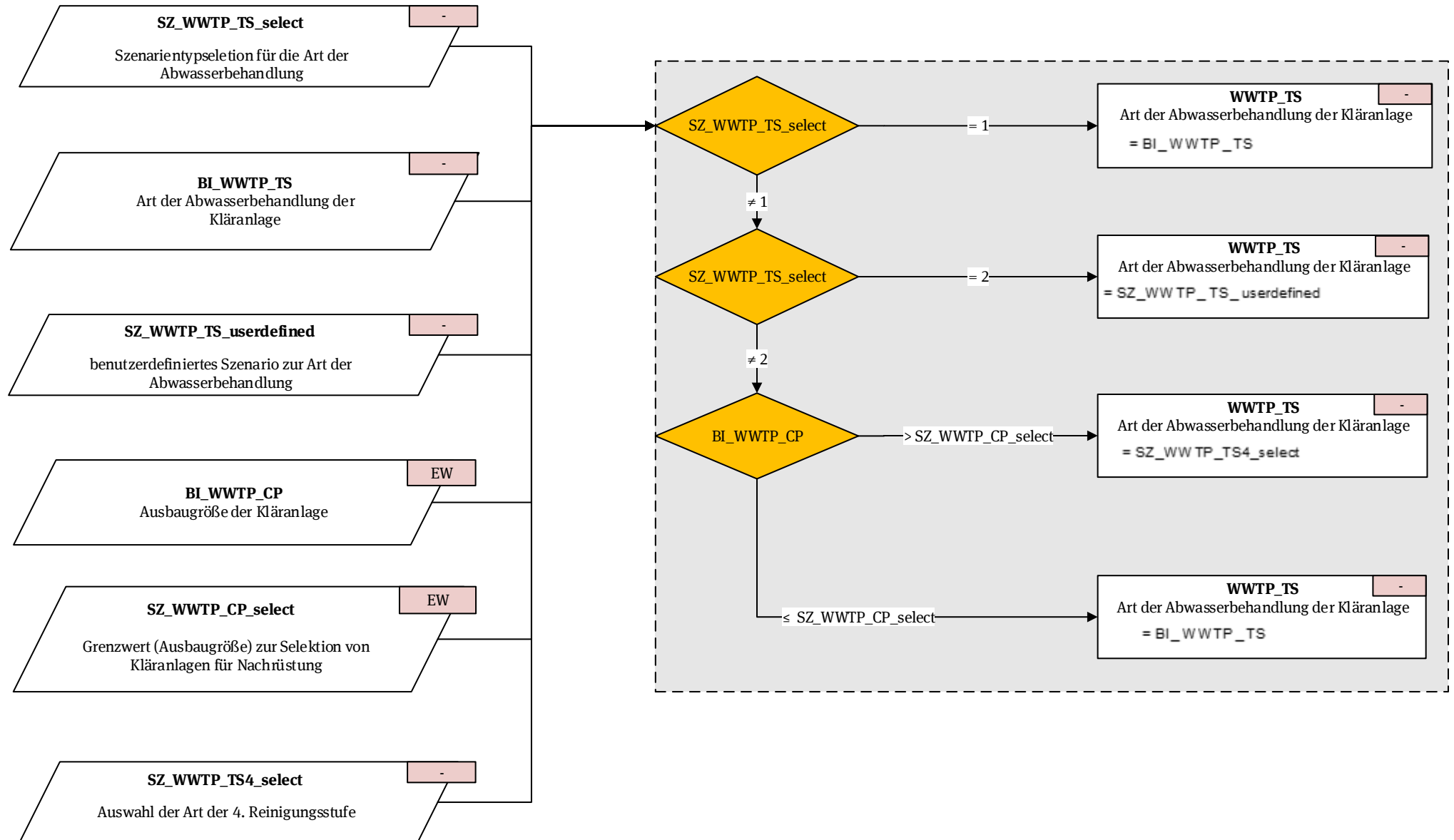


Einträge > PAK-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge über Kanalisationssysteme, gesamt

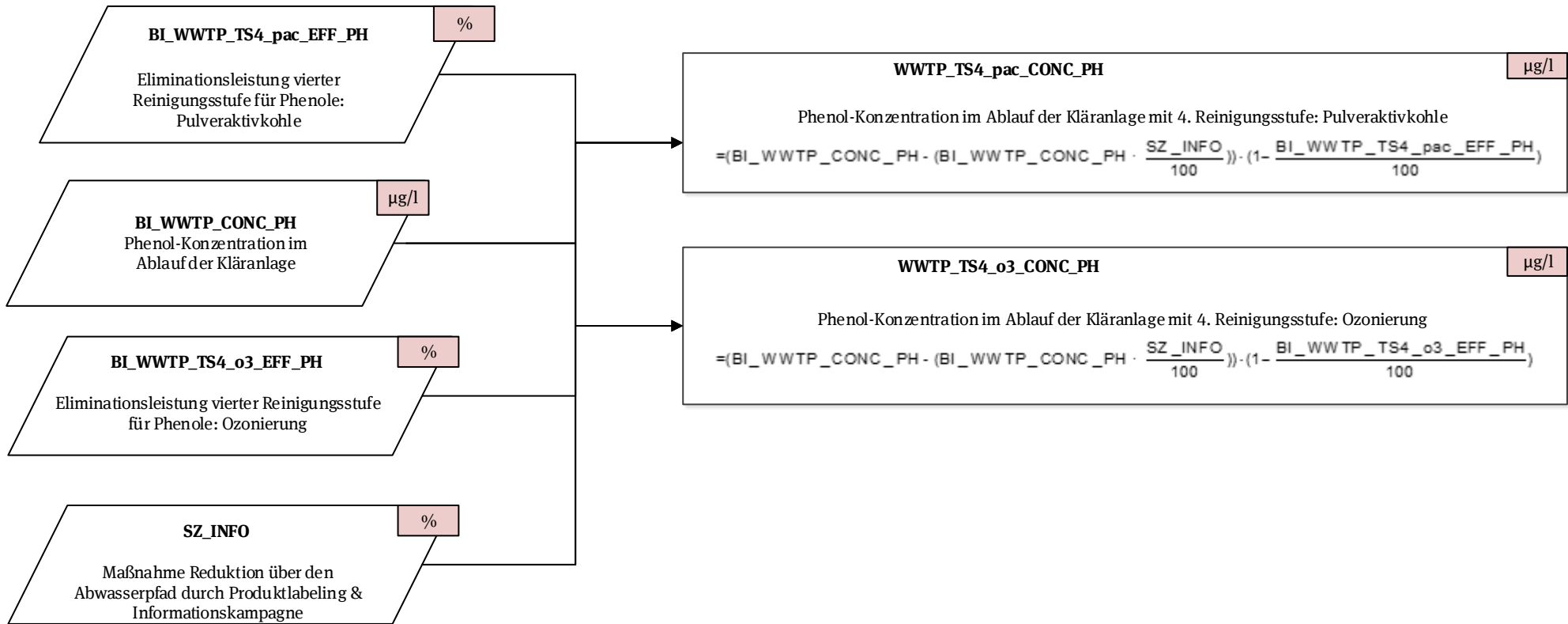


Rechenstapel „Phenol-Einträge über Kläranlagen“

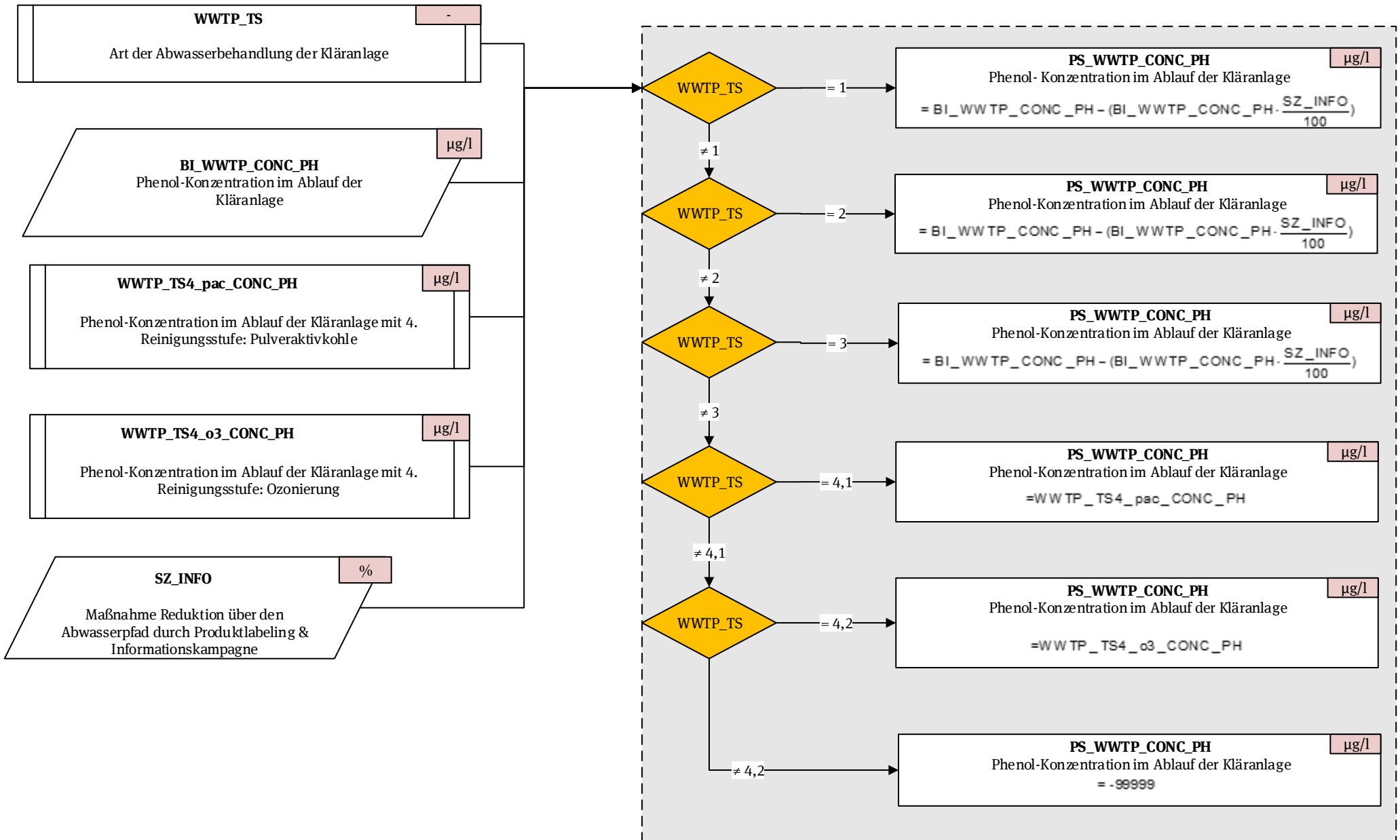
Einträge > Phenol-Einträge über Kläranlagen



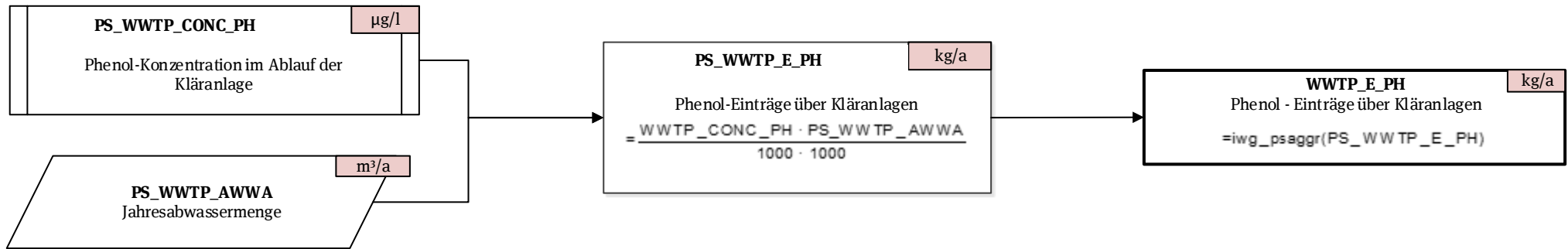
Einträge > Phenol-Einträge über Kläranlagen



Einträge > Phenol-Einträge über Kläranlagen



Einträge > Phenol-Einträge über Kläranlagen



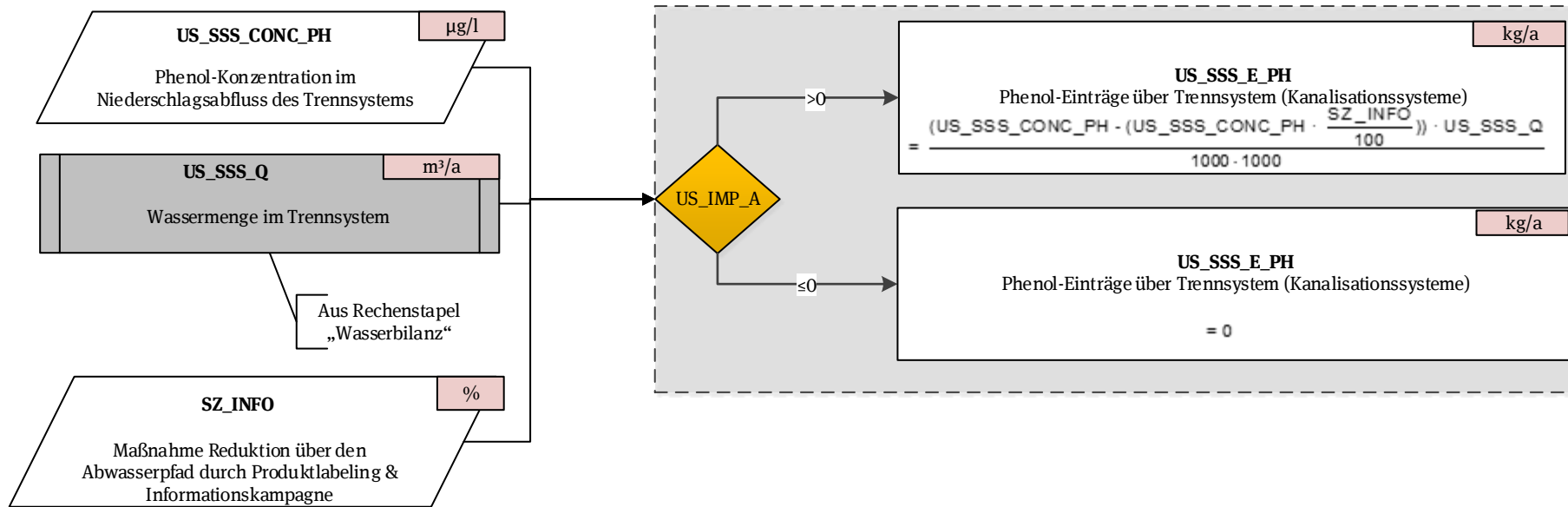
Rechenstapel „Phenol-Einträge über Kanalisationssysteme“

Benötigt wird der Rechenstapel „Flächen“

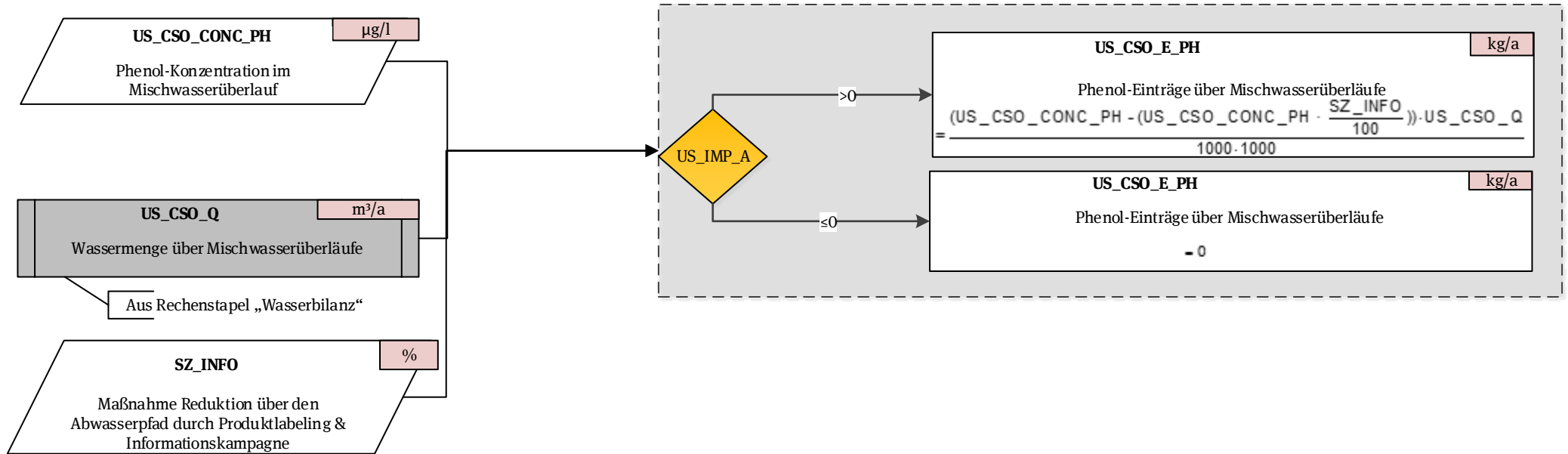
Benötigt wird der Rechenstapel „Wasserbilanz“

Benötigt wird der Rechenstapel „Einwohner“

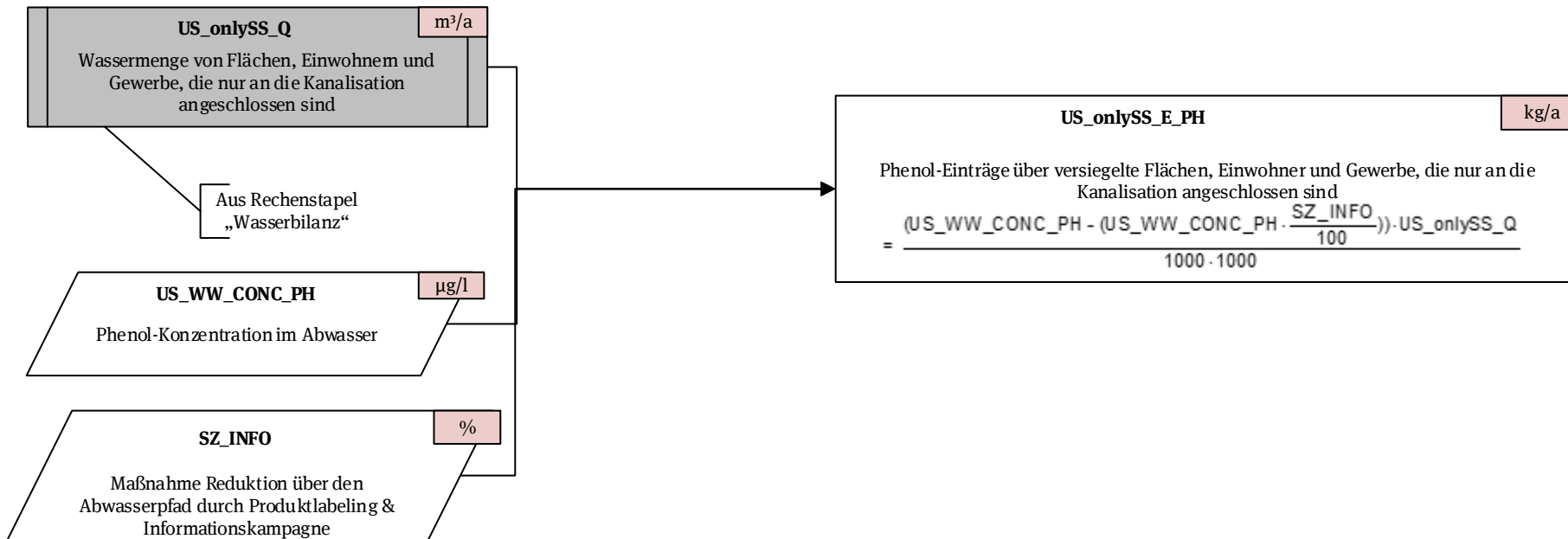
Einträge > Phenol-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge aus dem Trennsystem



