



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

INHALTSVERZEICHNIS

Inhaltsverzeichnis	2
Abbildungsverzeichnis	4
Tabellenverzeichnis	4
Abkürzungsverzeichnis	5
Zusammenfassung	7
1 Einleitung	10
2 Verfeinerung der Indexkriterien zur Beschreibung der Persistenz und Mobilität	11
2.1 Indexkriterium Persistenz	11
2.1.1 Einbeziehung des Abbauverhaltens in unterschiedlichen Umweltkompartimenten	11
2.1.2 Bewertung der Persistenz auf der Grundlage von unter REACH geforderten Standardtest	13
2.1.3 Vorgehen bei der Bewertung der Daten zur Persistenz	14
2.2 Parameter zur Beschreibung der Mobilität	16
2.2.1 Wasserlöslichkeit und Log K_{ow} als Mobilitätskriterien	16
2.2.2 Bewertung der Mobilität von ionaren Verbindungen	18
2.2.3 Bewertung der Mobilität auf der Grundlage von unter REACH geforderten Standardtest	19
2.3 Berücksichtigung verschiedener Eintragspfade	19
3 Überarbeitung der Berechnung des Indexsystems	20
3.1 Verfeinerung des Indexsystems durch Veränderung der Klassengrenzen	20
3.1.1 Definition neuer Klassengrenzen	20
3.1.2 Anwendung auf nachgewiesene Spurenstoffe im Trinkwasser	22
3.2 Normierte Klassierung und eine weitere Verknüpfungsregel für Stoffeigenschaften	24
3.2.1 Ableitung einer normierten Klassierung und Verknüpfung der Indexzahlen	24
3.2.2 Anwendung auf nachgewiesene Spurenstoffe im Trinkwasser	26
3.3 Fazit zur Bewertung der Rohwasserrelevanz auf der Grundlage von Stoffeigenschaften	27
4 Ergänzung um weitere Kriterien	27
4.1 Kriterien Produktionsmengen und Verwendung	27
4.2 Verknüpfung des Kriteriums intrinsische Stoffeigenschaften mit dem Verbreitungspotentials	29

5	Überprüfung des verfeinerten Screeningmodells anhand einer Testgruppe von Substanzen	30
5.1	Zusammenstellung der Substanzen der Testgruppe	30
5.2	Überprüfung der verfeinerten Indizierungsregeln	31
5.2.1	Überprüfung anhand von Stoffkenndaten	31
5.2.2	Überprüfung unter Einbeziehung des Verbreitungspotentials	34
6	Ermittlung des Rohwassergängigkeitspotentials mit einem verfeinerten Screeningmodell	36
7	Zusammenfassende Diskussion	39
8	Literatur	41

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Sorptionsverhalten (pH-Wert abhängiger Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient $\log D_{OW}$) von Arzneimitteln bei verschiedenen pH-Werten (aus SCHEYTT et al. 2011)	18
Abbildung 2: Eintragspfade von Chemikalien ins Trinkwasser	20
Abbildung 3: Indexzahl als Funktion von Wasserlöslichkeit und Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient	21
Abbildung 4: Anzahl von Stoffen des Lerndatensatzes ($n = 151$) gruppiert nach der Indexsumme K gemäß der verfeinerten Klassengrenzen	23
Abbildung 5: Vergleich der Klassierungsergebnisse auf der Grundlage der einfachen und der verfeinerten Indizierung (Lerndatensatz, Stoffe $n = 151$)	23
Abbildung 6: Vergleich der Klassierungsergebnisse auf der Grundlage verschiedener Annahmen für die Indizierung (Stoffe $n = 151$)	26
Abbildung 7: Bewertung der Stoffe des Testdatensatzes aufgrund ihrer Eigenschaften nach der verfeinerten Indizierung ($n = 342$)	32
Abbildung 8: Stoffbewertung nach der verfeinerten Indizierung und Positivbefunde in Wasseruntersuchungen ($n = 342$)	33
Abbildung 9: Abschätzung des Rohwassergängigkeitspotentials unter Berücksichtigung des Verbreitungspotentials ($n = 69$)	35
Abbildung 10: Charakterisierung von Stoffen mit einem Kontaminationspotential für Rohwasser (¹ s. Abbildung 11, ² s. Abbildung 12)	37
Abbildung 11: Berücksichtigung einer möglichen Dissoziation	38
Abbildung 12: Hierarchisierung verschiedener Angaben zur Persistenz	38

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Ergänzende Daten zu Stoffen mit niedriger Indexzahl für das Abbauverhalten	12
Tabelle 2: Entsprechend der registrierten Produktions- / Importmenge erforderliche, für dieses Gutachten relevante Stoffkenndaten (ECHA 2008)	14
Tabelle 3: Extrapolation von Daten aus Ready- und Inherent-Biodegradability-Tests auf Simulationstests	15
Tabelle 4: Indizierung der Angaben zum $\log K_{OW}$ und zum K_{OC} in Klassen	17
Tabelle 5: Vergleich $\log K_{OW}$ und K_{OC} und der jeweiligen Indexklassen	17
Tabelle 6: Verfeinerte Indizierung von Stoffeigenschaften	21
Tabelle 7: Indizierung der Angaben zu Verbrauchsmengen	28
Tabelle 8: Kategorisierte Verwendungen, Umweltfreisetzungskategorien nach REACH und Indexzahlen	28

Abkürzungsverzeichnis

ARW	Arbeitsgemeinschaft der Rhein-Wasserwerke
AWWR	Arbeitsgemeinschaft der Wasserwerke an der Ruhr
BLV	Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit
CMR	cancerogen, mutagen, reproduktionstoxisch
DT ₅₀	biologische Halbwertszeit [d]
ECHA	European Chemicals Agency
ERC	Environmental Release Category, Umweltfreisetzungskategorie
HPV	High Production Volume
I	Indexzahlen
I _{DT50}	Indexzahl DT ₅₀
I _{Kow}	Indexzahl Octanol-Wasser-Verteilungskoeffizient
I _M	Indexzahl Menge
I _s	Indexzahl Löslichkeit
I _v	Indexzahl Verwendung
k.A.	keine Angabe
K	Summe der Indexzahlen für die Stoffeigenschaften
K _a	Dissoziationskonstante
K _d	Verteilungskoeffizient zwischen Boden/Sediment und Wasser [Volumen/Masse]
K _f	FREUNDLICH-Koeffizient
K _{OC}	Verteilungskoeffizient zwischen organischem Kohlenstoff im Boden/Sediment und Wasser [Volumen/Masse]
K _{OW}	n-Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient [-]
LCA	Lebenszyklusbewertung
LPV	Low Production Volume
M	Menge [t]
Max	Maximalwert
MW	arithmetischer Mittelwert
n. b.	nicht belegt
OECD	Organisation for Economic Co-Operation and Development
P	Persistenz
PBSM	Pflanzenbehandlungs- und Schädlingsbekämpfungsmittel
PBT	persistent, bioakkumulierend, toxisch



vPvB	sehr persistent, sehr biokkumulierend
REACH	Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung chemischer Stoffe
RGP	Rohwassergängigkeitspotential
S	Wasserlöslichkeit [Masse/Volumen]
SVHC	Substances of Very High Concern, Besonders Besorgniserregende Stoffe
TGD	Technical Guidance Documents
vP	sehr große Persistenz
V	Verbrauch
VP	Verwendungspotential

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.

