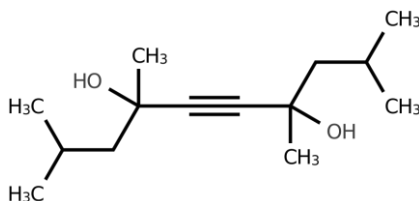


Kurzdossier Spurenstoffe

Stoffname: 2,4,7,9-Tetramethyldec-5-in-4,7-diol (TMDD)

CAS-Nr: 126-86-3



Wasserlöslichkeit: 1,7 g/L bei 20 °C ¹

Dissoziationskonstante(n): pKa > 10, dissoziiert nicht unter Umweltbedingungen im Wasser. ²

Der Fokus der vorliegenden Relevanzbewertung liegt auf Deutschland. Sie gründet auf Umweltbeobachtungsdaten aus der Bundesrepublik Deutschland. Daten aus anderen Ländern können als zusätzliche Interpretationshilfe herangezogen werden.

Dieses Kurzdossier umfasst ausschließlich die für die Bewertung der Relevanz erforderlichen Informationen. Die Bewertung erfolgt auf dem aktuellen Stand des Wissens.

Anwendung

TMDD ist ein industrielles Tensid und wird u.a. als Schaumhemmer und Netzmittel, Kühlschmierstoffbestandteil und als Zusatz in Farben, Druckertinte und als Beistoff in Pflanzenschutzmitteln verwendet. Unter REACH ist eine Tonnage von ≥ 1000 t registriert. ²

Ausgewählte Daten zum Vorkommen in Gewässern und Biota

Bezug/Betrachtungseinheit	Jahr und Monitoringdaten [$\mu\text{g/L}$]	Quelle
Fließgewässer Deutschland, Messprogramm der Bundesländer	2018-2020 (903 Messungen an 49 LAWA-Messstellen) 0,01 - 0,05 (BG) < 0,05 - 11 (Maximalwerte) < 0,025 - 5,075 (Jahresmittelwerte)	³
Oberflächengewässer, Deutschland	2009-2020, < 9000 Einträge 0,34 (Mittelwert) 0,06 (Median) 0,68 (95-Perzentil) 180 (Maximalwert)	⁴
Ruhr	2019: 0,35 - 0,56	⁵
Flüsse Deutschland	2010: 0,047 - 54,5	⁶
Flüsse Deutschland	2010: 0,04 - 5,3	⁷

Ausgewählte Daten zum Vorkommen in Gewässern und Biota

Ablauf Kläranlage	2010: • 0,079 - 138	6
Ablauf Kläranlage	2009, 2010: • < BG – 3,54	8

Ausgewählte Daten zum Vorkommen in Roh- und Trinkwasser

Bezug/Betrachtungseinheit	Jahr und Monitoringdaten [$\mu\text{g/L}$]	Quelle
Rohwasser, Niederlande	2010-2016: • 0,11 (Mittelwert) • 0,135 (P90)	9
Trinkwasserversorgung, Deutschland	Daten von drei Wasserversorgungsunternehmen mit einer betreuten Trinkwassermenge von 560 Mio. m³ pro Jahr aus 2016-2022 Grundwasser; 110 Messstellen; 175 Messungen; BG = 0,01 • < BG (Minimalkonzentrationen) • < BG (Mediankonzentrationen) • < BG – 0,01 (Maximalkonzentrationen) • 0 – 50% (rel. Anteil der Positivbefunde > BG) Rohwasser (aus Flusswasser); 9 Messstellen; 301 Messungen; BG = 0,1 • < BG – 0,28 (Minimalkonzentrationen) • < BG – 1,02 (Mediankonzentrationen) • 0,18 - 5,46 (Maximalkonzentrationen) • 0 – 100% (rel. Anteil der Positivbefunde > BG) Rohwasser (aus Grundwasser); 3 Messstellen; 73 Messungen; BG = 0,03 • < BG (Minimalkonzentrationen) • ≤ BG (Mediankonzentrationen) • 0,04 - 1,32 (Maximalkonzentrationen) • 25 – 39% (rel. Anteil der Positivbefunde > BG) Rohwasser (aus Grundwasser/Uferfiltrat); 1 Messstelle; 28 Messungen; BG = 0,03 • 0,05 (Minimalkonzentration) • 0,07 (Mediankonzentration) • 0,14 (Maximalkonzentration) • 100% (rel. Anteil der Positivbefunde > BG) Trinkwasser (aus Grundwasser); 8 Messstellen; 58 Messungen; BG = 0,1 • < BG (Minimalkonzentrationen) • < BG (Mediankonzentrationen) • < BG (Maximalkonzentrationen) • 0% (rel. Anteil der Positivbefunde > BG)	10

Ausgewählte Daten zum Vorkommen in Roh- und Trinkwasser

Trinkwasser (aus angereichertem Grundwasser); in geringen Anteilen Uferfiltration; 5 Messstellen; 122 Messungen; BG = 0,1