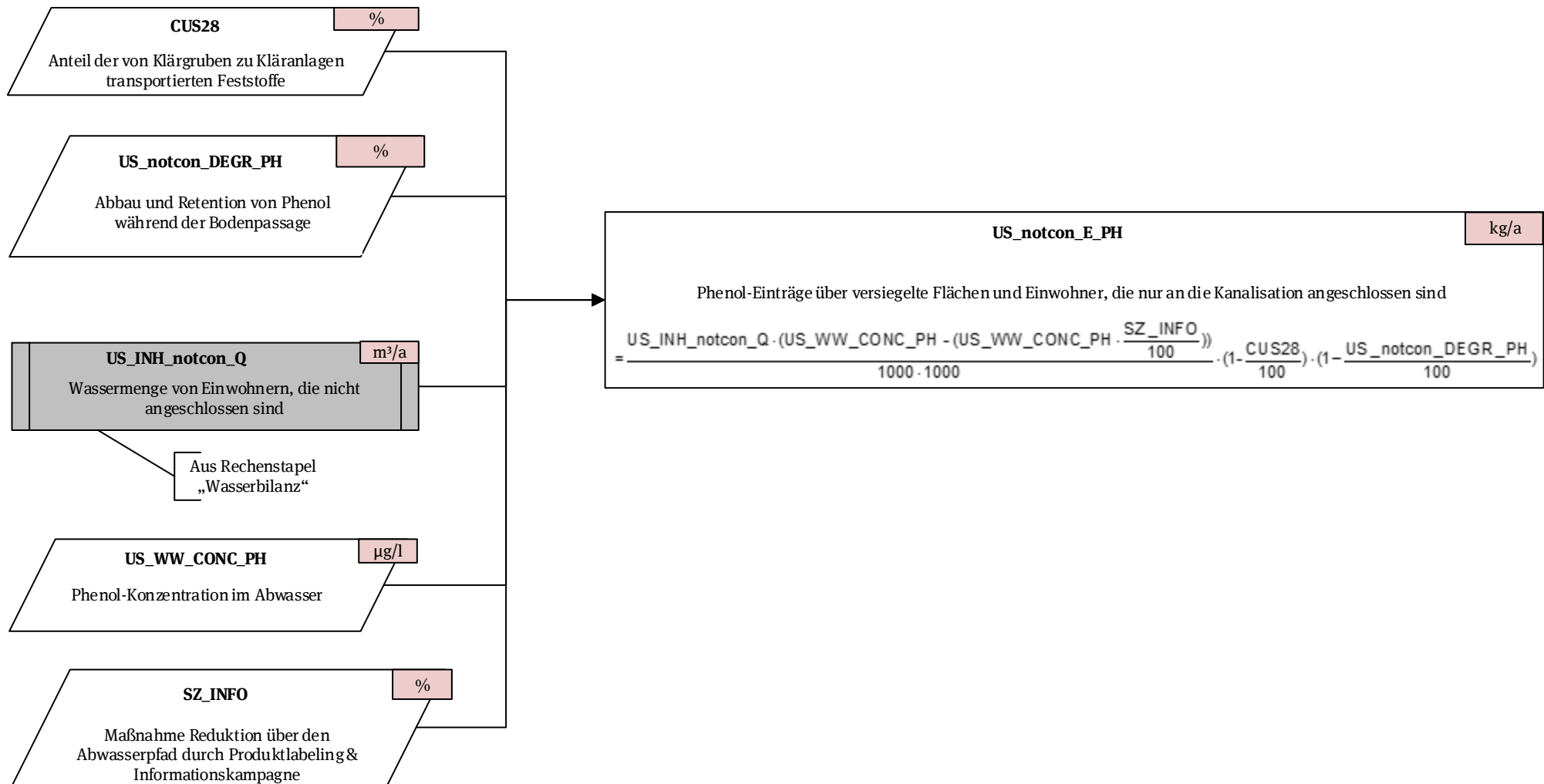
Einträge > PH-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge aus Mischwasserüberläufen



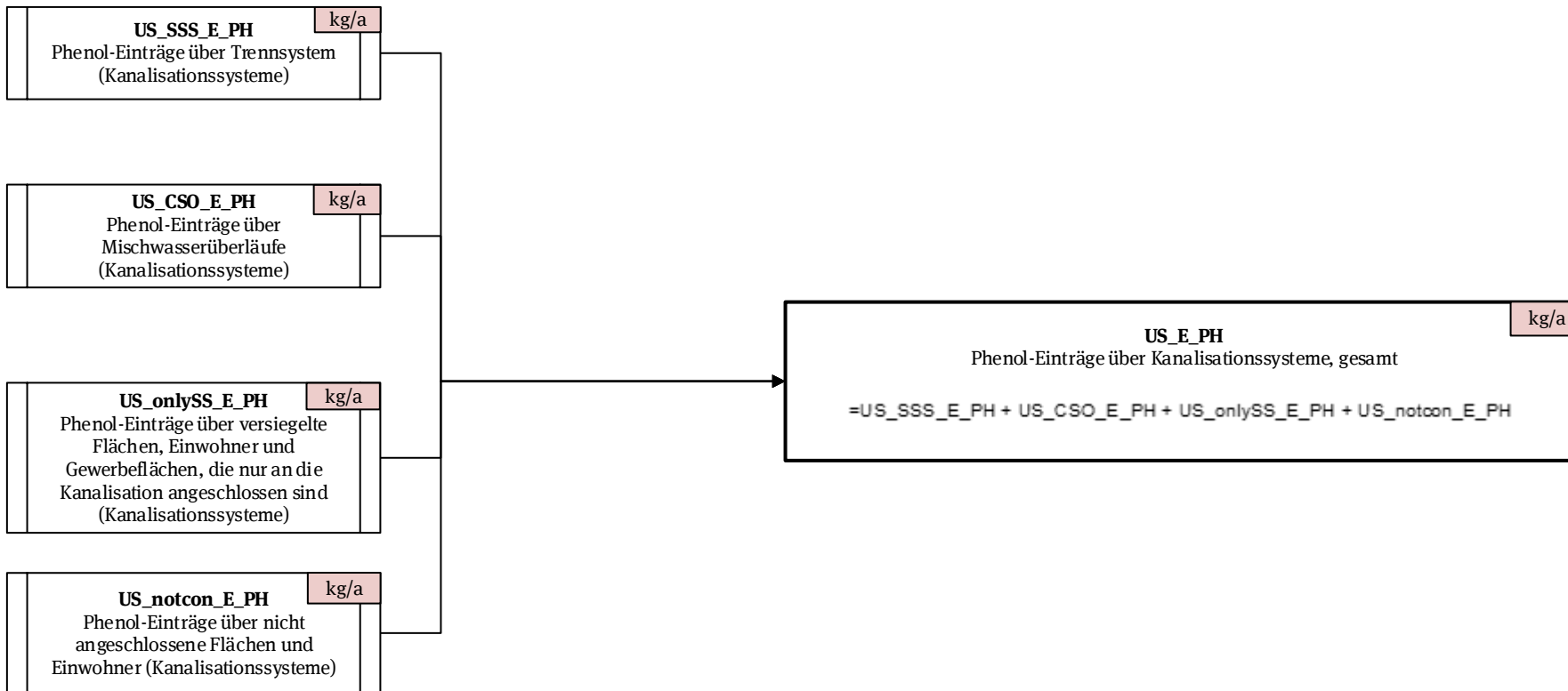
Einträge > Phenol-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge von Flächen und Einwohnern, die an die Kanalisation angeschlossen sind, nicht aber an Kläranlagen



Einträge > Phenol-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge von nicht angeschlossenen Flächen und Einwohnern



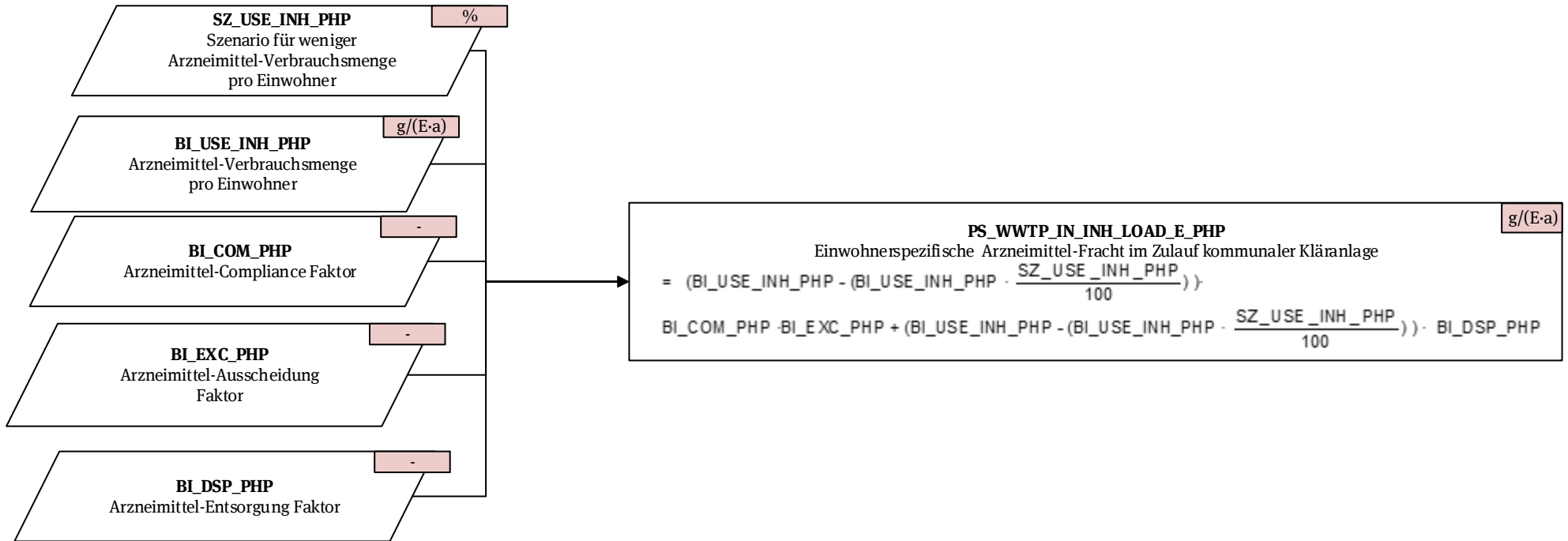
Einträge > Phenol-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge über Kanalisationssysteme, gesamt



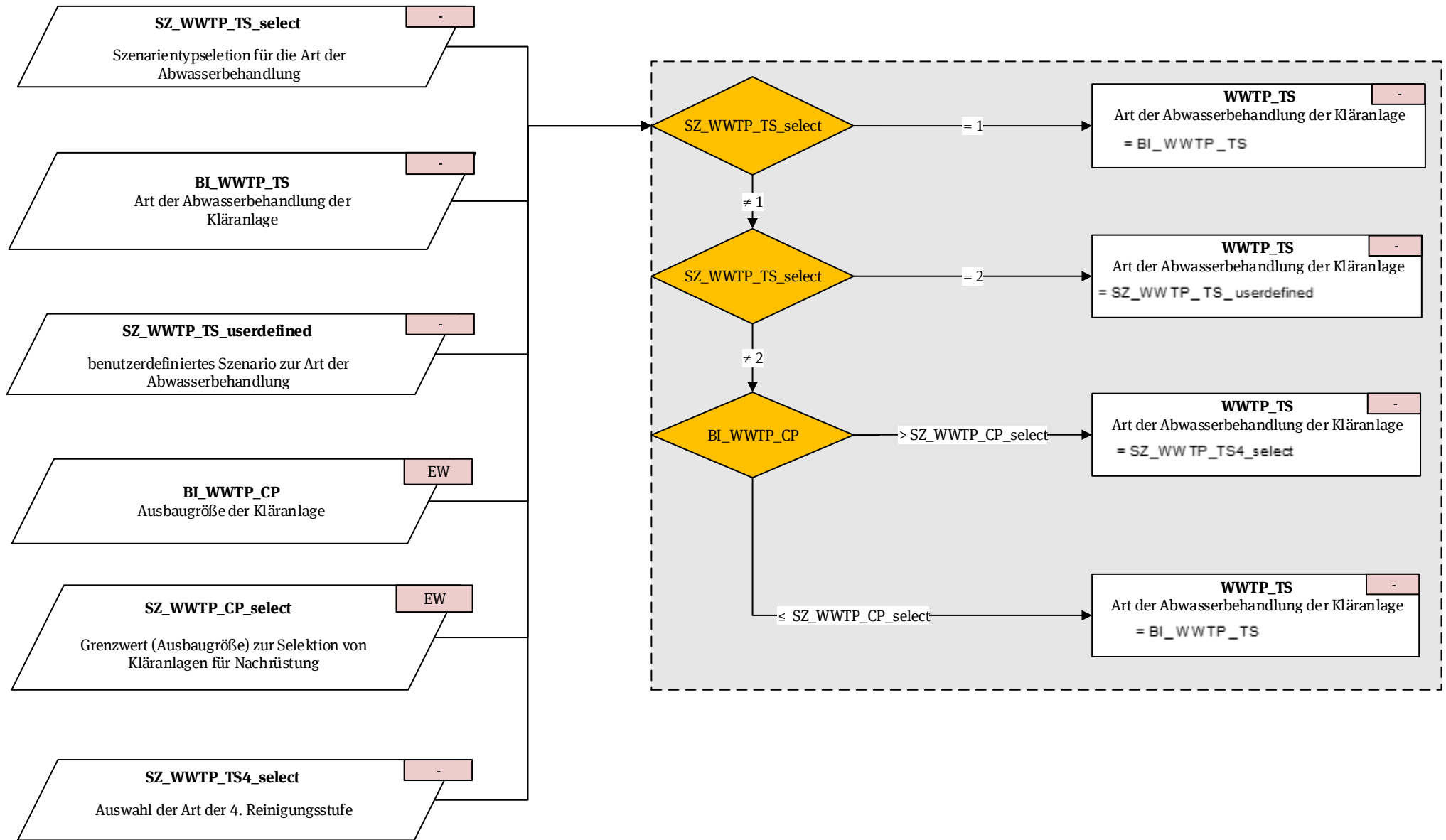
Rechenstapel „Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen“

Variante 1: Einwohnerbezogener Ansatz

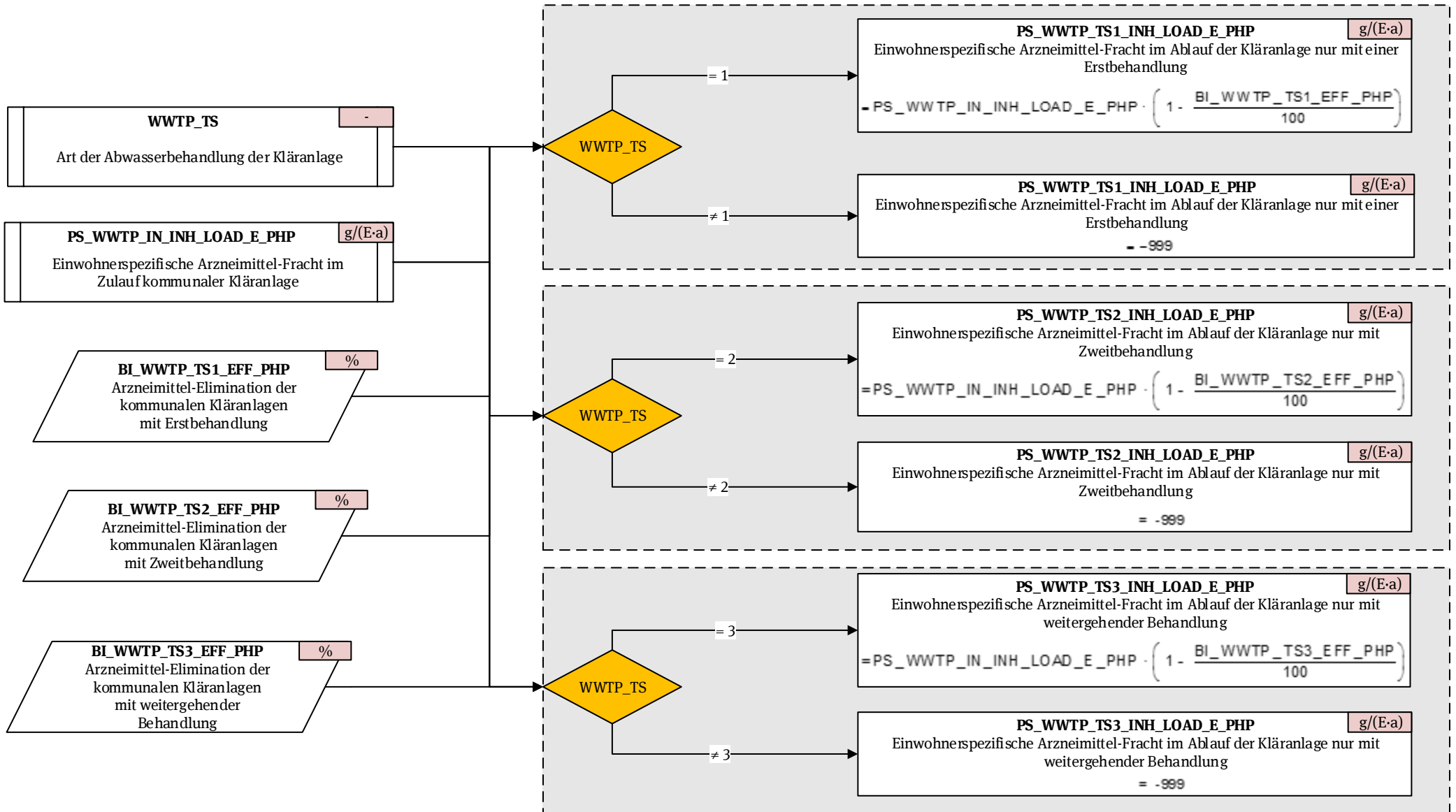
Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen (Variante 1)