1 Einleitung

In dem vorangegangenen, für das UBA erstellte Gutachten „Definition und Bewertung von trinkwasserrelevanten Chemikalien im Rahmen der REACH-Verordnung und Empfehlungen zum Screening nach potentiell kritischen Substanzen“ (Kuhlmann et. al. 2010, FKZ 363 01 241) ist ein Screeningmodell entwickelt worden, um aus der Vielzahl von unter REACH registrierungspflichtigen Substanzen die herauszufiltern, die potentiell Trinkwasserkontaminanten sind. In das Screeningmodell gehen als Parameter zur Beschreibung der Mobilität die Wasserlöslichkeit und der Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient in logarithmischer Form sowie als Maß für die Persistenz die biologische Halbwertszeit als DT_{50} ein. Die Angaben zu diesen drei Größen werden klassiert und mit Indexzahlen belegt, aus denen eine Indexsumme gebildet wird. Je höher die resultierende Zahl desto höher ist das Trinkwasserkontaminationspotential des Stoffes.

Das Screeningmodell wurde an einer Zusammenstellung von 151 Stoffen (Lerndatensatz) überprüft, die sowohl Angaben zu Positivbefunden im Trinkwasser aus der nationalen und internationalen Literatur als auch Daten zu den drei Screeningparametern umfassen. Das Screeningmodell erwies sich als treffsicher und konnte das Auftreten der Stoffe im Trinkwasser in den meisten Fällen plausibel abbilden. Anhand von einzelnen Stoffen, deren dokumentiertes Auftreten im Trinkwasser sich nicht aus den im Screeningmodell eingesetzten Stoffeigenschaften erklären ließ, wurde aber auch deutlich, dass eine weitere Verfeinerung des Screeningmodells erforderlich ist.

Erste Gedanken hierzu wurden bereits als Ausblick im vorangegangenen Gutachten formuliert. In einem UBA-Fachgespräch wurde sowohl das Screeningmodell selbst als auch dessen Weiterentwicklung mit Experten aus der Wasserversorgung und der Wasserforschung diskutiert. Unter Berücksichtigung der Ergebnisse wird in diesem Folgegutachten das bisherige Screeningmodell verfeinert. Um die Treffgenauigkeit zu erhöhen werden die bisher schon eingesetzten Stoffkriterien um weitere Kriterien ergänzt, die über die eigentlichen Stoffeigenschaften hinausgehen. Dies sind die Art der Anwendung und die Produktions- bzw. Verbrauchsmenge. Das verfeinerte Screeningmodell wird anhand einer neu erstellten Stoffliste (Testdatensatz) validiert. Einbezogen werden Stoffe, die mit Positivbefunden im Trinkwasser auftreten sowie Stoffe, die nicht im Trinkwasser, aber an anderer Stelle in der aquatischen Umwelt zu finden sind.

Eines der Ergebnisse der Diskussionen mit Wasserfachleuten war eine Veränderung des bisherigen Blickwinkels. Um den Schutz der Ressource Rohwasser einzubeziehen, wird in dem jetzt erstellten Gutachten bereits auf eine potentielle Belastung des Rohwassers, also auf die Rohwassergängigkeit, abgehoben und dem entsprechend der Terminus **Rohwassergängigkeitspotential (RGP)** verwendet. Damit wird auf mögliche Belastungen von Trinkwasser abgehoben, das mit naturnahen Verfahren aus Oberflächenwasser-Ressourcen über Uferfiltration und künstliche Grundwasseranreicherung gewonnen wird. Eine eventuelle Minderung einer Belastung durch technische Verfahren zur Trinkwasseraufbereitung (z.B. Aktivkohlefiltration, Ozonbehandlung) wird hingegen nicht betrachtet.

2 Verfeinerung der Indexkriterien zur Beschreibung der Persistenz und Mobilität

2.1 Indexkriterium Persistenz

2.1.1 Einbeziehung des Abbauverhaltens in unterschiedlichen Umweltkompartimenten

In dem bisherigen Screeningmodell wird als Maß für die Abbaubarkeit bzw. Persistenz eines Stoffes die DT_{50} eingesetzt. Hierbei werden Daten aus standardisierten Tests verwendet, die je nach Versuchsbedingungen das Abbauverhalten in unterschiedlichen Kompartimenten, also etwa Boden, Wasser/Sediment oder der Kläranlage widerspiegeln. Die in den betrachteten Kompartimenten vorherrschenden Randbedingungen können das Abbauverhalten stark verändern. Unterschiedliche Daten zur Persistenz sollen sinnvoll in die Stoffbewertung mit einbezogen werden. Auf die mögliche Veränderung von Abbauraten bei geringer Sauerstoffverfügbarkeit wurde bereits ansatzweise im 1. Gutachten eingegangen.

Um den Einfluss verschiedener Randbedingungen auf Aussagen zur Abbaubarkeit von Stoffen zu überprüfen, wurde für die Stoffe, die in dem bisherigen Klassierungssystem als gut abbaubar mit einer Indexzahl von 1 (= $DT_{50} < 10$ d) belegt wurden, weitere Informationen zum Abbauverhalten zusammengetragen.

Diese neuen Daten sind in Tabelle 1 zusammengestellt. Bezieht man die ergänzenden Daten ein, wird ein großer Teil der Stoffe mit einer anderen, in den meisten Fällen höheren Indexzahl bewertet (blau unterlegt).

Beim Vorliegen von mehreren Angaben zur Abbaubarkeit, die zu einer Einstufung in unterschiedliche Indexklassen führen kann, ist eine Wertung der Daten erforderlich. Das Vorgehen wird im Folgenden an Beispielen aus Tabelle 1 erläutert:

- Es werden jeweils die Daten berücksichtigt, die den bei der Trinkwassergewinnung vorliegenden Bedingungen am nächsten kommen: für Benzothiazol geben die Daten aus Tests mit Oberflächenwasser und das Verhalten in Testfiltern besser die Verhältnisse bei der naturnahen Trinkwasseraufbereitung wider als die aus dem OECD-Test, der das Verhalten in der Kläranlage widerspiegelt. Eine höhere Bewertung der Persistenz unterbleibt in diesem Fall.
- Liegen Hinweise dafür vor, dass in Boden, Sediment oder Grundwasser der Abbau im Vergleich zum Oberflächenwasser verlangsamt vor sich geht, wird dies in die Bewertung einbezogen. Dementsprechend sollte Glyphosat auf Grund der Daten zum Abbau in Sediment-Wasser-Systemen mit einer höheren Indexzahl für die Persistenz bewertet werden.
- Kommt es bei geringer Sauerstoffverfügbarkeit zum verzögerten Abbau, so wird dies ebenfalls berücksichtigt. Die Daten zum anaeroben Abbau von Vinylchlorid und 1,3-Dichlorbenzol führen entsprechend zu einer anderen Bewertung.