- < BG (Minimalkonzentrationen)
- < BG (Mediankonzentrationen)
- < BG (Maximalkonzentrationen)
- 0% (rel. Anteil der Positivbefunde > BG)

Trinkwasser (aus angereichertem Grundwasser); in geringen Anteilen Uferfiltration; Aufbereitung mit Ozonung und Aktivkohlefiltration; 4 Messstellen; 114 Messungen; BG = 0,1

- < BG (Minimalkonzentrationen)
- < BG (Mediankonzentrationen)
- < BG – 0,128 (Maximalkonzentrationen)
- 0 – 3,4% (rel. Anteil der Positivbefunde > BG)

Stoffeigenschaften gemäß Relevanzkriterien

	Bezugswert / Triggerwert	Daten für jeweiligen Stoff	Bewertung der Besorgnis
Persistenz/ biologische Abbaubarkeit	Persistent, wenn: „nicht leicht biologisch abbaubar“ / „nicht inhärent abbaubar“ oder gemäß Annex XIII der REACH-Verordnung ¹¹ und zugehörigem Leitfaden ¹²	Nicht leicht biologisch abbaubar ²	+
Mobilität/ Adsorptionsfähigkeit	Mobil (M): log K _{oc} < 3 Sehr mobil (vM): log K _{oc} < 2 ¹³	Log K _{oc} = 1,634 (Berechnet mit KOCWIN v2.0) ²	+
Humantoxizität (auf Basis von CLP)	Humantoxisch, wenn die Kriterien zur Klassifizierung nach CLP-Verordnung Kategorie Kanzerogen (1A, 1B) oder Keimzellmutagen (1A, 1B) oder Reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B, 2) oder STOT RE (1, 2) erfüllt sind ¹⁴	Keine Einstufung	Keine Bewertung
Ökotoxizität (akut/chronisch; Standardtests)	Ökotoxisch, wenn LC ₅₀ /EC ₅₀ < 0,1 mg/L oder NOEC < 0,01 mg/L gemäß Annex XIII der REACH-Verordnung ¹¹ und zugehörigem Leitfaden ¹² (nicht ökotoxisch, wenn EC ₅₀ > Wasserlöslichkeit)	Akute Toxizität Fisch: (OECD 203) Karpfen (<i>Cyprinus carpio</i>) 96h-LC ₅₀ = 42 mg/L ² Zebrabärblingsembryonen (<i>Danio rerio</i>) 96 h-Fish embryo test (FET) LC ₅₀ = 72 mg/L; EC ₅₀ für subletale Effekte = 61 mg/L ¹⁵ Toxizität Algen: Süßwasser Alge (<i>Selenastrum capricornutum</i>) EC ₅₀ = 82 mg/L; NOEC = 15 mg/L ²	-

Gleichwertige zusätzliche Besorgnisgründe

	Bewertungsgrundlage	Bewertung
Verhalten in Kläranlagen	Eliminationsraten in konventionellen kommunalen Kläranlagen: (n=4): 33 - 68% ¹⁸ (n=5): 0 - 29% ¹⁹	

Weitere Informationen und Bezugswerte

	Bezugswerte, Einstufungen	Bewertung und ggfs. Vergleich mit Monitoringdaten
Humantoxizität	Repeated Dose 28-Day Oral Toxicity Studie in Ratten (OECD 422): NOAEL = 174 mg/kg KG/d ²	
PNEC	PNEC = 40 µg/L ² SF = 1000	Vereinzelte Überschreitungen in Oberflächengewässern in D
Wassergefährdungsklasse	WGK 1 (schwach wassergefährdend) ²⁰	

Entscheidung des Gremiums zur Bewertung der Relevanz von Spurenstoffen

Basierend auf dem vorliegenden Kurzdossier wurde am 22.01.2024 folgende Entscheidung zur Relevanz des Stoffes gefällt: TMDD ist ein relevanter Spurenstoff.

Es sind im Rahmen dieser Bewertung ausreichend Stoffdaten in qualitativ adäquater Form verfügbar. Der Stoff TMDD wird in deutschen Oberflächengewässern und im Ablauf von Kläranlagen gefunden. Der Stoff ist mobil und persistent. Auf dieser Grundlage ist er als relevant einzustufen.