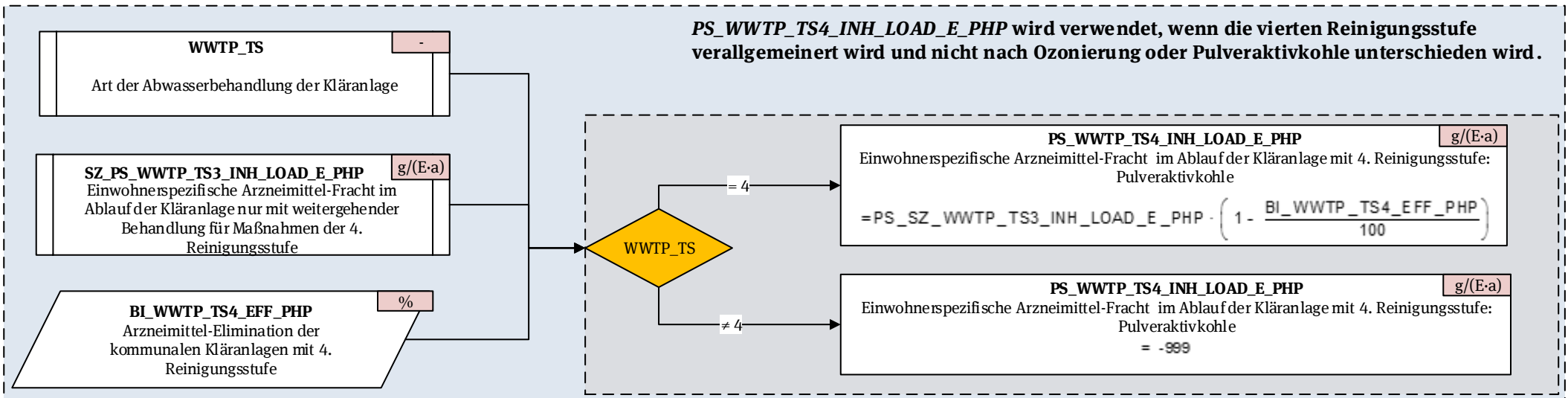
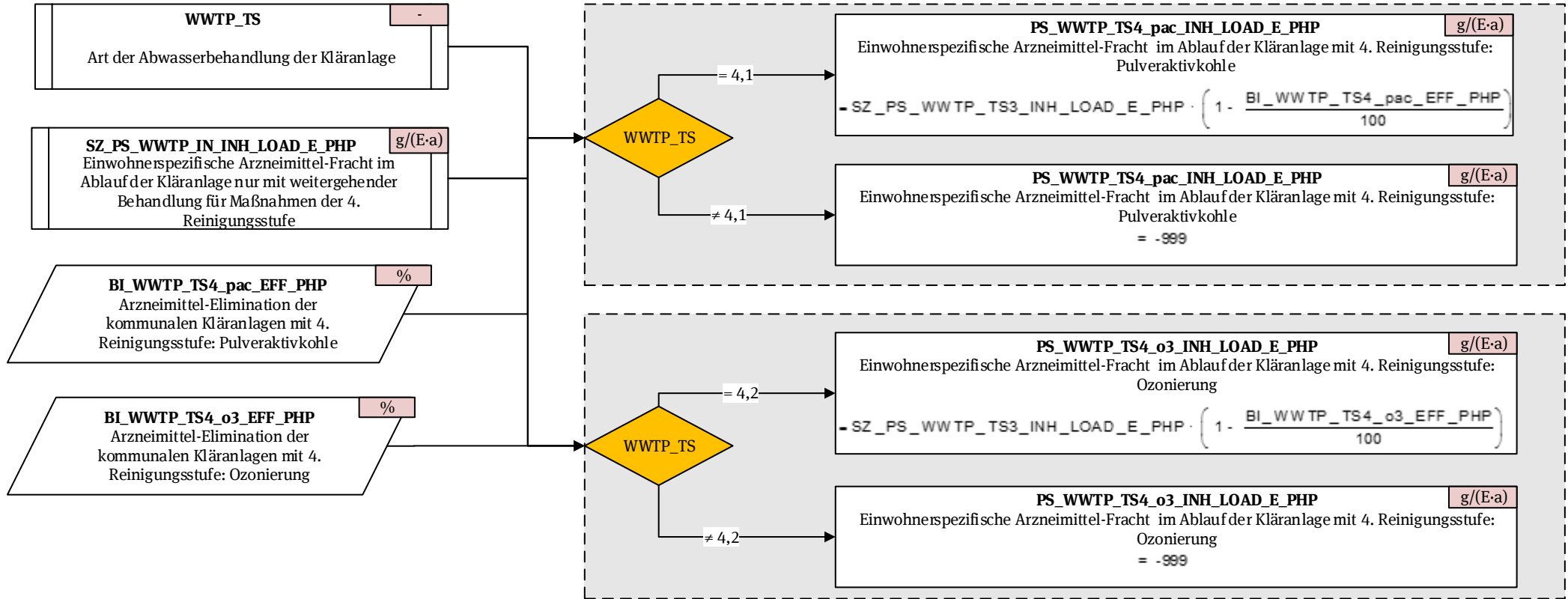
Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen (Variante 1)



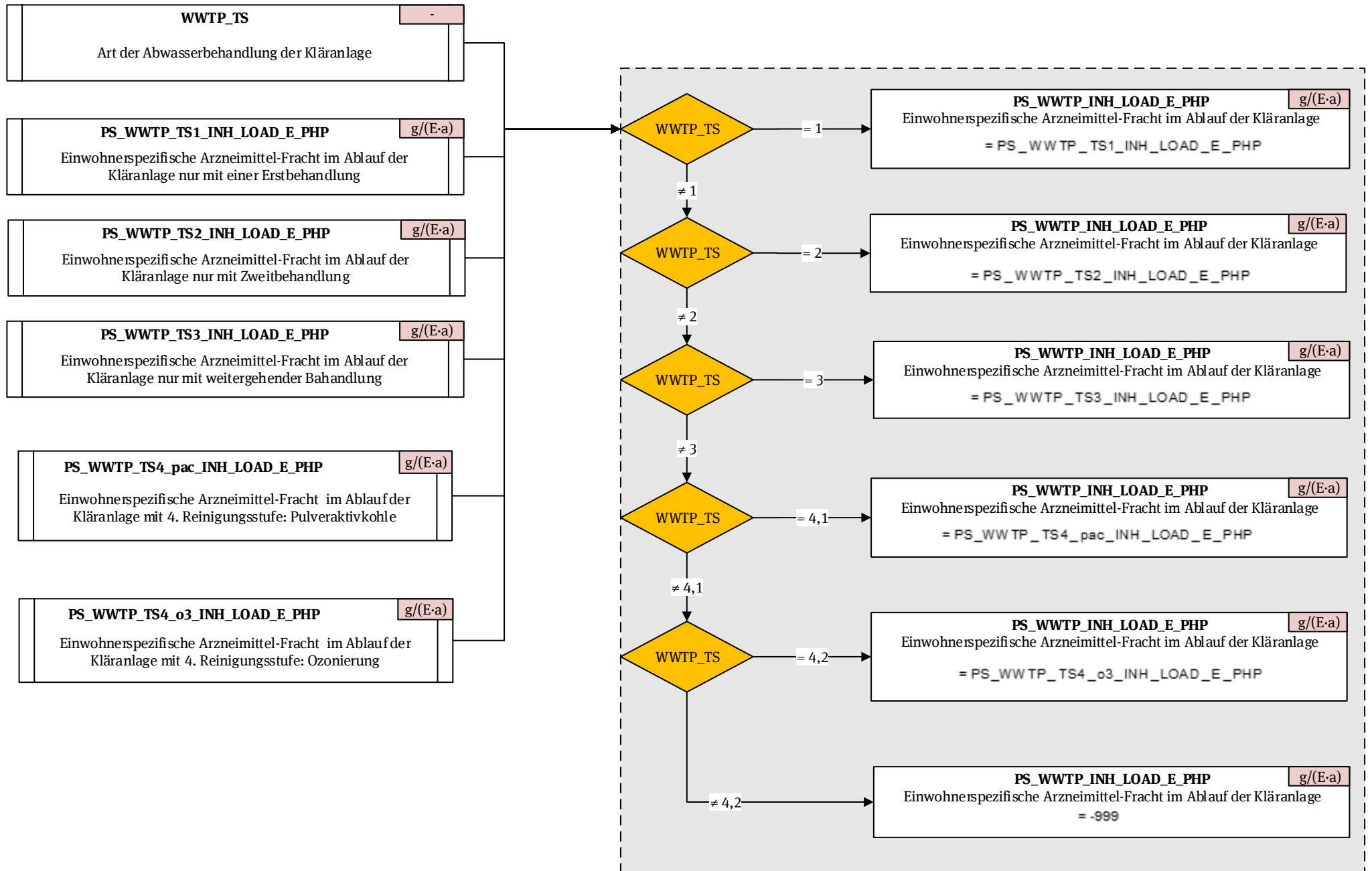
Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen (Variante 1)



Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen (Variante 1)

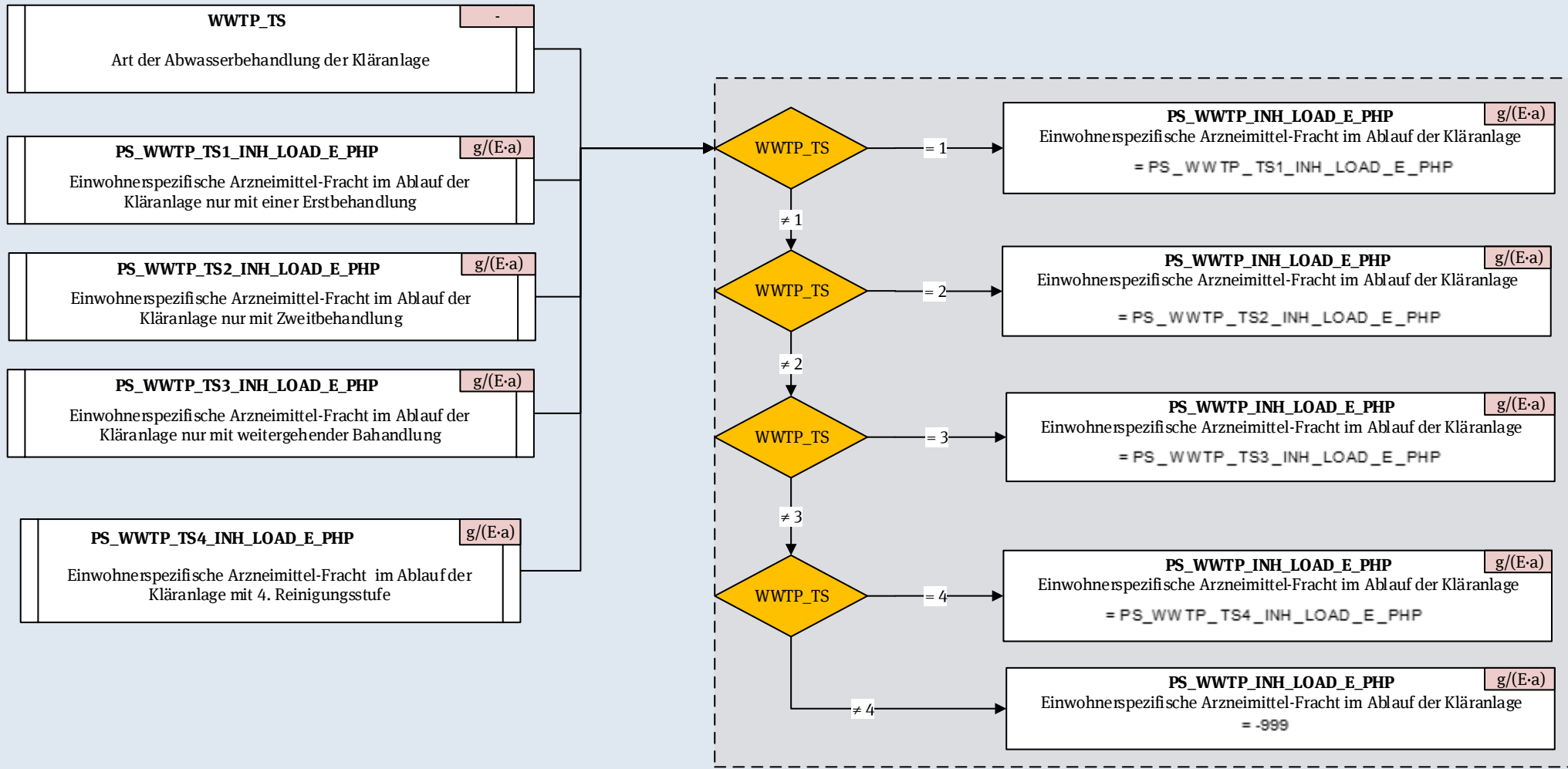


Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen (Variante 1)

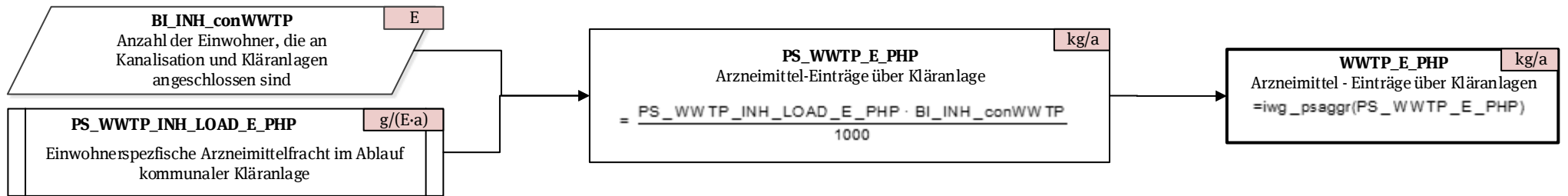


Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen (Variante 1)

PS_WWTP_TS4_INH_LOAD_E_PHP wird verwendet, wenn die vierten Reinigungsstufe verallgemeinert wird und nicht nach Ozonierung oder Pulveraktivkohle unterschieden wird.



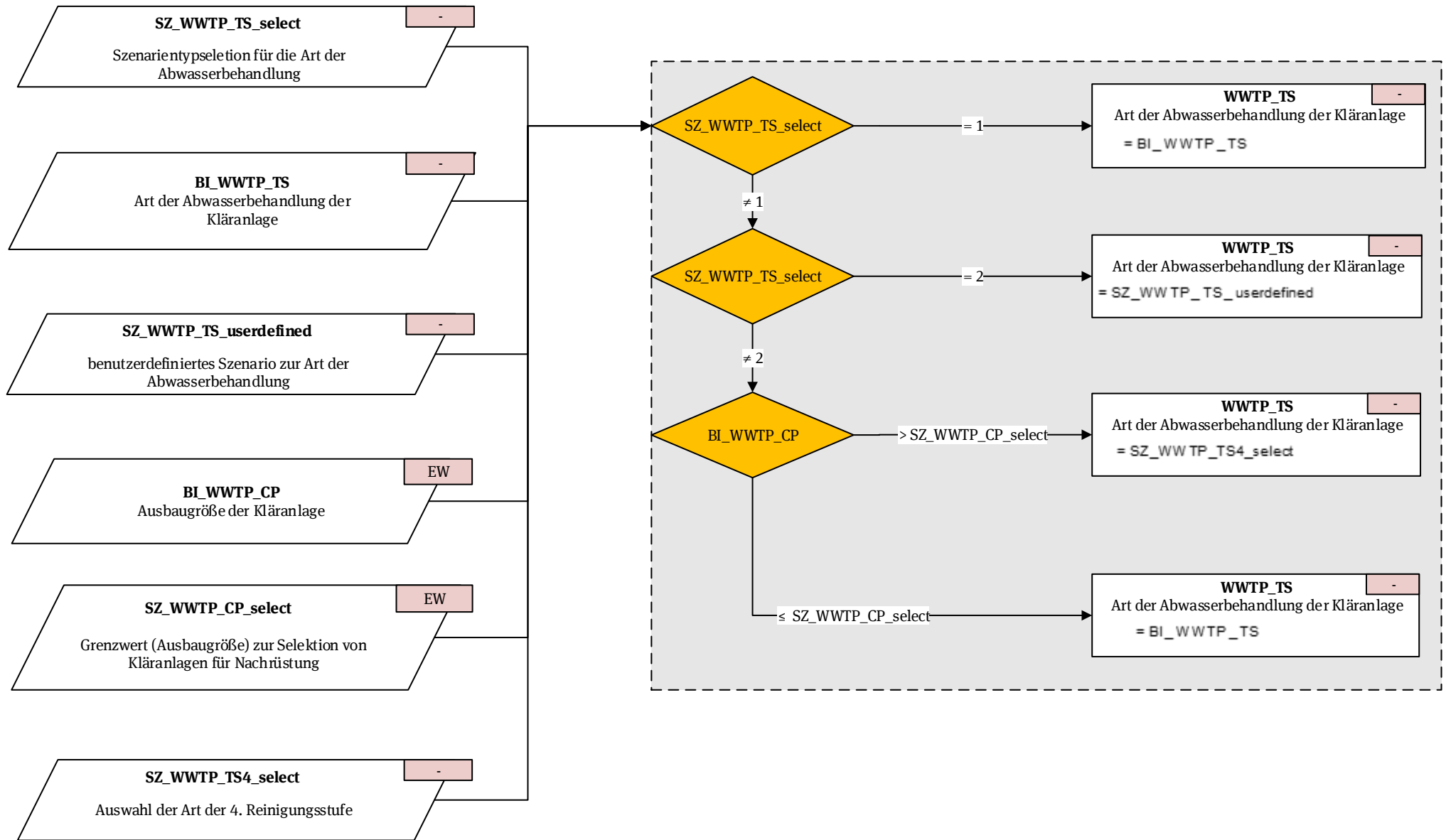
Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen (Variante 1)



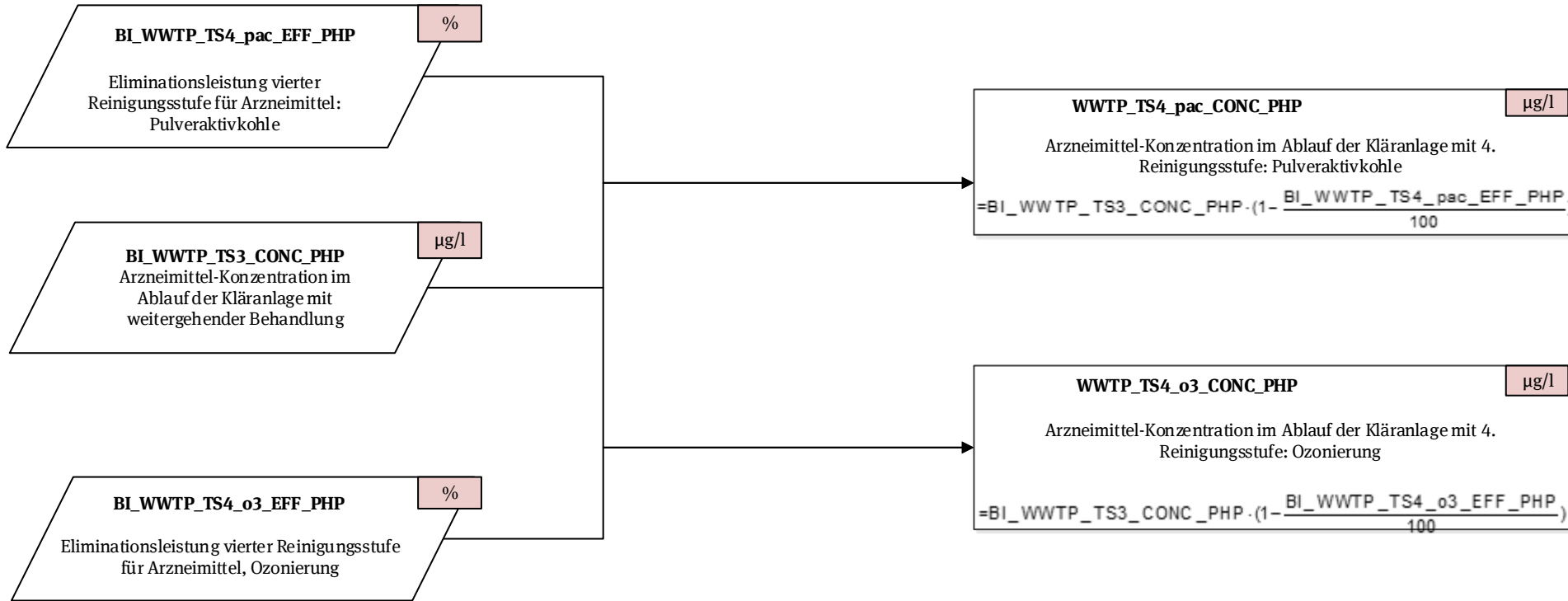
Rechenstapel „Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen“