Tabelle 1: Ergänzende Daten zu Stoffen mit niedriger Indexzahl für das Abbauverhalten
blau unterlegte Stoffe: DT₅₀ ergibt höhere Indexzahl

Quellen:

1 US EPA 2011a, 2 FOOTPRINT 2011, 3 CHEMIDPLUS 2011, 4 Rippen 2010, 5 Water Research Foundation and DVGW-Technologiezentrum Wasser 2010, 6 US EPA 2011a, 7 Health Canada 2011, 8 Finland's environmental administration 2011, 9 IUCLID 2011, 10 INERIS 2011, 11 TOXNET 2011
GW – Grundwasser, OW – Oberflächenwasser

Stoff	I _{DT50}	DT ₅₀ d	Matrix	DT ₅₀ d	Matrix	DT ₅₀ d	Matrix	Quellen
Acetochlor	1	4,3	Boden	14	Boden	19,7	Wasser/Sediment	1,2,2
Acetophenon	1	<10	k.A.					3
Acetylsalicylsäure	1	<6	k.A.	<10	Kläranlage, aerob	<10	Kläranlage, anaerob	1,4,4
Benzothiazol	1	<10	OW, aerob	6	Testfilter	>100	OECD-Test, Kläranlage	3,5,6
Bisphenol A	1	<5	OW, aerob	>162	Sediment, anaerob	>100	OECD-Test, Kläranlage	4,4,4
Butylbenzylphthalat	1	<2	OW, aerob	<180	Sediment, anaerob	<10	OECD-Test, Kläranlage	7,1,4
Dichlorbenzol, 1,3-	1	<7	Wasser	>1000	GW, anoxisch	28	River-die-away-test	8,8,4
Dichlormethan	1	<1	OW	56	GW			8,8
Dimethylphthalat	1	<7	OW	<14	GW			9,9
Glyphosat	1	<10	Wasser	87	Wasser/Sediment			10,2
Molinat	1	3	Wasser	12,5	Boden	61	Wasser/Sediment	10,2,2
Phenazon	1	9	Kläranlage	>28	Testfilter			3,5
Propylbenzol, iso-	1	<8	GW	<10	Grundwasser	>100	Flusswasser	3,4,4
Styrol	1	<5	Wasser	<30	Boden	10	OECD-Test, Kläranlage	3,3,4
Toluol	1	<5	GW	<5	Boden			7,7
Tributylphosphat	1	<10	OW	10-100	OECD-Test, Kläranlage	>100	Flusswasser	3,4,11
Vinyl Chloride	1	<10	GW	>1000	GW, anaerob			3,4

Legt man diese Kriterien an die Stoffe in Tabelle 1 an, so ergibt sich für alle in der Spalte Stoff blau unterlegten Substanzen eine höhere Indexzahl.

Somit ergibt sich folgende Hierarchie von Abbaudaten unterschiedlicher Herkunft, die je nach Verfügbarkeit verwendet werden:

1. Boden
2. Sediment
3. Laboruntersuchungen zum Abbau
dabei
 - a) Perkolationsversuche (z.B. Testfilter)
 - b) Batchversuche
4. Grundwasser
5. Oberflächenwasser
6. Abbautest zum Verhalten in Kläranlagen
7. QSAR-Modellierung

Fehlen Daten zum Abbau im Boden kommen entsprechend nachrangige und damit gegebenenfalls modellierte Werte zum Tragen.

Zusätzlich ist jeweils zu prüfen, ob anoxische Verhältnisse zu einer Verlängerung der Abbauzeiten führen. Diese sind dann vorrangig zu berücksichtigen.

2.1.2 Bewertung der Persistenz auf der Grundlage von unter REACH geforderten Standardtest

In Abhängigkeit von der Höhe der Produktions- oder Importmenge des Stoffes werden bei der Registrierung unter REACH Untersuchungsergebnisse (Daten) aus verschiedenen Standardtests zum biologischen Abbau gefordert, wobei mit steigenden höheren Mengen aufwendigere Untersuchungsergebnisse gefordert werden

Für organische Stoffe, deren Verwendungen zwischen 1 und 10 t/a liegt, wird nur für solche, die auf Grund ihrer Toxizität (CMR-Eigenschaften), der Verwendungsbedingungen oder die in Bezug auf Mensch und Umwelt besonders kritischen Eigenschaften aufweisen, die Angabe von Daten aus Abbautests zur guten Abbaubarkeit („ready biodegradability“) gefordert.

Bei Verwendungen zwischen 10 und 100 t/a sollen weitere Abbautests erwogen werden, wenn sich aus der Sicherheitsbewertung (Chemical safety assessment) Hinweise auf deren Notwendigkeit ergeben.

Wird ein Stoff mit 100 bis 1.000 t/a verwendet, sind von Seiten des Registranten auf Grundlage der Sicherheitsbewertung zusätzliche Tests vorzuschlagen.

Bei Verwendungen über 1.000 t/a sind weitere Tests in Erwägung zu ziehen.

Von der ECHA (ECHA 2008) werden darüber hinaus noch in einem Guidance-Dokument relevante Tests genannt, die notwendige Daten für eine integrierte Teststrategie liefern und in der Tabelle 2 zusammengestellt sind. Mit Hilfe dieser integrierten Teststrategie soll sichergestellt werden, dass alle erforderlichen Daten zur Chemikalienbewertung geliefert werden.

Unter dem Aspekt der Bewertung der Rohwasserrelevanz von Stoffen sind hier vor allem die Abbautests, bei denen die Verhältnisse im Boden und im Sediment simuliert werden, von Interesse. In der Regel sollen hier Ergebnisse aus standardisierten OECD-Tests oder gleichwertigen Tests, wie zum Beispiel die von der US-EPA entwickelten Tests (US EPA 2010), zum Tragen kommen.

Von den in Frage kommenden Simulations-Tests für die Abbaubarkeit in Wasser, Wasser/Sediment-Systemen und Boden beziehen auch einige den anaeroben Abbau mit ein (zum Beispiel OECD 308 „Aerobic and anaerobic transformation in aquatic sediment systems“ und OECD 307 „Aerobic and anaerobic transformation in soil“).

Tabelle 2: Entsprechend der registrierten Produktions- / Importmenge erforderliche, für dieses Gutachten relevante Stoffkennndaten (ECHA 2008)
Blau hinterlegt die zusätzlich geforderten Tests und Daten in dem betrachtetem Tonnageband

Tonnageband (t/a/Registrant)	Erforderliche Abbaudaten	Weitere notwendige Daten
10 - 100	Tests zur guten Abbaubarkeit	Log K _{ow} Dampfdruck Wasserlöslichkeit Adsorption/Desorption
100 – 1.000	Tests zur guten Abbaubarkeit Simulation des Bioabbaus in Wasser Simulation des Bioabbaus im Sediment Simulation des Bioabbaus im Boden	Log K _{ow} Dampfdruck Wasserlöslichkeit Adsorption/Desorption Dissoziationskonstante Abbauprodukte BCF
> 1.000	Tests zur guten Abbaubarkeit Simulation des Bioabbaus in Wasser Simulation des Bioabbaus im Sediment Simulation des Bioabbaus im Boden Weitere Tests müssen vorgeschlagen werden, wenn sich aus der Sicherheitsbewertung Hinweise auf die Notwendigkeit weitere Daten ergeben.	Log K _{ow} Dampfdruck Wasserlöslichkeit Adsorption/Desorption Dissoziationskonstante Abbauprodukte BCF

Aussagen aus Tests, bei denen die inhärente Abbaubarkeit untersucht, also der Abbau unter optimalen Bedingungen untersucht wird, wie zum Beispiel der Zahn-Wellens-Test, lassen sich in der Regel nicht auf das Verhalten eines Stoffes in der Natur übertragen. Substanzen, die in diesen Test umgesetzt werden, erweisen sich unter natürlichen Bedingungen häufig als persistent.

