



Förderkennzeichen 360 010 59

Sachverständigengutachten

**Verfeinerung und Validierung des Screenings nach
trinkwasserrelevanten Chemikalien im Geltungsbe-
reich der REACH-Verordnung**

im Auftrag des Umweltbundesamtes

Christian Skark

Birgit Kuhlmann

Ninette Zullei-Seibert

Schwerte

November 2011

Zusammenfassung

Ziel des Gutachtens war es, das in der vorangegangenen Studie (KUHLMANN et. al. 2010) entwickelte Screeningmodell zur Bewertung des Rohwassergängigkeitspotentials von Chemikalien weiter zu entwickeln und an einem neuen Testdatensatz zu überprüfen.

Hierzu wurden zunächst Alternativen zu den im Screeningmodell als Bewertungskriterien eingesetzten intrinsischen Stoffeigenschaften überprüft. An ausgewählten Stoffen wurde untersucht, ob die Einbeziehung weiterer Abbaudaten aus anderen Umweltkompartimenten zu einer besseren Einschätzung der Persistenz führen. Ebenfalls an einem Beispieldatensatz wurde geprüft, ob der K_{OC} -Wert zur Charakterisierung der Sorbierbarkeit besser geeignet ist als der bisher verwendete $\log K_{OW}$. Im Weiteren wurde untersucht, ob eine andere Form der Indizierung der Stoffeigenschaften sinnvoll ist. Zum einen wurde, aufbauend auf dem bisherigen Indizierungssystem, die Klassenbildung verändert und verfeinert, zum anderen aber auch ein ganz anderes Klassierungs- und Verknüpfungsmodell aufgegriffen (SCHLEYER UND RAFFIUS 2000), das auf normierten Werten für die Parameter Wasserlöslichkeit, $\log K_{OW}$ und DT_{50} basiert. Beide Modelle wurden auf den Lerndatensatz des 1. Gutachtens angewendet und die Ergebnisse miteinander verglichen. Gegenüber dem einfachen System des 1. Gutachtens wies das verfeinerte Screeningmodell eine größere Differenzierungsmöglichkeit auf. Mit dem normierten Indizierungssystem wurde jedoch aus der großen Zahl von Stoffen, die bereits im Trinkwasser nachgewiesen wurden, nur eine geringe Zahl als relevant eingeschätzt. Dieses Modell mit den normierten Parametern wurde daher nicht weiter berücksichtigt.

Als wesentlicher Schritt zur Optimierung des Screeningmodells wurden die Kriterien Verbrauchs- bzw. Produktionsmengen sowie die Art der Verwendung einbezogen. Die Menge wurde abgestuft mit Indexzahlen von 1 bis 4 belegt. Die Art der Verwendung wurde entsprechend modifizierter Umweltfreisetzungskategorien (ERC) eingestuft. Dies reicht von einer ausschließlichen Verwendung in geschlossenen Systemen, die mit einer Indexzahl von 0,1 belegt wurde, bis hin zur umweltoffenen Anwendung (Indexzahl 1).

Die Indexzahlen für die Anwendungsart und die -menge ergeben miteinander multipliziert das Verbreitungspotential.

Das Rohwassergängigkeitspotential wird anschließend durch eine multiplikative Verknüpfung der Indexsumme für die intrinsischen Stoffeigenschaften mit dem Verbreitungspotential ermittelt.

Gleichzeitig wurde ein Testdatensatz von ca. 380 Stoffen zusammengestellt. Diese Stoffe wurden im Rahmen von Monitoringprogrammen in Oberflächen-, Grund- und Trinkwasser untersucht. Etwaige Befunde wurden in den Datensatz aufgenommen. Für 342 dieser Stoffe konnten Daten zu den Stoffkriterien Wasserlöslichkeit, $\log K_{OW}$ und DT_{50} recherchiert werden. Daten zur Abbaubarkeit mussten zum Teil modelliert werden.