Variante 2: Konzentrationsbezogener Ansatz

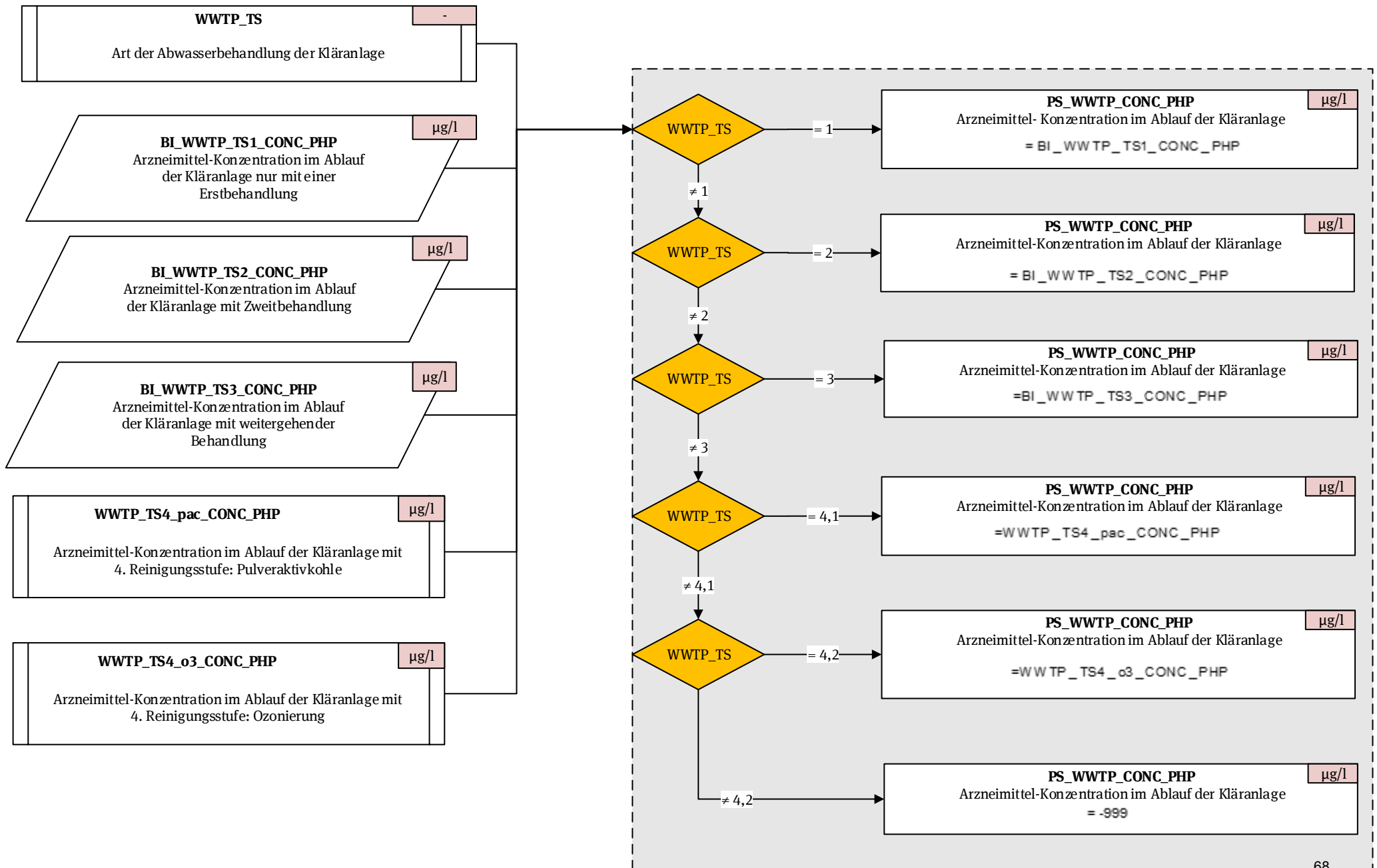
Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen (Variante 2)



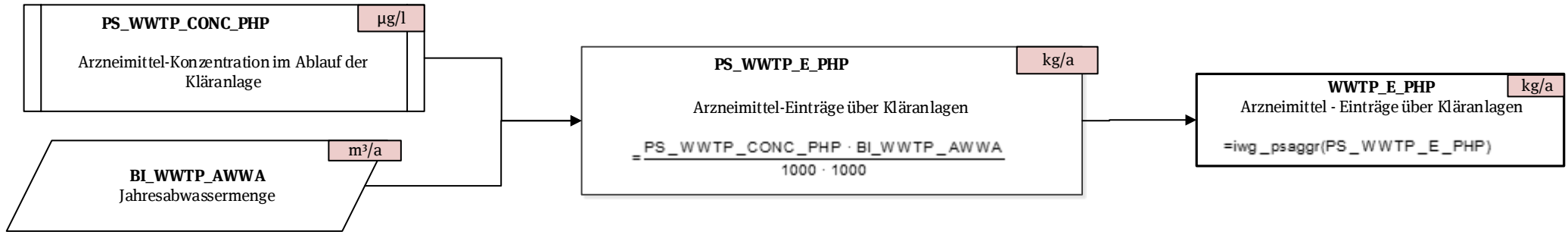
Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen (Variante 2)



Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen (Variante 2)



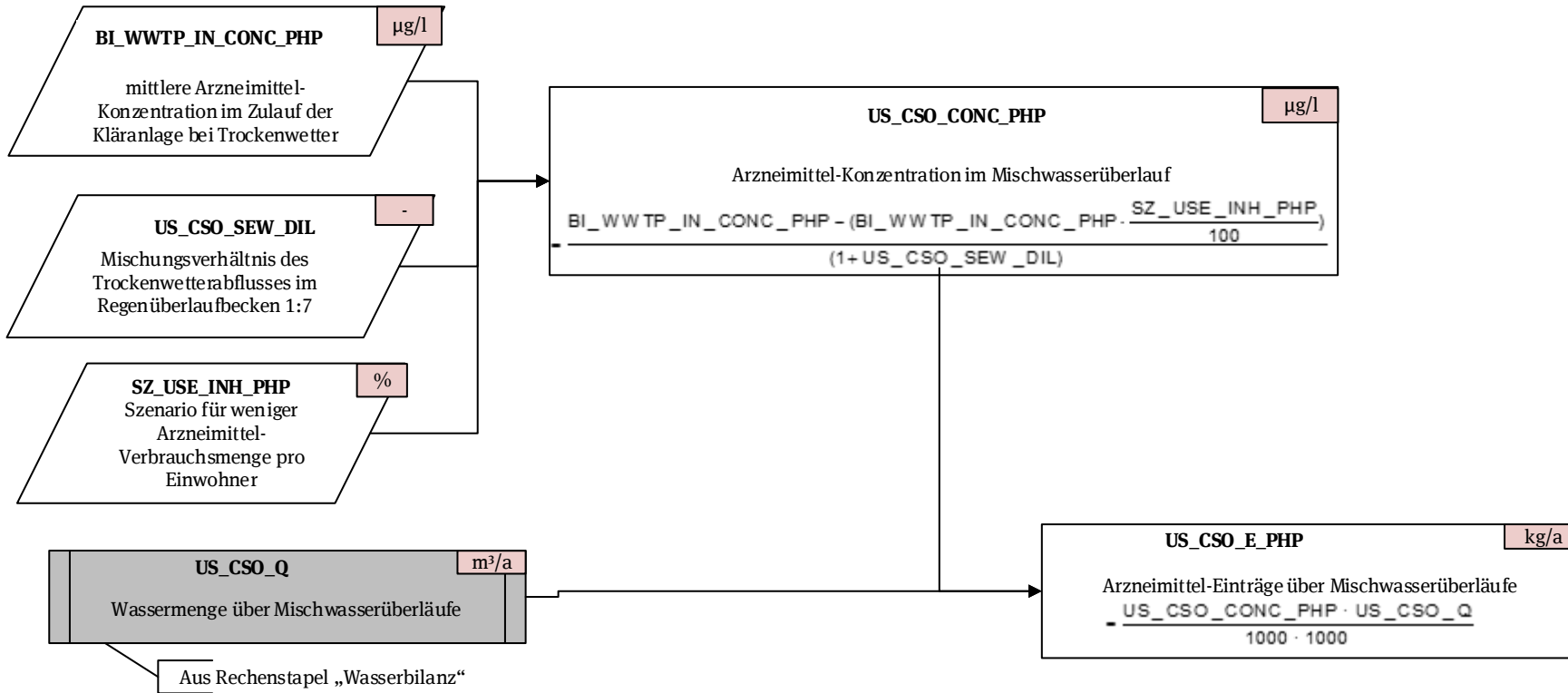
Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kläranlagen (Variante 2)



Rechenstapel „Arzneimittel-Einträge über Kanalisationssysteme“

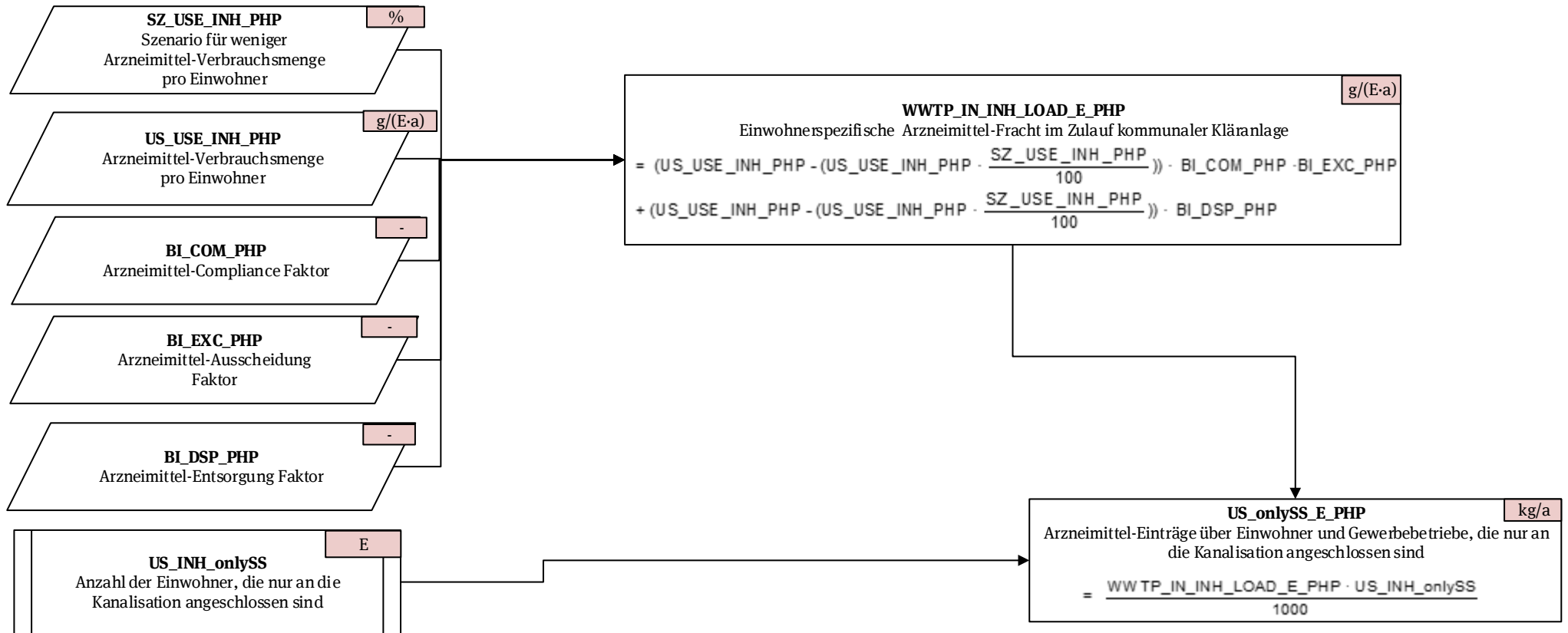
Benötigt wird der Rechenstapel „Wasserbilanz“

Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge aus Mischwasserüberläufen



Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge von Einwohnern, die an die Kanalisation angeschlossen sind, nicht aber an Kläranlagen

Variante 1: Einwohnerbezogener Ansatz

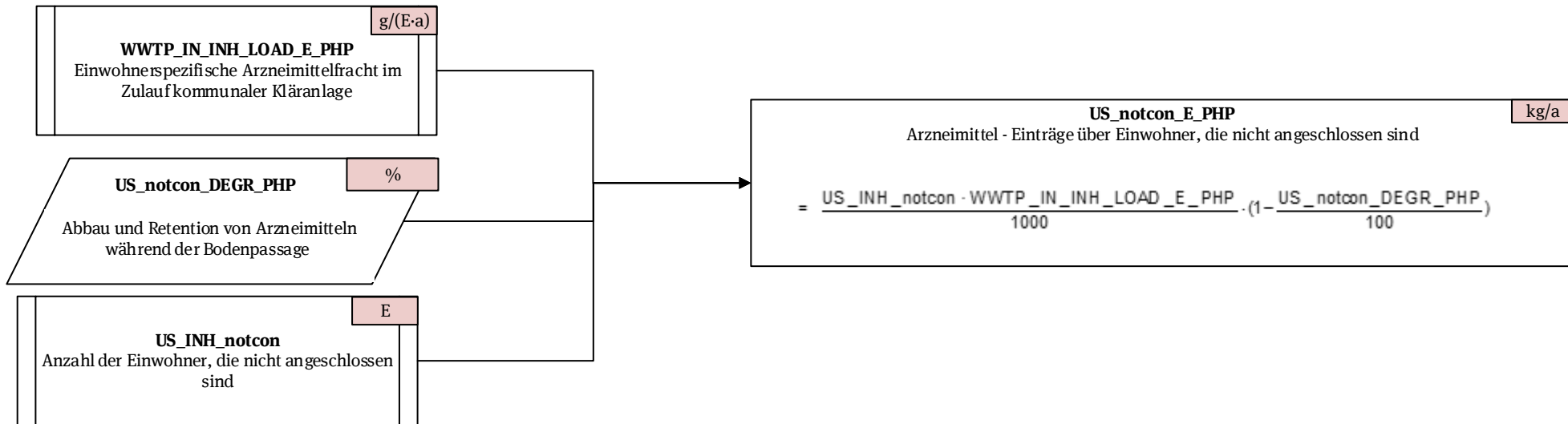


Variante 2: Konzentrationsbezogener Ansatz

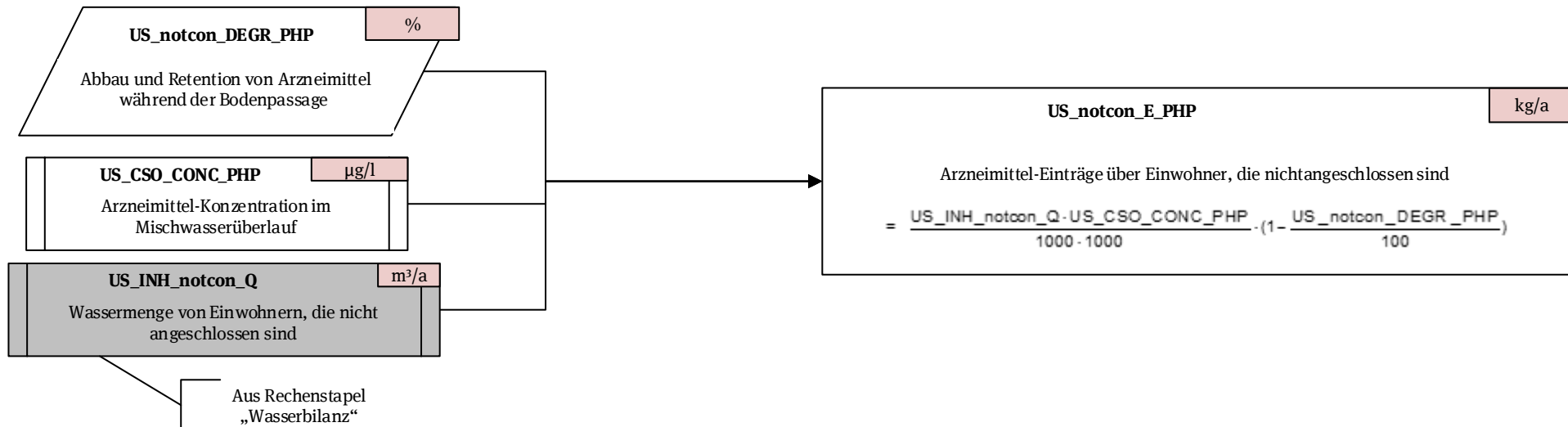


Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge von nicht angeschlossenen Einwohnern

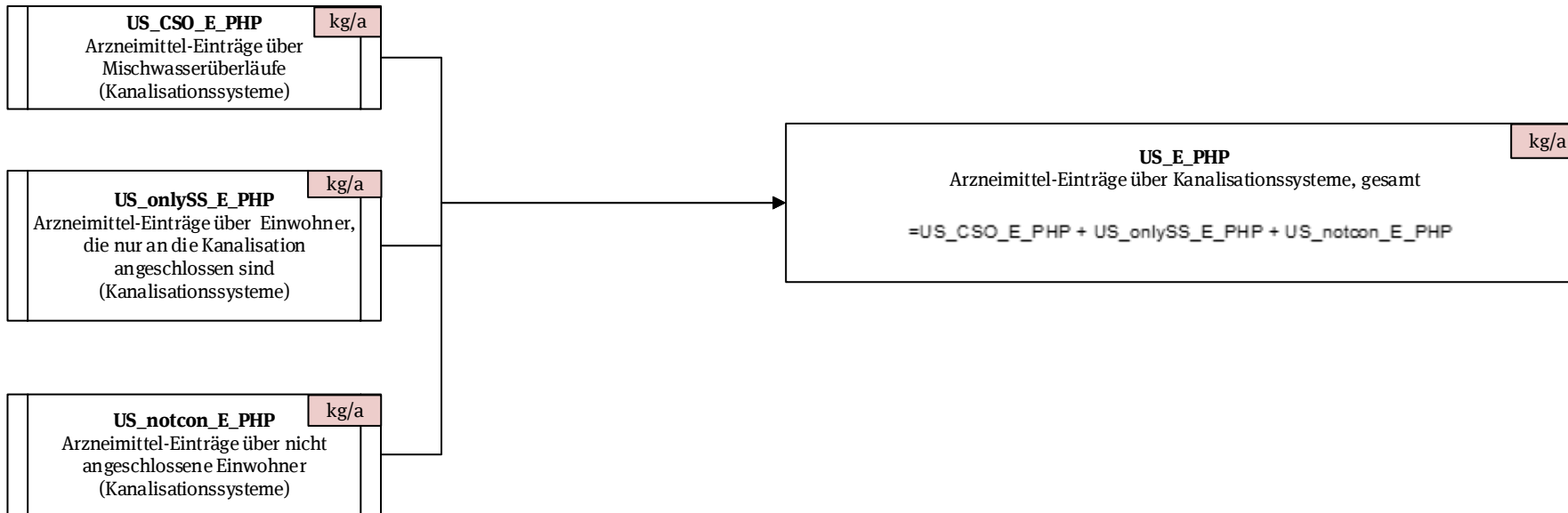
Variante 1: Einwohnerbezogener Ansatz



Variante 2: Konzentrationsbezogener Ansatz

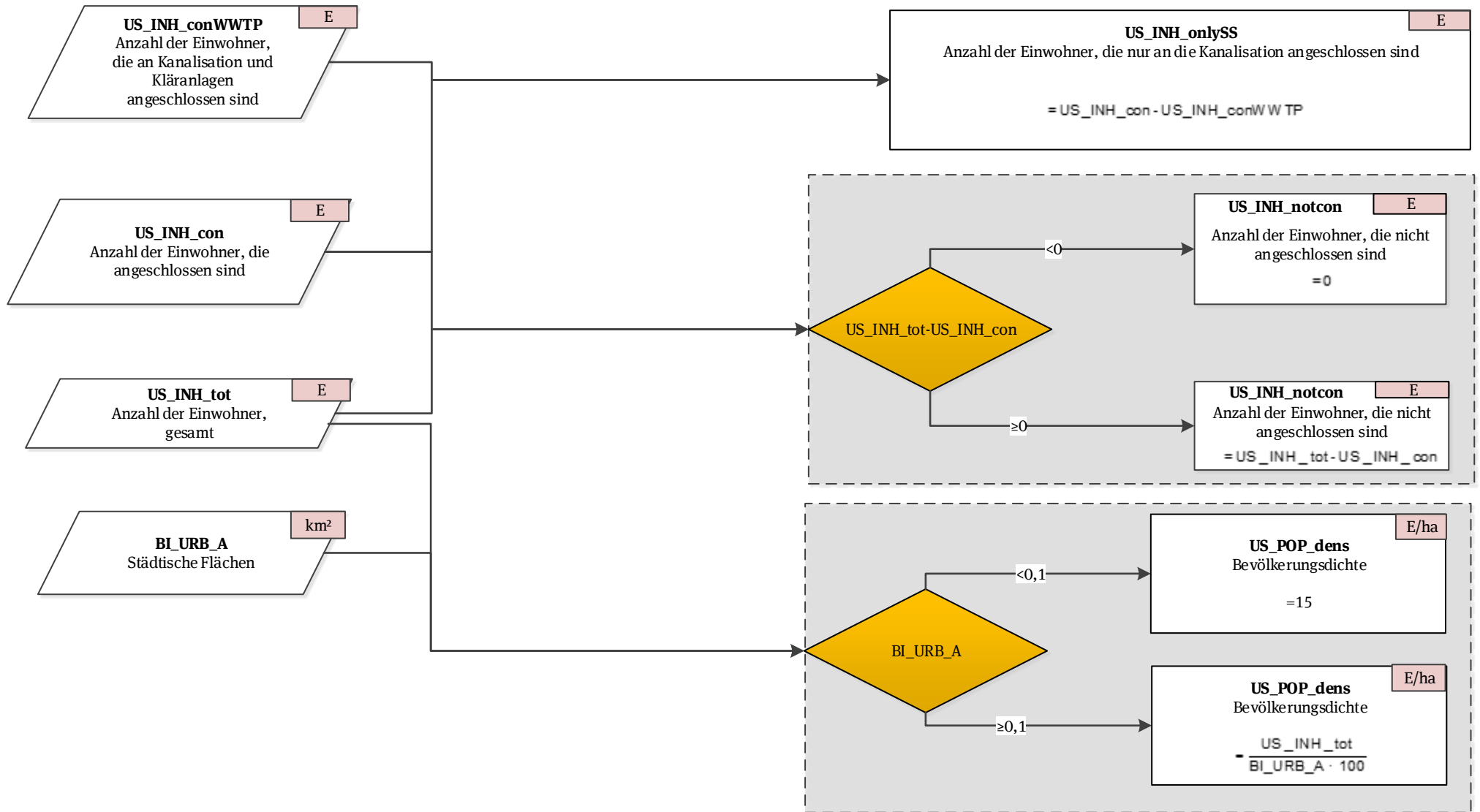


Einträge > Arzneimittel-Einträge über Kanalisationssysteme > Einträge über Kanalisationssysteme, gesamt