2.1.3 Vorgehen bei der Bewertung der Daten zur Persistenz

Die Vielfalt der in der Natur vorhandenen Randbedingungen spiegelt sich in den Testbedingungen der OECD-Tests wieder, bei denen verschiedene Kompartimente der aquatischen Umwelt simuliert werden. Somit liefern diese Standardtests im Labor übertragbare Aussagen für das Verhalten in der aquatischen Umwelt.

Um die Persistenz als Indexkriterium in das Screeningmodell eingehen zu lassen, ist beim Vorhandensein verschiedener Daten eine Wichtung erforderlich.

Im einfachsten Fall liegen alle für die Registrierung von Stoffen mit einer Tonnage von über 100 t/a geforderten Daten zum Bioabbau vor (s. Tabelle 2), fallen in die gleiche Indexklasse und können indiziert in das Screeningmodell eingehen.

Weichen sie so weit voneinander ab, dass sie in unterschiedliche Indexklassen fallen, so wird die höhere Klasse in das Screeningmodell eingesetzt.

Sind nur Daten aus Tests zur guten Abbaubarkeit vorhanden, so können diese gegebenenfalls mit Hilfe von Faktoren auf Abbauraten in Wasser und Boden extrapoliert werden.

In der Tabelle 3 ist das von der EPA (EPA 2000) und der European Commission (EC 2003) vorgeschlagene Vorgehen zusammengefasst.

Tabelle 3: Extrapolation von Daten aus Ready- und Inherent-Biodegradability-Tests auf Simulationstests

Daten aus Tests zur		Extrapolation auf	
Ready Biodegradability	Inherent Biodegradability	DT ₅₀ in Wasser (EPA 2000)	DT ₅₀ in Oberflächenwasser (EC 2003)
DOC-Abbau [%]		[d]	
> 70		5	
> 70, im 10-Tage-Fenster			15
> 70, im 10-Tage-Fenster			50
< 70			infini
40 - 70		10	
20 - 40	> 70	30	
	> 70		150
	< 70		infini
	20 - 70	100	
< 20	< 20	10.000	

Von der OECD (OECD 2009) wird ausgeführt, dass nach den bisherigen Erfahrungen eine Substanz, die sich in einem der standardisierten OECD-ready-biodegradability -Tests als leicht abbaubar erweist, ebenfalls in Wasser/Sediment-Systemen leicht abgebaut wird, d.h. eine DT₅₀ von weniger als 10 Tagen aufweist. In diesem Zusammenhang wird darauf hingewiesen, dass auch bei den in der Umwelt auftretenden niedrigen Konzentrationen bei einer Risikobewertung davon ausgegangen werden kann, dass eine Substanz, die in einem der OECD Simulationstest (Boden, Wasser, Sediment) mit einer DT₅₀ von weniger als 16 Tagen vollständig abgebaut wird, auch in der aquatischen Umwelt einem Bioabbau leicht zugänglich ist.

Liegen Abbaudaten nicht in dieser Form vor, sondern nur aus anderen Tests oder als Hinweise aus der Literatur vor, so sollte wie in 2.1.1 beschrieben vorgegangen werden. Daten aus Feldstudien oder Monitoringprogrammen sowie modellierte Daten können nach

sorgfältiger Prüfung der Datenvalidität in die Bewertung des Abbauverhaltens einbezogen werden.

2.2 Parameter zur Beschreibung der Mobilität

2.2.1 Wasserlöslichkeit und Log K_{ow} als Mobilitätskriterien

Die Mobilität eines Stoffes wird in dem Screeningmodell durch die Wasserlöslichkeit und die Sorbierbarkeit beschrieben. Während die Wasserlöslichkeit als Parameter hierbei alternativlos ist, lassen sich zur Parametrisierung der Sorbierbarkeit eines Stoffes unterschiedliche Größen nutzen. Neben der in dem bisherigen Screeningmodell eingesetzten logarithmierten Form des Oktanol-Wasser-Koeffizienten (Log K_{ow}) wird in der Literatur zur Beschreibung des Sorptionsverhaltens eines Stoffes eine Isotherme mit einem linearen Koeffizienten (K_d -Wert) oder der K_{oc} -Wert verwendet, der ein Maß für die Verteilung zwischen der organischen Substanz im Boden und der wässrigen Phase darstellt. In der Regel wird der für einen spezifischen Boden oder ein Sediment experimentell ermittelte K_d -Wert in einen K_{oc} -Wert übergeführt, indem der K_d -Wert durch den Anteil des organischen Kohlenstoffs im untersuchten Boden oder Sediment geteilt wird (SCHWARZENBACH ET AL. 1993; ECHA, 2008b). GRATHWOHL (2007) verweist darauf, dass diese Normierung aufgrund der Heterogenität der organischen Verbindungen im Boden und Sediment die Sorptionsfähigkeit eines Bodens ungenau einschätzt. Liegen keine K_{oc} -Werte vor, können diese auf der Basis empirischen Gleichungen oder mittels Programmen zur Ableitung von Stoffkennwerten aus dem K_{ow} -Wert abgeleitet werden (vgl. ECHA 2008b).

Der K_{oc} -Wert, als der auf den organischen Kohlenstoff normierte K_d -Koeffizient von Sorptionsisothermen, zeigt die Sorbierbarkeit eines Stoffes an. Da diese Werte aber ebenso wie die K_d -Werte vor allem die Sorptionsneigung an dem geprüften Sorbentien wieder spiegeln (vgl. KUHLMANN et al. 2010), bieten sie keine Vorteile gegenüber der Verwendung der K_{ow} -Werte zur Charakterisierung der Sorptionsneigung.

Trotz dieser grundsätzlichen Einwände wurde für ausgewählte Stoffe Daten zu K_{oc} -Werten zusammengestellt, in Klassen indiziert und die Auswirkungen auf die Abschätzung der Mobilität von Stoffen überprüft.

Als Beispieldatensätze wurden die PBSM aus der Stoffliste des 1. Gutachtens verwendet. Als Datenquelle diente eine umfangreiche Pestizid-Datensammlung (FOOTPRINT 2011). Die Einordnung der K_{oc} -Werte in Klassen erfolgte wie dort vorgeschlagen und ist in der Tabelle 4 vergleichend zur Einordnung der Log- K_{ow} -Werte dargestellt.

Werden die Stoffe in der Tabelle 5 entsprechend ihrem K_{oc} -Wert eingestuft, so ergeben sich mit wenigen Ausnahmen höhere Indexzahlen.

Eine signifikante Änderung der Einschätzung des Sorptionsverhaltens ergibt sich hingegen für das Herbizid Glyphosat (hellblau unterlegt).