Quellen

- (1) GESTIS-Stoffdatenbank. <https://gestis.dguv.de/data?name=102203> (accessed 2022-06-03).
- (2) Registration Dossier TMDD - ECHA. <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/14379> (accessed 2022-05-13).
- (3) Umweltbundesamt Nach Angaben Der Bund/Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA) Stand Juni 2022.
- (4) NORMAN EMPODAT Database - Chemical Occurrence Data. <https://www.norman-network.com/nds/empodat/> (accessed 2022-03-21).
- (5) AWWR; Ruhrverband. *Ruhrgütebericht 2019*; 2019. https://www.awwr.de/fileadmin/awwr_de/content/download/ruhrgutebericht_2019.pdf.
- (6) Guede, A. A.; Püttmann, W. Printing Ink and Paper Recycling Sources of TMDD in Wastewater and Rivers. *Science of The Total Environment* **2014**, 468–469, 671–676. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2013.08.046>.
- (7) Dsikowitzky, L.; Botalova, O.; Illgut, S.; Bosowski, S.; Schwarzbauer, J. Identification of Characteristic Organic Contaminants in Wastewaters from Modern Paper Production Sites and Subsequent Tracing in a River. *Journal of Hazardous Materials* **2015**, 300, 254–262. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2015.07.001>.
- (8) Guede, A. A.; Püttmann, W. Occurrence and Fate of TMDD in Wastewater Treatment Plants in Germany. *Water Research* **2011**, 45 (16), 5313–5322. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2011.07.038>.
- (9) Sjerps, R. M. A.; Brunner, A. M.; Fujita, Y.; Bajema, B.; de Jonge, M.; Bäuerlein, P. S.; de Munk, J.; Schriks, M.; van Wezel, A. Clustering and Prioritization to Design a Risk-Based Monitoring Program in Groundwater Sources for Drinking Water. *Environ Sci Eur* **2021**, 33 (1), 32. <https://doi.org/10.1186/s12302-021-00470-6>.
- (10) Gremium zur Bewertung der Relevanz von Spurenstoffen. *Abfrage Zur Betroffenheit Der Trinkwasserversorger (Stand Juli 2023)*; 2023.
- (11) Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 18. Dezember 2006 zur Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung chemischer Stoffe (REACH). <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/TXT/?uri=CELEX%3A02006R1907-20140410> (accessed 2022-07-08).
- (12) European Chemicals Agency. *Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment: Chapter R.11: PBT and VPvB Assessment*; Publications Office: LU, 2017.
- (13) EUROPÄISCHE KOMMISSION. *DELEGIERTE VERORDNUNG (EU) 2023/707 DER KOMMISSION Vom 19. Dezember 2022 Zur Änderung Der Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 in Bezug Auf Die Gefahrenklassen Und Die Kriterien Für Die Einstufung, Kennzeichnung Und Verpackung von Stoffen Und Gemischen*. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/TXT/HTML/?uri=CELEX:32023R0707&qid=1681394384679&from=EN> (accessed 2023-04-14).
- (14) Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. Dezember 2008 über die Einstufung, Kennzeichnung und Verpackung von Stoffen und Gemischen. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/de/TXT/?uri=CELEX:32008R1272> (accessed 2022-07-08).
- (15) Vincze, K.; Gehring, M.; Braunbeck, T. (Eco)Toxicological Effects of 2,4,7,9-Tetramethyl-5-Decyne-4,7-Diol (TMDD) in Zebrafish (Danio Rerio) and Permanent Fish Cell Cultures. *Environ Sci Pollut Res* **2014**, 21 (13), 8233–8241. <https://doi.org/10.1007/s11356-014-2806-y>.
- (16) Nerin, C.; Canellas, E.; Vera, P.; Garcia-Calvo, E.; Luque-Garcia, J. L.; Cámara, C.; Ausejo, R.; Miguel, J.; Mendoza, N. A Common Surfactant Used in Food Packaging Found to Be Toxic for Reproduction in Mammals. *Food and Chemical Toxicology* **2018**, 113, 115–124. <https://doi.org/10.1016/j.fct.2018.01.044>.
- (17) Garcia-Calvo, E.; Machuca, A.; Nerin, C.; Rosales-Conrado, N.; Anunciação, D. S.; Luque-Garcia, J. L. Integration of Untargeted and Targeted Mass Spectrometry-Based Metabolomics Provides Novel Insights into the Potential Toxicity Associated to Surfylnol. *Food and Chemical Toxicology* **2020**, 146, 111849. <https://doi.org/10.1016/j.fct.2020.111849>.
- (18) Guede, A. Occurrence and Sources of 2,4,7,9-Tetramethyl-5-Decyne-4,7-Diol (TMDD) in the Aquatic Environment, 2011. <http://publikationen.ub.uni-frankfurt.de/frontdoor/index/index/docId/24254>.

- (19) Blum, K. M.; Andersson, P. L.; Ahrens, L.; Wiberg, K.; Haglund, P. Persistence, Mobility and Bioavailability of Emerging Organic Contaminants Discharged from Sewage Treatment Plants. *Science of The Total Environment* **2018**, 612, 1532–1542. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.09.006>.
- (20) 2,4,7,9-Tetramethyldec-5-in-4,7-diol - *ChemInfo Public*.
<https://recherche.chemikalieninfo.de/public/stoff/20845?dv=0&st=0&sid=54b26485-93a0-43f8-8b96-846aefc951e0&sv=s6&o=GSBL.FULGOMORPH&ps=25> (accessed 2022-05-13).

Impressum

Herausgeber

Umweltbundesamt

Spurenstoffzentrum des Bundes

Spurenstoffzentrum@uba.de

Internet: www.spurenstoffzentrum.de

Autorenschaft, Institution

Umweltbundesamt

Internet:

www.umweltbundesamt.de

 [/umweltbundesamt.de](https://www.facebook.com/umweltbundesamt.de)

 [/umweltbundesamt](https://twitter.com/umweltbundesamt)