Rechenstapel „Einwohner“

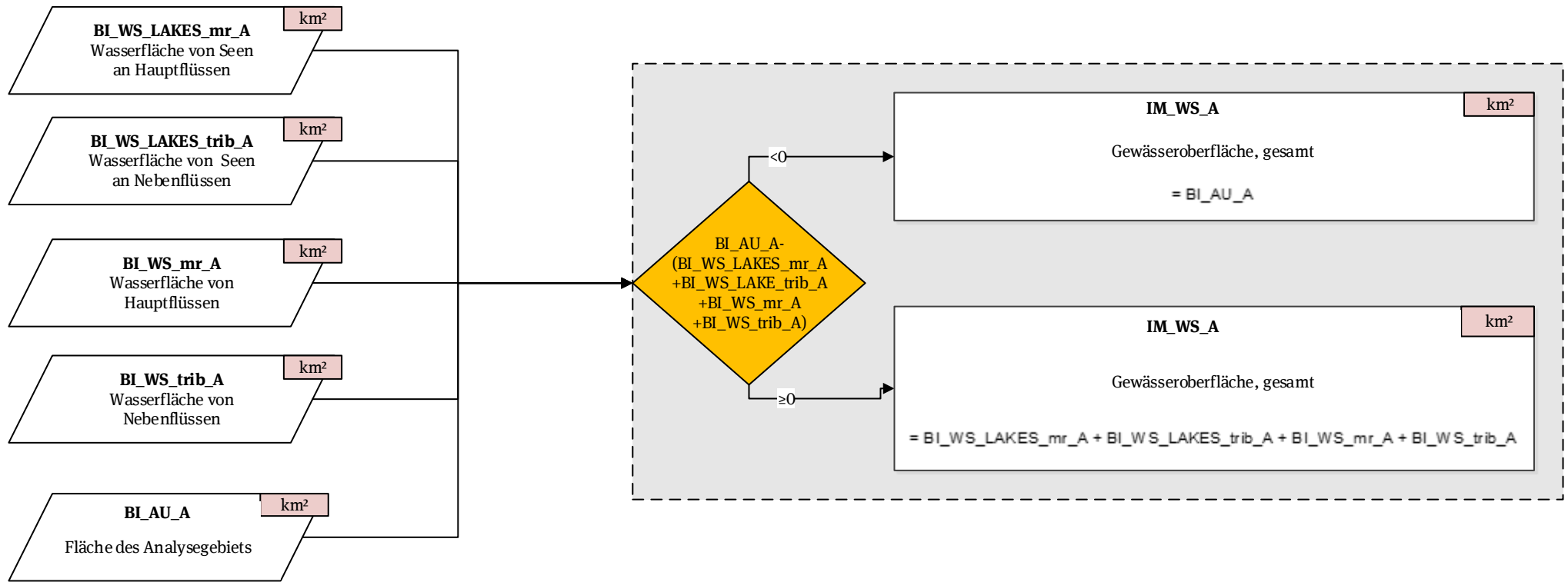
Einwohner > Angeschlossene und nicht angeschlossene Einwohner
 Einwohner > Bevölkerungsdichte



Rechenstapel „Flächen“

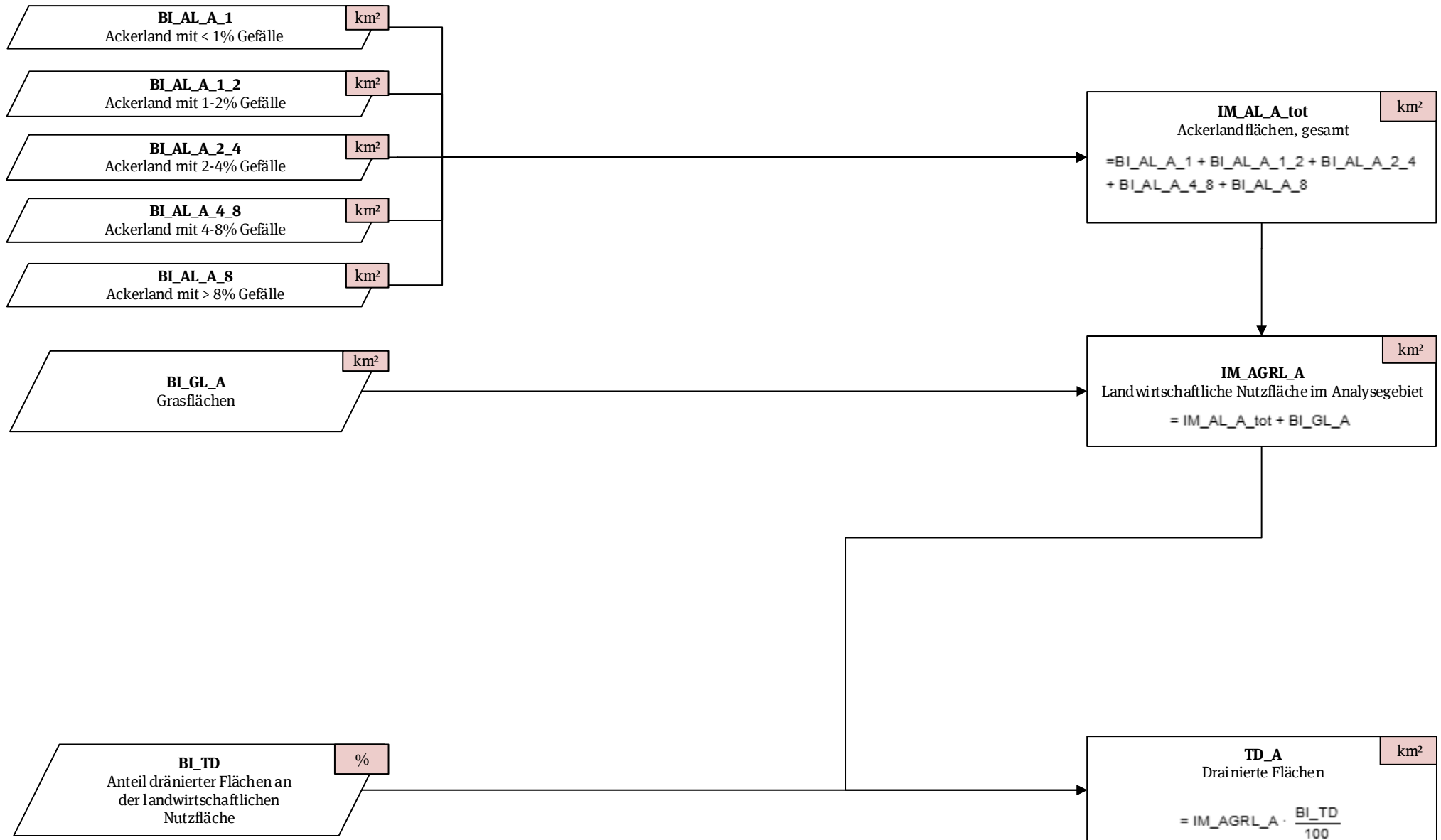
Benötigt wird der Rechenstapel „Einwohner“

Flächen > Gewässeroberfläche

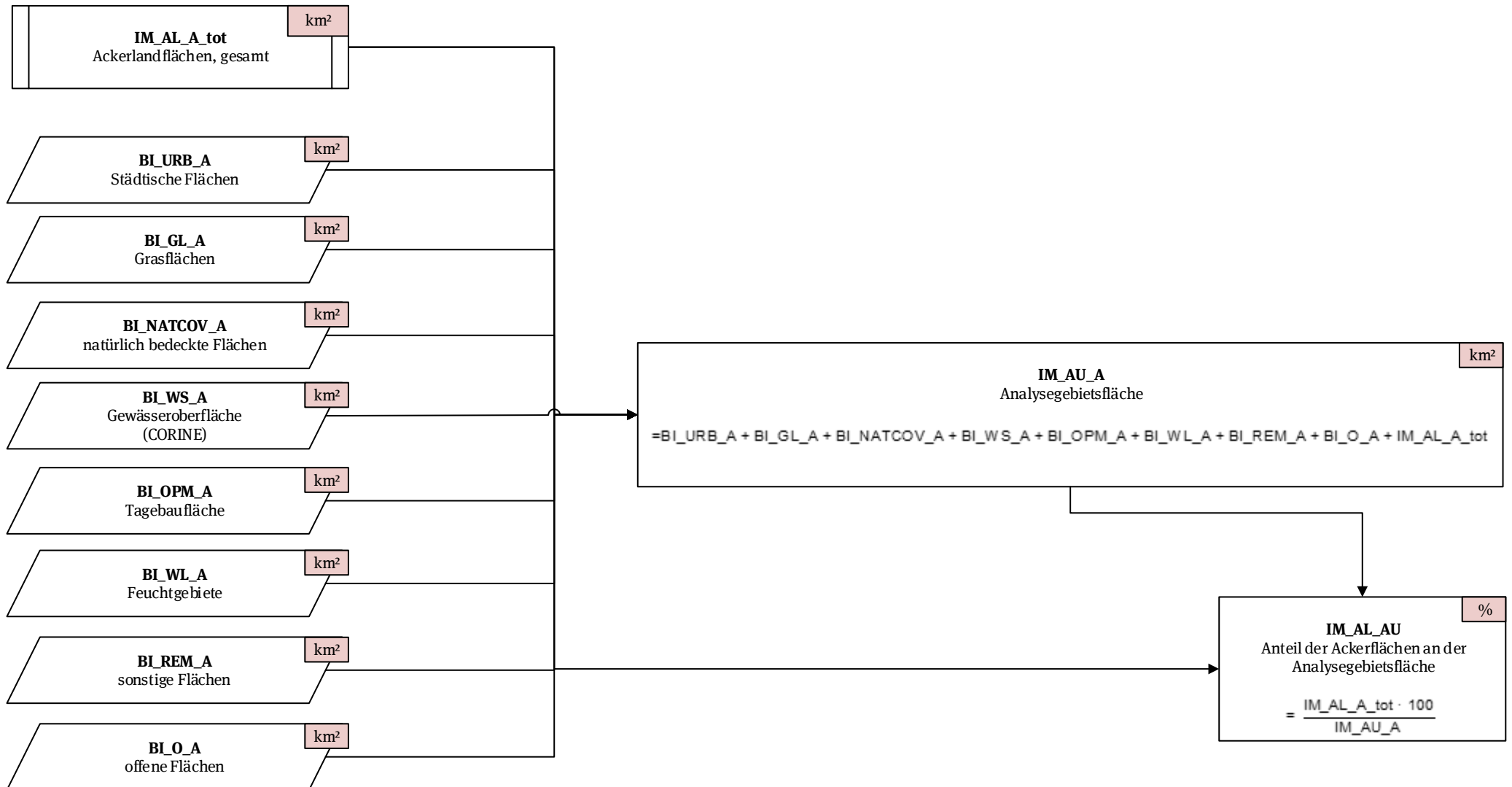


Flächen > Landwirtschaftliche Nutzfläche (1)

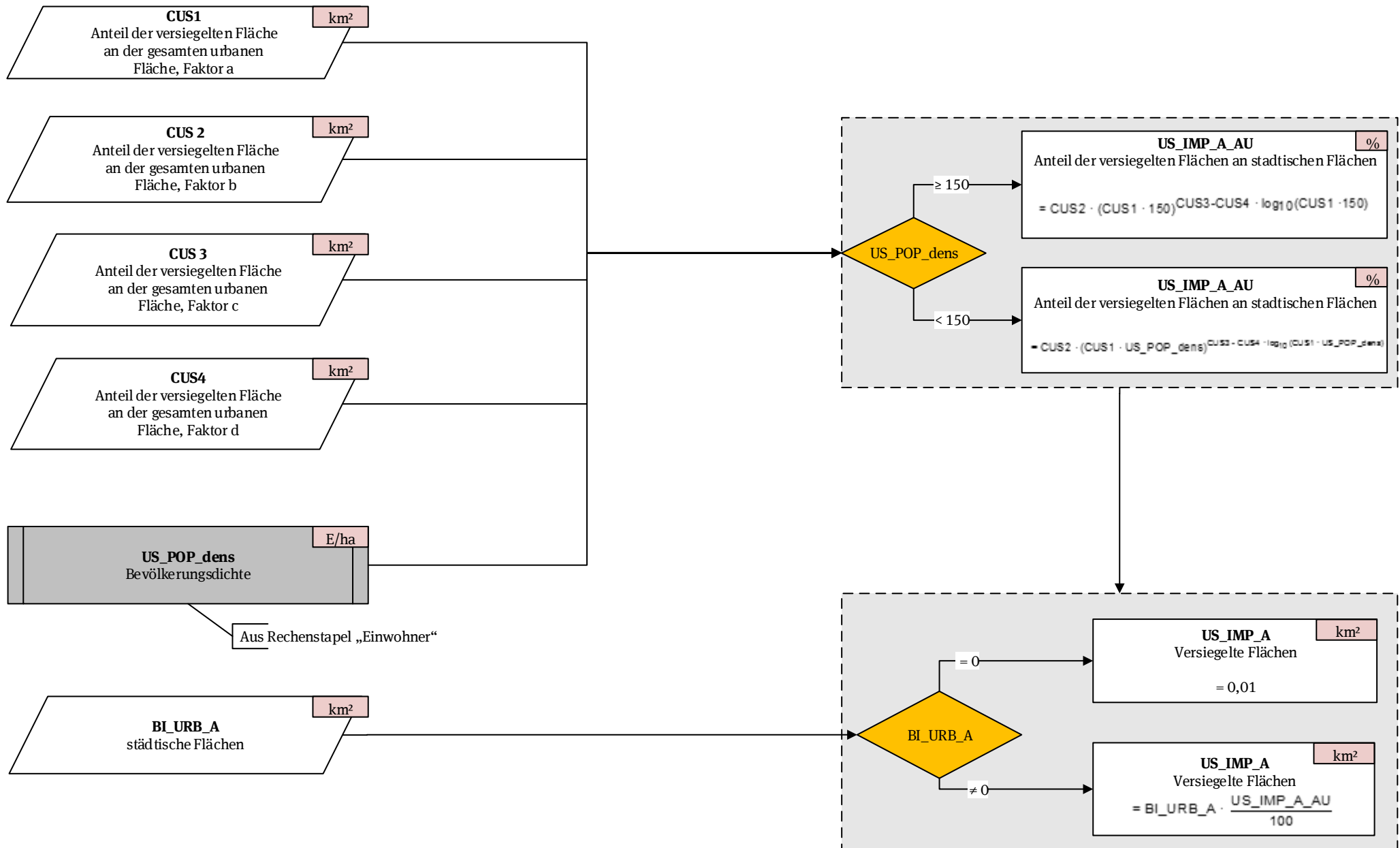
Flächen > Drainierte Fläche



Flächen > Landwirtschaftliche Nutzfläche (2)

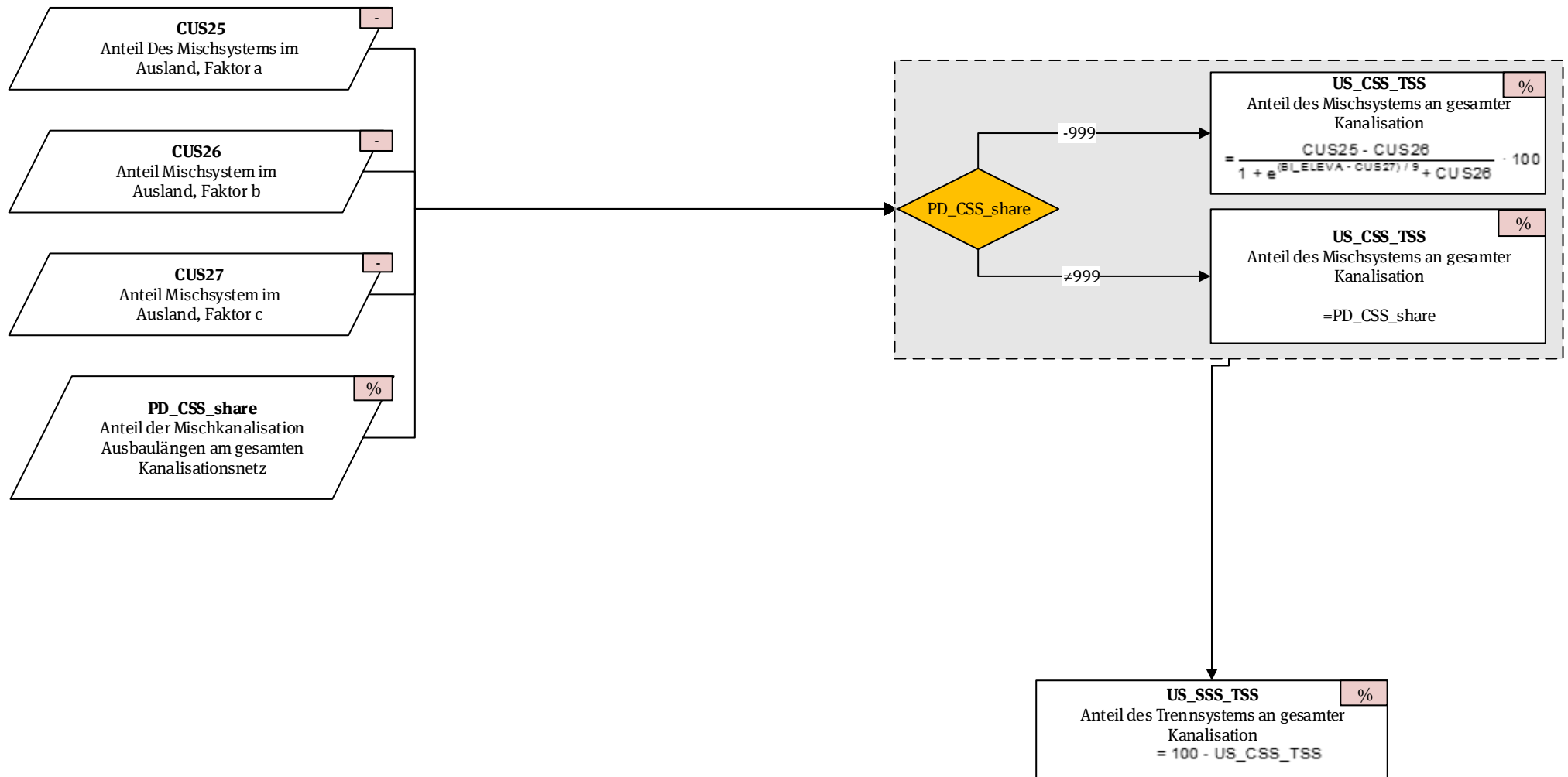


Flächen > Innerörtlich versiegelte Flächen > Innerörtlich versiegelte Flächen, gesamt