Tabelle 4: Indizierung der Angaben zum Log K_{OW} und zum K_{OC} in Klassen

Indexzahl I_x	1	2	3	4	5
Eigenschaft	Klasse				
log K_{OW}	$x > 4$	$4 \geq x > 2$	$2 \geq x > 1$	$1 \geq x > 0$	$0 \geq x$
K_{OC}	$x > 4.000$	$4.000 > x > 500$	$400 > x > 75$	$75 > x > 15$	$15 > x$

Tabelle 5: Vergleich Log K_{OW} und K_{OC} und der jeweiligen Indexklassen

Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Log K_{OW}	K_{OW}	K_{OC} [L/kg]	I_{KOW}	I_{KOC}
Acetochlor	Herbizid	3,03	1.072	156	2	3
Alachlor	Herbizid	3,52	3.311	124	2	3
Atrazin	Herbizid	2,50	316	100	2	3
Bentazon	Herbizid	2,34	219	51	2	4
Cyanazin	Herbizid	2,22	166	190	2	3
D, 2,4-	Herbizid	2,81	646	56	2	4
Dibrom-3-chlorpropan, 1,2-	Nematizid	2,96	912	100	2	3
Dichlorpropen, cis-1,3-	Nematizid	2,03	107	34	2	4
Dichlorpropen, trans-1,3-	Nematizid	2,03	107	34	2	4
Diflufenican	Herbizid	4,90	79.433	3.186	1	1
Dimethenamid	Herbizid	2,15	141	108	2	3
Diuron	Herbizid	2,68	479	1.067	2	1
Glyphosat	Herbizid	-3,20	0,00063	21.699	5	1
Isoproturon	Herbizid	3,50	3.162	122	2	3
Linuron	Herbizid	3,20	1.585	628	2	2
Metolachlor	Herbizid	3,13	1.349	200	2	3
Molinat	Herbizid	3,21	1.622	190	2	3
Prometon	Herbizid	2,99	977	150	2	3
Propazin	Herbizid	2,93	851	154	2	3
Simazin	Herbizid	2,20	158	130	2	3

Während beim Glyphosat der negative Log K_{OW} eine sehr geringe Sorption und damit hohe Mobilität hinweist, ist genau Gegenteiliges aus dem K_{OC} -Wert abzuschätzen. Der Stoff müsste auf Grundlage dieses Wertes als nicht mobil eingeschätzt werden. Wie die Erfahrungen mit dem Verhalten von Glyphosat in aquatischen Systemen zeigen, spiegelt die Stoffbewertung, die auf dem Log K_{OW} basiert, den möglichen Eintrag in Gewässer weitaus besser wider (SKARK et al. 1998). Auch in der FOOTPRINT-Datensammlung selbst wird auf Daten aus EU-Studien hingewiesen, nach denen der K_{OC} -Wert in Abhängigkeit von der Bodenart stark variieren kann (K_{OC} zwischen 884 in lehmigem Sand und 60.000 in sil-tig-tonigem Lehm). Der Rückhalt von Glyphosat erfolgt vermutlich in starkem Maße an

Tonmineralen und experimentell gewonnene Sorptionskoeffizienten werden über die Normierung mit dem Anteil an organischem Kohlenstoff in hohe K_{OC} -Werte übersetzt.

Dennoch wird bereits mit der Indizierung aufgrund der K_{OW} -Werte eine beschränkte Sorptionsfähigkeit angezeigt und eine mögliche Rohwassergängigkeit angedeutet. Der Log K_{ow} wird daher als Stoffkriterium beibehalten, nicht zuletzt auch da dieser Parameter bei der Registrierung von Chemikalien unter REACH zu den Basisdaten gehört (vgl. Tabelle 2).

2.2.2 Bewertung der Mobilität von ionaren Verbindungen

Bei Stoffen, die ionar vorliegen können, kann dies zu einem veränderten Sorptionsverhalten führen. Starke organische Säuren, die bei den in Oberflächen- und Grundwasser üblichen pH-Werten anionisch vorliegen, zeigen dann häufig eine geringere Rückhaltung im Untergrund, während schwache Säuren sowie basische und amphotere Verbindungen in diesem pH-Bereich undissoziiert oder kationisch vorliegen und daraus resultierend vor allem an Tonmineralen besser sorbiert werden.

Den Einfluss des pH-Wertes auf die Sorption von ionaren Stoffen wurde im Rahmen des UBA-Fachgesprächs diskutiert und wurde dort in einem Beitrag am Beispiel von Arzneimitteln dokumentiert (Abbildung 1).

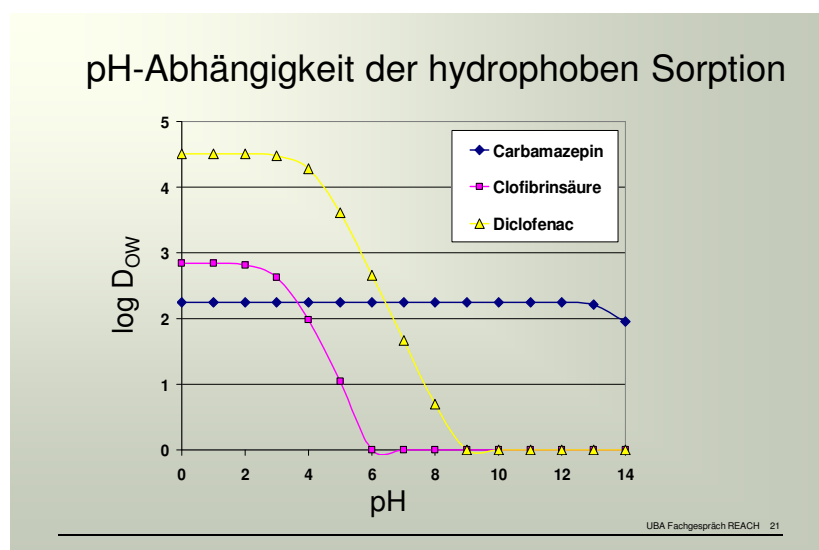


Abbildung 1: Sorptionsverhalten (pH-Wert abhängiger Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient $\log D_{ow}$) von Arzneimittel bei verschiedenen pH-Werten (aus SCHEYTT et al. 2011)

Clofibrinsäure mit einem pK_a -Wert von 3,2 und Diclofenac (pK_a 4,2) werden bei höheren pH-Werten weniger gut sorbiert. Das Sorptionsverhalten von Carbamazepin, das bis zum pH-Wert von 14 undissoziiert vorliegt, wird nicht vom pH-Wert beeinflusst.

Um diesen Effekt in die Abschätzung der Rohwassergängigkeit einer Chemikalie einzu- beziehen, kann ein zusätzlicher Punkt für die Mobilität vergeben werden, wenn Hinweise darauf vorliegen, dass der negative dekadische Logarithmus der Dissoziationskonstante pK_a den Wert von 7 unterschreitet und damit angezeigt wird, dass dieser Stoff bei üblichen pH-Werten im Oberflächen- und Grundwasser dissoziiert vorliegt.

2.2.3 Bewertung der Mobilität auf der Grundlage von unter REACH geforderten Standardtest

Angaben zur Wasserlöslichkeit und zum $\log K_{OW}$ gehören zu den Basis-Datenanforderungen bei der Registrierung von Chemikalien unter REACH und sind unabhängig vom Tonnage-Band anzugeben. Diese Stoffeigenschaften stellen geeignete Parameter zur Einschätzung der Mobilität dar. Die Angabe der Dissoziationskonstante wird erst bei produzierten Mengen von über 100 t/a erforderlich.

Als Datenquelle werden in den Guideline Documents (ECHA 2008) Angaben aus OECD-Tests, Nachschlagewerke (Datenkompilationen) und Modellberechnungen genannt.

