

TEXTE

65/2019

# Vorkommen von Duftstoffen aus Wasch und Reinigungsmitteln in Abwasser und Oberflächengewässern

Literaturstudie



TEXTE 65/2019

Projektnummer 105293

FB000125

# **Vorkommen von Duftstoffen aus Wasch- und Reinigungsmitteln in Abwasser und Oberflächengewässern**

Literaturstudie

von

Dr. Stefan Gartiser und Dr. Ines Heisterkamp  
Hydrotox GmbH, Freiburg

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](mailto:info@umweltbundesamt.de)  
Internet: [www.umweltbundesamt.de](http://www.umweltbundesamt.de)

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

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

### Durchführung der Studie:

Hydrotox GmbH  
Bötzingen Str. 29  
79111 Freiburg

### Abschlussdatum:

Oktober 2018

### Redaktion:

Fachgebiet IV 2.2 - Wasch & Reinigungsmittel  
Dr. Peter von der Ohe

Publikationen als pdf:

<http://www.umweltbundesamt.de/publikationen>

ISSN 1862-4804

Dessau-Roßlau, November 2018

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autorinnen und Autoren.

### **Kurzbeschreibung: Vorkommen von Duftstoffen aus Wasch- und Reinigungsmitteln in Abwasser und Oberflächengewässern**

Ziel der Literaturstudie ist es, das verfügbare Wissen zum Eintrag und Verbleib ausgewählter Duftstoffe in der Umwelt zusammenzufassen und damit dem Auftraggeber Entscheidungshilfen für eine Politikberatung zur Verfügung zu stellen. Hierzu wurde eine umfassende Recherche der vorhandenen deutsch- und englischsprachigen Veröffentlichungen zu Analysemethoden und Funden zu Duftstoffen aus Wasch- und Reinigungsmitteln in verschiedenen Umweltkompartimenten durchgeführt.

Insgesamt wurden zu den ausgewählten 30 Duftstoffen über 600 Einzelwerte aus über 90 Arbeiten zusammengetragen und dokumentiert. Moschusverbindungen waren von den Recherchen ausgeschlossen. Lediglich zu zwei Duftstoffen (alpha-Butylcinnamaldehyde und Isocyclocitral) wurden keine Monitoringdaten gefunden. Die recherchierten Daten beziehen sich überwiegend auf Zu- und Abläufe von Kläranlagen, die 69% aller ausgewerteten Dateneinträge ausmachen. Rund 21% der Einträge beziehen sich auf Monitoringdaten von Oberflächengewässern (Flüsse, Seen), die restlichen 10% auf Monitoringdaten zu Sedimenten, Grundwasser, Meerwasser, Regenwasser u.a. In einigen Arbeiten ist die Aussage zum Umweltvorkommen durch relativ hohe LOD im µg/L-Bereich deutlich eingeschränkt.

Hauptergebnis der Literaturstudie ist, dass die Duftstoffe OTNE, alpha-Isomethyl Ionone, Benzyl Alcohol, Benzyl Salicylate, Cinnamyl Alcohol, Citral, Eugenol, Hexyl Cinnamal, Isoeugenol, Lialal, D-Limonen und Methyl-dihydrojasmonate in Kläranlagenabläufen nachgewiesen werden. Es wird daher empfohlen diese in künftigen Monitoringprogrammen zu berücksichtigen.

### **Abstract: Occurrence of fragrances from detergents and washing and cleaning agents in wastewater and surface waters**

The objective of the literature study is to summarize the available knowledge on the entry and fate of selected fragrances in the environment and thereby provide the sponsor with decision support for policy advice. For this purpose, a comprehensive research of the existing German and English publications on analysis methods and monitoring data of fragrances from washing and cleaning agents in various environmental compartments was carried out.

In total, over 600 individual values from over 90 publications were compiled and documented for the selected 30 fragrances. Musk compounds were excluded from the research. Only for two fragrances (alpha-Butylcinnamaldehyde and Isocyclocitral) no monitoring data were found. The compiled data mainly refer to the inflow and outflow of sewage treatment plants, which account for 69% of all monitoring entries. Around 21% of the entries refer to monitoring data of surface waters (rivers, lakes), the remaining 10% refer to monitoring data of sediments, groundwater, seawater, rainwater and others. In some studies, the conclusion on the environmental occurrence is clearly limited by relatively high LOD in the µg/L range.

As main result of this literature study it was found that the fragrances OTNE, alpha-Isomethyl ionone, Benzyl alcohol, Benzyl salicylate, Cinnamyl alcohol, Citral, Eugenol, Hexyl cinnamal, Isoeugenol, Lialal, D-Limonene and Methyl dihydrojasmonate are detected in effluents of sewage treatment plants. Therefore, it is recommended to include these fragrances in future monitoring programs.

## Inhaltsverzeichnis

Tabellenverzeichnis .....	8
Abkürzungsverzeichnis .....	9
Zusammenfassung.....	10
Summary .....	14
1 Aufgabenstellung .....	18
2 Durchgeführte Recherchen .....	19
2.1 Ausgewählte Duftstoffe .....	19
2.2 Datenbankrecherchen .....	21
2.3 Internetrecherchen .....	22
2.4 Anfragen an Verbände und Experten .....	22
2.5 Auswertung und Dokumentation .....	24
3 Ergebnisse .....	25
3.1 Duftstoffe .....	25
3.1.1 alpha-Butylcinnamaldehyde .....	25
3.1.2 alpha-Isomethyl Ionone .....	25
3.1.3 Amyl Cinnamal .....	26
3.1.4 Amylcinnamyl Alcohol.....	26
3.1.5 Anise Alcohol.....	27
3.1.6 Benzyl Alcohol.....	27
3.1.7 Benzyl Benzoate.....	28
3.1.8 Benzyl Cinnamate .....	29
3.1.9 Benzyl Salicylate.....	29
3.1.10 beta-Ionone .....	30
3.1.11 Cinnamal .....	31
3.1.12 Cinnamyl Alcohol .....	32
3.1.13 Citral.....	33
3.1.14 Citronellol.....	33
3.1.15 Coumarin.....	34
3.1.16 Eugenol .....	35
3.1.17 Farnesol.....	35
3.1.18 Geraniol.....	36
3.1.19 Hexyl Cinnamal .....	37
3.1.20 Hydroxycitronellal.....	37

3.1.21	Isocyclocitral .....	38
3.1.22	Isoeugenol.....	38
3.1.23	Lialal .....	39
3.1.24	D,L-Limonene .....	40
3.1.25	D-Limonene.....	41
3.1.26	Linalool.....	42
3.1.27	Lyrall.....	42
3.1.28	Methyl-2-Octynoate.....	43
3.1.29	Methyl-dihydrojasmonat .....	43
3.1.30	OTNE .....	44
3.2	Bewertung der Monitoringdaten.....	46
3.3	Analysemethoden .....	49
4	Diskussion und Ausblick .....	50

## Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	In der Studie berücksichtigte Duftstoffe .....	19
Tabelle 2:	Zusammenfassung der Monitoringdaten.....	46



## Abkürzungsverzeichnis

<b>ARA</b>	Abwasserreinigungsanlage
<b>ARW</b>	Arbeitsgemeinschaft Rhein-Wasserwerke e. V.
<b>AWBR</b>	Arbeitsgemeinschaft Wasserwerke Bodensee-Rhein
<b>CAS</b>	Chemical Abstracts Service
<b>CLP</b>	Classification, Labelling and Packaging
<b>DVGW</b>	Deutscher Verein des Gas- und Wasserfaches e. V.
<b>EFSA</b>	European Food Safety Authority
<b>HSDB</b>	Hazardous Substances Data Bank
<b>INCI</b>	International Nomenclature of Cosmetic Ingredients
<b>IUPAC</b>	International Union of Pure and Applied Chemistry
<b>IFRA</b>	International Fragrance Association
<b>IHO</b>	Industrieverband Hygiene und Oberflächenschutz
<b>IKSR</b>	Internationale Kommission zum Schutz des Rheins
<b>IKW</b>	Industrieverband Körperpflege- und Waschmittel e.V.
<b>ICPDR</b>	Internationale Kommission zum Schutz der Donau
<b>IKW</b>	Industrieverband Körperpflege- und Waschmittel e. V.
<b>IVL</b>	Swedish Environmental Research Institute Ltd.
<b>LANUV</b>	Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen
<b>LAWA</b>	Bund/Länder-Arbeitsgemeinschaft Wasser
<b>LOD</b>	Limit of detection
<b>LOQ</b>	Limit of quantification
<b>NIH/NLM</b>	U.S. National Institutes of Health's National Library of Medicine
<b>OECD SIDS</b>	OECD Screening Information Dataset
<b>OTNE</b>	Tetramethyl acetyloctahydronaphthalenes
<b>PEC</b>	Predicted Environment Concentration
<b>PBOs</b>	Poorly biodegradable organics
<b>QSAR</b>	Quantitative Structure-Activity Relationship
<b>RIFM</b>	Research Institute for Fragrance Materials
<b>RIWA</b>	Association of Rhine Water Works
<b>SCCS</b>	Scientific Committee on Consumer Safety
<b>STP</b>	Sewage treatment plant
<b>TZW</b>	DVGW Technologiezentrum Wasser e.V.
<b>WRM</b>	Wasch- und Reinigungsmitteln

## Zusammenfassung

In Wasch- und Reinigungsmitteln (WRM) werden unter anderem biologisch schwer abbaubare organische Inhaltsstoffe eingesetzt, die z.T. auch ökotoxisch sind. Dazu zählen auch Duftstoffe, wie z.B. synthetische Moschusverbindungen, deren Vorkommen in der Umwelt durch zahlreiche Studien belegt ist. Monitoringdaten zu anderen Duftstoffe sind bislang lückenhaft. Die Detergenzienverordnung fordert bisher nur die Endabbaubarkeit von Tensiden, die in diesem Bereich eingesetzt werden, hat aber keine Kriterien für andere möglicherweise schwer abbaubare organische Inhaltsstoffe in Detergenzien aufgestellt.

Ziel der Literaturstudie ist es, das verfügbare Wissen zum Eintrag und Verbleib ausgewählter Duftstoffe in der Umwelt zusammenzufassen und damit dem Auftraggeber Entscheidungshilfen für eine Politikberatung zur Verfügung zu stellen. Hierzu wurde eine umfassende Recherche der vorhandenen deutsch- und englischsprachigen Veröffentlichungen zu Analysemethoden und Funden zu Duftstoffen aus Wasch- und Reinigungsmitteln in verschiedenen Umweltkompartimenten durchgeführt. Insgesamt wurden 30 Duftstoffe in der Literaturstudie berücksichtigt. Die Auswahl erfolgte aufgrund einer bekannten sensibilisierenden Wirkung und/oder der bekanntermaßen hohen Einträge durch die Experten des Umweltbundesamtes. Moschusverbindungen waren von den Recherchen ausgenommen, da die Datenlage hier vergleichsweise gut ist.

Alle ausgewählten Duftstoffe sind in der ECHA-Datenbank erfasst. Anhand der CAS-Nummern wurden – soweit angegeben – die Namen, Strukturformeln, der Tonnagebereich unter REACH sowie die harmonisierten bzw. notifizierten gefahrstoffrechtlichen Einstufungen nach CLP-Verordnung recherchiert und dokumentiert. Anschließend wurden gezielte Recherchen in Stoffdatenbanken (HSDB, OECD eChemPortal) sowie in Literaturdatenbanken (Pubmed, Scopus, Web of Science, Researchgate) durchgeführt. Zudem wurden Internetrecherchen (Google, Google Scholar) durchgeführt, wobei sowohl über allgemeine Begriffe (Duftstoff, fragrance), als auch über die INCI Namen bzw. die CAS Nummern recherchiert wurde. Bei hoher Trefferzahl wurden die Recherchen durch Verknüpfung mit „monitoring“, „surface water“, „waste water“ oder „sediment“ eingeschränkt.

Eine Anfrage zu den 30 ausgewählten Duftstoffen wurde zudem an verschiedene Forschungseinrichtungen, Behörden, Verbände, Universitäten sowie alle Bundesländer geschickt und gebeten, zu prüfen, ob die ausgewählten Duftstoffe in landesweiten Monitoringprogrammen berücksichtigt werden.

Die Ergebnisse der Literaturstudie wurden möglichst detailliert in eine Excel-Tabelle überführt, die separat zum Abschlussbericht bereitgestellt wird. Hierbei wurde die zeitliche und örtliche Probenahme, die Anzahl der Probenahmestellen und Proben, die verwendete analytische Methode einschließlich ihrer Nachweis- und Bestimmungsgrenzen sowie die Einzelergebnisse dokumentiert. Nicht aus allen Publikationen ließen sich diese Daten im gewünschten Detailgrad herauslesen.

Insgesamt wurden zu den ausgewählten 30 Duftstoffen über 600 Einzelwerte aus über 90 Arbeiten zusammengetragen und dokumentiert. Lediglich zu zwei Duftstoffen (alpha-Butylcinnamaldehyde und Isocyclocitral) wurden keine Monitoringdaten gefunden.

**Zusammenfassung der Monitoringdaten mit Angaben zu Minimum und Maximum Konzentrationen in verschiedenen ARA- und Umweltmedien.**

Name	ARA Zulauf	ARA Ablauf	Gewässer	Grund- wasser	Sediment limnisch	Meer- wasser	Sediment marin
	MIN MAX	MIN MAX	MIN MAX	MIN MAX	MIN MAX	MIN MAX	MIN MAX
alpha-Butylcinnamaldehyde	Keine Daten						
Alpha-Isomethyl Ionone	++ ++++	++ +++	< LOD ++		++		
Amyl Cinnamal	< LOD	<LOD					
Amylcinnamyl Alcohol	< LOD	<LOD					
Anise Alcohol	< LOD	<LOD					
Benzyl Alcohol	< LOD ++++	<LOD ++	< LOD ++++				
Benzyl Benzoate	< LOD ++++	< LOD	< LOD		< LOD		
Benzyl Cinnamate	< LOD	< LOD	< LOD				
Benzyl Salicylate	< LOD +++	< LOD +++	< LOD +++		< LOD	+ ++++	
beta-Ionone	++ +++	< LOD +	+ ++++		++ +++		
Cinnamal	< LOD	< LOD				+	
Cinnamyl Alcohol	++++	< LOD ++++	< LOD				
Citral	< LOD +++	< LOD +++	< LOD ++				
Citronellol	< LOD ++++	< LOD					
Coumarin	< LOD	< LOD	< LOD ++				
Eugenol	< LOD +++	< LOD +++	< LOD +				
Farnesol	< LOD ++++	< LOD					
Geraniol	< LOD ++++	< LOD	< LOD				

Name	ARA Zulauf MIN MAX	ARA Ablauf MIN MAX	Gewässer MIN MAX	Grund- wasser MIN MAX	Sediment limnisch MIN MAX	Meer- wasser MIN MAX	Sediment marin MIN MAX
Hexyl Cinnamal	++++ +++++	+ +++	< LOD				
Hydroxycitronellal	< LOD	< LOD	< LOD				
Isocyclocitral	Keine Daten						
Isoeugenol	+ +++	< LOD +++	< LOD		< LOD +++++		
Lialal	++ ++++	< LOD +++	++	++		+	
Limonene / D,L- Limonene			< LOD ++			++ ++++	
D-Limonene	+++ ++++	++ +++	< LOD +++		< LOD ++++	< LOD ++	
Linalool	++++ +++++	< LOD +++	+++				
Lyral	< LOD	< LOD					
Methyl-2-Octynoate	< LOD	< LOD					
Methyl- dihydrojasmonat	++++	< LOD +++	< LOD +++				
OTNE	++++ +++++	++ ++++	< LOD +++	< LOD ++++			+ +++++

Konzentrationsbereiche (in µg/L bzw. µg/kg):

+	< 0,01
++	0,01 - < 0,1
+++	0,1 - < 1
++++	1 - < 10
+++++	> 10

Bisher scheinen die ausgewählten Duftstoffe noch nicht in den Fokus von Monitoring-programmen gerückt zu sein. Ein Großteil der Duftstoffe ist natürlichen Ursprungs, so dass auch Einträge aus Pflanzen, Bakterien oder Algen erwartet werden können. Eine Ausnahme ist der synthetische Duftstoff OTNE, der oftmals im Zusammenhang mit synthetischen Moschus-verbindungen mituntersucht wurde und von dem schon länger bekannt ist, dass er in Oberflächengewässern nachweisbar ist.

Viele der ausgewählten Arbeiten thematisieren den Eintrag von Duftstoffen zudem eher über die Verwendung von Körperpflegeprodukten (personal care products), während der Eintrag über Wasch- und Reinigungsmittel kaum Beachtung findet.

Obwohl im Rahmen der Studie keine systematische Auswertung von Daten zur biologischen Abbaubarkeit der Duftstoffe durchgeführt wurde, weisen einige Veröffentlichungen auf eine gute Abbaubarkeit vieler Duftstoffe der Auswahlliste hin. So werden für Geraniol, Citral, Citronellol Abbauwerte von 80-100% und für Linalool von 60-70% in OECD 301 Tests angegeben (Wilsch-Irrgang 2017). In den REACH-Registrierungsdossiers finden sich Abbaudaten zu mehreren der Duftstoffe. Demnach gelten z.B. Anise Alcohol, Benzyl Alcohol, Cinnamyl Alcohol, Benzyl Benzoate, Farnesol und Linalool als leicht biologisch abbaubar.

Die gute Abbaubarkeit wird durch die meist gute Elimination der Duftstoffe bestätigt. Eine Ausnahme ist der Duftstoff OTNE, für den eine Elimination von lediglich 83-92 % belegt ist. Für den Duftstoff Linalool sind die höchsten Einträge in Kläranlagen belegt, die trotz der insgesamt guten Elimination von über 97% zu Einträgen in Oberflächengewässern führen könnten. Die Datenlage für Oberflächengewässer lässt aber keine Rückschlüsse zu. Auch alpha-Isomethyl Ionone, Benzyl Alcohol, Benzyl Salicylate, Cinnamyl Alcohol, Citral, Eugenol, Hexyl Cinnamal, Isoeugenol, Lialal, D-Limonen und Methyl-dihydrojasmonate lassen sich in Kläranlagenabläufen nachweisen.

Die recherchierten Monitoringdaten zu den ausgewählten Duftstoffen beziehen sich überwiegend auf Zu- und Abläufe von kommunalen Kläranlagen, die 69% aller Dateneinträge ausmachen. Rund 21% der Einträge beziehen sich auf Monitoringdaten von Oberflächengewässern (Flüsse, Seen), die restlichen 10% auf Monitoringdaten zu Sedimenten, Grundwasser, Meerwasser, Regenwasser u.a.

Hauptergebnis der Literaturstudie ist, dass neben OTNE die Duftstoffe, alpha-Isomethyl Ionone, Benzyl Alcohol, Benzyl Salicylate, Cinnamyl Alcohol, Citral, Eugenol, Hexyl Cinnamal, Isoeugenol, Lialal, D-Limonen und Methyl-dihydrojasmonate in Kläranlagenabläufen nachgewiesen werden. Es wird daher empfohlen diese in künftigen Monitoringprogrammen zu berücksichtigen.