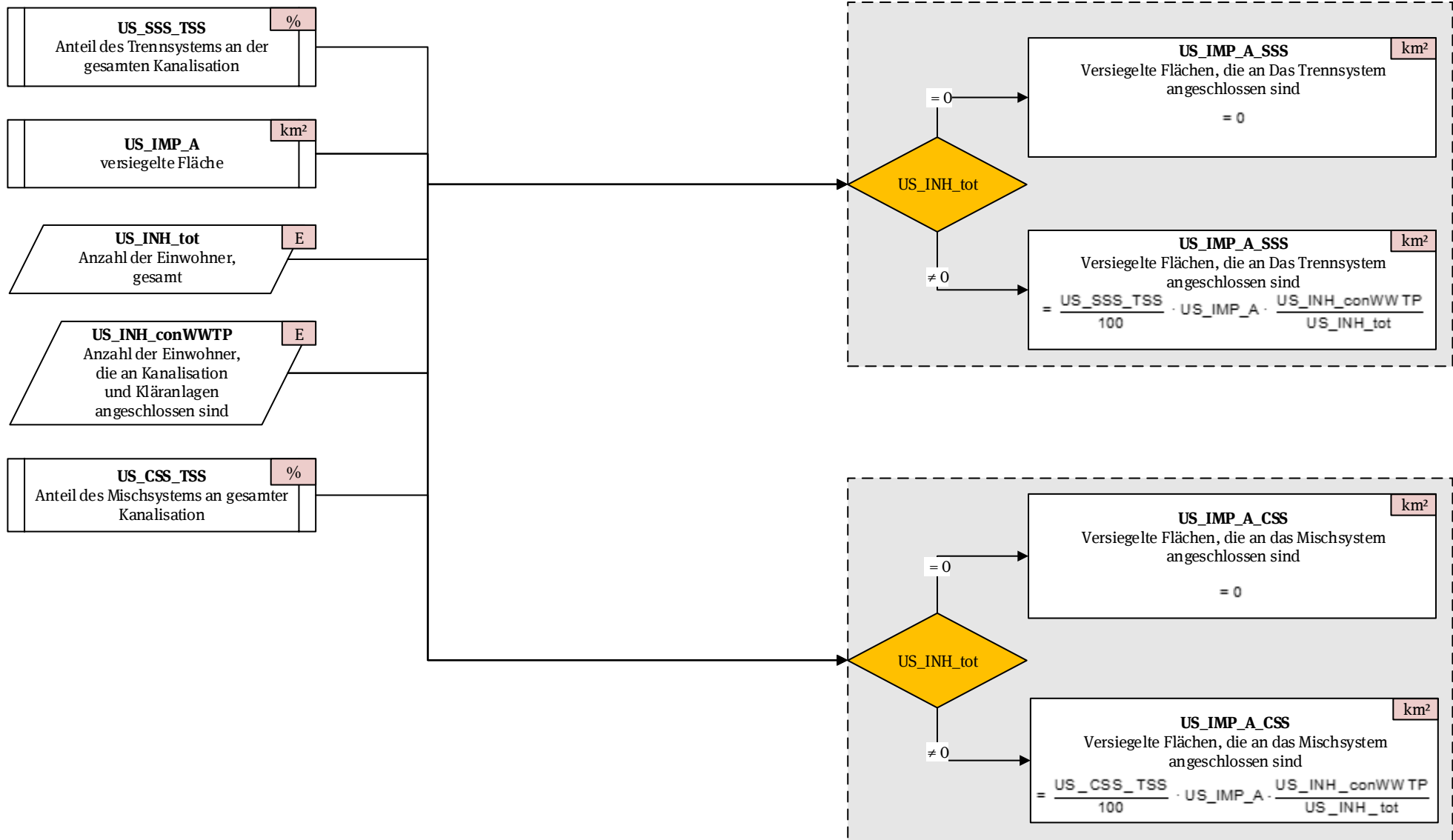


Flächen > Innerörtlich versiegelte Flächen > Anteil des Trennsystems an gesamter Kanalisation

Flächen > Innerörtlich versiegelte Flächen > Anteil des Mischsystems an gesamter Kanalisation

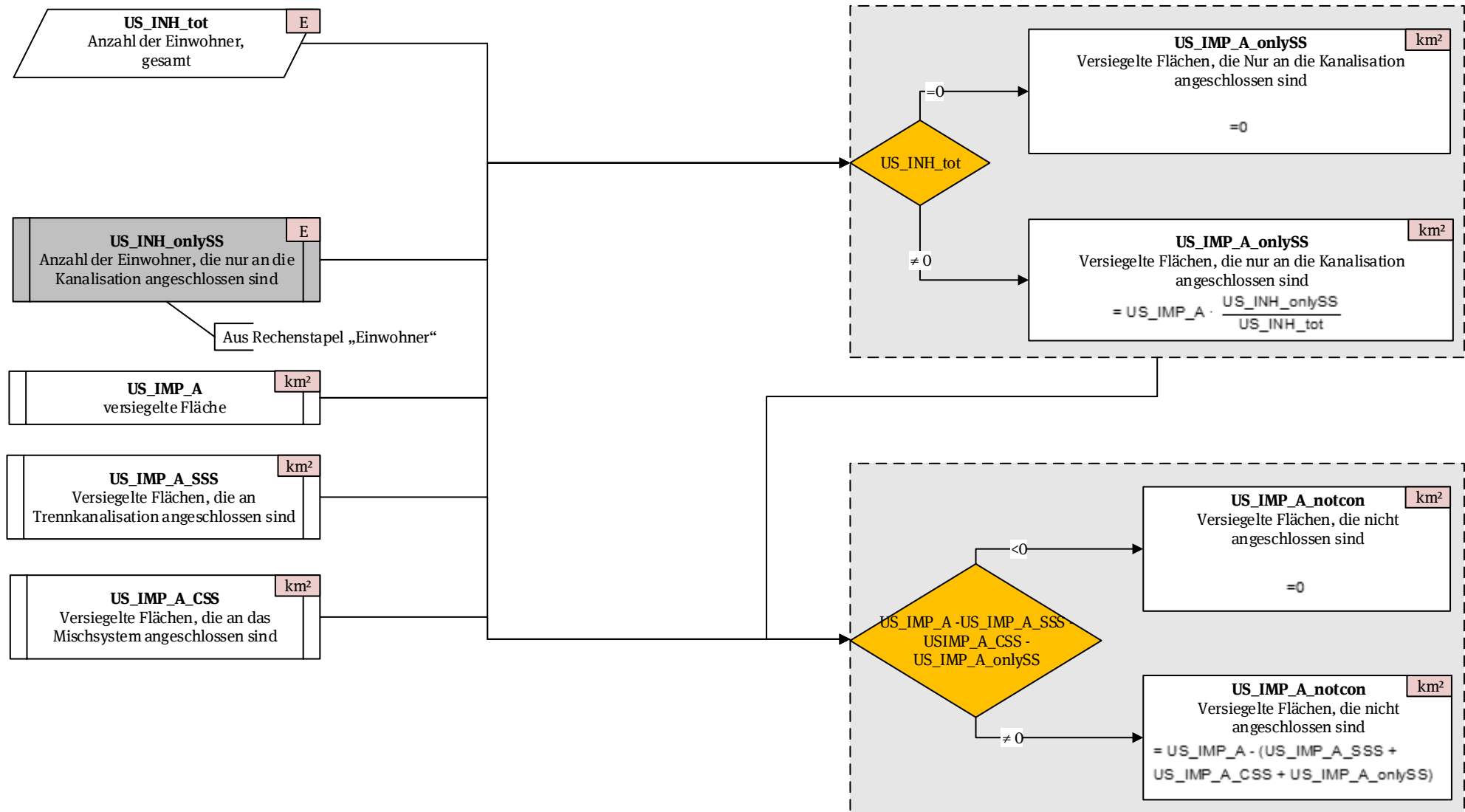


Flächen > Innerörtlich versiegelte Flächen > Innerörtlich versiegelte Flächen, die an Trennsystem angeschlossen sind
 Flächen > Innerörtlich versiegelte Flächen > Innerörtlich versiegelte Flächen, die an das Mischsystem angeschlossen sind

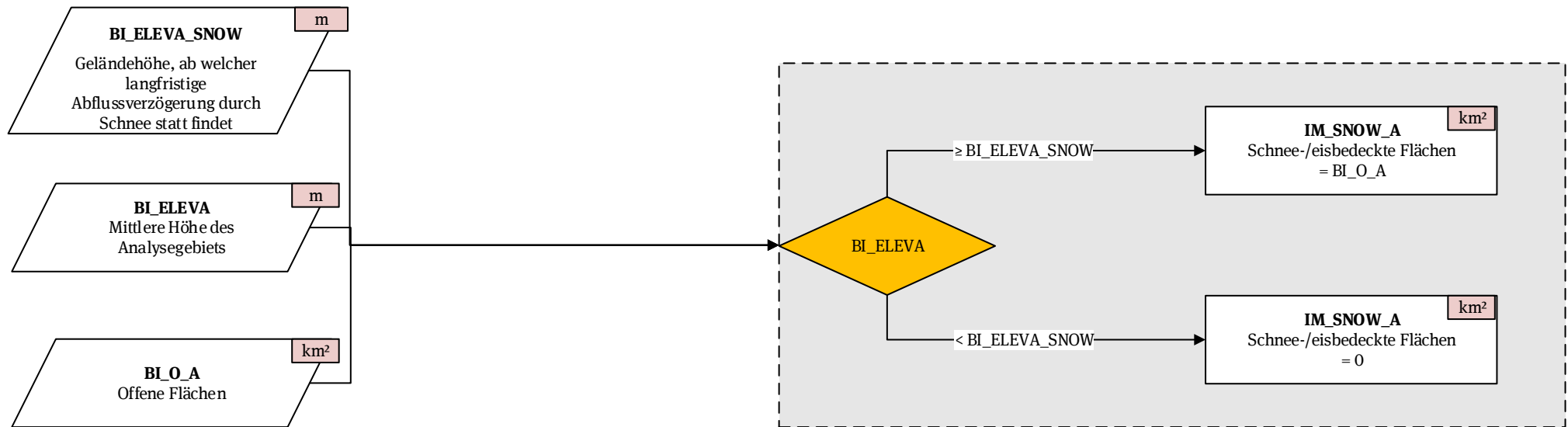


Flächen > Innerörtlich versiegelte Flächen > Innerörtlich versiegelte Flächen, die an die Kanalisation, nicht jedoch an eine Kläranlage angeschlossen sind

Flächen > Innerörtlich versiegelte Flächen > Innerörtlich versiegelte Flächen, die nicht angeschlossen sind



Flächen > Offene Flächen > Schnee- und eisbedeckte Flächen

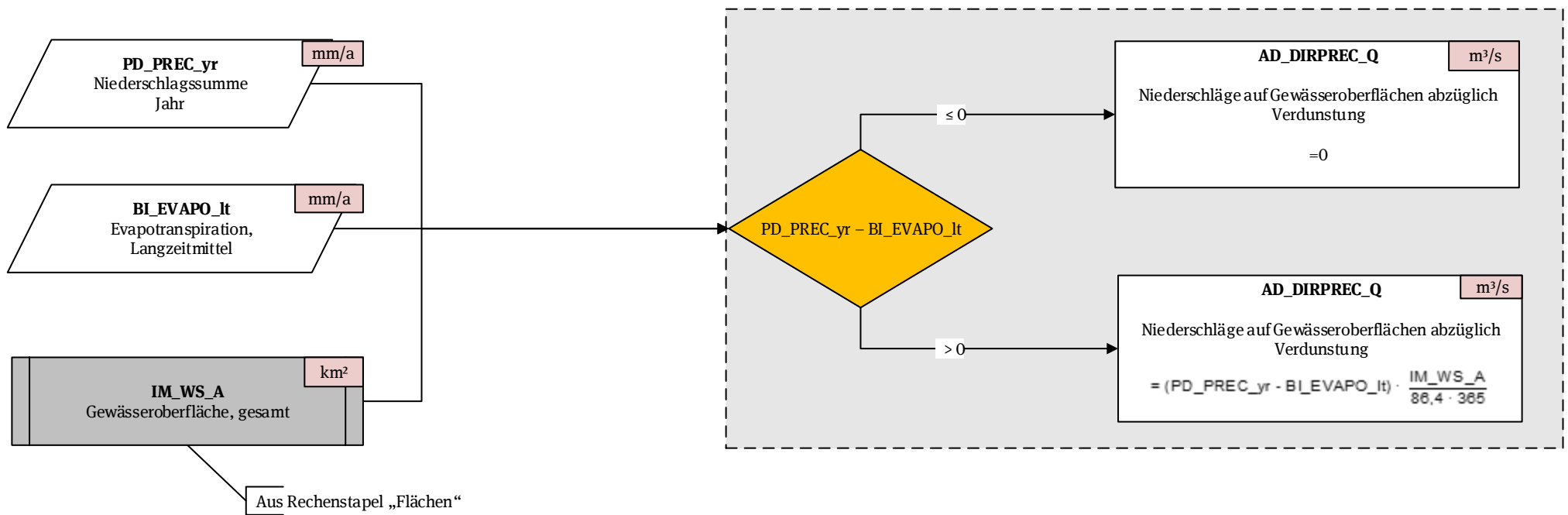


Rechenstapel „Wasserbilanz“

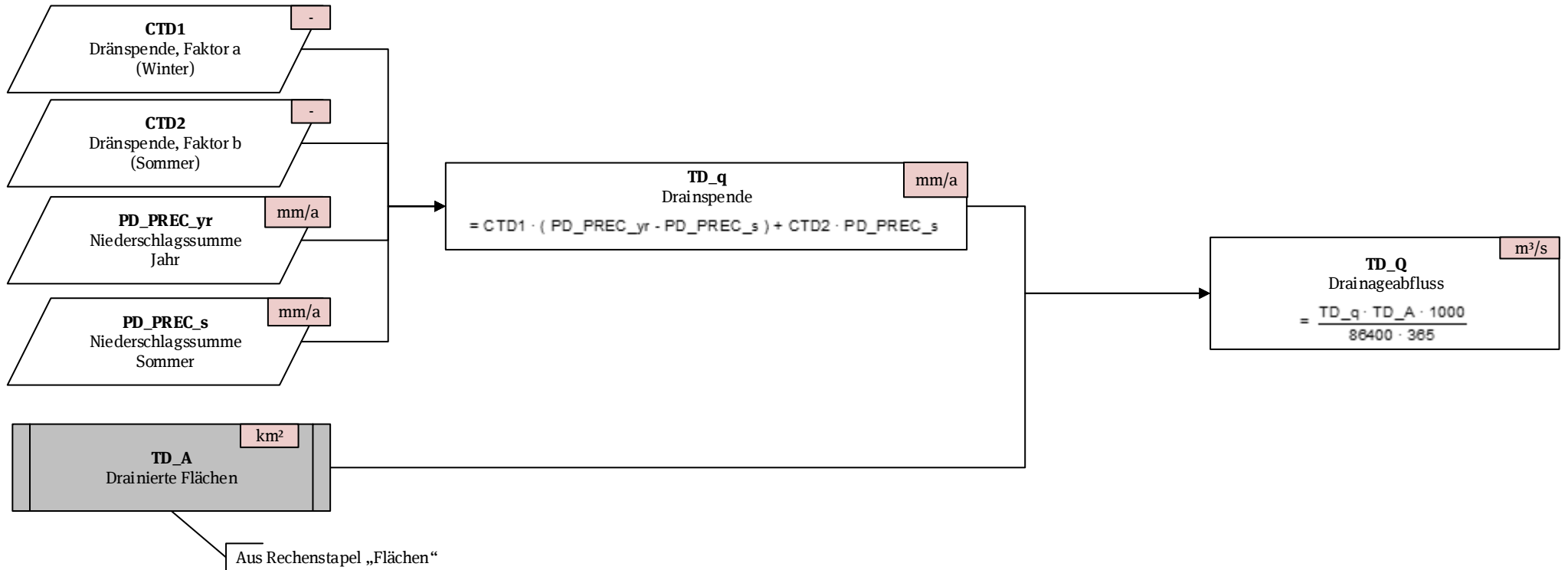
Benötigt wird der Rechenstapel „Einwohner“

Benötigt wird der Rechenstapel „Flächen“

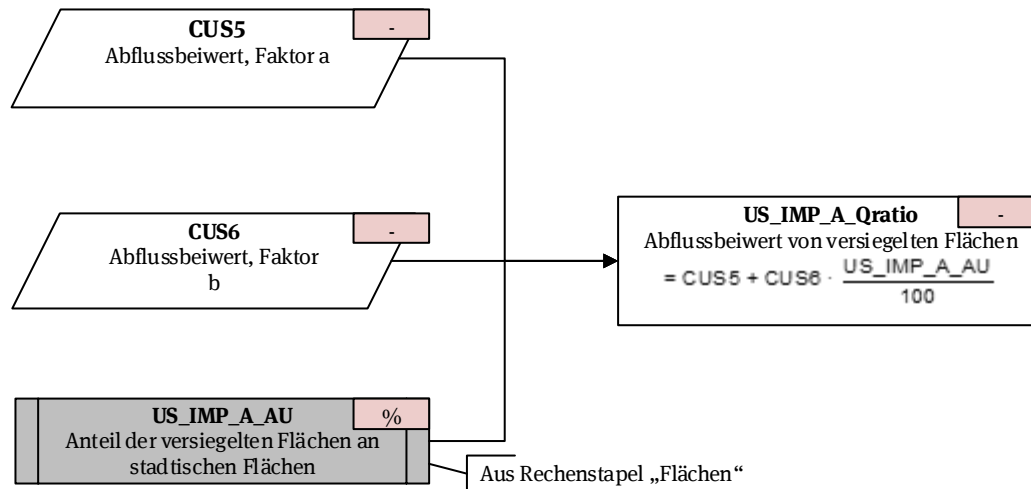
Wasserbilanz > Niederschläge auf Gewässeroberflächen abzüglich Verdunstung > Niederschläge auf Gewässeroberflächen abzüglich Verdunstung