2.3 Berücksichtigung verschiedener Eintragspfade

Chemikalien können auf den in der Abbildung 2 dargestellten Wegen in das Trinkwasser gelangen. Die wesentlichen Reinigungsprozesse finden dabei bei der Boden- bzw. Untergrundpassage statt, ergänzt durch Abbau und Sorption im Oberflächenwasser sowie die in geringerem Umfang und langsamer verlaufenden Abbaureaktionen im Grundwasser.

Für die bisher als Trinkwasserkontaminanten detektierten Industriechemikalien ist der wesentliche Eintragspfad der über das Abwasser ins Oberflächenwasser. Einträge ins Grundwasser über den Niederschlag oder die Aufbringung von Klärschlamm sind demgegenüber vernachlässigbar.

Die verschiedenen möglichen Eintragspfade weisen an unterschiedlichen Standorten eine große Heterogenität auf, wobei standörtliche Faktoren ein mögliches Auftreten überprägen. Unabhängig von diesen standörtlichen Randbedingungen soll das Screeningmodell einsetzbar sein. Die weitere Differenzierung intrinsischer Stoffeigenschaften erfolgt nicht, da weder die Mobilität als Kombination von Wasserlöslichkeit und Sorptionsneigung noch die Persistenz spezifische Variationen hinsichtlich eines potentiellen Eintragspfades aufweisen. Entsprechend wird keine derartige pfadspezifische Wichtung einzelner Eigenschaften vorgenommen.

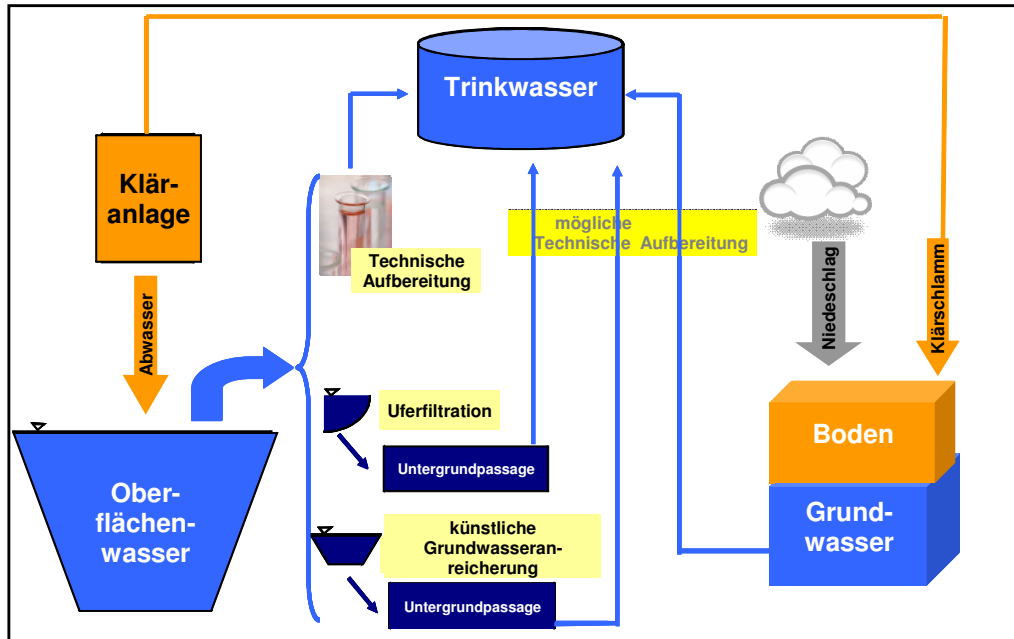


Abbildung 2: Eintragspfade von Chemikalien ins Trinkwasser

3 Überarbeitung der Berechnung des Indexsystems

3.1 Verfeinerung des Indexsystems durch Veränderung der Klassengrenzen

3.1.1 Definition neuer Klassengrenzen

Bislang werden die Stoffeigenschaften nach einer 4- bis 5 stufigen Klassifizierung indiziert (vgl. Tabelle 6 in KUHLMANN et al. 2010), wobei für die Klassen von Wasserlöslichkeit sowie K_{OW} annähernd eine logarithmische Skalierung gewählt wird. Die Abbauzeit wurde in nur 4 Stufen (bis \approx 2 Wochen, \approx 2 Wochen bis \approx 3 Monate, \approx 3 Monate bis \approx 1Jahr, mehr als 1 Jahr) gegliedert.

Im Folgenden soll betrachtet werden, ob eine detaillierte Untergliederung der Klassenbreiten für Löslichkeit, K_{OW} und DT_{50} Vorteile für eine Diskriminierung von rohwassergängigen Stoffen bieten kann.

Hierzu werden zunächst die Klassenbreiten angepasst und eine weitere Abstufung vorgenommen (Tabelle 6). Für die Wasserlöslichkeit S und den K_{OW} -Wert werden logarithmische Unterteilungen gewählt, um entsprechende Indexzahlen zuzuweisen (Abbildung 2).

Tabelle 6: Verfeinerte Indizierung von Stoffeigenschaften

Grenzen für Persistenz (P) und hohe Persistenz (vP) nach ECHA 2008

Indexzahl I _x Eigenschaft	Klasse						
	1	2	3	4	5	6	7
S [mg/L]	$x < 1$	$1 \leq x < 10$	$10 \leq x < 100$	$100 \leq x < 1.000$	$1.000 \leq x < 10.000$	$10.000 \leq x < 100.000$	$100.000 \leq x$
log K _{OW}	$x > 5$	$5 \geq x > 4$	$4 \geq x > 3$	$3 \geq x > 2$	$2 \geq x > 1$	$1 \geq x > 0$	$0 \geq x$
DT ₅₀ [d]	$x < 10$	$10 \leq x < 40$	$40 \leq x < 60$	$60 \leq x < 120$	$120 \leq x < 180$	$180 \leq x < 400$	$400 \leq x$
Persistenz			P(Süßwasser)	vP(Süßwasser)	P(Boden)	vP(Boden)	

Gegenüber der bisherigen Wahl der Klassenbreiten für die Wasserlöslichkeit wird sowohl im Bereich unter $S < 10$ mg/L als auch im Bereich $S > 1.000$ mg/L besser aufgelöst. Für den K_{OW}-Wert erfolgt eine bessere Auflösung im Bereich $K_{OW} > 100$ (

Abbildung 3). Gleichzeitig wird die Abbildung der Stoffeigenschaften auf der Basis der logarithmierten Funktion mit weiteren Klassengrenzen stetiger als bei den bisherigen engen Klassengrenzen.