Es wird vorgeschlagen, die verfügbaren Daten zur Abbaubarkeit und Ökotoxizität der ausgewählten Duftstoffe systematisch zu recherchieren und zu dokumentieren. Zudem sollten chemisch-physikalische Parameter (log Pow, Wasserlöslichkeit, Dampfdruck bzw. Henry Koeffizient) gesammelt werden. Hieraus lässt sich der Verbleib in Kläranlagen und damit der Eintrag in Oberflächengewässer abschätzen (z.B. über das Simple Treat Modell). Ein Vergleich dieser Daten mit den Monitoringergebnissen würde Rückschlüsse über Eintragungsmengen und Verhalten der Duftstoffe in der Umwelt ermöglichen.

## Summary

In washing and cleaning agents, organic ingredients with low biodegradation potential are used which partly are also ecotoxic. These organic ingredients include fragrances, e.g. synthetic musk compounds whose occurrence in the environment has been confirmed by numerous studies. For other fragrances, monitoring data are scarce so far. To date, the Detergents Regulation only requires the ultimate degradability of surfactants used in washing and cleaning agents, but no criteria for other potentially hardly degradable organic ingredients in detergents have been established.

The objective of the literature study is to summarize the available knowledge on the entry and fate of selected fragrances in the environment and thereby provide the client with decision support for policy advice. For this purpose, a comprehensive research of existing German and English publications on analysis methods and monitoring data of fragrances from washing and cleaning agents in various environmental compartments was carried out. A total of 30 fragrances were included in the literature review. The selection was made by the experts of the Federal Environment Agency on the basis of a known sensitizing effect and / or known high entries. Musk compounds were excluded from the research, since comparatively extensive data is available for this group of fragrances.

For all selected fragrances entries in the ECHA database are available. Based on the CAS numbers, the names, structural formulas, the tonnage range under REACH and the harmonized or notified classifications of hazardous substances according to the CLP regulation were searched for and documented. Subsequently, targeted searches were carried out in substance databases (HSDB, OECD eChemPortal) as well as in literature databases (Pubmed, Scopus, Web of Science, Researchgate). In addition, internet searches (Google, Google Scholar) were carried out, with both general terms (perfume, fragrance), as well as the INCI name or the CAS numbers. If the number of hits was too high, the searches were limited by linking with the terms "monitoring", "surface water", "waste water" or "sediment".

An inquiry regarding monitoring data of the 30 selected fragrances was sent to various research institutes, authorities, associations, universities and to all federal states to check whether the selected fragrances were included in federal or national monitoring programs.

The results of the literature study were transferred as detailed as possible into an Excel spreadsheet which is provided separately from the report. Here, the temporal and local sampling, the number of sampling points and samples, the analytical method used (including the detection and quantification limits) and the individual results were documented. It was however not possible to extract the requested data in sufficient details from all publications.

In total, over 600 individual values from over 90 publications were compiled and documented for the selected 30 fragrances. Only for two fragrances (alpha-Butylcinnamaldehyde and Isocyclocitral) no monitoring data were found.

**Summary of the monitoring data with information on minimum and maximum concentrations in various sewage treatment plants (STP) and environmental media.**

Name	STP Influent	STP Effluent	Surface water	Ground-water	Sediment Limnic	Marine water	Sediment marin
	MIN MAX	MIN MAX	MIN MAX	MIN MAX	MIN MAX	MIN MAX	MIN MAX
alpha-Butylcinnamaldehyde	No data						
Alpha-Isomethyl Ionone	++ ++++	++ +++	< LOD ++		++		
Amyl Cinnamal	< LOD	< LOD					
Amylcinnamyl Alcohol	< LOD	< LOD					
Anise Alcohol	< LOD	< LOD					
Benzyl Alcohol	< LOD ++++	< LOD ++	< LOD ++++				
Benzyl Benzoate	< LOD ++++	< LOD	< LOD		< LOD		
Benzyl Cinnamate	< LOD	< LOD	< LOD				
Benzyl Salicylate	< LOD +++	< LOD +++	< LOD +++		< LOD	+ ++++	
beta-Ionone	++ +++	< LOD +	+ ++++		++ +++		
Cinnamal	< LOD	< LOD				+	
Cinnamyl Alcohol	++++	< LOD ++++	< LOD				
Citral	< LOD +++	< LOD +++	< LOD ++				
Citronellol	< LOD ++++	< LOD					
Coumarin	< LOD	< LOD	< LOD ++				
Eugenol	< LOD +++	< LOD +++	< LOD +				
Farnesol	< LOD ++++	< LOD					
Geraniol	< LOD ++++	< LOD	< LOD				

Name	STP Influent MIN MAX	STP Effluent MIN MAX	Surface water MIN MAX	Ground-water MIN MAX	Sediment Limnic MIN MAX	Marine water MIN MAX	Sediment marin MIN MAX
Hexyl Cinnamal	++++ +++++	+ +++	< LOD				
Hydroxycitronellal	< LOD	< LOD	< LOD				
Isocyclocitral	No data						
Isoeugenol	+ +++	< LOD +++	< LOD		< LOD +++++		
Lialal	++ ++++	< LOD +++	++	++		+	
Limonene / D,L-Limonene			< LOD ++			++ ++++	
D-Limonene	+++ ++++	++ +++	< LOD +++		< LOD ++++	< LOD ++	
Linalool	++++ +++++	< LOD +++	+++				
Lyral	< LOD	< LOD					
Methyl-2-Octynoate	< LOD	< LOD					
Methyl-dihydrojasmonat	++++	< LOD +++	< LOD +++				
OTNE	++++ +++++	++ ++++	< LOD +++	< LOD ++++			+ +++++

Concentration ranges (in µg/L or µg/kg):

+	< 0.01
++	0.01 - < 0.1
+++	0.1 - < 1
++++	1 - < 10
+++++	> 10

Apparently, the selected fragrances have not been in focus of monitoring programs up to now. Many of the fragrances are of natural origin, so that entries from plants, bacteria or algae can be expected. One exception is the synthetic fragrance OTNE. Many studies on synthetic musk compounds also include OTNE and it is thus long known that OTNE occurs in surface waters.

Many of the available publications focus on the entry of fragrances via the use of personal care products, while the entry via washing and cleaning agents is hardly considered. On the other



hand, it is basically impossible to subsequently differentiate the sources of the monitored emissions.

Although within the study no systematic review of biodegradability data of the selected fragrances was carried out, some publications refer to the good biodegradability of many of them. Thus, for Geraniol, Citral, Citronellol, degradation values of 80-100% and for Linalool of 60-70% are reported in OECD 301 tests (Wilsch-Irrgang 2017). The REACH registration dossiers contain degradation data on several of the fragrances. Thus, e.g. Anise Alcohol, Benzyl Alcohol, Cinnamyl Alcohol, Benzyl Benzoate, Farnesol and Linalool are classified as readily biodegradable.

The good degradability of most of these fragrances is confirmed by their usually good elimination in sewage treatment plants (STP). One exception is the fragrance OTNE, for which an elimination of only 83-92% is proven. For Linalool, the highest entries to STP are documented, which could also lead to entries to surface waters despite its overall good elimination of over 97%. However, the available data for surface waters do not allow any conclusions. Other fragrances that are found in STP effluents are alpha-Isomethyl ionones, Benzyl alcohol, Benzyl salicylates, Cinnamyl alcohol, Citral, Eugenol, Hexyl cinnamal, Isoeugenol, Lialal, d-Limonene and Methyl-dihydrojasmonate.

The researched monitoring data on the selected fragrances mainly refer to the inflows and outflows of municipal wastewater treatment plants, which account for 69% of all data entries. Around 21% of the data entries refer to monitoring data of surface waters (rivers, lakes), the remaining 10% to monitoring data on sediments, groundwater, seawater, rainwater and others.

As main result of the literature study it was found that in addition to OTNE the fragrances alpha-Isomethyl ionone, Benzyl alcohol, Benzyl salicylates, Cinnamyl alcohol, Citral, Eugenol, Hexyl cinnamal, Isoeugenol, Lialal, D-Limonene and Methyl dihydrojasmonate are detected in effluents of sewage treatment plants. It is therefore recommended to include these fragrances in future monitoring programs.

It is proposed to systematically research and document the available data on the degradability and ecotoxicity of the selected fragrances. In addition, chemical-physical parameters (log Pow, water solubility, vapor pressure or Henry coefficient) should be compiled. From this, it is possible to estimate their fate in sewage treatment plants and thus their entry into surface waters (for example via the Simple Treat model). A comparison of these data with the monitoring results would allow to draw conclusions on entry levels and fate of fragrances in the environment.

## 1 Aufgabenstellung

In Wasch- und Reinigungsmitteln (WRM) werden unter anderem biologisch schwer abbaubare organische Inhaltsstoffe (engl. poorly biodegradable organics – PBOs) eingesetzt. Dazu zählen auch Duftstoffe, welche als biologisch schwer abbaubare Bestandteile von WRM in Gewässer eingetragen werden. Die Detergenzienverordnung (EG) Nr. 648/2004 fordert bisher nur die Endabbaubarkeit / Mineralisierung von Tensiden, die in diesem Bereich eingesetzt werden, hat aber keine Kriterien für andere möglicherweise schwer abbaubare organische Inhaltsstoffe in Detergenzien aufgestellt. In einem Projekt für das Umweltbundesamtes zu schwer abbaubaren organischen Inhaltsstoffen in Wasch- und Reinigungsmitteln wurde festgestellt, dass der Hauptanteil der ins Abwasser eingetragenen Duftstoffe aus dem Einsatz von WRM stammt (Groß et al. 2012). Die in WRM eingesetzten Duftstoffe werden entsprechend der Internationalen Nomenklatur für kosmetische Inhaltsstoffe (INCI) Codierung auf der Verpackung bzw. der Herstellerwebseite veröffentlicht und sind somit bekannt. Einige sind biologisch schwer abbaubar und zudem ökotoxisch. Die bislang vorliegenden Daten hinsichtlich ihres Verhaltens und Verbleibs in der Umwelt sind unzureichend und lassen eine abschließende Umweltrisikobewertung nicht zu. Nach derzeitigem Kenntnisstand kann nicht ausgeschlossen werden, dass Duftstoffe aus WRM Kläranlagen in relevanten Mengen passieren, in der aquatischen Umwelt langfristig akkumulieren sowie nachteilig auf Wasserorganismen wirken können.

Ziel der Literaturstudie ist es, das verfügbare Wissen zum Eintrag und Verbleib ausgewählter Duftstoffe in der Umwelt zusammenzufassen und damit dem Auftraggeber Entscheidungshilfen für eine Politikberatung zur Verfügung zu stellen. Hierzu wurde eine umfassende Recherche der vorhandenen deutsch- und englischsprachigen Veröffentlichungen zu Analysemethoden und Funden zu Duftstoffen aus Wasch- und Reinigungsmitteln in verschiedenen Umweltkompartimenten durchgeführt. Insgesamt wurden 30 Duftstoffe in der Literaturstudie berücksichtigt. Die Auswahl der Duftstoffe erfolgte aufgrund einer bekannten sensibilisierenden Wirkung und/oder der bekanntermaßen hohen Einträge durch die Experten des Umweltbundesamtes. Da das Vorkommen von synthetischen Moschusverbindungen (Nitromoschus- und Polycyclische Moschusverbindungen) in der Umwelt durch zahlreiche Studien belegt ist (u.a. Homem et al. 2015), wurden diese von der Literaturstudie ausgenommen.

## 2 Durchgeführte Recherchen

### 2.1 Ausgewählte Duftstoffe

Die Auswahl der Duftstoffe wurde vom Auftraggeber vorgegeben. Insgesamt wurden 30 überwiegend aus pflanzlichen Quellen stammende Duftstoffe in die Studie einbezogen. Im Abschlussbericht werden die im Englischen gebräuchlichen Bezeichnungen der Duftstoffe und hier vorzugsweise, soweit vorhanden, INCI-Namen<sup>1</sup> verwendet. Duftstoffe ohne INCI Bezeichnung werden anhand der üblichen Kurznamen oder über die IUPAC-Nomenklatur<sup>2</sup> angegeben. Eine eindeutige Identifikation erfolgt über die CAS Nummern.

**Tabelle 1: In der Studie berücksichtigte Duftstoffe**

Name	CAS	Chemischer Name	INCI
alpha-Butylcinnamaldehyde	7492-44-6	(2E)-2-(phenylmethylidene)hexanal	
alpha-Isomethyl Ionone	127-51-5	3-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexenyl)-3-buten-2-one	
Amyl Cinnamal	122-40-7	2-Benzylideneheptanal	AMYL CINNAMAL
Amylcinnamyl Alcohol	101-85-9	2-Pentyl-3-phenylprop-2-en-1-ol	
Anise Alcohol	105-13-5	Benzyl alcohol, p-methoxy-	
Benzyl Alcohol	100-51-6	Benzyl alcohol	BENZYL ALCOHOL
Benzyl Benzoate	120-51-4	Benzyl benzoate; Phenylmethyl benzoate	BENZYL BENZOATE
Benzyl Cinnamate	103-41-3	2-Propenoic acid, 3-phenyl; phenylmethyl ester	BENZYL CINNAMATE
Benzyl Salicylate	118-58-1	Benzyl salicylate	BENZYL SALICYLATE
beta-Ionone	14901-07-6 79-77-6	trimethylcyclohex-1-ene-1-yl)- but-3-ene-2-one	MIXED IONONE
Cinnamal	104-55-2	Cinnamaldehyde; 3-Phenyl-2-propenal	CINNAMAL
Cinnamyl Alcohol	104-54-1	Cinnamyl alcohol	CINNAMYL ALCOHOL
Citral	5392-40-5	3,7-Dimethyl-2,6-octadienal	CITRAL
Citronellol	106-22-9 26489-01-0 7540-51-4 1117-61-9	3,7-Dimethyl-6-octen-1-ol	CITRONELLOL
Coumarin	91-64-5	2H-1-Benzopyran-2-one	COUMARIN
Eugenol	97-53-0	Phenol, 2-methoxy-4-(2-propenyl)-	EUGENOL

<sup>1</sup> International Nomenclature of Cosmetic Ingredients

<sup>2</sup> International Union of Pure and Applied Chemistry

Name	CAS	Chemischer Name	INCI
Farnesol	4602-84-0	2,6,10-Dodecatrien-1-ol, 3,7,11-trimethyl-	FARNESOL
Geraniol	106-24-1	2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-, (2E)-	GERANIOL
Hexyl Cinnamal	101-86-0	2-Phenylmethyloctanal; alpha-Hexylcinnamaldehyde; 2-Benzylideneoctanal, alpha-n-hexyl-beta-phenylacrolein	
Hydroxycitronellal	107-75-5	7-Hydroxycitronellal	HYDROXYCITRONELLAL
Isocyclocitral	1335-66-6	2,4,6- trimethyl-3-cyclohexene-1-carboxaldehyde	
Isoeugenol	97-54-1	Phenol, 2-methoxy-4-(1-propenyl)-	ISOEUGENOL
Lialal	80-54-6	3-(4-tert-Butylphenyl)-2-methylpropanal; Butylphenyl Methylpropional	BUTYLPHENYL METHYLPROPIONA
Limonene / D,L-Limonene	138-86-3	1,8(9)-p-Menthadiene, p-Mentha-1,8-diene; 1-Methyl-4-isopropenyl-1-cyclohexene; 1-Methyl-4-Isopropenylcyclohexene, dipentene	DIPENTENE
D-Limonene	5989-27-5	(R)-p-Mentha-1,8-diene, (4R)-1-Methyl-4-(1-methylethenyl)cyclohexene	
Linalool	78-70-6	3,7-Dimethyl octa-1,6-diene-3-ol	LINALOOL
Lylal	31906-04-4 51414-25-6	Hydroxyisohexyl-3-Cyclohexene Carboxaldehyd (HICC)	
Methyl-2-Octynoate	111-12-6	Methylheptincarbonat; Methyl-2-octynoat	
Methyl-dihydrojasmonat	24851-98-7 2630-39-9	Methyl 3-oxo-2-pentylcyclopentaneacetate	METHYL- DIHYDROJASMONAT
OTNE	54464-57-2 54464-59-4 68155-66-8 68155-67-9	Tetramethyl Acetyloctahydronaphthalenes; (verschiedene Isomere)	

Alle ausgewählten Duftstoffe sind in der ECHA-Datenbank erfasst.<sup>3</sup> Anhand der CAS-Nummern wurden – soweit angegeben – die Namen, Strukturformeln, der Tonnagebereich unter REACH

<sup>3</sup> <https://echa.europa.eu/de/information-on-chemicals>

sowie die harmonisierten bzw. notifizierten gefahrstoffrechtlichen Einstufungen nach CLP-Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 von Stoffen und Gemischen recherchiert und dokumentiert.

## 2.2 Datenbankrecherchen

Anhand der CAS Nummern wurden gezielte Recherchen in der „Hazardous Substances Data Bank“ (HSDB) der U.S. National Library of Medicine durchgeführt.<sup>4</sup> Zu 17 der ausgewählten Duftstoffe finden sich HSDB Stoffdossiers, in denen vereinzelt Daten zum Umweltvorkommen berichtet werden, deren Referenzen nachfolgend ausgewertet wurden.

Zu einigen Duftstoffen (Benzyl Alcohol, Citral, Linalool und beta-Ionone) wurden über das OECD eChemPortal u.a. OECD Screening Information Datasets (OECD SIDS)<sup>5</sup> gefunden, die teilweise Referenzen zu Monitoringdaten enthalten. Für wenige Duftstoffe (Hydroxycitronellal, Isoeugenol) liegen zudem HERA-Stoffberichte vor, in denen jedoch nur auf das Fehlen von Monitoringdaten hingewiesen wird.<sup>6</sup>

In mehreren Pubmed-Recherchen (Literaturdatenbank der U.S. NIH/NL mit Schwerpunkt Biomedizin und „life science“) wurde zunächst mit allgemeinen Begriffen wie „fragrances“, „perfumes“ oder „essential oils“ in Verknüpfung mit „monitoring“, „environment“, „surface water“ oder „sewage treatment“, „waste water“ gesucht. Es zeigte sich, dass der Begriff „monitoring“ zu unpräzise ist, da sich zahlreiche Publikationen auf die Produktüberwachung von Kosmetika hinsichtlich des Vorhandenseins (allgenerer) Duftstoffe bezogen.

Nach Auswertung der vorhandenen Fachpublikationen wurde in der Literaturdatenbank Scopus (enthält u.a. Science Direct) zu allen Stoffen gezielt nach Monitoringdaten über die Duftstoffnamen bzw. die CAS Nummern gesucht. Wenn die Trefferzahl über 100 lag, wurde die Recherche durch Verknüpfung mit „water“, „surface water“, „sewage treatment“, „waste water“ oder „sediment“ eingeschränkt. Hierbei wurden etwa 20 weitere relevante Publikationen gefunden. Weitere Recherchen mit denselben Begriffskombinationen wurden in Researchgate durchgeführt, wobei allerdings nur wenige neue Arbeiten gefunden wurden.

Abschließend wurde für 8 Duftstoffe, für die bis dahin keine oder nur wenige Arbeiten vorlagen, gezielte Recherchen in der Datenbank „Web of Science“ durchgeführt.<sup>7</sup> Sofern die Trefferzahl 100 überschritt, wurde die oben beschriebene Recherchestrategie verfolgt, indem die Suche mit weiteren Begriffen („surface water“ bzw. „waste water“) verknüpft wurde. Insgesamt wurden hierbei nur wenige zusätzliche Arbeiten gefunden.