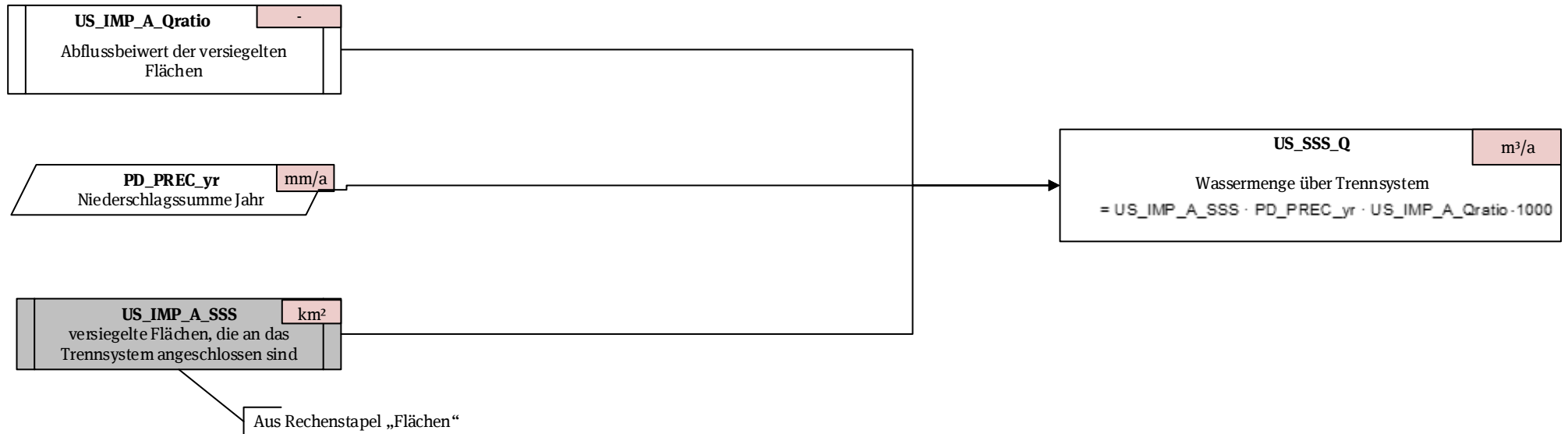
Wasserbilanz > Drainagenabfluss > Drainagenabfluss



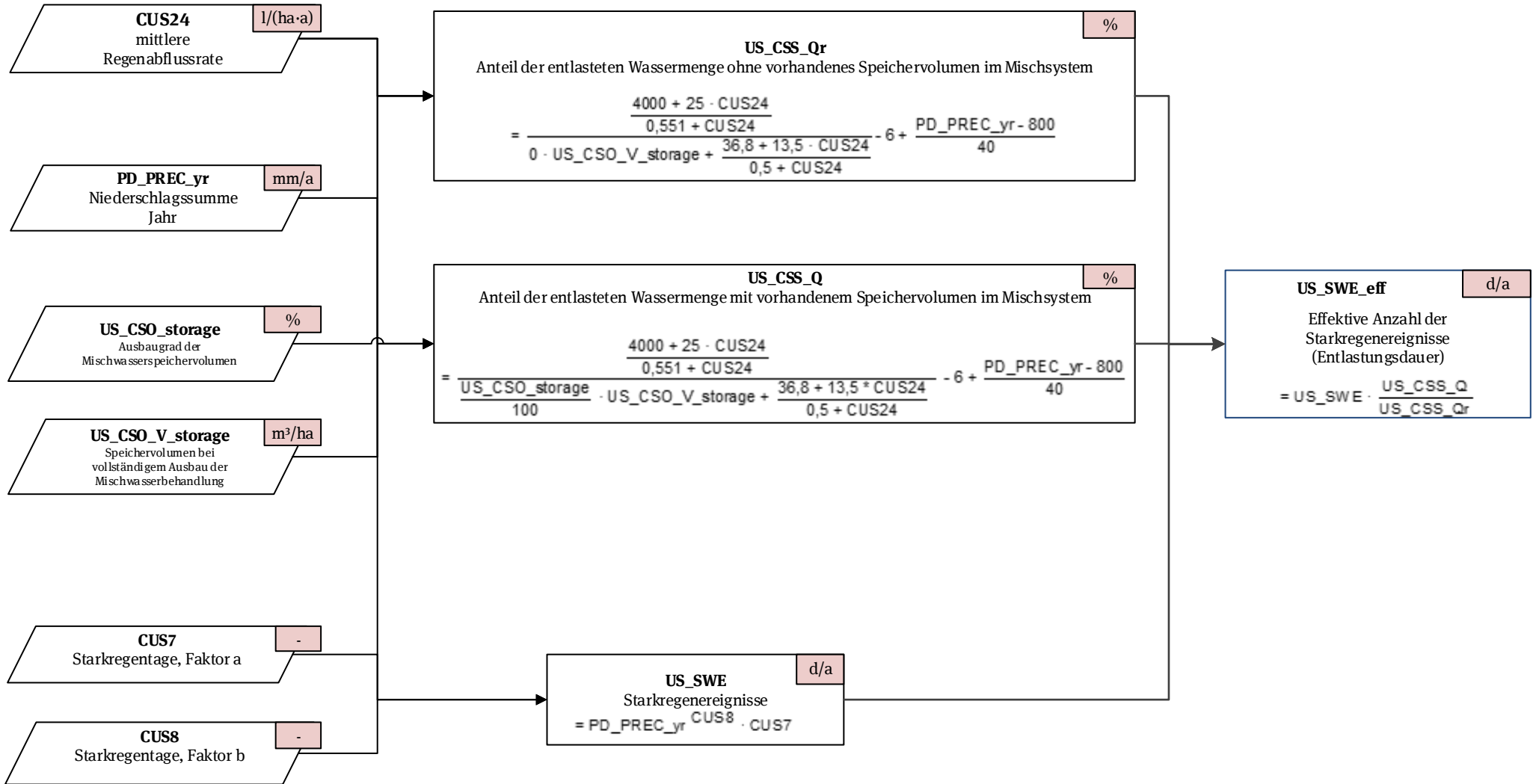
Wasserbilanz > Urbaner Abfluss > Abflussbeiwert der versiegelten Flächen



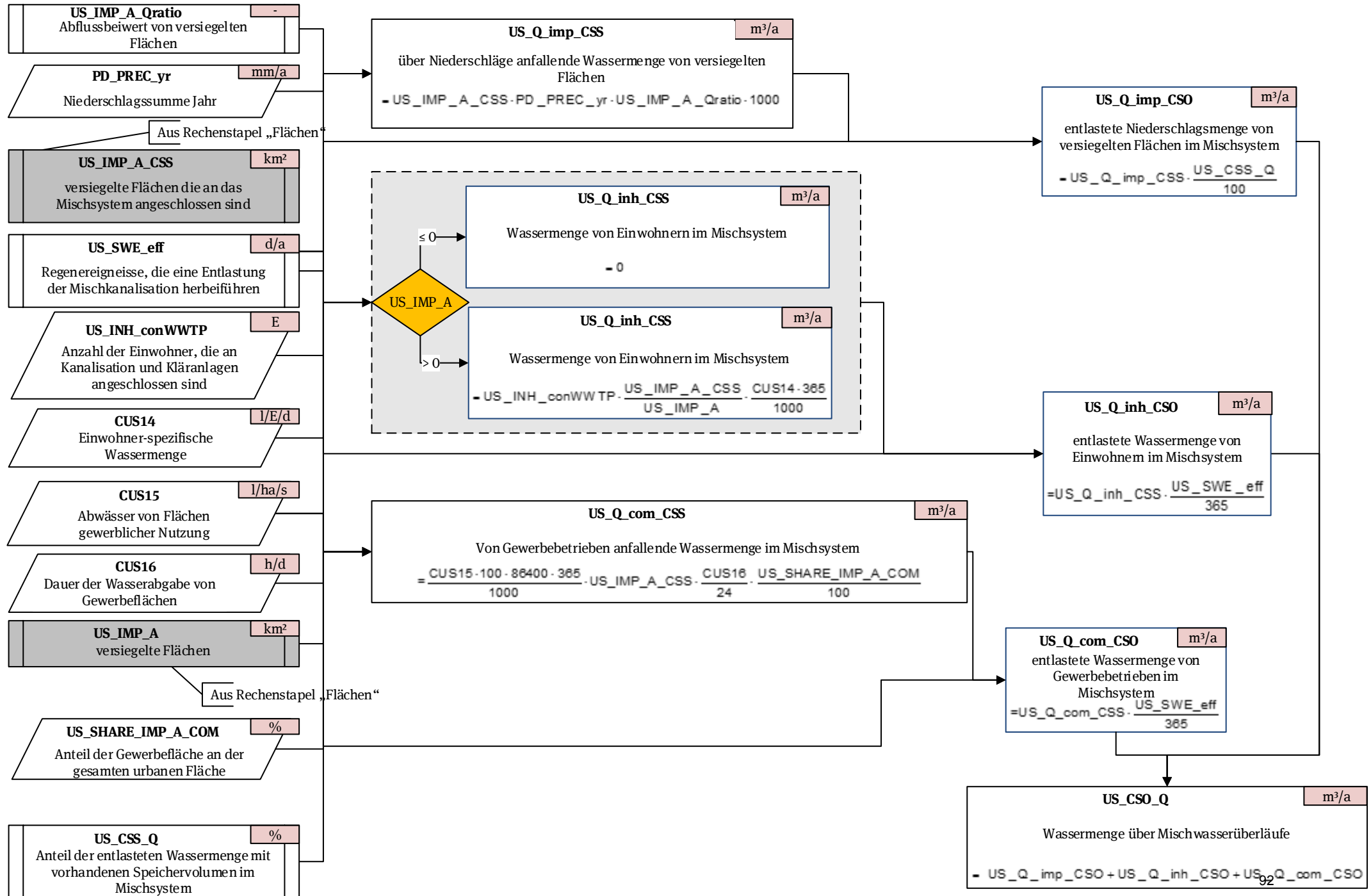
Wasserbilanz > Urbaner Abfluss > Urbaner Abfluss über Trennsystem



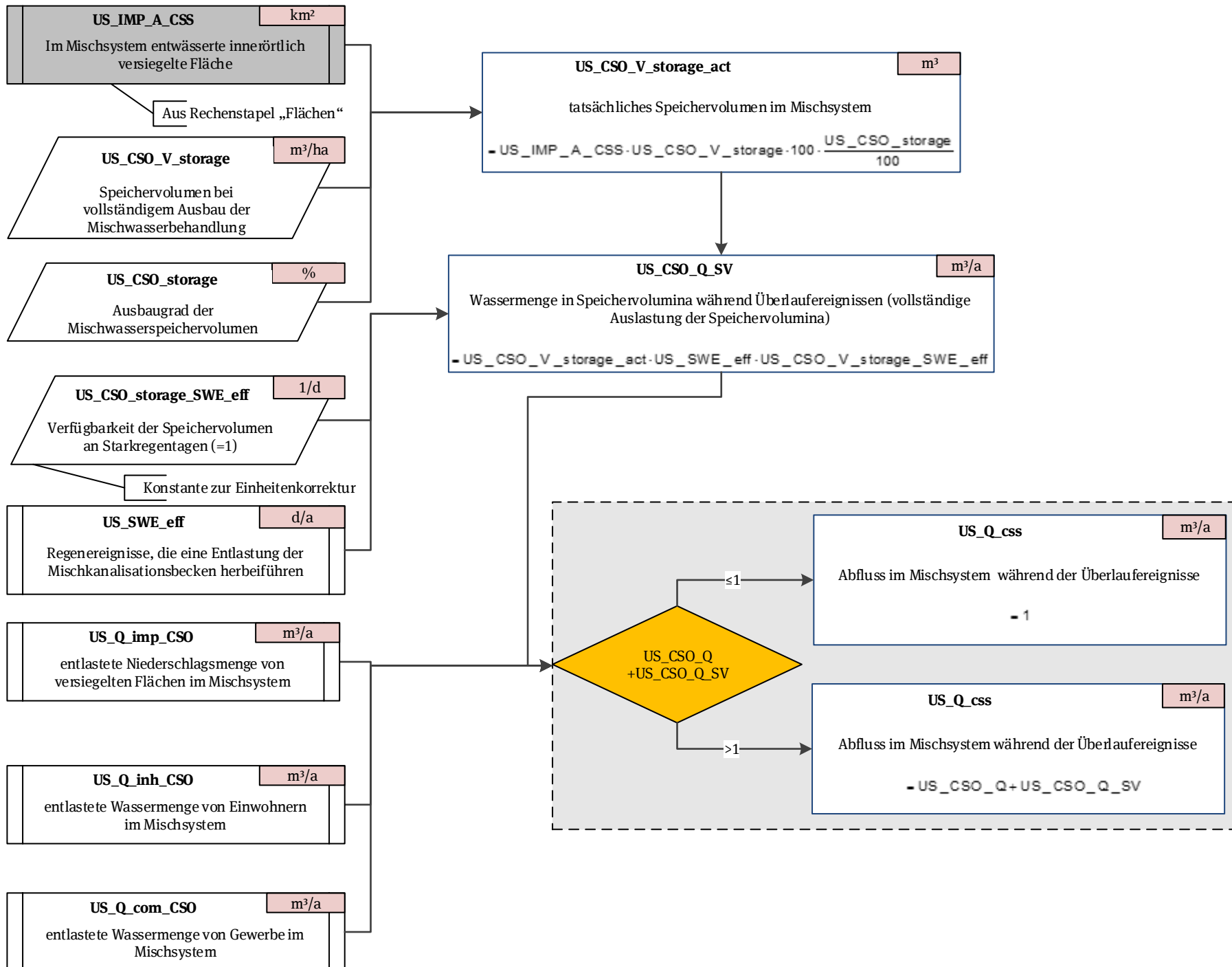
Wasserbilanz > Urbaner Abfluss > Urbaner Abfluss über Mischsystemüberläufe (1)



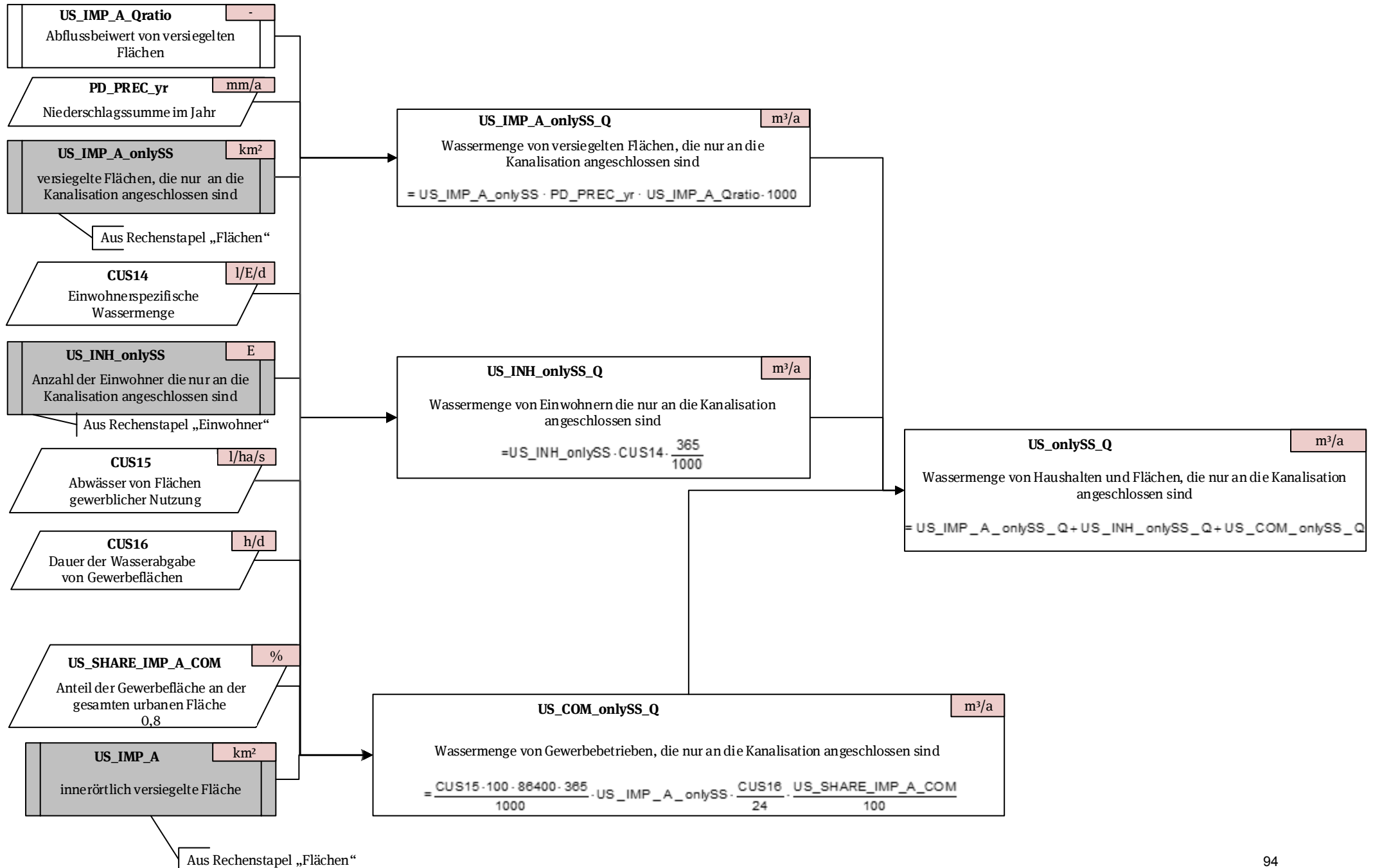
Wasserbilanz > Urbaner Abfluss > Urbaner Abfluss über Mischsystemüberläufe (2)



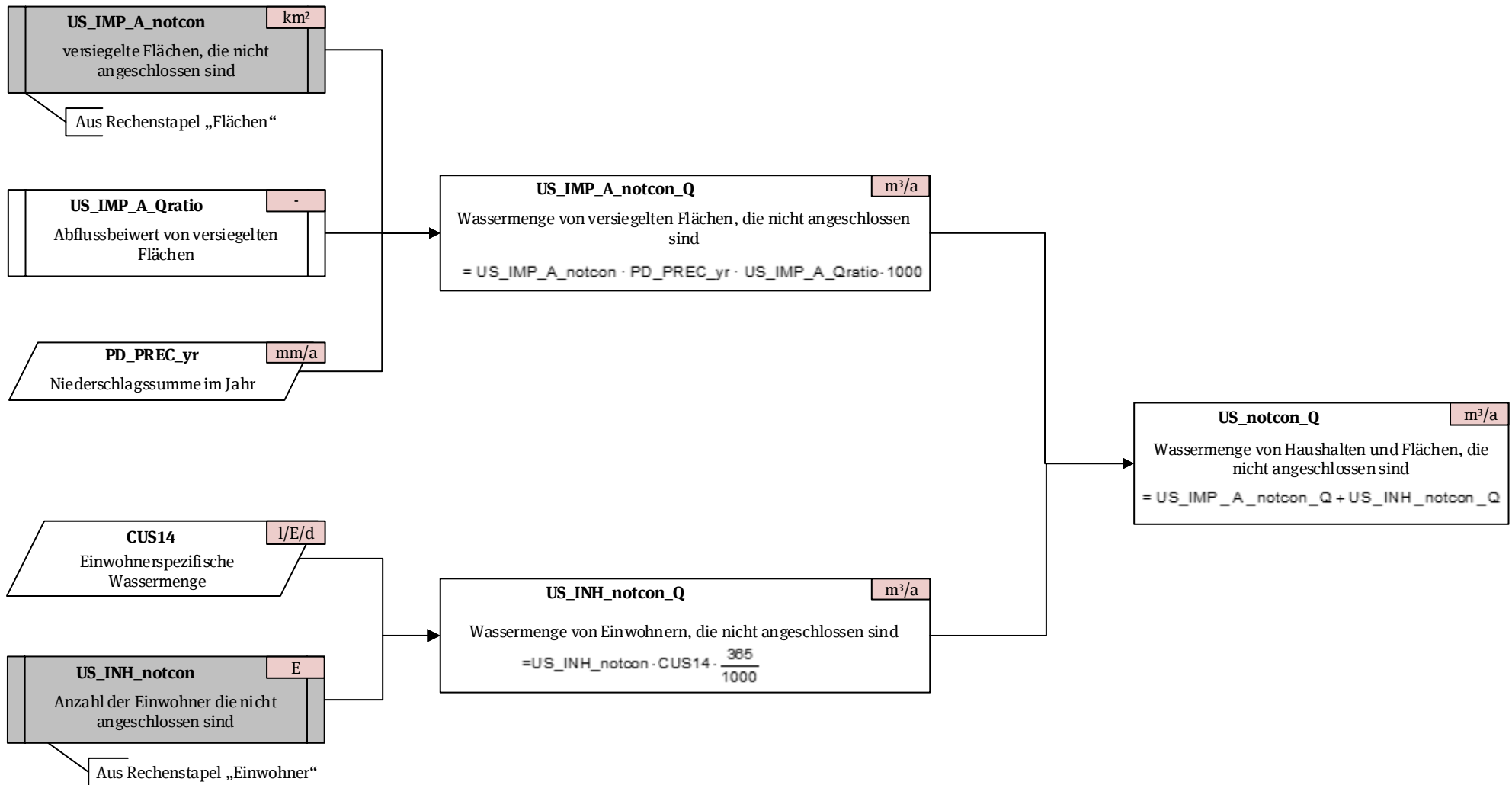
Wasserbilanz > Urbaner Abfluss > Urbaner Abfluss über Mischsystemüberläufe (3)