Mit diesem Datensatz wurden zunächst nur die stoffintrinsic Kriterien des verfeinerten Modells getestet. Substanzen, denen aufgrund ihrer Stoffeigenschaften ein hohes bis sehr hohes Potential für ein Auftreten in Roh- und Trinkwasser zugewiesen wurde, konnten im Vergleich zu den Verbindungen mit geringerem stoffintrinsic Rohwassergängigkeitspotential vermehrt in der aquatischen Umwelt nachgewiesen werden.

Für 69 Stoffe dieses Testdatensatzes ließen sich auch für die Kriterien Verbrauch und Anwendung Daten zusammenstellen. Entsprechend konnte das um das Verbreitungspotential erweiterte Screeningmodell nur auf diese Teilgruppe angewendet werden. Dabei wurden vor allem einige Pflanzenbehandlungs- und Schädlingsbekämpfungsmittel (PBSM) mit einem hohen bis sehr hohen Rohwassergängigkeitspotential identifiziert.

Eine abschließende Bewertung der Möglichkeiten des hier abgeleiteten Screeningmodells für die Identifizierung von potentiellen Roh- und Trinkwasserkontaminanten muss bislang jedoch unterbleiben, da insbesondere für Chemikalien, die derzeit unter REACH registriert werden, aktuelle Daten zu Anwendungsart und –menge nicht zugänglich sind.

Summary

The aim of the report was to redevelop the screening model for assessing the raw water transfer potential of chemicals (RGP) from a previous study (KUHLMANN et. al. 2010) and to validate it with a new test record.

In a first step alternative parameters as evaluation criteria in the screening model were examined concerning the intrinsic substance properties. Regarding degradation it was investigated at selected substances whether additional degradation data from other environmental compartments may give a better estimate for the persistence. A sample data set was examined whether the K_{OC} value is more suitable for the characterization of the sorption than the previously used $\log K_{OW}$. In both cases, the inclusion of these new parameters did not provide additional information about the potential of a substance for the transfer to the raw water.

In addition, another form of indicating the material properties was investigated. Building on the existing indexing system the classification intervals were changed. In a second exercise the mode of classification and the linking of the parameters were entirely changed according SCHLEYER and RAFFIUS (2000). This screening model is also based on standardized values for the parameters of water solubility, $\log K_{OW}$ and DT_{50} . Both models were applied on the learning data set of the first report and the results were compared with each other. In comparison to the simple indexing system of first report the more refined screening model showed more differentiated results. With the standardized indexing system, however, a large number of substances that were already detected in drinking water

can not be classified according to their proven relevance. Therefore this second model with the standardized parameters was not considered any further.

To enhance the possibilities of the screening model for indicating the proliferation potential criteria for production and consumption levels and the type of use were included. The consumption and production amount was covered with graded index numbers from 1 to 4. The type of use was classified according to the modified environmental release categories (ERC). This ranges from an exclusive use in closed systems, which was assigned an index value of 0,1, up to the open use (index number 1). The index numbers for the quantity and the applications multiplied together result in the proliferation potential.

The raw water transfer potential is then determined by a multiplicative combination of the index sum of the intrinsic properties of substances with the proliferation potential.

Simultaneously, a test data set was compiled for about 380 substances. These substances were examined as part of monitoring programs in surface water, groundwater and drinking water. Any findings were included in the record. For 342 of these substances data on the substance criteria solubility, $\log K_{OW}$ and DT_{50} were researched. Particularly data on the degradability had to be modeled to some extent.

With that test data set the intrinsic substance criteria of the refined model were tested. Substances that have been assigned a high to very high potential for the occurrence in raw and drinking water due to their intrinsic properties could increasingly be detected in the aquatic environment compared to the compounds with a lower raw water transfer potential based on the intrinsic properties.

For 69 substances in the test data set information about the use and application as well as the mode of environmental release could be compiled. Only for this sub set of compounds the expanded screening model under inclusion of the proliferation potential was applied. Mainly pesticides were identified with a high to very high raw water transfer potential.

A final assessment of the capabilities of the derived screening model for the identification of potential raw and drinking water contaminants can not be finalized, because especially for chemicals in industrial use that are currently registered under REACH, recent data on application type and quantity are not accessible.