Die überwiegende Zahl der in der Studie berücksichtigten Duftstoffe ist pflanzlichen Ursprungs, so dass auch Einträge aus natürlichen Quellen auftreten können. Für beta-Ionone, das bei der Trinkwassergewinnung aus eutrophen Seen Probleme bereiten kann, wurde z.B. ein Zusammenhang der im Seewasser gefundenen Konzentration an Algen bzw. insbesondere Cyanobakterien nachgewiesen (Peter et al. 2009).

Es wurden insbesondere Publikationen mit Monitoringdaten in Oberflächengewässern, kommunalen Abwässern (Zu- und Ablauf) sowie Sedimenten ausgewertet. Da der Verbraucherbereich im Fokus stand, wurden Publikationen zu Industrieabwässern in denen z.B. deutlich höhere Konzentrationen in Abwasserreinigungsanlagen behandelt wurden, nicht ausgewertet (u.a. Alvarez et al. 1999).

---

<sup>4</sup> <https://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB>

<sup>5</sup> <https://www.echemportal.org/echemportal/index.action>

<sup>6</sup> <http://www.heraproject.com>

<sup>7</sup> <http://wokinfo.com/>

## 2.3 Internetrecherchen

Es wurden Google Recherchen mit den einzelnen Duftstoffnamen sowie den Suchbegriffen „monitoring“ und „surface water“ durchgeführt, wobei jeweils die ersten 50 Treffer je Duftstoff ausgewertet wurden. Allerdings wurden hierbei überwiegend Arbeiten zum Produktmonitoring von Körperpflegeprodukten (personal care products) hinsichtlich allergener Duftstoffe gefunden (kein Umweltmonitoring). Daraufhin wurde anhand der INCI Namen bzw. der CAS Nummern zu allen Stoffen in der Suchmaschine Google Scholar recherchiert. Wiederum wurde bei hoher Trefferzahl die Recherche durch Verknüpfung mit „surface water“, „waste water“ oder „sediment“ eingeschränkt. Hierbei wurden einige weitere Arbeiten gefunden, die der „grauen Literatur“ zuzurechnen sind.

Zudem wurden einige Webseiten von Behörden und Instituten wie Landesumweltämter, Umweltbehörden der EU-Mitgliedsstaaten, Institute der Wasserwirtschaft und Fluss-Reinhalte-Kommissionen gezielt zu den Begriffen „Duftstoff“, „fragrances“ bzw. „perfumes“ bzw. „essential oils“ in Verknüpfung mit „monitoring“ durchsucht.

Nach Auswertung der vorhandenen Fachpublikationen wurde zu den Stoffen mit Datenlücken eine gezielte Google-Recherche über die Duftstoffnamen in Verknüpfung mit „water“, „surface water“ oder „sewage treatment“ durchgeführt. Wenn die Trefferzahl über 250 lag, wurde die Suche zusätzlich durch Ausschlussbegriffe (ohne „patent“, ohne „material safety data sheet“, ohne „Sicherheitsdatenblatt“, ohne „personal care product“, ohne „cosmetic products“) eingeschränkt, um Publikationen zum Produktmonitoring auszuschließen, und die Treffer systematisch ausgewertet. Die Eingabe der CAS Nummern ergab zahlreiche nicht weiterführende Treffer und wurde nicht weiter verfolgt.

Bei den Recherchen wurde beispielsweise eine Monitoringstudie der TU Wien im Auftrag des Umweltbundesamtes Österreich gefunden, in der allerdings ausschließlich Moschusverbindungen berücksichtigt waren (Scharf et al. 2004).

Das Research Institute for Fragrance Materials (RIFM)<sup>8</sup> hat beispielsweise Risikobewertungen für einzelne Duftstoffe (Benzyl Alcohol, Linalool, 2,6-Dimethyl-5-heptenal, Linalyl acetate, alpha-Amylcinnamaldehyde, Linalyl Hexanoate, Methyl-dihydrojasmonate) veröffentlicht. Hier sind zwar Verbrauchsschätzungen aufgeführt, allerdings werden keine Monitoringdaten in der Umwelt berichtet.

## 2.4 Anfragen an Verbände und Experten

Die Liste mit den 30 ausgewählten Duftstoffen wurde an verschiedene Forschungseinrichtungen, Verbände und Universitäten gesendet, wobei oftmals bestehende persönliche Kontakte genutzt wurden.

Dem Research Institute for Fragrance Materials (RIFM) liegen keine Monitoringdaten zu den ausgewählten Duftstoffen vor. Im Rahmen der Risikobewertung werden die Umweltkonzentrationen („Predicted Environment Concentrations“, PEC) über die Eintragsmengen und Modelle abgeschätzt (Salvito et al. 2002). Die International Fragrance Association (IFRA) bezog sich in ihrem Antwortschreiben ebenfalls auf die RIFM-Bewertungen von Duftstoffen. Auch dem Industrieverband Körperpflege- und Waschmittel e.V. (IKW) und der Bund/Länder-Arbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA) sind keine Monitoringdaten bekannt. Der IKW teilte mit, dass auch den Mitgliedsfirmen keine Monitoringdaten zu den ausgewählten Duftstoffen vorliegen. Einige von diesen Duftstoffen können durch Pflanzen synthetisiert

---

<sup>8</sup> <http://www.rifm.org/>

werden bzw. auch Bestandteile von Lebensmitteln und Gewürzen sein. Viele Duftstoffe seien leicht oder inhärent biologisch abbaubar (persönliche Mitteilung vom 3.9.18).

Weder das Technologiezentrum Wasser (TZW, zugleich Koordinierungsstelle der Arbeitsgemeinschaft Wasserwerke Bodensee-Rhein, AWBR), die RheinEnergie AG (zugleich Geschäftsführung der Arbeitsgemeinschaft Rhein-Wasserwerke e. V., ARW), das Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ) noch das Fraunhofer-Institut für Molekularbiologie und Angewandte Oekologie (IME) haben sich bisher mit den ausgewählten Duftstoffen beschäftigt. Diese Institute sind in zahlreichen Monitoringstudien involviert.

Von Seiten des Umweltbundesamtes wurde eine Recherche im Norman Netzwerk<sup>9</sup> durchgeführt, über das sich Wissenschaftler zu (neuen) Umweltschadstoffen austauschen. Lediglich für OTNE und alpha-Isomethyl Ionone (g-Methylionone) fanden sich hier Einträge, die dann durch direkte Kontaktaufnahme mit den beteiligten Institutionen berücksichtigt wurden.

Über das Umweltbundesamt wurde die Anfrage zudem an alle Bundesländer weitergeleitet und gebeten, zu prüfen, ob die ausgewählten Duftstoffe in landesweiten Monitoringprogrammen berücksichtigt werden. Als Ergebnis wurde auf eine bereits bekannte bayerische Studie zu Duftstoffen in Kläranlagenabläufen und Fließgewässern hingewiesen (Klaschka et al. 2012). Zudem wurden vom Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen (LANUV) konkrete Daten zu OTNE übermittelt. Alle anderen Bundesländer antworteten, dass die ausgewählten Duftstoffe nicht untersucht werden. Von Seiten der Ländervertreter wurde die Anfrage dahingehend kommentiert, dass es sich bei den ausgewählten Duftstoffen um deklarationspflichtige und potentiell allergene Aromen in Kosmetika und Lebensmitteln handelt. Fast alle Stoffe der Liste kämen auch natürlicherweise vor, so dass man anthropogene Einträge nicht sicher von natürlichen Einträgen unterscheiden könnte.

Auch dem österreichischen Umweltbundesamt liegen keine Monitoringdaten oder Studien zu den ausgewählten Duftstoffen vor (persönliche Mitteilung vom 10.8.18).

In der Datenbank der Internationalen Kommission zum Schutz der Donau (ICPDR) wurden Daten zu OTNE gefunden, die in der Literaturstudie berücksichtigt wurden.<sup>10</sup>

Das Swedish Environmental Research Institute (IVL) führte mehrere umfangreiche Monitoringstudien mit Duftstoffen durch, von denen Isoeugenol, D-Limonene und OTNE in der Literaturstudie ausgewertet wurden.<sup>11</sup> Weiter vom IVL betrachtete Duftstoffe sind Acetyl cedrene (CAS 32388-55-9), Dihydroactinidiolide (DHI, CAS 17092-92-1) und Benzene, 1,1'-(3,3-dimethyl-1-butenyldiene)bis 1,1,3-Trimethyl-3-phenylindan (PTML, CAS 910-35-8).

Die Association of Rhine Water Works (RIWA) stellte rd. 60 Einzeldaten zu alpha-Isomethyl Ionone Konzentration in Maas und Rhein zur Verfügung, von denen die meisten unter der Nachweisgrenze lagen. Die anderen von der RIWA berücksichtigten Duftstoffe betrafen Moschusverbindungen sowie Geruchsstoffe wie Dimethyldisulfid und Campher (persönliche Mitteilung vom 21.8.18).

Das bei der Europäischen Kommission angesiedelte Scientific Committee on Consumer Safety (SCCS) erstellt Risikobewertungen für Wirkstoffe in Verbraucherprodukten, darunter auch verschiedene Duftstoffe mit Schwerpunkt auf die menschliche Gesundheit (u.a. allergene Wirkung). Das Vorkommen dieser Stoffe in der Umwelt wird nicht betrachtet.

---

<sup>9</sup> <https://www.norman-network.net/>

<sup>10</sup> <https://www.icpdr.org/>

<sup>11</sup> [www.ivl.se](http://www.ivl.se) (Zugriffsdatum 8.8.2018)

Zudem wurden einzelne Experten, die Monitoringdaten zu den ausgewählten Duftstoffen publiziert hatten, direkt kontaktiert, um Hinweise auf aktuelle Forschungsprojekte zu erhalten.

Am Umweltanalytischen Laboratorium des Instituts für Siedlungswasserwirtschaft der RWTH Aachen wurde eine Monitoringstudie im Auftrag des LANUV durchgeführt, in der einige Duftstoffe enthalten sind. Neben den in vorliegender Studie nicht berücksichtigten Moschusverbindungen wurde lediglich OTNE berücksichtigt. Hier liegen etwa 30 Einzelwerte zu verschiedenen Fließgewässern und Kläranlagenabläufen vor. Weitere berücksichtigte Duftstoffe sind Cashmeran (CAS 33704-61-9) und verschiedene Moschusverbindungen. Die Daten sind noch nicht veröffentlicht (persönliche Mitteilung vom 2.9.18).

## **2.5 Auswertung und Dokumentation**

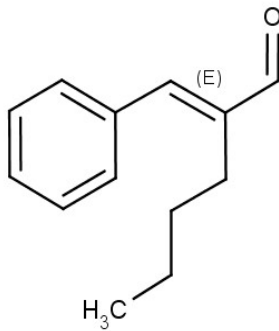
Die Ergebnisse der Literaturstudie wurden möglichst detailliert in eine Excel-Tabelle überführt, die separat zum Abschlussbericht bereitgestellt wird. Hierbei wurde die zeitliche und örtliche Probenahme, die Anzahl der Probenahmestellen und Proben, die verwendete analytische Methode einschließlich ihrer Nachweis- und Bestimmungsgrenzen sowie die Einzelergebnisse dokumentiert. Sofern die Daten sinnvoll aggregiert vorlagen (Median bzw. Mittelwert) wurden diese berichtet, teilweise sind aber auch nur die maximalen gefundenen Konzentrationen berichtet und dokumentiert. Nicht aus allen Publikationen ließen sich diese Daten im gewünschten Detailgrad herauslesen. Die berücksichtigten Arbeiten wurden zudem in die bibliographischen Datenbank Mendeley überführt.



## 3 Ergebnisse

### 3.1 Duftstoffe

#### 3.1.1 alpha-Butylcinnamaldehyde



EC Nr.: 231-320-0

CAS Nr.: 7492-44-6

Summenformel: C<sub>13</sub>H<sub>16</sub>O

alpha-butylcinnamaldehyde

2E)-2-(phenylmethylidene)hexanal

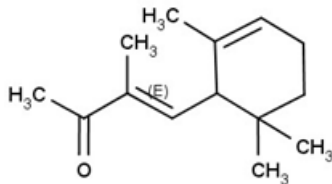
Notifizierte Einstufung: Skin Irrit. 2 (H315), Eye Irrit. 2 (H319)

Keine Angaben zu Herstellung/Import und Einsatzbereichen.

Monitoringdaten:

Zu alpha-Butylcinnamaldehyde wurde keine Arbeit zum Umweltvorkommen gefunden. In der Übersichtsarbeit von Adam et al. (2004) wird die Substanz hinsichtlich ihrer humantoxikologischen Relevanz im Rahmen der umfangreichen Duftstoffgruppe der Cinnamyl-Derivate berücksichtigt.

#### 3.1.2 alpha-Isomethyl Ionone



EC Nr.: 204-846-3

CAS Nr.: 127-51-5

Summenformel: C<sub>14</sub>H<sub>22</sub>O

3-methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one

alpha-iso-Methylionone

Notifizierte Einstufung: Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1B (H317), Eye Irrit. 2 (H319), Aquatic Chronic 2 (H411)

Herstellung/Import in EU: 100-1000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Luftsprays, Parfums und Duftstoffe, Polituren und Wachse, Kosmetika und Körperpflegeprodukte, Biozide, Wasch- und Reinigungsmittel

Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Im Zulauf von kommunalen ARA in Europa und den USA wurden typische Konzentrationen von 0,03 – 3,67 µg/L und im Ablauf von 0,02 – 0,38 µg/L bestimmt (Simonich et al. 2000, 2002, Becerril et al. 2010, Becerril-Bravo et al. 2010). Simonich et al

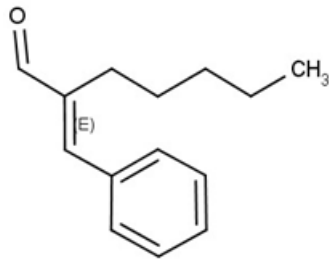
(2002) fanden für alpha-Isomethyl Ionone in 5 Kläranlagen mit dem Belebtschlammverfahren aus den USA und Europa mittlere Eliminationsraten von 96,5%.

Oberflächenwasser: In Fließgewässern Rumäniens wurden mittlere Konzentrationen von 0,05 µg/L bestimmt (Feher et al. 2016), während in Japan deutlich geringere mittlere Konzentrationen von 0,0006 µg/L gefunden wurden (Kameda et al. 2007).

Die Association of Rhine Water Works (RIWA) stellte rd. 60 Einzeldaten zu alpha-Isomethyl Ionone Konzentration in Maas und Rhein aus den Jahren 2008-2017 zur Verfügung, von denen die meisten unter der Nachweisgrenze (LOD = 0,01 µg/L) lagen. An der Probenahmestelle Lüttich (Maas) wurden in 4 von 31 Proben alpha-Isomethyl Ionone nachgewiesen (Maximum 0,034 µg/L). An der Probenahmestelle Namêche (Maas) waren es 4 von 28 Proben (Maximum 0,043 µg/L) (persönliche Mitteilung vom 21.8.18). Da weitere Angaben zu dieser Monitoringstudie nicht verfügbar sind, wurden die Daten nicht in die Excel-Liste übernommen.

Zur Konzentration in Flusssedimenten liegt nur die Arbeit von Kameda et al. (2007) vor, in der mittlere Konzentrationen von 0,2 µg/kg dokumentiert sind.

### 3.1.3 Amyl Cinnamal



EC Nr.: 204-541-5

CAS Nr.: 122-40-7

Summenformel: C<sub>14</sub>H<sub>18</sub>O

2-benzylideneheptanal

Notifizierte Einstufung: Skin Sens. 1(H317), Aquatic Chronic 2( H411)

Herstellung/Import in EU: 10-100 t/a

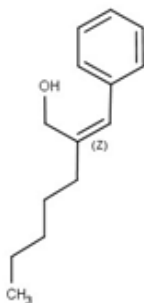
Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen und im industriellen Bereich verwendet (weitverbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Luftsprays, Biozide, Parfums und Duftstoffe, Polituren und Wachse, Kosmetika und Körperpflegeprodukte

Monitoringdaten:

Amyl Cinnamal wurde weder im Zu- noch Ablauf von kommunalen Kläranlagen, noch in Fließgewässern in Spanien und Mexiko nachgewiesen (Becerril et al. 2010, Becerril-Bravo et al. 2010, Martinez et al. 2013). Die LOD lagen in einem weiten Bereich von 0,0005 µg/L bis 0,19 µg/L. Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.4 Amylcinnamyl Alcohol



EC Nr.: 202-982-8

CAS Nr.: 101-85-9

Summenformel: C<sub>14</sub>H<sub>20</sub>O

2-pentyl-3-phenylprop-2-en-1-ol

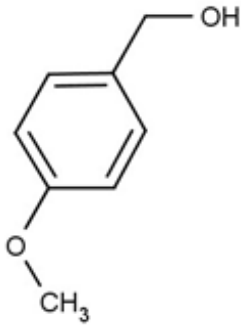
Notifizierte Einstufung: Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1 (H317), Eye Irrit. 2 (H319)

Keine Angaben zu Herstellung/Import und Einsatzbereichen.

Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Amylcinnamyl Alcohol wurde weder im Zu- noch im Ablauf von kommunalen Kläranlagen in Spanien und Mexiko nachgewiesen (Becerril et al. 2010, Becerril-Bravo et al. 2010). Der LOD lag allerdings mit rd. 0,6 µg/L so hoch, dass die Aussage zum Vorkommen eingeschränkt ist. Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.5 Anise Alcohol



EC Nr.: 203-273-6

CAS Nr.: 105-13-5

Summenformel: C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub>

4-methoxybenzyl alcohol

(4-methoxyphenyl)methanol

Notifizierte Einstufung: Acute Tox. 4 (H302), Skin Sens. 1 (H317), Eye Dam. 1 H318

Herstellung/Import in EU: 10-100 t/a

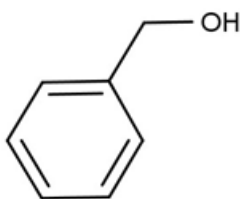
Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen und im industriellen Bereich verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Biozide (z. B. Desinfektionsmittel, Schädlingsbekämpfungsmittel), Wasch- und Reinigungsmittel, Luftpflegemittel, Polituren und Wachse, Parfüms und Duftstoffe, Kosmetika und Körperpflegeprodukte, Verwendung in Innenräumen und im Freien als Verarbeitungshilfsstoff.

Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Anise Alcohol wurde weder im Zu- noch im Ablauf von kommunalen Kläranlagen in Spanien und Mexiko nachgewiesen (Becerril et al. 2010, Becerril-Bravo et al. 2010). Der LOD lag bei mit rd. 1 µg/L sehr hoch, so dass die Gesamtaussage zum Vorkommen eingeschränkt ist. Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.6 Benzyl Alcohol



EC Nr.: 202-859-9

CAS Nr.: 100-51-6

Summenformel: C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>O

Biozider Wirkstoff

Harmonisierte Einstufung: Acute Tox. 4 (H302)

Herstellung/Import in EU: 10000-100000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Beschichtungsprodukte, Wasch- und Reinigungsmittel, Tinten und Toner, Kleb- und Dichtstoffe, Füllstoffe, Spachtelmassen, Putze, Modelliermassen, Polituren und Wachse sowie pH-Regulatoren und Wasseraufbereitungsprodukte.

Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Weder im Zu- noch im Ablauf kommunaler Kläranlagen in Spanien und Mexiko war Benzylalkohol nachweisbar (Becerril et al. 2010, Martinez et al. 2015). Der LOD lag bei 0,19 µg/L. Auch Maidatsi et al. (2015) fanden im Ablauf einer Griechischen Kläranlage kein Benzylalkohol. Im Gegensatz dazu wurde in chinesischen Kläranlagenzuläufen mittlere Konzentrationen von 3,4 µg/L und im Ablauf von 0,08 µg/L gefunden (Wang et al. 2018).

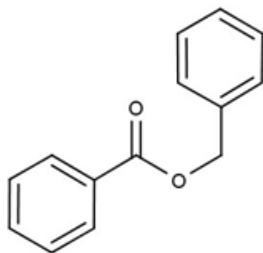
Oberflächenwasser: In mehreren Flüssen und Seen der USA, Spaniens und Griechenlands wurde Benzylalkohol nicht nachgewiesen (Martinez et al. 2013, Johnson 2012, Anderson et al. 2004, Maidatsi et al. 2015). Im Einzugsgebiet Thornton Creek des Lake Washington wurde Benzylalkohol in 10 von 38 Probenahmestellen verschiedener Zuflüsse nachgewiesen. Der Median der positiven Proben lag bei rd. 1 µg/L (Anderson et al. 2004).

Baranowska und Wojciechowska (2013) untersuchten 9 polnische Flüsse und einen See und fanden lediglich in einigen Proben des Flusses Bytombka Benzylalkohol mit maximalen Werten von 35 µg/L.

Allinson et al. (2014) wiesen bis zu 0,334 µg/L Benzylalkohol in urbanen Regenwasserabläufen in Melbourne, Australien, nach und führten die Einträge auf den Abrieb von Reifen zurück. Im Regenwasser der Messstation Puy de Dôme (Zentralfrankreich) wurden mittlere Konzentrationen von 0,03 µg/L bestimmt (Lebedev et al. 2018).

Grundwasser: In den USA war Benzylalkohol meist nicht nachweisbar, die maximalen Werte lagen bei 1,1 µg/L (Johnson 2012). Eine weitere Arbeit aus China berichtet von regelmäßigen Funden mit einem Median von 0,582 µg/L (Kong et al. 2016).

### 3.1.7 Benzyl Benzoate



EC Nr.: 204-402-9

CAS Nr.: 120-51-4

Summenformel: C<sub>14</sub>H<sub>12</sub>O<sub>2</sub>

Benzoic acid, phenylmethyl ester

Harmonisierte Einstufung: Acute Tox. 4 (H302), Aquatic Chronic 2 (H411)

Herstellung/Import in EU: 1000-10000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Wasch- und Reinigungsmittel, Polituren und Wachse, Luftsprays, Kosmetika und Körperpflegeprodukte, Parfums und Duftstoffe sowie Biozide.

Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Weder im Zu- noch im Ablauf kommunaler Kläranlagen in Spanien und Mexiko war Benzyl Benzoate nachweisbar (Becerril et al. 2010). Der LOD lag bei 0,003 µg/L.

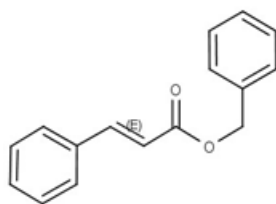
Demgegenüber fanden Bruchet et al. (2002) den Duftstoff im Zulauf einer Kläranlage bei Lyon, Frankreich, in Konzentrationen von 3 µg/L. In keiner der untersuchten Kläranlagen wurde Benzyl Benzoate im Ablauf nachgewiesen. Dies wird auch durch die Arbeit von Roots et al. (2011) an estländischen Kläranlagen bestätigt.

Oberflächenwasser: Roots et al. (2011) konnten Benzyl Benzoate in vier estländischen Flüssen und einem See nicht nachweisen. Der LOD lag bei 0,05 µg/L.

Sedimente: Ricking et al. (2003) untersuchten Berliner Gewässersedimente und konnten Benzyl Benzoate bis zu Konzentrationen von 0,5 µg/kg nachweisen.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.8 Benzyl Cinnamate



EC Nr.: 203-109-3

CAS Nr.: 103-41-3

Summenformel: C<sub>16</sub>H<sub>14</sub>O<sub>2</sub>

Notifizierte Einstufung: Skin Sens. 1 (H317), Aquatic Chronic 2 (H411)

Herstellung/Import in EU: 10-100 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Biozide (z. B. Desinfektionsmittel, Schädlingsbekämpfungsprodukte), Wasch- und Reinigungsmittel, Luftsprays, Polituren und Wachse, Parfum und Duftstoffe sowie Kosmetika und Körperpflegeprodukte.

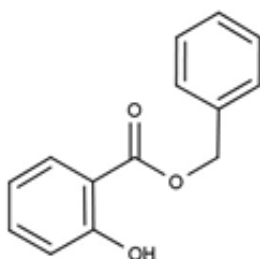
Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Weder im Zu- noch im Ablauf kommunaler Kläranlagen in Spanien und Mexiko war Benzyl Cinnamate nachweisbar (Becerril et al. 2010). Der LOD lag bei 0,008 µg/L. Dies zeigen auch die Arbeiten von Becerril-Bravo et al. (2010) sowie Maidatsi et al. (2015) zu Kläranlagenabläufen in Spanien und Griechenland.

Oberflächenwasser: In den Untersuchungen von Ekpeghere et al. (2016) und Maidatsi et al. (2015) konnte Benzyl Cinnamate in mehreren Flüssen und Seen nicht nachgewiesen werden. Die LOD lagen bei ≤ 0,01 µg/L.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.9 Benzyl Salicylate



EC Nr.: 204-262-9

CAS Nr.: 118-58-1

Summenformel: C<sub>14</sub>H<sub>12</sub>O<sub>3</sub>

Benzoic acid, 2-hydroxy-, phenylmethyl ester

Notifizierte Einstufung: Skin Sens. 1B (H317), Eye Irrit. 2 (H319), Aquatic Chronic 3 (H412)

Herstellung/Import in EU: 1000-10000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen und im industriellen Bereich/in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Luftsprays, Biozide, Parfums und Duftstoffe, Polituren und Wachse, Wasch- und Reinigungsmittel sowie Kosmetika und Körperpflegeprodukte.

Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Während Benzyl Salicylate im Zulauf kommunaler Kläranlagen in Spanien und Mexiko nicht nachweisbar war (Becerril et al. 2010), wurde es in mehreren anderen Arbeiten in Konzentrationen von 0,03 – 0,56 µg/L (Negreira et al. 2010, Martinez et al. 2015, Oppenheimer et al. 2007) bis 7,3-19,5 µg/L (Simonich et al. 2002) nachgewiesen. Im Ablauf kommunaler Kläranlagen wurden mittlere Konzentrationen von < LOD bis 1 µg/L bestimmt (Godayol et al. 2015, Simonich et al. 2002, Martinez et al. 2015). Die Elimination von Benzyl Salicylate in kommunalen Kläranlagen in den USA und Europa beträgt 71-99% für Anlagen mit Tropfkörpern und 88-99,9% für Anlagen mit Belebtschlammverfahren (Simonich et al. 2002). Godayol et al. (2015) bestimmten Benzyl Salicylate nicht im Rohabwasser, aber nach der Vorklärung (primary treatment) und im Ablauf zweier Kläranlagen in Spanien und wiesen eine Elimination von 82 – 96% im Klärbecken nach. Demgegenüber fanden Martinez et al. (2015) in einer spanischen Kläranlage, die mit einer Umkehrosmoseanlage ertüchtigt werden sollte, eine Elimination von lediglich 48% im Belebtschlammverfahren.

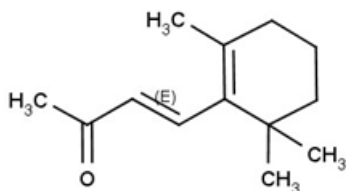
Oberflächenwasser: Benzyl Salicylate wurde in Flusswasser in Japan, Italien und Spanien in Konzentrationen von < LOD bis 0,15 µg/L (Mittelwert) bestimmt (Kameda et al. 2011, Vila et al. 2016, Negreira et al. 2010).

Süßwassersedimente: In japanischen Fließgewässersedimenten konnten Kameda et al. 2007, 2011 Benzyl Salicylate nicht nachweisen (LOD = 1 µg/kg).

Meerwasser: Vecchiato et al. (2016) bestimmten im Oberflächenwasser der Lagune von Venedig im Mittel 2,4 µg/L Benzyl Salicylate. Auch in Meerwasserproben bei Sizilien und der Antarktis wurde Benzyl Salicylate in Konzentrationen von 0,056 µg/L bzw. 0,005 µg/L nachgewiesen (Vecchiato et al. 2018, 2017).

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.10 beta-Ionone



EC Nr.: 238-969-9

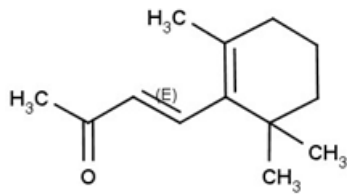
CAS Nr.: 14901-07-6

Summenformel: C<sub>13</sub>H<sub>20</sub>O

4-(2,6,6-trimethylcyclohex-1-ene-1-yl)-but-3-ene-2-one

Notifizierte Einstufung: Aquatic Chronic 2 (H411)

Herstellung/Import in EU: 100-1000 t/a



EC Nr.: 201-224-3

CAS Nr.: 79-77-6

Summenformel:  $C_{13}H_{20}O$

(E)-4-(2,6,6-trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one

Notifizierte Einstufung: Aquatic Acute 2 (H401) und Aquatic Chronic 2 (H411)

Herstellung/Import in EU: 1000-10.000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Luftsprays, Biozide, Parfums und Duftstoffe, Polituren und Wachse, Kosmetika und Körperpflegeprodukte.

Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Klaschka et al. (2012) bestimmten beta-Ionone im Zu- und Ablauf einer Kläranlage an der Ammer. Die mittlere Zulaufkonzentration lag bei  $0,47 \mu\text{g/L}$ , die mittlere Ablaufkonzentration bei  $<0,003 \mu\text{g/L}$ . Dem entspricht eine Elimination von 99%. Bai et al. (2016) fanden im Zulauf zweier Kläranlagen in China maximale Konzentrationen von  $0,029 \mu\text{g/L}$ . Im Ablauf konnte beta-Ionone nicht detektiert werden.

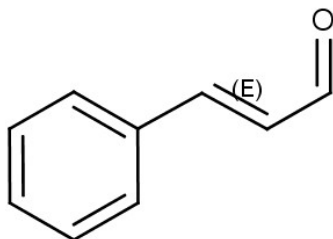
Oberflächenwasser: In Fließgewässern (Arno Norditalien) wurden beta-Ionone Konzentrationen von  $< \text{LOD}$  bis  $0,006 \mu\text{g/L}$  bestimmt (Bao et al. 1997). Ding et al. (2014) untersuchten zur Trinkwassergewinnung vorgesehene nicht näher spezifiziertes Oberflächenwasser und fanden bis zu  $0,113 \mu\text{g/L}$ .

In zahlreichen Arbeiten wurde ein Zusammenhang zwischen der biogenen Entstehung von beta-Ionone durch Algenblüten (insbesondere Cyanobakterien) in eutrophen Seen nachgewiesen (Peter et al. 2009, Deng et al. 2011, Jiang et al. 2015, Huang et al. 2017, Bai et al. 2016). Beta-Ionone gilt als einer der Hauptkomponenten für die unangenehme Geruchsbildung, die auch in der Trinkwassergewinnung Probleme aufwerfen kann. Die berichteten Konzentration lagen zwischen  $< \text{LOD}$  bis  $2,3 \mu\text{g/L}$ .

Süßwassersedimente: In Sedimenten von chinesischen Seen wiesen Jiang et al. (2015) bis zu  $0,012 \mu\text{g/kg}$  und Huang et al. (2017) bis zu  $0,26 \mu\text{g/kg}$  nach.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.11 Cinnamal



EC Nr.: 203-213-9

CAS Nr.: 104-55-2

Summenformel:  $C_9H_8O$

3-phenyl-2-propenal

Biozider Wirkstoff

Notifizierte Einstufung: Acute Tox. 4 (H312), Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1 (H317), Eye Irrit. 2 (H319)

Herstellung/Import in EU: 1000-10000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

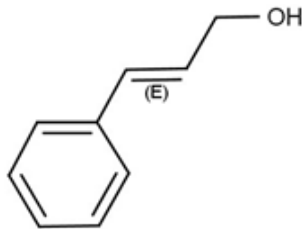
Verbraucherprodukte: Luftsprays, Parfums und Duftstoffe, Polituren und Wachse, Wasch- und Reinigungsmittel, Kosmetika und Körperpflegeprodukte, Pharmazeutika und Biozide.

Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Cinnamal wurde weder im Zu- und Ablauf von kommunalen Kläranlagen in Spanien und Mexiko, noch in Fließgewässern nachgewiesen (Becerril et al. 2010, Becerril-Bravo et al. 2010). Der LOD lag bei 0,06 µg/L.

Meerwasser: In Meerwasserproben des Puget Sound (Washington, USA) sowie Barkley Sound (British Columbia, Canada) wurde Cinnamal in Konzentrationen von 0,005 µg/L bzw. 0,004 µg/L (Median) nachgewiesen (Keil et al. 2011).

### 3.1.12 Cinnamyl Alcohol



EC Nr.: 203-212-3

CAS Nr.: 104-54-1

Summenformel: C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>O

(2E)-3-phenyl-2-propen-ol

Notifizierte Einstufung: Skin Sens. 1 (H317),

Acute Tox. 4 (H302), Eye Irrit. 2 (H319)

Herstellung/Import in EU: 100-1000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen und im industriellen Bereich verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Parfums und Duftstoffe, Polituren und Wachse, Wasch- und Reinigungsmittel, Luftsprays, Biozide sowie Kosmetika und Körperpflegeprodukte.

Monitoringdaten:

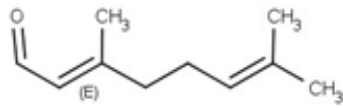
Kommunale Kläranlagen: In zwei Spanischen Kläranlagenzuläufen wurde Cinnamylalkohol in Konzentrationen von 1,1 µg/ (Becerril et al. 2010) bzw. einem Median 11,5 µg/L (Martinez et al. 2015) nachgewiesen. Im Ablauf lag die mittlere Konzentration für die letztgenannte Arbeit bei 1,37 µg/L, so dass von einem Eliminationsgrad von rd. 88% auszugehen ist. In weiteren Arbeiten wurden Ablaufkonzentrationen < LOD (Becerril-Bravo et al. 2010, Maidatsi et al. 2015) bis 2,55 µg/L (Martinez et al. 2013) bestimmt.

Oberflächenwasser: In Fließgewässern (Llobregat, Spanien) und Seen (Pamvotis, Griechenland) war Cinnamylalkohol nicht nachweisbar (Martinez et al. 2013, Maidatsi et al. 2015). Die LOD lagen bei 0,1 bzw. 0,0032 µg/L.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.



### 3.1.13 Citral



EC Nr.: 226-394-6

CAS Nr.: 5392-40-5

Summenformel: C<sub>10</sub>H<sub>16</sub>O

2,6-Octadienal, 3,7-dimethyl

3,7-Dimethyl-2,6-octadienal

Harmonisierte Einstufung: Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1 (H317)

Herstellung/Import in EU: 1000-10000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen und industriellen Bereich und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Biozide, Wasch- und Reinigungsmittel, Luftsprays, Polituren und Wachse, Parfums und Duftstoffe sowie Kosmetika und Körperpflegeprodukte.

Monitoringdaten:

Weder im Zu- noch im Ablauf kommunaler Kläranlagen in Spanien und Mexiko war Citral nachweisbar (Becerril et al. 2010). Der LOD lag bei 0,042 µg/L.

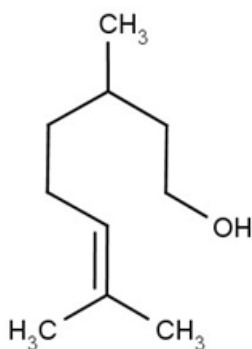
Demgegenüber fanden Martinez et al (2015) in einer spanischen Kläranlage, die mit einer Umkehrosioseanlage ertüchtigt werden sollte, im Zu- und Ablauf 0,3 µg/L. Im Ablauf einer Griechischen Kläranlage war Citral nicht nachweisbar (Maidatsi et al. 2015). Der LOD lag hier bei 0,0015 µg/L.

Oberflächenwasser: Citral wurde in Fließgewässern (Llobregat, Spanien) nicht nachgewiesen. Der LOD lag bei 0,01 µg/L (Martinez et al. 2013). Bao et al. (1997) untersuchte die Substanz an mehreren Probenahmestellen des Ebro (Italien) und fand Konzentrationen von < LOD bis 0,03 µg/L. Maidatsi et al. 2015 konnte Citral im See Pamvotis (Griechenland) nicht nachweisen. Der LOD lag hier bei 0,0015 µg/L.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

In der Literatur finden sich zahlreiche Arbeiten zum Vorkommen von β-Cyclocitral mit der CAS 432-25-7 in Seen, wobei ähnlich wie bei beta-Ionon eine biogene Entstehung durch Blaualgenblüten postuliert wird (u.a. Jones and Korth 1995).

### 3.1.14 Citronellol



EC Nr.: 203-375-0

CAS Nr.: 106-22-9

Summenformel: C<sub>10</sub>H<sub>20</sub>O

(3S)-3,7-dimethyloct-6-en-1-ol; (±)-β-Citronellol; 3,7 - dimethyloct-6-en-1-ol

Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1B (H317), Eye Irrit. 2 (H319)

EC Nr.: 247-737-6

CAS Nr.: 106-22-9; 26489-01-0

(±)-3,7-dimethyloct-6-en-1-ol

Herstellung/Import in EU: 100-1000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

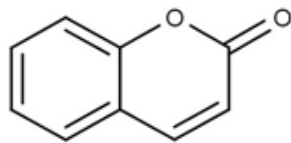
Verbraucherprodukte: Luftsprays, Biozide, Parfums und Duftstoffe, Polituren und Wachse, Wasch- und Reinigungsmittel sowie Kosmetika und Körperpflegeprodukte.

Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Im Ablauf kommunaler Kläranlagen in Spanien und Schweden wurde Citronellol nicht nachgewiesen (Becerril-Bravo et al. 2010, Paxeus et al. 1996). Der LOD lag für die erste Arbeit bei 0,28 µg/L und wurde bei der zweiten Arbeit nicht angegeben. Escalas et al. (2003) bestimmt im Zulauf einer spanischen Kläranlage mittlere Konzentrationen von 3,5 µg/L während die Substanz im Ablauf nicht nachweisbar war (LOD nicht angegeben).