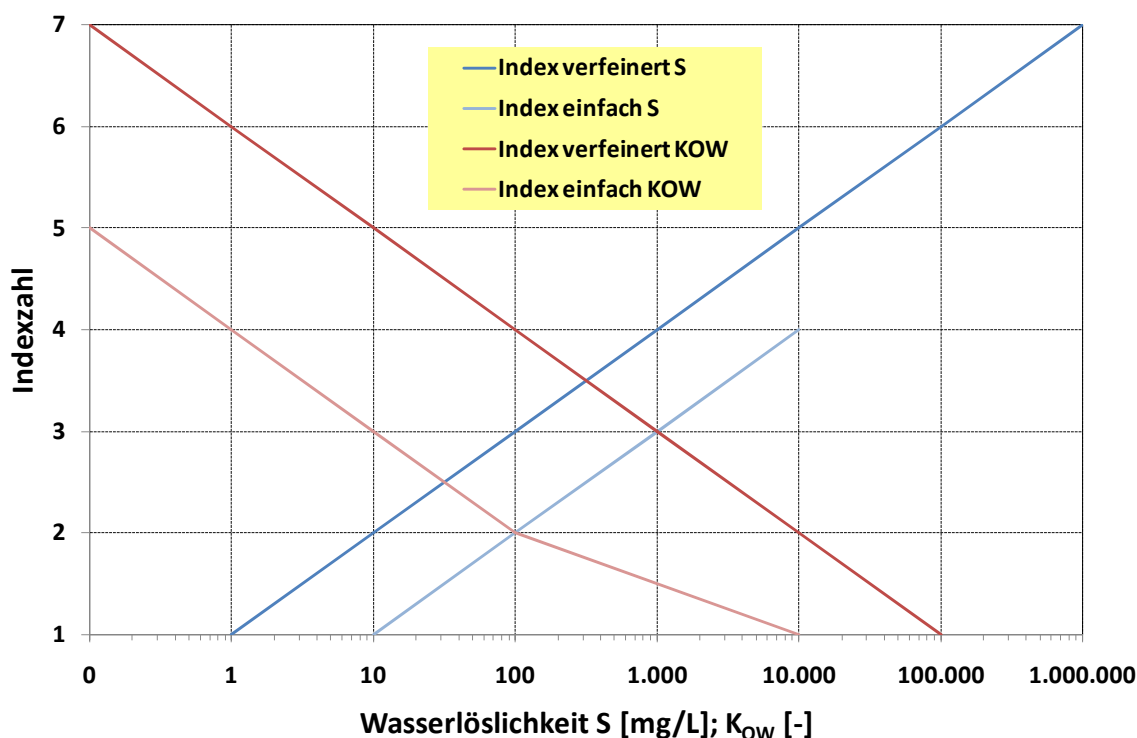


Abbildung 3: Indexzahl als Funktion von Wasserlöslichkeit und Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient

Auch die Klassenbreiten für die DT_{50} werden so verändert, dass in einem Bereich, der eine mittlere bis hohe Persistenz abbildet, die unteren Klassengrenzen die Persistenzkriterien gemäß der Richtlinien der ECHA (2008:194) darstellen (Tabelle 6). Somit werden Klassengrenzen eingeführt, die Persistenz (P) oder große Persistenz (vP) für Süßwasser oder Boden anzeigen.

Für die Indizierung der DT_{50} wird keine mathematisch geschlossene Funktion angenommen. Durch die Intervallsprünge – induziert durch die P- bzw. vP-Kriterien der TGD – wird jedoch auch diese Abbildungsvorschrift nicht-linear. Somit werden alle Teil-Funktionen des stoffintrinsic Indizierungssystems in nicht-lineare Funktionszusammenhänge überführt.

Die Verknüpfung auf der Basis dieser neuen Indizierungsvorschrift erfolgt wiederum durch Summierung der Indexzahlen

$$(1) \quad K = I_s + I_{Kow} + I_{DT50}$$

Diese Indexsumme K kann Werte zwischen 3 und 21 annehmen.

3.1.2 Anwendung auf nachgewiesene Spurenstoffe im Trinkwasser

Im Folgenden wird die im vorherigen Abschnitt verfeinerte Indizierungsvorschrift für die Stoffeigenschaften gemäß Tabelle 6 auf den Lerndatensatz, also die Zusammenstellung von 151 Stoffen, die im Trinkwasser nachgewiesen sind und bereits im 1. Sachverständigengutachten zusammengetragen wurden, angewandt. Anschließend erfolgt ein Vergleich mit dem Ergebnis nach der im 1. Sachverständigengutachten dargestellten Klassenbildung, die im Weiteren als einfache Indizierung bezeichnet wird.

Das Ergebnis der Indizierung der Stoffeigenschaften mit der verfeinerten Indizierung ist in Abbildung 4 wiedergegeben. Für 106 Substanzen wird mit Indexsummen K über 10 ein hohes bis sehr hohes stoffintrinsic Rohwassergängigkeitspotential (RGP) identifiziert. Dies entspricht 70 % der 151 Stoffe. Der höchste auftretende Wert für K ist 20 und wird für Dioxan ermittelt. Ein geringes RGP mit einer Indexsumme K bis 5 wird für 5 Stoffe gefunden. Der niedrigste, festgestellte Wert für K liegt bei 4 und trifft auf 3 Substanzen zu (DEHP, BHT, Octylzimtsäure). Ebenfalls mit einem geringen RGP bei $K = 5$ fallen BBP und Fenofibrat auf.

Die Verteilung der Indexzahlen für die Merkmale Wasserlöslichkeit, $\log K_{OW}$ und DT_{50} sowie für die Indexsumme K nach der einfachen und der verfeinerten Indizierungsvorschrift sind in Anlage 3 dargestellt

In Abbildung 5 wird das Ergebnis der Klassierung mit den einfachen und den verfeinerten Indizierungsvorschriften dargestellt. Für die Abgrenzung der Kategorien gering, mittel, hoch und sehr hoch werden jeweils Anteile der maximalen Indexsumme K herangezogen.

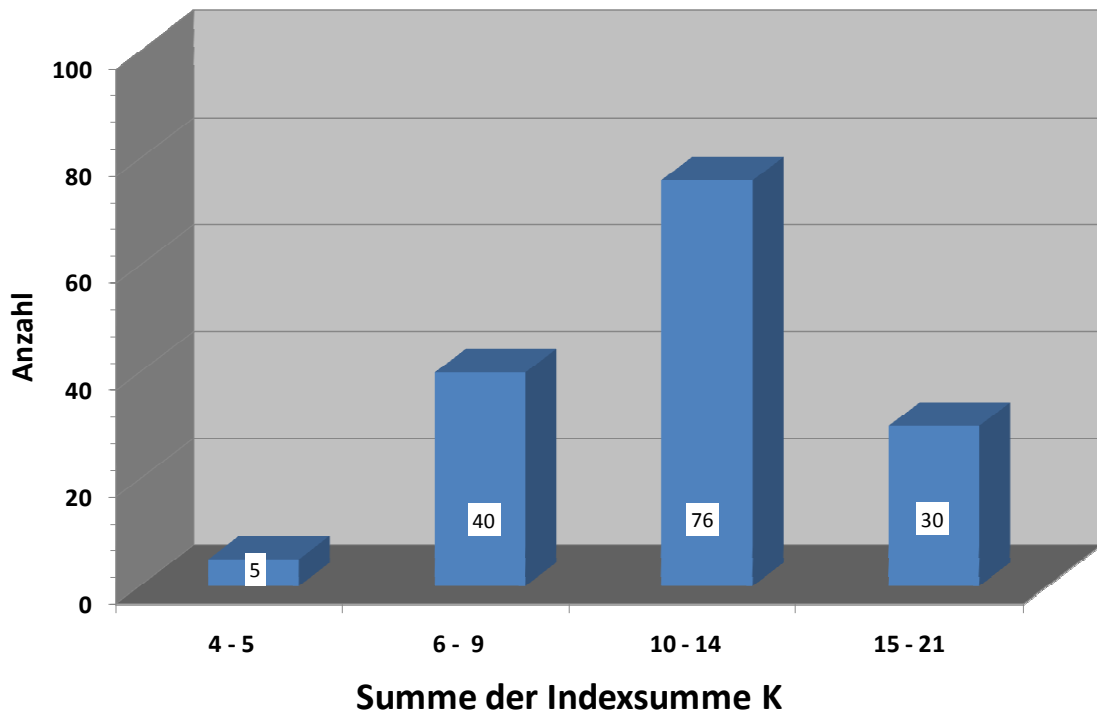


Abbildung 4: Anzahl von Stoffen des Lerndatensatzes (n = 151) gruppiert nach der Indexsumme K gemäß der verfeinerten Klassengrenzen