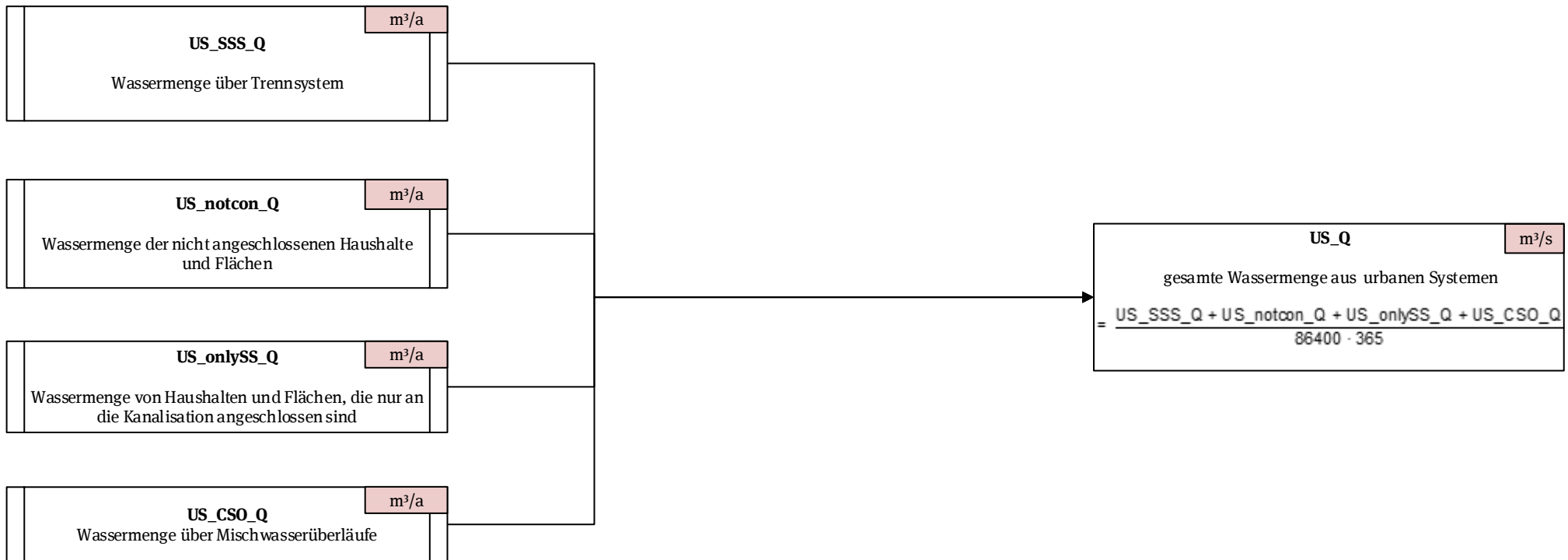
Wasserbilanz > Urbaner Abfluss > Urbaner Abfluss über nur an die Kanalisation angeschlossene Haushalte und Flächen



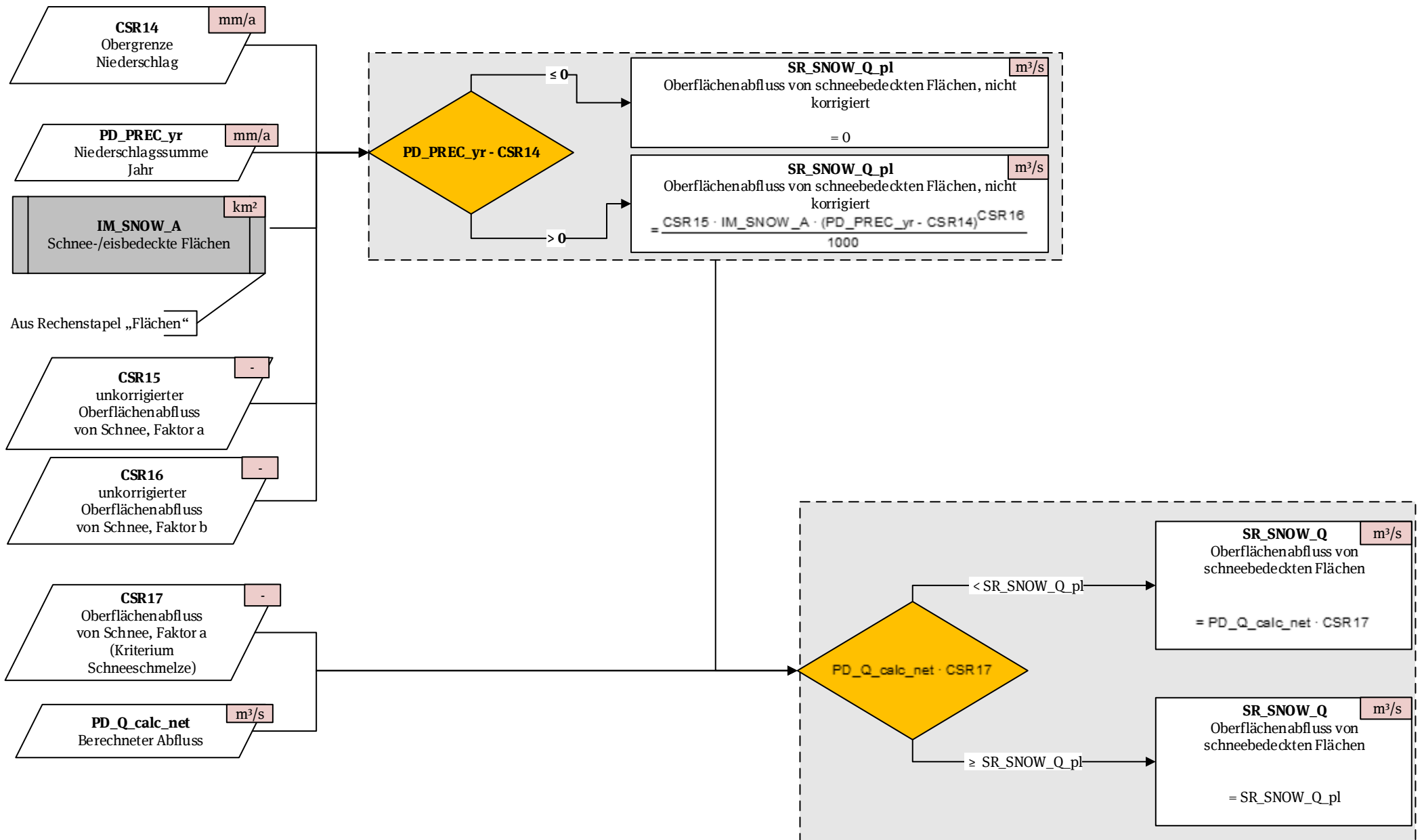
Wasserbilanz > Urbaner Abfluss > Urbaner Abfluss über nicht angeschlossene Haushalte und Flächen



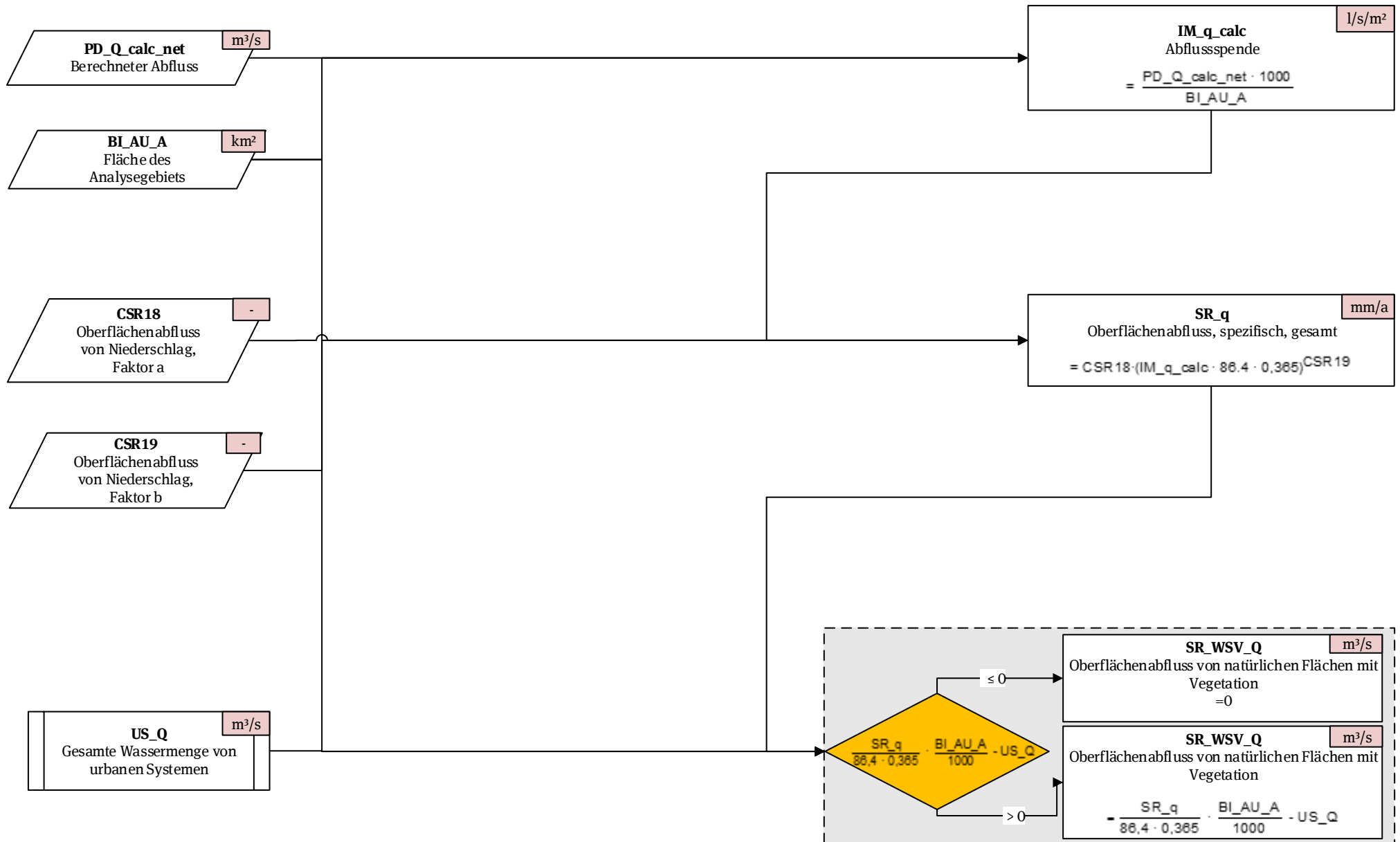
Wasserbilanz > Urbaner Abfluss > Gesamter urbaner Abfluss



Wasserbilanz > Oberflächenabfluss > Oberflächenabfluss von schneebedeckten Flächen



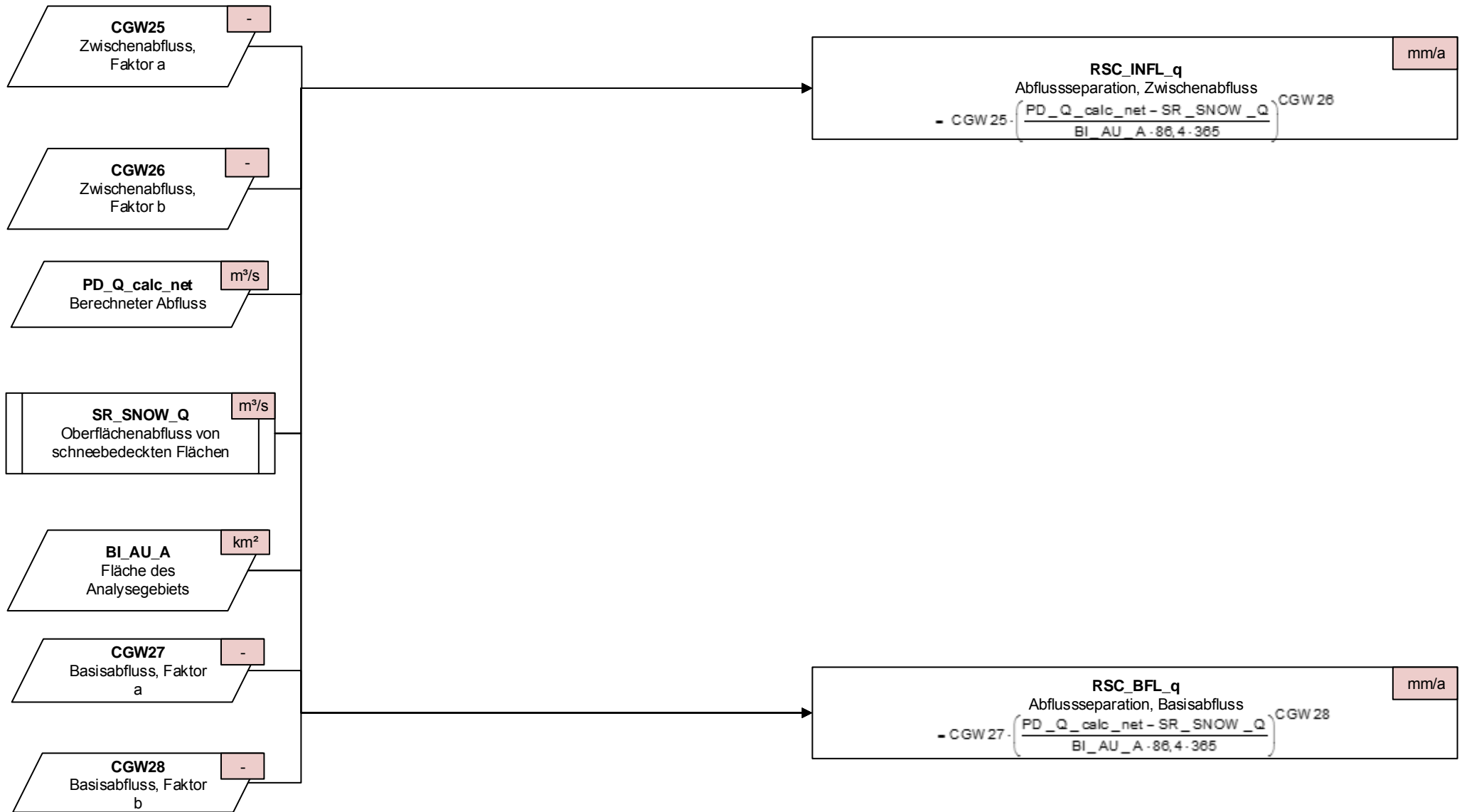
Wasserbilanz > Oberflächenabfluss > Abflussspende von versiegelten und unversiegelten Flächen spezifisch
 Wasserbilanz > Oberflächenabfluss > Oberflächenabfluss von nicht versiegelten Flächen



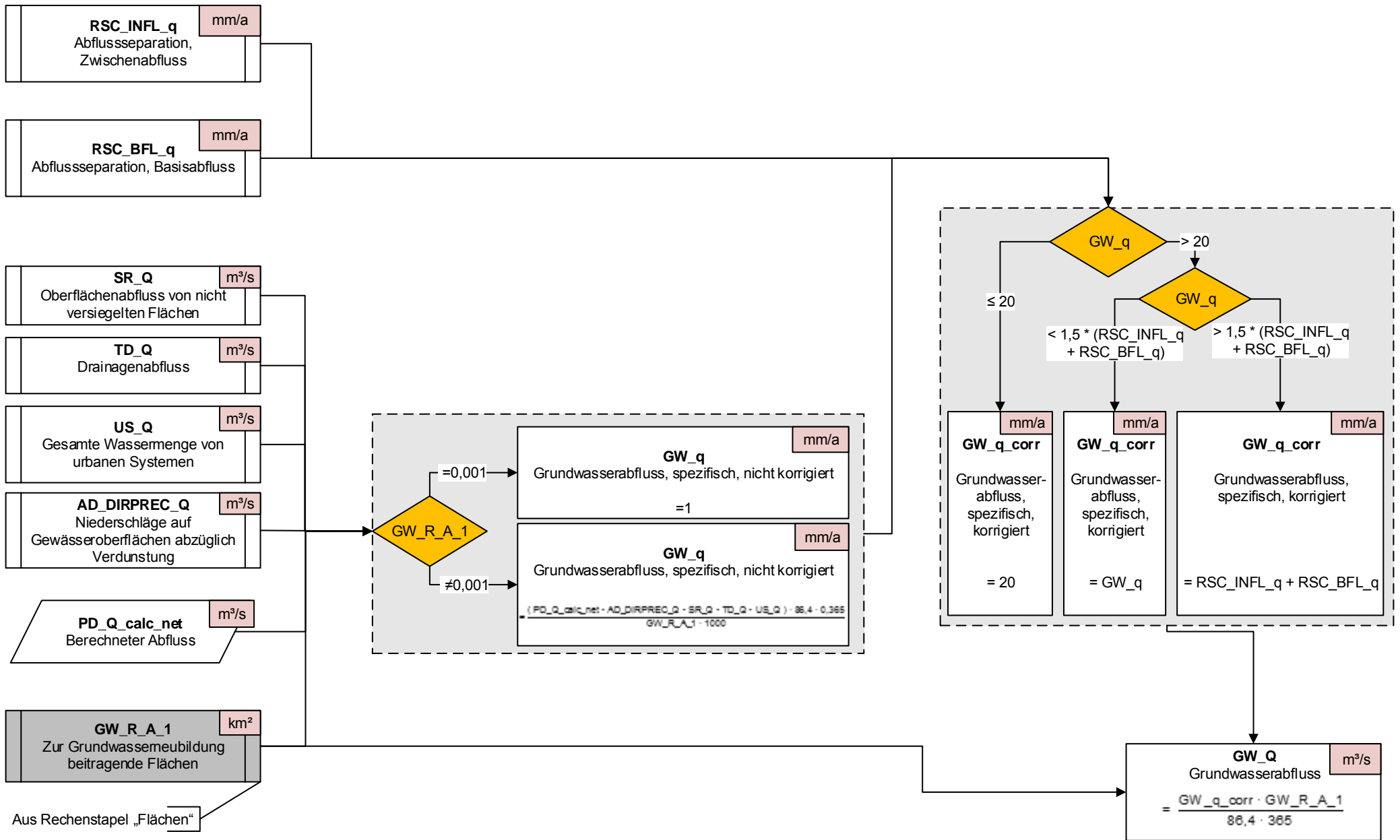
Wasserbilanz > Oberflächenabfluss > Oberflächenabfluss von nicht versiegelten Flächen



Wasserbilanz > Grundwasserabfluss > Grundwasserabfluss (1)



Wasserbilanz > Grundwasserabfluss > Grundwasserabfluss (2)



Wasserbilanz > Abfluss, gesamt > Abfluss, gesamt