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.15 Coumarin



EC Nr.: 202-086-7

CAS Nr.: 91-64-5

Summenformel: C<sub>9</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>

(2H)-1-Benzopyran-2-one

Notifizierte Einstufung: Acute Tox. 4 (H302), Skin Sens. 1 (H317)

Herstellung/Import in EU: 1000-10000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen und im industriellen Bereich verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Parfums und Duftstoffe, Kosmetika und Körperpflegeprodukte, Klebstoffe und Dichtmassen, Luftsprays, Biozide, Pharmazeutika, Polituren und Wachse, Textilhilfsmittel und Farbstoffe sowie Wasch- und Reinigungsmittel.

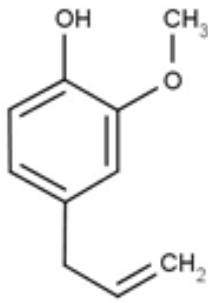
Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Coumarin wurde im Zulauf kommunaler Kläranlagen in Spanien, Mexiko und Deutschland nicht nachgewiesen (Becerril et al. 2010, Wluka et al. 2017, Martinez et al. 2015). Auch im Ablauf lagen die Konzentrationen unter den LOD von 0,0005 bis 0,19 µg/L (Becerril et al. 2010, Becerril-Bravo et al. 2010, Maidatsi et al. 2015).

Oberflächenwasser: In einzelnen Rein- und Maaswasserproben wurde Coumarin in Konzentrationen von 0,01 – 0,09 µg/L nachgewiesen (van Stee et al. 2002). Demgegenüber war Coumarin in Seewasserproben (See Pamvotis, Griechenland) nicht nachweisbar (Maidatsi et al. 2015). Der LOD lag hier bei 0,0012 µg/L.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.16 Eugenol



EC Nr.: 202-589-1

CAS Nr.: 97-53-0

Summenformel: C<sub>10</sub>H<sub>12</sub>O<sub>2</sub>

Phenol, 2-Methoxy-4-(2-Propenyl)-;

2-methoxy-4-prop-2-enylphenol

Notifizierte Einstufung: Skin Sens. 1 (H317), Eye Irrit. 2 (H319)

Herstellung/Import in EU: 1000-10000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Wasch- und Reinigungsmittel, Biozide, Luftsprays, Polituren und Wachse, Kosmetika und Körperpflegeprodukte sowie Parfums und Duftstoffe.

Monitoringdaten:

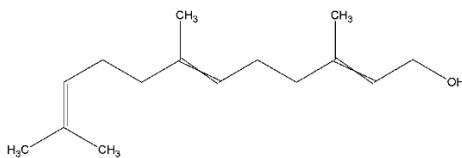
Kommunale Kläranlagen: Eugenol wurde in keiner der untersuchten spanischen und mexikanischen Kläranlagen nachgewiesen (Becerril et al. 2010). Der LOD lag bei 0,012 µg/L. In einer weiteren spanischen Kläranlage wurden im Zulauf mittlere Konzentrationen von 0,51 µg/L und im Ablauf von 0,3 µg/L bestimmt (Martinez et al. 2015).

Oberflächenwasser: In Fließgewässern (Llobregat, Spanien) und Seen (Pamvotis, Griechenland) war Eugenol nicht nachweisbar (Martinez et al. 2013, Maidatsi et al. 2015). Die LOD lagen bei 0,01 bzw. 0,002 µg/L.

Meerwasser: Keil et al. (2011) fanden Eugenol in Wasserproben des Puget Sound, USA in Konzentrationen von 0,004 µg/L und im Barkley Sound, Canada in Konzentrationen von 0,0005 µg/L.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.17 Farnesol



EC Nr.: 225-004-1

CAS Nr.: 4602-84-0

Summenformel: C<sub>15</sub>H<sub>26</sub>O

(2E,6E)-3,7,11-trimethyldodeca-2,6,10-trien-1-ol

Notifizierte Einstufung: Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1B (H317), Aquatic Acute 1 (H400), Aquatic Chronic 1 (H410 M=1)

Herstellung/Import in EU: 100-1000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Biozide, Wasch- und Reinigungsmittel, Biozide, Luftsprays, Polituren und Wachse, Parfums und Duftstoffe sowie Kosmetika und Körperpflegeprodukte.

Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Farnesol wurde weder im Zu- noch im Ablauf von kommunalen Kläranlagen in Spanien und Mexiko nachgewiesen (Becerril et al. 2010). In der Kläranlage von Göteborg, Schweden, wurden mittlere Konzentrationen an Farnesol von 4 µg/L nachgewiesen, im Ablauf der Kläranlage war die Substanz nicht nachweisbar (Paxeus et al. 1996).

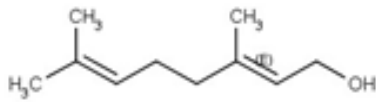
Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.18 Geraniol

EC Nr.: 203-377-1

CAS Nr.: 106-24-1

Summenformel: C<sub>10</sub>H<sub>18</sub>O



(2E)-3,7-Dimethyl-2,6-octadien-1-ol

2,6-Dimethyl-2,6-octadien-8-ol

Biozider Wirkstoff

Notifizierte Einstufung: Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1 (H317), Eye Dam. 1 (H318)

Herstellung/Import in EU: 1000-10000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Wasch- und Reinigungsmittel, Biozide, Luftsprays, Polituren und Wachse, Parfums und Duftstoffe sowie Kosmetika und Körperpflegeprodukte.

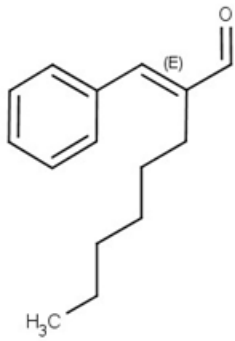
Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Geraniol wurde weder im Zu- noch im Ablauf von kommunalen Kläranlagen in Spanien und Mexiko nachgewiesen (Becerril et al. 2010). Der LOD lag bei 0,048 µg/L. Auch im Zulauf einer weiteren spanischen Kläranlage wurde die Substanz nicht gefunden (Martinez et al. 2015). In der Kläranlage von Göteborg, Schweden, wurden mittlere Konzentrationen an Farnesol von 1 µg/L nachgewiesen, im Ablauf der Kläranlage war die Substanz nicht nachweisbar (Paxeus et al. 1996). Der LOD wurde hier nicht angegeben.

Oberflächenwasser: In Fließgewässern (Llobregat, Spanien) und Seen (Pamvotis, Griechenland) war Geraniol nicht nachweisbar (Martinez et al. 2013, Maidatsi et al. 2015). Die LOD lagen bei 0,0033 bzw. 0,003 µg/L.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.19 Hexyl Cinnamal



EC Nr.: 202-983-3

CAS Nr.: 101-86-0

Summenformel: C<sub>15</sub>H<sub>20</sub>O

α-hexylcinnamaldehyde

(2E)-2-(phenylmethylidene)octanal

2-Benzylideneoctanal

Notifizierte Einstufung: Skin Sens. 1 (H317),

Skin Sens. 1B (H317), Aquatic Acute 1 (H400), Aquatic  
Chronic 2 (H411)

Keine Angaben zu Herstellung/Import und  
Einsatzbereichen.

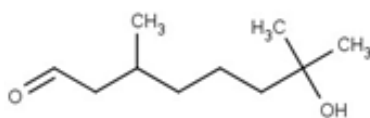
#### Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Im Zulauf von kommunalen ARA in Europa und den USA wurden mittlere Konzentrationen von 7,9 bis 34,9 µg/L bestimmt. Im Ablauf lagen die Konzentrationen bei 0,01 bis 0,465 µg/L (Simonich et al. 2000, 2002). Die Gesamtelimination lag nach der biologischen Reinigung zwischen 96,3 und 99,9%. Auch im Ablauf von weiteren spanischen sowie einer griechischen Kläranlage war die Substanz nicht nachweisbar (Becerril et al. 2010, Becerril-Bravo et al. 2010, Maidatsi et al. 2015). Der LOD lag zwischen 0,002 und 0,026 µg/L. Klaschka et al. (2012) bestimmten Hexyl Cinnamal im Zu- und Ablauf einer Kläranlage an der Ammer. Die mittlere Zulaufkonzentration lag bei 7,58 µg/L, die mittlere Ablaufkonzentration bei <0,009 µg/L. Dem entspricht eine Elimination von 99,9%. Simonich et al (2002) fanden für Hexyl Cinnamal in 5 Kläranlagen mit dem Belebtschlammverfahren aus den USA und Europa mittlere Eliminationsraten von 99,8%.

Oberflächenwasser: Im See Pamvotis, Griechenland war Hexyl Cinnamal nicht nachweisbar (Maidatsi et al. 2015). Der LOD lag bei 0,0025 µg/L.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.20 Hydroxycitronellal



EC Nr.: 203-518-7

CAS Nr.: 107-75-5

Summenformel: C<sub>10</sub>H<sub>20</sub>O<sub>2</sub>

7-hydroxycitronellal

3,7-Dimethyl-7-hydroxyoctanal

Notifizierte Einstufung: Skin Sens. 1 (H317), Eye Irrit. 2  
(H319)

Herstellung/Import in EU: 1000-10000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Luftsprays, Biozide, Parfums und Duftstoffe, Polituren und Wachse, Wasch- und Reinigungsmittel sowie Kosmetika und Körperpflegeprodukte.

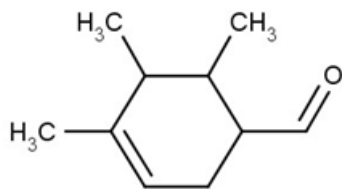
Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: In keiner der Arbeiten wurde Hydroxycitronellal im Zu- oder Ablauf von Kläranlagen in Spanien, Mexiko oder Griechenland nachgewiesen (Godayol et al. 2015, Becerril et al. 2010, Becerril-Bravo et al. 2010, Martinez et al. 2013, Maidatsi et al. 2015, Martinez et al. 2015). Die LOD lagen zwischen 0,0029 und 1,7 µg/L.

Oberflächenwasser: In Fließgewässern (Llobregat, Spanien) und Seen (Pamvotis, Griechenland) war Hydroxycitronellal nicht nachweisbar (Martinez et al. 2013, Maidatsi et al. 2015). Die LOD lagen bei 0,1 bzw. 0,0029 µg/L.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.21 Isocyclocitral



EC Nr.: 215-638-7

CAS Nr.: 1335-66-6

Summenformel: C<sub>10</sub>H<sub>16</sub>O

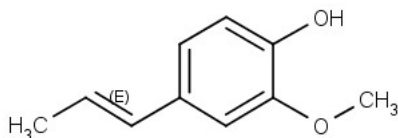
2,4,6- trimethyl-3-cyclohexene-1-carboxaldehyde

Notifizierte Einstufung: Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1B (H317), Aquatic Chronic 3 (H412)

Keine Angaben zu Herstellung/Import und Einsatzbereichen.

Zu Isocyclocitral wurden keinerlei Monitoringdaten in Umweltmedien gefunden. Lediglich die verwandte Verbindung beta-Cyclocitral (2,6,6-trimethyl-1-cyclohexene-1-carboxaldehyde, CAS 432-25-7) wurde vereinzelt in Oberflächengewässern nachgewiesen. Jiang et al. (2016) bestimmten im Lake Chaohu Maximalwerte von 0,077 µg/L und Huang et al. (2018) im See Taihu (beide in China) Maximalwerte von 3,2 µg/L beta-Cyclocitral, die mit dem Auftreten von Blaualgenblüten (Microcystis, Anabaena) bzw. mit deren Abbau nach der Blüte erklärt wurden.

### 3.1.22 Isoeugenol



EC Nr.: 202-590-7

CAS Nr.: 97-54-1

Summenformel: C<sub>10</sub>H<sub>12</sub>O<sub>2</sub>

2-Methoxy-4-(1-propenyl)phenol

Notifizierte Einstufung: Acute Tox. 4 (H30),

Acute Tox. 4 (H312), Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1 (H317), Eye Irrit. 2 (H319)

Keine Angaben zu Herstellung/Import und Einsatzbereichen.

#### Monitoringdaten:

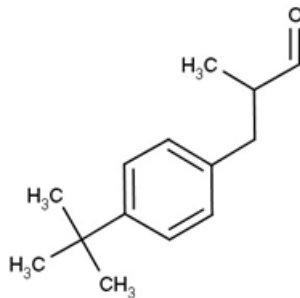
Kommunale Kläranlagen: Im Rahmen eines schwedischen Monitoringprogramms wurden die Zu- und Ablaufkonzentrationen in 10 schwedischen Kläranlagen bestimmt. Die Zulaufkonzentrationen lagen zwischen 0,005 und 0,42 µg/L, die Ablaufkonzentrationen lagen bei < 0,001 bis maximal 0,002 µg/L (Remberger et al. 2004). In derselben Arbeit wurde Isoeugenol auch in Klärschlammproben bestimmt. Die Konzentrationen lagen überwiegend unter der jeweiligen Bestimmungsgrenze, in einer Probe wurden 0,01 µg/g Trockengewicht bestimmt.

In zwei weiteren spanischen Kläranlagen wurden Zulaufkonzentrationen von maximal 0,74 bzw. ein Mittelwert von 0,96 µg/L bestimmt (Becerril et al. 2010, Martinez et al. 2015). Im Ablauf war Isoeugenol in der ersten Anlage nicht nachweisbar, in der zweiten Anlage wurden im Mittel 0,48 µg/L gefunden.

Oberflächenwasser: In Fließgewässern (Llobregat, Spanien) und Seen (Pamvotis, Griechenland) war Isoeugenol nicht nachweisbar (Martinez et al. 2013, Maidatsi et al. 2015). Die LOD lagen bei 0,1 bzw. 0,0032 µg/L. In 24 schwedischen Gewässersedimenten bestimmten Remberger et al. (2004) maximale Konzentrationen von 16 µg/kg Trockengewicht. In 14 Proben lagen die Konzentrationen unter der (variablen) Bestimmungsgrenze.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

#### 3.1.23 Lialal



EC Nr.: 201-289-8

CAS Nr.: 80-54-6

Summenformel: C<sub>14</sub>H<sub>20</sub>O

2-(4-tert-butylbenzyl)propionaldehyde

3-(4-tert-butylphenyl)butanal

Notifizierte Einstufung: Acute Tox. 4 (H302), Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1 (H317), Repr. 2 (H361), Aquatic Chronic 2 (H411)

Herstellung/Import in EU: 1000-10000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Luftsprays, Biozide, Polituren und Wachse, Wasch- und Reinigungsmittel, Parfums und Duftstoffe, Kosmetika und Körperpflegeprodukte, Beschichtungsprodukte, Füllstoffe, Spachtelmassen, Putze, Modellierton, Fingerfarben und Tinten und Toner.

#### Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Im Zulauf kommunaler Kläranlagen aus Deutschland, Europa, Mexiko und den USA wurde Lialal regelmäßig nachgewiesen. Die mittleren Konzentrationen lagen im Bereich von 0,03 bis 2,56 µg/L (Klaschka et al. 2012, Simonich et al. 2000, 2002, Becerril et al. 2010). Im Ablauf fanden sich Werte von < LOD (Becerril-Bravo et al. 2010), bis 0,38 µg/L (Klaschka et al. 2012). Demnach ermittelten Klaschka et al. (2012) für Lialal eine Eliminationsrate in einer Kläranlage an der Ammer von >99,9%. Simonich et al (2002) fanden für Lialal (hier als p-t-bucinal bezeichnet) in 5 Kläranlagen mit dem Belebtschlammverfahren aus den USA und Europa

mittlere Eliminationsraten von 96,12%. Zlamalova Gargosova et al. (2013) bestimmten die Zu- und Ablaufkonzentration von Lialal in einer tschechischen Kläranlage und fanden mittlere Werte von 0,049 g/L bzw. 0,047 µg/L (Elimination 90,4%).

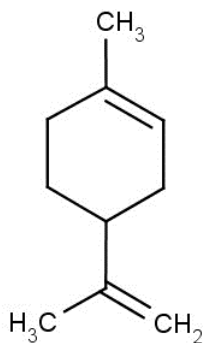
Oberflächenwasser: In bayerischen Fließgewässern (Ammer, Loisach, Isar) unterhalb von Kläranlagen wurden Konzentrationen < 0,01 µg/L bestimmt (Klaschka et al. 2012).

Grundwasser: Stuart et al (2011) untersuchten Lialal in verschiedenen Grundwasserproben im Vereinigten Königreich und fanden maximale Konzentrationen von 0,07 µg/L.

Meerwasser: Keil et al. (2011) fanden Lialal in Wasserproben des Puget Sound, USA in Konzentrationen von 0,008 µg/L und im Barkley Sound, Canada in Konzentrationen von 0,001 µg/L.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.24 D,L-Limonene



EC Nr.: 205-341-0

CAS Nr.: 138-86-3

Summenformel: C<sub>10</sub>H<sub>16</sub>

Dipentene; (+/-)-Limonene

Harmonisierte Einstufung: Flam. Liq. 3 (H226), Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1 (H317), Aquatic Acute 1 (H400), Aquatic Chronic 1 (H410)

Keine Angaben zu Herstellung/Import.

Die Substanz wird zur industriellen Verwendung hergestellt und / oder importiert (Verwendung von Zwischenprodukten).

Verbraucherprodukte: Der ECHA liegen keine öffentlichen Daten darüber vor, ob und in welchen chemischen Produkten der Stoff verwendet wird.

Monitoringdaten:

Oberflächenwasser: Im Neckar bei Heilbronn wurden in einer Einzelprobe 0,014 µg/L Limonen (Jüttner 1999) nachgewiesen. Schwarzbauer (2006) fand in 3 Sickerwasserproben von Mülldeponien < LOD bis 60 µg/L Limonene.

Meerwasser: Sauer (1981) wiesen im Golf von Mexiko bis zu 0,04 µg/L D/L-Limonen nach.

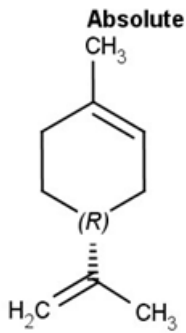
D/L-Limonen wurde als geruchsaktive Substanz auch in der Abluft der Forschungskläranlage der Universität Stuttgart in Höhe von 0,1146 µg/L Luft nachgewiesen (Zarra et al. 2008).

In der Arbeit von Bianchi and Varney (1998) wurde die saisonale Abhängigkeit der Limonene – Konzentrationen im Estuarwasser von Southampton, UK untersucht (Brackwasser). Als (natürliche) Quelle des im Frühjahr und Sommer beobachteten Anstiegs auf bis zu 1 µg/L wurde die Phytoplanktonblüte, insbesondere des photosynthetisch aktive Ciliats *Mesodinium rubrum* identifiziert.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.



### 3.1.25 D-Limonene



EC Nr.: 227-813-5

CAS Nr.: 5989-27-5, 68606-81-5

Summenformel: C<sub>10</sub>H<sub>16</sub>

(R)-p-mentha-1,8-diene

(+)-Limonene; d-limonene

Harmonisierte Einstufung: Flam. Liq. 3 (H226), Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1 (H317), Aquatic Acute 1 (H400), Aquatic Chronic 1 (H410)

Herstellung/Import in EU: 1000-10000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Wasch- und Reinigungsmittel, Luftpflegeprodukte, Biozide (z. B. Desinfektionsmittel, Schädlingsbekämpfungsmittel) und Poliermittel und Wachse.

Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: D-Limonen wurde im Zulauf kommunaler Kläranlagen in Spanien, Mexiko und den USA nachgewiesen (Escalas et al. 2003, Becerril et al. 2010, Forster et al. 2012). Die Konzentrationen lagen zwischen 0,23 (Einzelwert) bis 4 µg/L (Mittelwert). Im Ablauf wurden zwischen 0,078 bis 0,2 µg/L bestimmt (Martinez et al. 2013, Escalas et al. 2003, Becerril et al. 2010, Maidatsi et al. 2015, Forster et al. 2012), wobei die Substanz in weiteren Arbeiten mit einem relativ hohen LOD > 0,3 µg/L nicht nachgewiesen wurde (Godayol et al. 2015, Glassmeyer et al. 2005). In Klärschlämmen von 9 Kläranlagen aus den USA wurde 630 µg/kg nachgewiesen (Kinney et al. 2006). D-Limonen wurde als geruchsaktive Substanz auch in der Abluft der Forschungskläranlage der Universität Stuttgart in Höhe von 0,023 µg/L Luft nachgewiesen (Zarra et al. 2008).

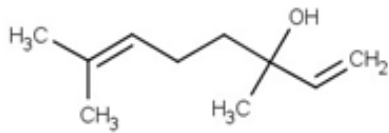
Oberflächenwasser: In Oberflächenwasser von Flüssen und Seen lagen die D-Limonen-Konzentrationen zwischen < LOD (Lee & Rasmussen 2006, Focazio et al. 2008, Stackelberg et al. 2004, Potter et al. 2005, Maidatsi et al. 2015) und maximal 0,28 µg/L (Baldwin et al. 2016).

Süßwassersedimente: Battaglin et al. (2018) wiesen D-Limonen in Fließgewässersedimenten des Rocky Mountain National Park in Höhe von geschätzten 169 µg/kg nach.

Meerwasser: Keil et al. (2011) fanden D-Limonen in Wasserproben des Puget Sound, USA in Konzentrationen von 0,019 µg/L während die Substanz im Barkley Sound, Canada nicht nachweisbar war.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.26 Linalool



EC Nr.: 201-134-4

CAS Nr.: 78-70-6

Summenformel: C<sub>10</sub>H<sub>18</sub>O

(3S)-3,7-dimethylocta-1,6-dien-3-ol

Harmonised classification Skin Sens. 1B (H317)

Notifizierte Einstufung: Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1B (H317), Eye Irrit. 2 (H319)

Herstellung/Import in EU: 1000-10000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Biozide, Polituren und Wachse, Wasch- und Reinigungsmittel, Luftsprays, Kosmetika und Körperpflegeprodukte, Parfums und Duftstoffe, Frostschutzmittel, Tinten und Toner, Beschichtungsprodukte und Füllstoffe, Spachtelmassen, Putze und Modellierton.

Monitoringdaten:

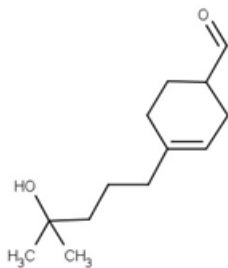
Kommunale Kläranlagen: Escalas et al (2003) bestimmten Linalool in Kläranlagen in Spanien und fanden mittleren Konzentrationen von 9,2 µg/L im Zulauf und 0,31 µg/L im Ablauf. Dem entspricht eine mittlere Eliminationsrate von 96,6%. Zlamalova Gargosova et al. (2013) bestimmten die Zu- und Ablaufkonzentration von Linalool in einer tschechischen Kläranlage und fanden mittlere Werte von 55,72 µg/L bzw. 0,046 µg/L (Elimination 99,9%).

Diese Daten werden durch weitere Arbeiten bestätigt, in denen Linalool im Ablauf von Kläranlagen in Konzentrationen von < LOD bis 0,251 nachgewiesen wurde (Godayol et al. 2015, Becerril et al. 2010, Becerril-Bravo et al. 2010, Hutchins et al. 1984, Maidatsi et al. 2015).

Oberflächenwasser: Maidatsi et al. (2015) wiesen Linalool in dem griechischen See Pamvotis in mittleren Konzentrationen von 0,22 µg/nach.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

### 3.1.27 Lylal



EC Nr.: 250-863-4

CAS Nr.: 31906-04-4

Summenformel: C<sub>13</sub>H<sub>22</sub>O<sub>2</sub>

4-(4-hydroxy-4-methylpentyl)cyclohex-3-enecarbaldehyde

Harmonisierte Einstufung: Skin Sens. 1A (H317)

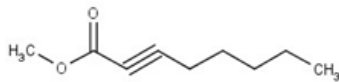
Keine Angaben zu Herstellung/Import und Einsatzbereichen.

#### Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: In keiner der vorhandenen Arbeiten wurde Lyril im Zu- oder Ablauf von Kläranlagen in Spanien oder Mexiko nachgewiesen (Godayol et al. 2015, Becerril et al. 2010, Becerril-Bravo et al. 2010). Der LOD lag im Bereich von 0,063 – 1,1 µg/l.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

#### 3.1.28 Methyl-2-Octynoate



EC Nr.: 203-836-6

CAS Nr.: 111-12-6

Summenformel: C<sub>9</sub>H<sub>14</sub>O<sub>2</sub>

Methyl oct-2-ynoate; Folione

Notifizierte Einstufung: Sens. 1A (H317), Aquatic Acute 1 (H400), Aquatic Chronic 3 (H412)

Herstellung/Import in EU: 1-10 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen und im industriellen Bereich verwendet (weit verbreitete Verwendung).

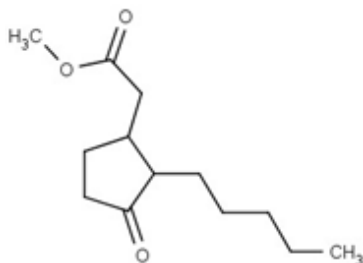
Verbraucherprodukte: Biozide (z. B. Desinfektionsmittel, Schädlingsbekämpfungsmittel), Wasch- und Reinigungsmittel, Luftpflegemittel, Polituren und Wachse, Parfums und Duftstoffe, Kosmetika und Körperpflegeprodukte, Verwendung in Innenräumen und im Freien als Verarbeitungshilfsstoff.

#### Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: In keiner der vorhandenen Arbeiten wurde Methyl-2-Octynoate im Zu- oder Ablauf von Kläranlagen in Spanien oder Mexiko nachgewiesen (Becerril et al. 2010, Becerril-Bravo et al. 2010). Der LOD lag bei 0,13 bzw. 0,055 µg/L.

Für andere Umweltkompartimente liegen keine Daten vor.

#### 3.1.29 Methyl-dihydrojasmonat



EC Nr.: 246-495-9

CAS Nr.: 24851-98-7

Summenformel: C<sub>13</sub>H<sub>22</sub>O<sub>3</sub>

methyl (3-oxo-2-pentylcyclopentyl)acetate

methyl 2-(3-oxo-2-pentylcyclopentyl)acetate

Notifizierte Einstufung: Not classified.

Herstellung/Import in EU: 1000-10000 t/a

Die Substanz wird von Verbrauchern, im beruflichen Bereich, in der Industrie und in der Produktion verwendet (weit verbreitete Verwendung).

Verbraucherprodukte: Parfums und Duftstoffe, Biozide, Wasch- und Reinigungsmittel, Luftsprays, Polituren und Wachse, Kosmetika und Körperpflegeprodukte, Beschichtungsprodukte, Füllstoffe,

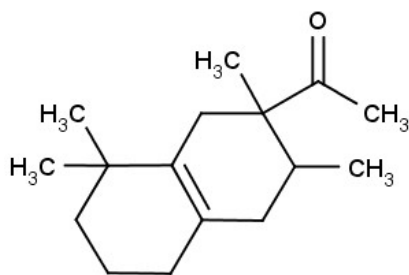
Spachtelmassen, Putze, Modellierton, Fingerfarben, Kraftstoffe, Tinten und Toner und Lederbehandlungsprodukte.

Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: Im Zulauf kommunaler Kläranlagen in den USA und Europa wurden mittlere Konzentrationen von 1 – 21 µg/L bestimmt (Simonich et al. 2000, Klaschka et al. 2012, Hijosa-Valsero et al. 2011). Im Ablauf der Kläranlagen wurden <0,006 – 1,23 µg/L bestimmt. Arrubla et al. (2016) bestimmten im Zulauf einer kolumbianische Kläranlage 15,7 µg/L und im Ablauf 9,1 µg/L. Klaschka et al. (2012) ermittelten für Methyl-dihydrojasmonat eine Eliminationsrate in einer Kläranlage an der Ammer von >99,9%. Simonich et al (2002) fanden für Methyl-dihydrojasmonat in 5 Kläranlagen mit dem Belebtschlammverfahren aus den USA und Europa mittlere Eliminationsraten von 98,2%.

Oberflächenwasser: In Fließgewässern wurden Konzentrationen von <0,01 – 0,75 µg/L ermittelt (Klaschka et al. 2012, Feher et al. 2016, Kameda et al. 2007, Navarro et al. 2011, Matamoros et al. 2010, 2012). Matamoros et al. (2012) bestimmten im Ablauf des dänischen Sees Brabrand eine mittlere Konzentration von 0,029 µg/L.

### 3.1.30 OTNE



EC Nr.: 259-174-3

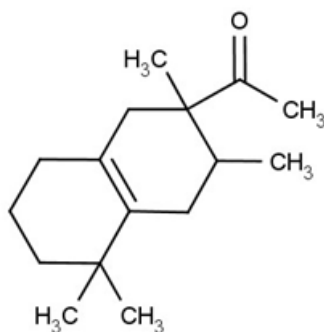
CAS Nr.: 54464-57-2

Summenformel: C<sub>16</sub>H<sub>26</sub>O

Tetramethyl Acetyloctahydronaphthalenes;

1-(1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-2,3,8,8-tetramethyl-2-naphthyl)ethan-1-one; Amberon;  
Octahydrotetramethylacetonaphthone

Notifizierte Einstufung: Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1 (H317), Aquatic Chronic 2 (H411)



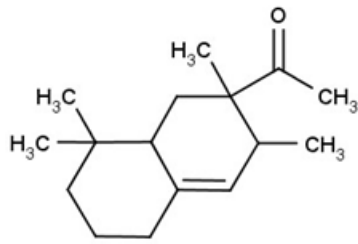
EC Nr.: 259-175-9

CAS Nr.: 54464-59-4

Summenformel: C<sub>16</sub>H<sub>26</sub>O

1-(1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-2,3,5,5-tetramethyl-2-naphthyl)ethan-1-one

Notifizierte Einstufung: Skin Irrit. 2 (H315), Skin Sens. 1 (H317), Aquatic Chronic 2 (H411)

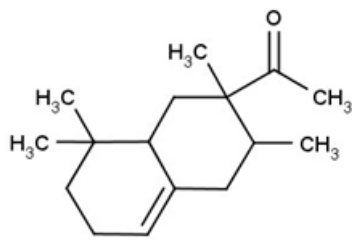


EC Nr.: 268-978-3

CAS Nr.: 68155-66-8

Summenformel: C<sub>16</sub>H<sub>26</sub>O

1-(1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-2,3,8,8-tetramethyl-2-naphthyl)ethan-1-one



EC Nr.: 268-979-9

CAS Nr.: 68155-67-9

Summenformel: C<sub>16</sub>H<sub>26</sub>O

1-(1,2,3,4,6,7,8,8a-octahydro-2,3,8,8-tetramethyl-2-naphthyl)ethan-1-one

#### Monitoringdaten:

Kommunale Kläranlagen: OTNE lässt sich im Zu- und Ablauf kommunaler Kläranlagen regelmäßig nachweisen. Im Zulauf wurden Konzentrationen von 1,27 bis 21,5 µg/L bestimmt, im Ablauf 0,028 bis 3,2 µg/ (Klaschka et al. 2012, Simonich et al. 2002, Terzic et al. 2008, Diaz-Garduno et al. 2017, McDonough et al. 2017, Mitjans and Ventura 2004). Klaschka et al. (2012) ermittelten für OTNE eine Eliminationsrate in einer Kläranlage an der Ammer von 82,9%. Simonich et al (2002) fanden für OTNE in 5 Kläranlagen mit dem Belebtschlammverfahren aus den USA und Europa mittlere Eliminationsraten von 91,7%.

Im Klärschlamm der Kläranlage Georgetown, USA wurden 0,007 µg/kg Trockengewicht bestimmt (Difrancesco et al. 2004), in Schlämmen von 44 schwedischen Kläranlagen hingegen ein Median von 9,5 µg/kg Trockengewicht (Österas et al. 2012).

Oberflächenwasser: In Fließgewässern in Deutschland, Frankreich, Ungarn, Schweden und Spanien wurden üblicherweise Konzentrationen < LOD bis maximal 0,81 µg/L bestimmt (Bester et al. 2008, Danube data base, Klaschka et al. 2012, Corada-Fernandez et al. 2017, Mitjans and Ventura 2004, Österas et al. 2012). Eine Ausnahme wird von Corada-Fernandez et al. (2017) beschrieben, die bei einem Starkregenereignis am Fluss Guadalete, Spanien bis 6,54 µg/L OTNE nachwiesen.

Grundwasser: Corada-Fernandez et al. (2017) bestimmten OTNE in 29 Grundwasserproben in Südspanien und fanden Konzentrationen < LOD bis maximal 1,285 µg/L.

Marine Sedimente: Pintado-Herrera et al. (2016) fanden in küstennahen mit urbanen bzw. industriellen Abwassereinleitungen beeinflussten Sedimenten Südspaniens 0,003 – 0,56 µg/kg Trockensubstanz OTNE. Die gleichen Autoren bestimmten in der Bucht von Cadix und dem Huelva Estuar deutlich höhere Werte von 22,1 bzw. 6,1 µg/kg Trockensubstanz (Pintado-Herrera et al. 2017).

### 3.2 Bewertung der Monitoringdaten

Insgesamt wurden zu den ausgewählten 30 Duftstoffen über 600 Einzelwerte aus über 90 Arbeiten zusammengetragen und dokumentiert. Lediglich zu zwei Duftstoffen (alpha-Butylcinnamaldehyde und Isocyclocitral) wurden keine Monitoringdaten gefunden.

Der Duftstoff alpha-Butylcinnamaldehyde (CAS 7492-44-6) wurde unter REACH nur vorregistriert, ein Substanzdossier ist daher nicht verfügbar. Die Verbindung wurde aufgrund der vermuteten allergisierenden Wirkung in die ECHA-Liste von Stoffen aufgenommen, die voraussichtlich die Kriterien von Anhang III der REACH-Verordnung (vorregistrierte Stoffe, die vermutlich in eine der Gefahrenklassen in den Bereichen „Gesundheitsgefahren“ oder „Umweltgefahren“ fallen) erfüllen. Gleiches trifft auch für Isocyclocitral (CAS 1335-66-6) zu, das zudem aufgrund von QSAR Abschätzung als möglicherweise karzinogen und reproduktionstoxisch gilt (<https://echa.europa.eu/de/information-on-chemicals>, Zugriffsdatum 7.9.18).

Der Duftstoff Isocyclocitral wird zwar in einer Stellungnahme der Europäischen Behörde für Lebensmittelsicherheit (EFSA) zu Duftstoffen hinsichtlich seines allergenen Potentials berücksichtigt (EFSA 2011), weitere relevante Daten liegen jedoch nicht vor.

Insgesamt scheinen die ausgewählten Duftstoffe noch nicht in den Fokus von Monitoringprogrammen gerückt zu sein. Ein Großteil der Duftstoffe ist natürlichen Ursprungs, so dass auch Einträge aus Pflanzen, Bakterien oder Algen erwartet werden können. Eine Ausnahme ist der synthetische Duftstoff OTNE, der oftmals im Zusammenhang mit synthetischen Moschusverbindungen mituntersucht wurde und von dem schon länger bekannt ist, dass er in Oberflächengewässern nachweisbar ist.

Viele der ausgewählten Arbeiten thematisieren den Eintrag von Duftstoffen zudem eher über die Verwendung von Körperpflegeprodukten (personal care products), während der Eintrag über Wasch- und Reinigungsmittel kaum Beachtung findet. Allerdings lässt sich dies in den Mischproben aus Kläranlagen oder aus Oberflächengewässern nicht sicher zuordnen.

Eine Übersicht über die recherchierten Daten mit den minimalen und maximalen Konzentrationsbereichen ist in Tabelle 2 dargestellt (siehe Legende unten).

**Tabelle 2: Zusammenfassung der Monitoringdaten mit Angaben zu Minimum und Maximum Konzentrationen in verschiedenen ARA und Umweltmedien.**

Name	ARA	ARA	Gewässer	Grundwasser	Sediment limnisch	Meerwasser	Sediment marin
	Zulauf	Ablauf					
	MIN	MIN	MIN	MIN	MIN	MIN	MIN
	MAX	MAX	MAX	MAX	MAX	MAX	MAX
alpha-Butylcinnamaldehyde	Keine Daten						
Alpha-Isomethyl Ionone	++ ++++	++ +++	< LOD ++		++		
Amyl Cinnamal	< LOD	<LOD					
Amylcinnamyl Alcohol	< LOD	<LOD					

Name	ARA Zulauf MIN MAX	ARA Ablauf MIN MAX	Gewässer MIN MAX	Grund- wasser MIN MAX	Sediment limnisch MIN MAX	Meer- wasser MIN MAX	Sediment marin MIN MAX
Anise Alcohol	< LOD	<LOD					
Benzyl Alcohol	< LOD ++++	<LOD ++	< LOD ++++				
Benzyl Benzoate	< LOD ++++	< LOD	< LOD		< LOD		
Benzyl Cinnamate	< LOD	< LOD	< LOD				
Benzyl Salicylate	< LOD +++	< LOD +++	< LOD +++		< LOD	+ ++++	
beta-Ionone	++ +++	< LOD +	+ ++++		++ +++		
Cinnamal	< LOD	< LOD				+	
Cinnamyl Alcohol	++++	< LOD ++++	< LOD				
Citral	< LOD +++	< LOD +++	< LOD ++				
Citronellol	< LOD ++++	< LOD					
Coumarin	< LOD	< LOD	< LOD ++				
Eugenol	< LOD +++	< LOD +++	< LOD +				
Farnesol	< LOD ++++	< LOD					
Geraniol	< LOD ++++	< LOD	< LOD				
Hexyl Cinnamal	++++ +++++	+ +++	< LOD				
Hydroxycitronellal	< LOD	< LOD	< LOD				
Isocyclocitral	Keine Daten						
Isoeugenol	+ +++	< LOD +++	< LOD		< LOD +++++		
Lialal	++ ++++	< LOD +++	++	++		+	

Name	ARA Zulauf MIN MAX	ARA Ablauf MIN MAX	Gewässer MIN MAX	Grund- wasser MIN MAX	Sediment limnisch MIN MAX	Meer- wasser MIN MAX	Sediment marin MIN MAX
Limonene / D,L- Limonene			< LOD ++			++ ++++	
D-Limonene	+++ ++++	++ +++	< LOD +++		< LOD ++++	< LOD ++	
Linalool	++++ +++++	< LOD +++	+++				
Lylal	< LOD	< LOD					
Methyl-2-Octynoate	< LOD	< LOD					
Methyl- dihydrojasmonat	++++	< LOD +++	< LOD +++				
OTNE	++++ +++++	++ ++++	< LOD +++	< LOD ++++			+ +++++

Konzentrationsbereiche (in µg/L bzw. µg/kg):

+	< 0,01
++	0,01 - < 0,1
+++	0,1 - < 1
++++	1 - < 10
+++++	> 10

Obwohl im Rahmen der Studie keine systematische Auswertung von Daten zur biologischen Abbaubarkeit der Duftstoffe durchgeführt wurde, weisen einige Veröffentlichungen auf eine gute Abbaubarkeit vieler Duftstoffe der Auswahlliste hin. So werden für Geraniol, Citral, Citronellol Abbauwerte von 80-100% und für Linalool von 60-70% in OECD 301 Tests angegeben (Wilsch-Irrgang 2017). In den REACH-Registrierungsdossiers finden sich Abbaudaten zu mehreren der Duftstoffe. Demnach gelten z.B. Anise Alcohol, Benzyl Alcohol, Cinnamyl Alcohol, Benzyl Benzoate, Farnesol und Linalool als leicht biologisch abbaubar (<https://echa.europa.eu/de/information-on-chemicals>, Zugriffsdatum 3.6.18).

Die gute Abbaubarkeit wird durch die meist gute Elimination der Duftstoffe bestätigt. Eine Ausnahme ist der Duftstoff OTNE, für das eine Elimination von lediglich 83-92 % belegt ist. Für den Duftstoff Linalool sind die höchsten Einträge in Kläranlagen belegt, die trotz der insgesamt guten Elimination von über 97% zu Einträgen in Oberflächengewässern führen könnten. Die Datenlage für Oberflächengewässer lässt aber keine Rückschlüsse zu. Auch alpha-Isomethyl Ionone, Benzyl Alcohol, Benzyl Salicylate, Cinnamyl Alcohol, Citral, Eugenol, Hexyl Cinnamal, Isoeugenol, Lialal, D-Limonen und Methyl-dihydrojasmonate lassen sich in Kläranlagenabläufen nachweisen. Zumindest einige der untersuchten Duftstoffe sind jedoch den sogenannten pseudo-persistenten Stoffen zuzurechnen, die trotz relativ guter Abbaubarkeit aufgrund des hohen kontinuierlichen Eintrags in Oberflächengewässern nachgewiesen werden (Ahting et al. 2018).



### **3.3 Analysemethoden**

Die in der überwiegenden Anzahl der Arbeiten verwendete Analysenmethode ist GC-MS, was darauf hinweist, dass die Substanzen eine gewisse Flüchtigkeit und oftmals keine chromophore Gruppe (UV, VIS) aufweisen. Wässrige Proben wurden meist mit verschiedenen Festphasenextraktionsverfahren (SPE, SPME) angereichert, in älteren Arbeiten wurde hierfür auch Flüssigextraktionsverfahren verwendet. Feststoffproben (Sedimente, Klärschlamm) wurden in der Regel mittels Flüssigextraktion eluiert. Neben den ausgewerteten Arbeiten zum Umweltvorkommen der ausgewählten Duftstoffe existieren zahlreiche weitere Methoden zum Nachweis allergener Duftstoffe in Produkten oder pflanzlichen Materialien, die jedoch einen anderen Konzentrationsbereich abdecken und ohne Anreicherungsverfahren auskommen.

## 4 Diskussion und Ausblick

Insgesamt sind in der Fachliteratur zu Duftstoffen in der Umwelt überwiegend Einträge zu Moschusverbindungen zu finden. In einer Untersuchung des Österreichischen Umweltbundesamtes zum Vorkommen organischer Stoffe in Donausedimenten und Schwebstoffen wurden folgende Moschusverbindungen berücksichtigt (Scharf et al. 2004): Moschus-Xylol, Moschus-Keton, Moschus-Tibeten, Moschus-Ambrette, Moschus-Mosken, Galaxolid (HHCB), Tonalid (AHTN), Celestolid (ADBI), Phantolid (AHMI), Traseolid (ATII), Cashmeran (DPMI). Für alle diese Stoffe finden sich Einträge in der ECHA-Chemikaliendatenbank, einige unterliegen jedoch strikten Verwendungsbeschränkungen. Es wäre zu prüfen, welche Moschusverbindungen noch auf dem Markt sind und ob die Datenlage zu Monitoringergebnissen tatsächlich für alle diese Verbindungen gut ist.

Die recherchierten Monitoringdaten zu den ausgewählten Duftstoffen beziehen sich überwiegend auf Zu- und Abläufe von Kläranlagen, die 69% aller Einträge ausmachen. Rund 21% der Einträge beziehen sich auf Monitoringdaten von Oberflächengewässern (Flüsse, Seen), die restlichen 10% auf Monitoringdaten zu Sedimenten, Grundwasser, Meerwasser, Regenwasser u.a. In einigen Arbeiten ist die Aussage zum Umweltvorkommen durch relativ hohe LOD im µg/L-Bereich deutlich eingeschränkt.

Es sei darauf hingewiesen, dass zwei Duftstoffe (Eugenol und Geraniol) auch als Pflanzenschutzmittel zugelassen sind. Für zwei weitere (Citronellol und Cinnamaldehyde) wurde der Antrag abgelehnt.<sup>12</sup> Für Citronella Oil, ein Substanzgemisch mit den Hauptkomponenten Citronellal, Geraniol, Citronellol und Geranyl Acetate, liegt ein "Safety report" der European Food Safety Authority (EFSA) vor, in dem darauf hingewiesen wird, dass Eugenol und Isoeugenol als Verunreinigungen enthalten sind (EFSA 2012). Es werden allerdings keine Monitoringdaten berichtet. Drei Duftstoffe (Benzyl Alcohol, Cinnamal und Geraniol) sind zugleich anerkannte biozide Wirkstoffe.<sup>13</sup>

Von Seiten der Ländervertreter wurde die Anfrage dahingehend kommentiert, dass es sich bei den ausgewählten Duftstoffen um deklarationspflichtige und potentiell allergene Aromen in Kosmetika und Lebensmitteln handelt, die fast alle auch natürlicherweise vorkämen. Daher sollte noch geprüft werden, ob neben den bekannten Moschusverbindungen weitere synthetische Duftstoffe auf dem Markt sind.

Während der Recherche wurden Hinweise auf zahlreiche Duftstoffe gefunden, die in der Auswahlliste nicht enthalten waren. Neben den Moschusverbindungen sind hier folgende Duftstoffe zu nennen, deren Vorkommen in Umweltmedien bei künftigen Recherchen berücksichtigt werden sollten:

- ▶ Acetyl Cedrene (CAS 32388-55-9)
- ▶ Benzene, 1,1'-(3,3-dimethyl-1-butenylidene)bis 1,1,3-Trimethyl-3-phenylindan (PTML, CAS 910-35-8).
- ▶ Butyl Acetate (CAS 123-86-4)
- ▶ 4-tert-Butylcyclohexanol (CAS 98-52-2)

---

<sup>12</sup> <http://ec.europa.eu/food/plant/pesticides/eu-pesticides-database/public/>

<sup>13</sup> <https://echa.europa.eu/de/information-on-chemicals/biocidal-active-substances>

- ▶ 4-tert. Butylcyclohexanone (CAS 98-53-3)
- ▶ Camphor (CAS 76-22-2, CAS 464-49-3, CAS 464-48-2)
- ▶ 1,8-Cineol (CAS 470-82-6)
- ▶ beta-Cyclocitral (CAS 432-25-7)
- ▶ Dihydroactinidiolide (DHI, CAS 17092-92-1)
- ▶ Isophorone (CAS 78-59-1)
- ▶ Menthol (CAS 2216-51-5, CAS 89-78-1, CAS 15356-60-2, CAS 1490-04-6)
- ▶ 5-Methylheptan-3-one (CAS 541-85-5)
- ▶ alpha-Terpineol (CAS 7785-53-7 und CAS 10482-56-1)
- ▶ 4-Terpineol (CAS 562-74-3)

Es wird vorgeschlagen, die verfügbaren Daten zur Abbaubarkeit und Ökotoxizität der ausgewählten Duftstoffe systematisch zu recherchieren und zu dokumentieren. Zudem sollten chemisch-physikalische Parameter (log Pow, Wasserlöslichkeit, Dampfdruck bzw. Henry Koeffizient) gesammelt werden. Hieraus lässt sich der Verbleib in Kläranlagen und damit der Eintrag in Oberflächengewässer abschätzen (z.B. über das Simple Treat Modell). Ein Vergleich dieser Daten mit den Monitoringergebnissen würde Rückschlüsse über Eintragsmengen und Verhalten der Duftstoffe in der Umwelt ermöglichen.

Hauptergebnis der Literaturstudie ist, dass die Duftstoffe OTNE, alpha-Isomethyl Ionone, Benzyl Alcohol, Benzyl Salicylate, Cinnamyl Alcohol, Citral, Eugenol, Hexyl Cinnamal, Isoeugenol, Lialal, D-Limonen und Methyl-dihydrojasmonate in Kläranlagenabläufen nachgewiesen werden. Es wird daher empfohlen diese in künftigen Monitoringprogrammen zu berücksichtigen.

## Quellenverzeichnis

**Hinweis: Das Quellenverzeichnis enthält auch die Referenzen, die nur in der zugehörigen Excel-Tabelle, aber nicht im Abschlussbericht zitiert sind.**

Adams, T. B., Cohen, S. M., Doull, J., Feron, V., Goodman, J. I., Marnett, L. J., Munro, I. C., Portoghese, P. S., Smith R. L., Waddell, W.J., Wagner, B. M. (2004). The FEMA GRAS assessment of cinnamyl derivatives used as flavor ingredients. *Food Chem Toxicol.* 42(2), p. 157-185

Ahting, M., Brauer, F., Duffek, A., Ebert, I., Eckhardt, A., Hassold, E., Helmecke, M., Kirst, I., Krause, B., Lepom, P., Leuthold, S., Mathan, C., Mohaupt, V., Moltmann, J.-F., Müller, A., Nöh, I., Pickl, C., Pirntke, U., Pohl, K., Rechenberg, J., Suhr, M., Thierbach, C., Tietjen, L., Von der Ohe, P., Winde, C. (2018). Empfehlungen zur Reduzierung von Mikroverunreinigungen in den Gewässern. Umweltbundesamt April 2018  
[https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/1410/publikationen/uba\\_pos\\_mikroverunreinigung\\_final\\_bf.pdf](https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/1410/publikationen/uba_pos_mikroverunreinigung_final_bf.pdf)

Allinson, M., Myers, J., & Pettigrove, V. (2014). Use of novel rapid assessment tools for efficient monitoring of micropollutants in urban storm water (SWF Project 80S – 8100) Final Report Graeme Allinson, (January).

Alvarez, F. R., Shaul, G. M., Krishnan, E. R., Perrin, D. L., Rahman, M. (1999): Fate of Terpene Compounds in Activated Sludge Wastewater Treatment Systems. *Air Waste Manag Assoc.* 49(6), p. 734-739

Anderson, P., Jack, R., Burke, C. (2004). Surface Water Monitoring Program for Pesticides in Salmonid-Bearing Streams, April to December, 2003.

Arrubla Vélez, J. P., Cubillos Vargas, J. A., Ramirez Vargas, C. A., Arredondo Gonzalez, J. A., Arias Isaza, C. A., & Paredes Cuervo, D. (2016). Pharmaceutical and personal care products in domestic wastewater and their removal in anaerobic treatment systems: Septic tank – up flow anaerobic filter. *Ingeniería e Investigación*, 36(1), 70–78. <https://doi.org/10.15446/ing.investig.v36n1.53076>

Bai, X., Zhang, T., Wang, C., Zong, D., Li, H., & Yang, Z. (2016). Occurrence and distribution of taste and odor compounds in subtropical water supply reservoirs and their fates in water treatment plants. *Environmental Science and Pollution Research*, 24(3), 2904–2913. <https://doi.org/10.1007/s11356-016-7966-5>

Baldwin, A. K., Corsi, S. R., De Cicco, L. A., Lenaker, P. L., Lutz, M. A., Sullivan, D. J., & Richards, K. D. (2016). Organic contaminants in Great Lakes tributaries: Prevalence and potential aquatic toxicity. *Science of the Total Environment*, 554–555, 42–52. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.02.137>

Bao, M. L., Barbieri, K., Burrini, D., Griffini, O., & Pantani, F. (1997). Determination of trace levels of taste and odor compounds in water by microextraction and gas chromatography-ion-trap detection-mass spectrometry. *Water Research*, 31(7), 1719–1727. [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(96\)00338-7](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(96)00338-7)

Baranowska, I., & Wojciechowska, I. (2013). The determination of preservatives in cosmetics and environmental waters by HPLC. *Polish Journal of Environmental Studies*, 22(6), 1609–1625.

Battaglin, W. A., Bradley, P. M., Iwanowicz, L., Journey, C. A., Walsh, H. L., & Blazer, V. S. (2018). Pharmaceuticals, hormones, pesticides, and other bioactive contaminants in water, sediment, and tissue from Rocky Mountain National Park, 2012–2013. *Science of the Total Environment*, 643, 651–673.  
<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.06.150>

Becerril, E., Lamas, J. P., Sanchez-Prado, L., Llompart, M., Lores, M., & Garcia-Jares, C. (2010). Analysis of regulated suspected allergens in waters. *Talanta*, 83(2), 464–474.  
<https://doi.org/10.1016/j.talanta.2010.09.038>

Becerril-Bravo, E., Pablo Lamas, J., Sanchez-Prado, L., Lores, M., Garcia-Jares, C., Jimenez, B., & Llompart, M. (2010). Ultrasound-assisted emulsification-microextraction of fragrance allergens in water. *Chemosphere*, 81(11), 1378–1385. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2010.09.028>

- Bester, K., Hüffmeyer, N., Schaub, E., & Klasmeier, J. (2008). Surface water concentrations of the fragrance compound OTNE in Germany - A comparison between data from measurements and models. *Chemosphere*, 73(8), 1366–1372. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2008.06.057>
- Bester, K., Klasmeier, J., & Kupper, T. (2008). Emissions of OTNE (Iso-E-super) - Mass flows in sewage treatment plants. *Chemosphere*, 71(11), 2003–2010. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2008.02.004>
- Bester, K., & Schäfer, D. (2009). Activated soil filters (bio filters) for the elimination of xenobiotics (micro-pollutants) from storm- and waste waters. *Water Research*, 43(10), 2639–2646. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2009.03.026>
- Bianchi, A. P., Varney, M. S. (1998): Volatile organic compounds in the surface waters of a British estuary. Part 1. Occurrence, distribution and variation. *Wat. Res.* 32(2), p. 352-370
- Bruchet, A., Prompsy, C., Filippi, G., & Souali, A. (2002). A broad spectrum analytical scheme for the screening of endocrine disruptors (EDs), pharmaceuticals and personal care products in wastewaters and natural waters. *Water Science and Technology*, 46(3), 97–104. <https://doi.org/10.1016/j.proenv.2017.03.099>
- Bu, Q., Wang, D., Liu, X., & Wang, Z. (2014). A high throughout semi-quantification method for screening organic contaminants in river sediments. *Journal of Environmental Management*, 143, 135–139. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2014.05.009>
- Chen, X., & Bester, K. (2009). Determination of organic micro-pollutants such as personal care products, plasticizers and flame retardants in sludge. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 395(6), 1877–1884. <https://doi.org/10.1007/s00216-009-3138-5>
- Corada-Fernández, C., Candela, L., Torres-Fuentes, N., Pintado-Herrera, M. G., Paniw, M., & González-Mazo, E. (2017). Effects of extreme rainfall events on the distribution of selected emerging contaminants in surface and groundwater: The Guadalete River basin (SW, Spain). *Science of the Total Environment*, 605–606, 770–783. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.06.049>
- Deng, X., Liang, G., Chen, J., Qi, M., & Xie, P. (2011). Simultaneous determination of eight common odors in natural water body using automatic purge and trap coupled to gas chromatography with mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*, 1218(24), 3791–3798. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2011.04.041>
- Díaz-Garduño, B., Pintado-Herrera, M. G., Biel-Maeso, M., Rueda-Márquez, J. J., Lara-Martín, P. A., Perales, J. A., ... Martín-Díaz, M. L. (2017). Environmental risk assessment of effluents as a whole emerging contaminant: Efficiency of alternative tertiary treatments for wastewater depuration. *Water Research*, 119, 136–149. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2017.04.021>
- Difrancesco, A. M., Chiu, P. C., Standley, L. J., Allen, H. E., & Salvito, D. T. (2004). Dissipation of Fragrance Materials in Sludge-Amended Soils. *Environmental Science and Technology*, 38(1), 194–201. <https://doi.org/10.1021/es034618v>
- Ding, Z., Peng, S., Xia, W., Zheng, H., Chen, X., & Yin, L. (2014). Analysis of five earthy-musty odorants in environmental water by HS-SPME/GC-MS. *International Journal of Analytical Chemistry*, 2014. <https://doi.org/10.1155/2014/697260>
- Duong, H. T., Kadokami, K., Chau, H. T. C., Nguyen, T. Q., Nguyen, T. T., & Kong, L. (2015). Groundwater screening for 940 organic micro-pollutants in Hanoi and Ho Chi Minh City, Vietnam. *Environmental Science and Pollution Research*, 22(24), 19835–19847. <https://doi.org/10.1007/s11356-015-5180-5>
- EFSA (2011) Opinion on fragrance allergens in cosmetic products. Scientific Committee on Consumer Safety (SCCS). Pre-consultation opinion at 13th plenary meeting of 13-14.12 .2011 [https://ec.europa.eu/health/scientific\\_committees/consumer\\_safety/docs/sccs\\_o\\_073.pdf](https://ec.europa.eu/health/scientific_committees/consumer_safety/docs/sccs_o_073.pdf)

EFSA (2012): Conclusion on the peer review of the pesticide risk assessment of the active substance plant oils/citronella oil. European Food Safety Authority, EFSA Journal 2012; 10(2):2518 <https://efsa.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.2903/j.efsa.2012.2518>

Ekpeghere, K. I., Kim, U. J., O, S. H., Kim, H. Y., & Oh, J. E. (2016). Distribution and seasonal occurrence of UV filters in rivers and wastewater treatment plants in Korea. *Science of the Total Environment*, 542, 121–128. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.10.033>

Escalas, A., Guadayol, J. M., Cortina, M., Rivera, J., & Caixach, J. (2003). Time and space patterns of volatile organic compounds in a sewage treatment plant. *Water Research*, 37(16), 3913–3920. [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(03\)00336-1](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(03)00336-1)

Feher, I.-C., Moldovan, Z., & Oprean, I. (2016). Spatial and seasonal variation of organic pollutants in surface water using multivariate statistical techniques. *Water Science and Technology*, 74(7), 1726–1735. <https://doi.org/10.2166/wst.2016.351>

Focazio, M. J., Kolpin, D. W., Barnes, K. K., Furlong, E. T., Meyer, M. T., Zaugg, S. D., ... Thurman, M. E. (2008). A national reconnaissance for pharmaceuticals and other organic wastewater contaminants in the United States - II) Untreated drinking water sources. *Science of the Total Environment*, 402(2–3), 201–216. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2008.02.021>

Foster, A. L., Katz, B. G., & Meyer, M. . (2012). Occurrence and Potential Transport of Selected Pharmaceuticals and Other Organic Wastewater Compounds from Wastewater-Treatment Plant Influent and Effluent to Groundwater and Canal Systems in Miami-Dade County, Florida. Scientific Investigations Report. U.S. Geological Survey.

Glassmeyer, S. T., Furlong, E. T., Kolpin, D. W., Cahill, J. D., Zaugg, S. D., Werner, S. L., ... Kryak, D. D. (2005). Transport of Chemical and Microbial Compounds from Known Wastewater Discharges: Potential for Use as Indicators of Human Fecal Contamination. *Environmental Science and Technology*. <https://doi.org/10.1021/es048120k>

Godayol, A., Besalú, E., Anticó, E., & Sanchez, J. M. (2015). Monitoring of sixteen fragrance allergens and two polycyclic musks in wastewater treatment plants by solid phase microextraction coupled to gas chromatography. *Chemosphere*, 119, 363–370. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2014.06.072>

Groß, R., Leisewitz, A., Moch, K. (2012). Untersuchung der Einsatzmengen von schwer abbaubaren organischen Inhaltsstoffen in Wasch- und Reinigungsmitteln im Vergleich zum Einsatz dieser Stoffe in anderen Branchen im Hinblick auf den Nutzen einer Substitution. Abschlussbericht FKZ 3709 65 430 im Auftrag des Umweltbundesamtes

Haggard, B. E., Galloway, J. M., Green, W. R., & Meyer, M. T. (2006). Pharmaceuticals and other organic chemicals in selected north-central and northwestern Arkansas streams. *Journal of Environmental Quality*, 35(4), 1078–1087. <https://doi.org/10.2134/jeq2005.0248>

Harrison, E. Z., Oakes, S. R., Hysell, M., & Hay, A. (2006). Organic chemicals in sewage sludges. *Science of the Total Environment*, 367(2–3), 481–497. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2006.04.002>

Hernández Leal, L., Vieno, N., Temmink, H., Zeeman, G., & Buisman, C. J. N. (2010). Occurrence of xenobiotics in gray water and removal in three biological treatment systems. *Environmental Science and Technology*, 44(17), 6835–6842. <https://doi.org/10.1021/es101509e>

Hijosa-Valsero, M., Matamoros, V., Sidrach-Cardona, R., Pedescoll, A., Martín-Villacorta, J., García, J., ... Bécares, E. (2011). Influence of design, physico-chemical and environmental parameters on pharmaceuticals and fragrances removal by constructed wetlands. *Water Science and Technology*, 63(11), 2527–2534. <https://doi.org/10.2166/wst.2011.500>

- Homem, V., Silva, J. A., Ratola, N., Santos, L., & Alves, A. (2015). Long lasting perfume e A review of synthetic musks in WWTPs. *Journal of Environmental Management*, 149(1), 168–192. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2014.10.008>
- Huang, H., Xu, X., Liu, X., Han, R., Liu, J., & Wang, G. (2018). Distributions of four taste and odor compounds in the sediment and overlying water at different ecology environment in Taihu Lake. *Scientific Reports*, 8(1), 2–11. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-24564-z>
- Hutchins S.R., Tomson M. B., Wilson J. T., Ward, C. H. (1984). Fate of trace organics during rapid infiltration of primary wastewater at Fort Devens, Massachusetts. *Water Research*, 18(8), 1025–1036.
- ICPDR. (2003). Joint Danube Survey 3: Overview Map. <https://doi.org/10.1596/0-8213-4681-4>
- Jiang, Y., Cheng, B., Liu, M., & Nie, Y. (2015). Spatial and Temporal Variations of Taste and Odor Compounds in Surface Water, Overlying Water and Sediment of the Western Lake Chaohu, China. *Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology*, 96(2), 186–191. <https://doi.org/10.1007/s00128-015-1698-y>
- Jones, G. J., Korth, W. (1995). In situ production of volatile odour compounds by river and reservoir phytoplankton populations in Australia. *Water Science and Technology* 31(11), p. 145-151
- Johnson, J. (2012). 2011 Groundwater and Surface Water Monitoring Project : Baseline Monitoring to Address Oil and Gas Development in South Park, (September).
- Jüttner, F. (1999). Efficacy of bank filtration for the removal of fragrance compounds and aromatic hydrocarbons. *Water Science and Technology*, 40(6), 123–128. [https://doi.org/10.1016/S0273-1223\(99\)00547-8](https://doi.org/10.1016/S0273-1223(99)00547-8)
- Kameda, Y; Tamada, M; Kanai, Y; Masunaga, S. (2007). Occurrence of Organic UV Filters in Surface Waters , Sediments , and Core Sediments in Tokyo Bay-Organic UV Filters are New POPs? *Organohalogen Compounds*, 69, 263–266.
- Kameda, Y., Kimura, K., & Miyazaki, M. (2011). Occurrence and profiles of organic sun-blocking agents in surface waters and sediments in Japanese rivers and lakes. *Environmental Pollution*, 159(6), 1570–1576. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2011.02.055>
- Keil, R., Saleme, K., Forrest, B., Neibauer, J., & Logsdon, M. (2011). Differential presence of anthropogenic compounds dissolved in the marine waters of Puget Sound, WA and Barkley Sound, BC. *Marine Pollution Bulletin*, 62(11), 2563–2567. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2011.08.029>
- Kingsbury, J. A., Delzer, G. C., & Hopple, J. A. (2008). Anthropogenic Organic Compounds in Source Water of Nine Community Water Systems that Withdraw from Streams, 2002-05. Scientific Investigations Report. U.S. Geological Survey, 68.
- Kinney, C. A., Furlong, E. T., Zaugg, S. D., Burkhardt, M. R., Werner, S. L., Cahill, J. D., & Jorgensen, G. R. (2006). Survey of organic wastewater contaminants in biosolids destined for land application. *Environmental Science and Technology*, 40(23), 7207–7215. <https://doi.org/10.1021/es0603406>
- Klaschka, U., von der Ohe, P. C., Bschorer, A., Krezmer, S., Sengl, M., & Letzel, M. (2012). Occurrences and potential risks of 16 fragrances in five German sewage treatment plants and their receiving waters. *Environmental Science and Pollution Research*, 20(4), 2456–2471. <https://doi.org/10.1007/s11356-012-1120-9>
- Kong, L., Kadokami, K., Duong, H. T., & Chau, H. T. C. (2016). Screening of 1300 organic micro-pollutants in groundwater from Beijing and Tianjin, North China. *Chemosphere*, 165, 221–230. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2016.08.084>
- Lebedev, A. T., Polyakova, O. V., Mazur, D. M., Artaev, V. B., Canet, I., Lallement, A., ... Delort, A. M. (2018). Detection of semi-volatile compounds in cloud waters by GCxGC-TOF-MS. Evidence of phenols and phthalates as priority pollutants. *Environmental Pollution*, 241, 616–625. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2018.05.089>

- Lee, C. J., & Rasmussen, T. J. (2006). Occurrence of organic wastewater compounds in effluent-dominated streams in Northeastern Kansas. *Science of the Total Environment*, 371(1–3), 258–269. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2006.07.023>
- Maidatsi, K. V., Chatzimitakos, T. G., Sakkas, V. A., & Stalikas, C. D. (2015). Octyl-modified magnetic graphene as a sorbent for the extraction and simultaneous determination of fragrance allergens, musks, and phthalates in aqueous samples by gas chromatography with mass spectrometry. *Journal of Separation Science*, 38(21), 3758–3765. <https://doi.org/10.1002/jssc.201500578>
- Martínez, C., Gómez, V., Dubert, D., Majamaa, K., Pocurull, E., & Borrull, F. (2015). Study of reverse osmosis treatment for micropollutants rejection in advanced water reuse applications. *Desalination and Water Treatment*, 55(10), 2690–2699. <https://doi.org/10.1080/19443994.2014.940208>
- Martínez, C., Ramírez, N., Gómez, V., Pocurull, E., & Borrull, F. (2013). Simultaneous determination of 76 micropollutants in water samples by headspace solid phase microextraction and gas chromatography-mass spectrometry. *Talanta*, 116(2013), 937–945. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2013.07.055>
- Matamoros, V., Arias, C. A., Nguyen, L. X., Salvadó, V., & Brix, H. (2012). Occurrence and behavior of emerging contaminants in surface water and a restored wetland. *Chemosphere*, 88(9), 1083–1089. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2012.04.048>
- Matamoros, V., Arias, C., Brix, H., & Bayona, J. M. (2009). Preliminary screening of small-scale domestic wastewater treatment systems for removal of pharmaceutical and personal care products. *Water Research*, 43(1), 55–62. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2008.10.005>
- Matamoros, V., Jover, E., & Bayona, J. M. (2010). Part-per-Trillion Determination of Pharmaceuticals, Pesticides, and Related Organic Contaminants in River Water by Solid-Phase Extraction Followed by Comprehensive Two-Dimensional Gas Chromatography Time-of-Flight Mass Spectrometry. *Anal. Chem.*, 82(2), 699–706. <https://doi.org/10.1021/ac902340e>
- McDonough, K., Casteel, K., Zoller, A., Wehmeyer, K., Hulzebos, E., Rila, J. P., Federle, T. (2017). Probabilistic determination of the ecological risk from OTNE in aquatic and terrestrial compartments based on US-wide monitoring data. *Chemosphere*, 167, 255–261. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2016.10.006>
- Mitjans, D., & Ventura, F. (2004). Determination of musks and other fragrance compounds at ng/L levels using CLSA (closed loop stripping analysis) and GC/MS detection. *Water Science and Technology*, 50(5), 119–123.
- Navarro, A. E., Hernández, M. E., Bayona, J. M., Morales, L., & Ruiz, P. (2011). Removal of selected organic pollutants and coliforms in pilot constructed wetlands in southeastern Mexico. *International Journal of Environmental Analytical Chemistry*, 91(7–8), 680–692. <https://doi.org/10.1080/03067319.2010.547578>
- Negreira, N., Rodríguez, I., Rubí, E., & Cela, R. (2010). Dispersive liquid-liquid microextraction followed by gas chromatography-mass spectrometry for the rapid and sensitive determination of UV filters in environmental water samples. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 398(2), 995–1004. <https://doi.org/10.1007/s00216-010-4009-9>
- Oppenheimer, J., Stephenson, R., Burbano, A., & Liu, L. (2007). Characterizing the Passage of Personal Care Products Through Wastewater Treatment Processes. *Water Environment Research*, 79(13), 2564–2577. <https://doi.org/10.2175/106143007X184573>
- Österås A. H., Sternbeck J., Woldegiorgis, A. (2012). Screening of the fragrances OTNE , acetyl cedrene and diphenylether Screening of the fragrances OTNE , acetyl cedrene and diphenylether.
- Paxéus, N., & Schröder, H. F. (1996). Screening for non-regulated organic compounds in municipal wastewater in Göteborg, Sweden. *Water Science and Technology*, 33(6), 9–15. [https://doi.org/10.1016/0273-1223\(96\)00300-9](https://doi.org/10.1016/0273-1223(96)00300-9)



- Peter, A., Köster, O., Schildknecht, A., & von Gunten, U. (2009). Occurrence of dissolved and particle-bound taste and odor compounds in Swiss lake waters. *Water Research*, 43(8), 2191–2200. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2009.02.016>
- Pintado-Herrera, M. G., Combi, T., Corada-Fernández, C., González-Mazo, E., & Lara-Martín, P. A. (2012). Occurrence and spatial distribution of legacy and emerging organic pollutants in marine sediments from the Atlantic coast (Andalusia, SW Spain). *Nanoscale*, 4(16), 5043. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.06.055>
- Pintado-Herrera, M. G., González-Mazo, E., & Lara-Martín, P. A. (2016). In-cell clean-up pressurized liquid extraction and gas chromatography-tandem mass spectrometry determination of hydrophobic persistent and emerging organic pollutants in coastal sediments. *Journal of Chromatography A*. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2015.12.040>
- Potter, A., Andersson, J., Sjöblom, A., Junedahl, E., Cousins, A. P., Brorström-lundén, E., & Cato, I. (2005). Results from the Swedish National Screening Programme. *Screening*, (September).
- Puig Infante A., Cebrian Guajardo N., Sarasa Alonso J., Martinez Navascues M. C., Ormad Melero M. P., Mutuberria Cortabitarte M. S., O. N. J. L. (1993). GC/MS analysis of organic water pollutants isolated by XAD-2 resins and activated carbon in the Gallego River, Spain. *Water Research*, 27(7), 1167–1176.
- Remberger, M., Kaj, L., Palm, A., Sternbeck, J., & Brorström-lundén, E. K. E. (2004). Screening tertiary butylphenols, methylphenols, and long-chain alkylphenols in the Swedish environment. *IVL Report*, 1–96. Retrieved from <http://www.ivl.se/download/18.7df4c4e812d2da6a416800071799/B1594.pdf>
- Ricking, M., Schwarzbauer, J., & Franke, S. (2003). Molecular markers of anthropogenic activity in sediments of the Havel and Spree Rivers (Germany). *Water Research*, 37(11), 2607–2617. [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(03\)00078-2](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(03)00078-2)
- Roots, O., Nommsalu, H., & Viisimaa, M. (2011). Report hazardous substances screening results in the aquatic environment of Estonia.
- Salvito, D. T., Senna, R. J., Federle, T.W. (2002): A framework for prioritizing fragrance materials for aquatic risk assessment. *Environ Toxicol Chem.* 21(6), p. 301-8.
- Sauer, T. C. (1981). Volatile organic compounds in open ocean and coastal surface waters. *Organic Geochemistry*, 3(3), 91–101. [https://doi.org/10.1016/0146-6380\(81\)90003-6](https://doi.org/10.1016/0146-6380(81)90003-6)
- Scharf, S., Loos, S., Uhl, M., Kreuzinger, N. (2004): Untersuchung von Donausedimenten und Schwebstoffen auf ausgewählte organische Stoffe. *Berichte BE-249*, Wien <http://www.umweltbundesamt.at/fileadmin/site/publikationen/BE249.pdf>
- Schwarzbauer, J. (2006). *Organic Contaminants in Riverine and Groundwater Systems - Aspects of the Anthropogenic Contribution*.
- Simonich, S. L., Begley, W. M., Debaere, G., & Eckhoff, W. S. (2000). Trace analysis of fragrance materials in wastewater and treated wastewater. *Environmental Science and Technology*, 34(6), 959–965. <https://doi.org/10.1021/es991018g>
- Simonich, S. L., Federle, T. W., Eckhoff, W. S., Rottiers, A., Webb, S., Sabaliunas, D., & De Wolf, W. (2002). Removal of fragrance materials during U.S. and European wastewater treatment. *Environmental Science and Technology*, 36(13), 2839–2847. <https://doi.org/10.1021/es025503e>
- Song, C., Liu, X., Song, Y., Liu, R., Gao, H., Han, L., & Peng, J. (2017). Key blackening and stinking pollutants in Dongsha River of Beijing: Spatial distribution and source identification. *Journal of Environmental Management*, 200(April 2015), 335–346. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2017.05.088>
- Stackelberg Paul E., Furlong Edward T., Meyer Michael T., Zaugg Steven D., Henderson Alden K., Reissman, D. B. (2004). Persistence of pharmaceutical compounds and other organic wastewater contaminants in a

conventional drinking-watertreatment\ nplant. *Science of the Total Environment*, 329, 99–113.

<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2004.03.015>

Stuart, M. E., Manamsa, K., Talbot, J. C., & Crane, E. J. (2011). Emerging contaminants in groundwater. *British Geological Survey Open Report, OR/11/013(May)*, 111. <https://doi.org/10.1089/109287503768335887>

Terzić, S., Senta, I., Ahel, M., Gros, M., Petrović, M., Barcelo, D., ... Jabučar, D. (2008). Occurrence and fate of emerging wastewater contaminants in Western Balkan Region. *Science of the Total Environment*.

<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2008.03.003>

Van Stee, L. L. P., Leonards, P. E. G., Van Loon, W. M. G. M., Jan Hendriks, A., Maas, J. L., Struijs, J., & Brinkman, U. A. T. (2002). Use of semi-permeable membrane devices and solid-phase extraction for the wide-range screening of microcontaminants in surface water by GC-AED/MS. *Water Research*, 36(18), 4455–4470.

[https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(02\)00177-X](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(02)00177-X)

van Wezel, Annemarie; van den Hurk, Floris; Sjerps, Rosa; Meijers, Erwin; Roex, E. (2018). Impact of industrial waste water treatment plants on Dutch surface waters and drinking water sources, (January), 2018.

<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.05.325>

Vecchiato, M., Cremonese, S., Gregoris, E., Barbaro, E., Gambaro, A., & Barbante, C. (2016). Fragrances as new contaminants in the Venice lagoon. *Science of the Total Environment*, 566–567, 1362–1367.

<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.05.198>

Vecchiato, M., Gregoris, E., Barbaro, E., Barbante, C., Piazza, R., & Gambaro, A. (2017). Fragrances in the seawater of Terra Nova Bay, Antarctica. *Science of the Total Environment*, 593–594, 375–379.

<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.03.197>

Vecchiato, M., Turetta, C., Patti, B., Barbante, C., Piazza, R., Bonato, T., & Gambaro, A. (2018). Distribution of fragrances and PAHs in the surface seawater of the Sicily Channel, Central Mediterranean. *Science of the Total Environment*, 634, 983–989. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.04.080>

Vila, M., Pablo Lamas, J., Garcia-Jares, C., Dagnac, T., & Llompart, M. (2016). Ultrasound-assisted emulsification microextraction followed by gas chromatography-mass spectrometry and gas chromatography-tandem mass spectrometry for the analysis of UV filters in water. *Microchemical Journal*, 124, 530–539.

<https://doi.org/10.1016/j.microc.2015.09.023>

Wang, J., Tian, Z., Huo, Y., Yang, M., Zheng, X., & Zhang, Y. (2018). Monitoring of 943 organic micropollutants in wastewater from municipal wastewater treatment plants with secondary and advanced treatment processes. *Journal of Environmental Sciences (China)*, 67, 309–317. <https://doi.org/10.1016/j.jes.2017.09.014>

Wilsch-Irrgang, A. (2017): How about the biodegradability of fragrances in laundry detergents, cleaners and household care products? Vortrag auf dem 64th SEPAWA Congress & 13th European Detergents Conference 18-20 October 2017, Estrel Congress Center, Berlin, Germany

Wluka, A.-K., Coenen, L., & Schwarzbauer, J. (2017). Screening of organic pollutants in urban wastewater treatment plants and corresponding receiving waters. *Water Science and Technology*, 76(4), 832–846.

<https://doi.org/10.2166/wst.2017.265>

Zarra, T., Naddeo, V., Belgiorno, V., Reiser, M., & Kranert, M. (2008). Odour monitoring of small wastewater treatment plant located in sensitive environment. *Water Science and Technology*, 58(1), 89–94.

<https://doi.org/10.2166/wst.2008.330>

Zlámálová Gargošová, H., Čáslavský, J., & Vávřova, M. (2013). Selected Pharmaceuticals and Musk Compounds in Wastewater. *Waste Water - Treatment Technologies and Recent Analytical Developments*, 196. Retrieved from <http://www.intechopen.com/download/get/type/pdfs/id/39078>