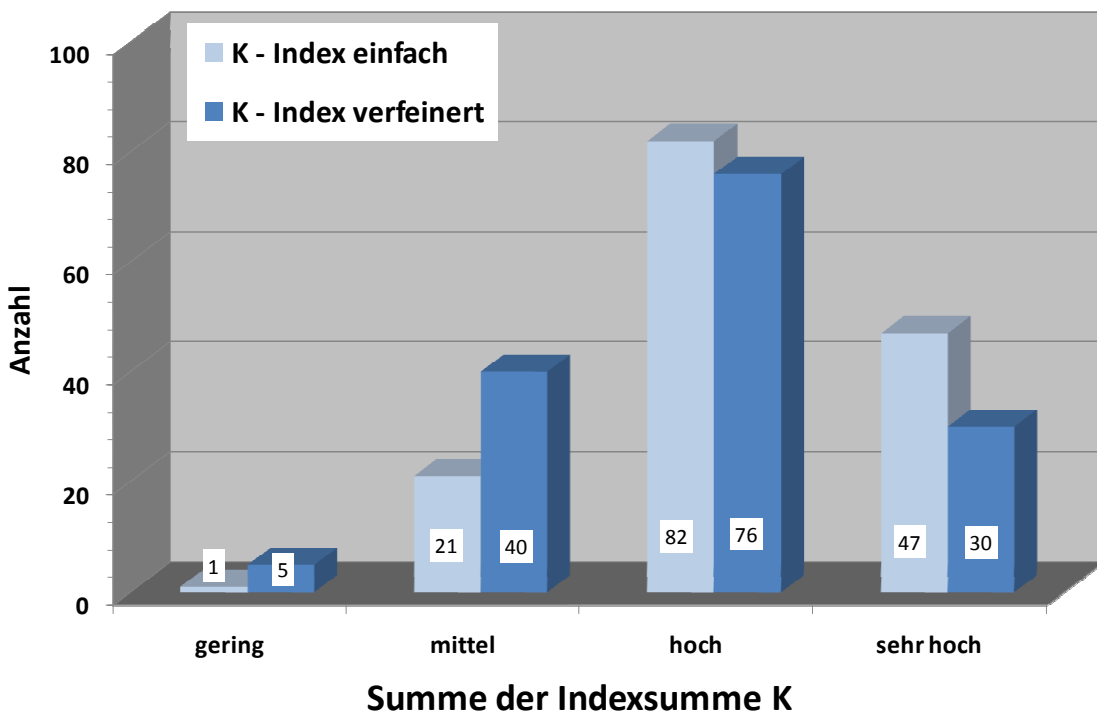


Abbildung 5: Vergleich der Klassierungsergebnisse auf der Grundlage der einfachen und der verfeinerten Indizierung (Lerndatensatz, Stoffe n = 151)

Die Kategorie „gering“ reicht bis zu ca. 25 % der maximalen Summe, während ein Prädikat „mittel“ bis zu ca. 45 % der maximalen Summe vergeben wird. Die Kategorie „hoch“ liegt zwischen ca. 45 und 66 %. Darüber wird die Bezeichnung „sehr hoch“ zugewiesen.

Im Vergleich zum Ergebnis nach der Indizierung mit wenigen Klassen zeigt die neue verfeinerte Klassierung mit einer zusätzlichen Spreizung der Klassen einen geringeren Anteil von Stoffen in den Kategorien „hoch“ (Indexsumme 10 – 14) und „sehr hoch“ (Indexsumme > 14) und höhere Anteile von Stoffen in den Kategorien „gering“ (Indexsumme ≤ 5 und „mittel“ (Indexsumme 6 - 9).

Die gleichförmigere Verteilung mit der verfeinerten Indizierungsvorschrift zeigt sich auch in der Darstellung in Anlage 3. Sowohl die verfeinerte Indizierung der Wasserlöslichkeit als auch des log K_{OW} zeigen gleichförmigere Histogramme als nach der einfachen Indizierungsvorschrift.

Die verfeinerte Indizierung mit zusätzlichen Klassen bietet somit die Möglichkeit einer stärkeren Differenzierung. Es bedarf bei dieser Indizierung einer ausgeprägten Kombination von Stoffeigenschaften, die Mobilität und Persistenz anzeigen, um einer Substanz ein hohes Potential zum Auftreten in der aquatischen Umwelt zuzuweisen. Auf diese Weise erfolgt eine stärkere Trennung zwischen potentiellen Kontaminanten und weniger relevanten Stoffen.

3.2 Normierte Klassierung und eine weitere Verknüpfungsregel für Stoffeigenschaften

3.2.1 Ableitung einer normierten Klassierung und Verknüpfung der Indexzahlen

Im Folgenden soll erprobt werden, welche Bedeutung eine andere Generierung von Indexzahlen und eine anderweitige Verknüpfungsregel auf die Identifizierung des Rohwassergängigkeitspotential haben kann. Die Regel wird in Anlehnung an SCHLEYER UND RAFFIUS (2000) bzw. KERNDORF ET AL. (1993) abgeleitet.

Im Kern gehen auch SCHLEYER UND RAFFIUS (2000) davon aus, Stoffeigenschaften zu Mobilität und Sorption zu klassifizieren und so zu einer Bewertung eines Transferpotentials im Boden zu gelangen. Dazu nehmen diese Autoren eine Normierung der Werte zur Wasserlöslichkeit und zum K_{OW}-Wert so vor, dass den logarithmierten Werten ein Wert zwischen 1 und 100 zugewiesen wird. Dazu werden Normierungsfunktionen aus den Größenordnungen der Werte der zu betrachtenden Stoffgruppe abgeleitet.

Stoffe des Lerndatensatzes (n = 151) erstrecken sich die Werte für die Wasserlöslichkeit über 8 Zehnerpotenzen ($\log S \in [-2,6]$) und für den K_{OW}-Wert über 13 Zehnerpotenzen ($\log K_{OW} \in [-5,8]$). Der große Variationsbereich bei dem Merkmal K_{OW}-Wert liegt in der Berücksichtigung vieler Arzneimittel und weiterer polarer Stoffe.

Die Normierungsfunktion zur Gewinnung von Indexzahlen für die Wasserlöslichkeit zwischen 0 und 100 lautet dann:

$$(2) \quad I_S = 100 * (2 + \log S) / 8.$$

Der Wert 2 in Gleichung 2 ergibt sich lediglich aus numerischen Gründen, damit der Normierungsterm den Wert 1 annehmen kann. Je größer der Wert von I_S ausfällt umso höher ist die Mobilität einer Substanz zu bewerten.

Für den K_{OW} -Wert muss eine Anpassung vorgenommen werden, da ein hoher K_{OW} -Wert eine hohe Sorptionsfähigkeit und somit eine geringe Mobilität der Substanz anzeigt. Wenn ein hoher Wert von I_{KOW} eine hohe Mobilität anzeigen soll muss für die Bewertung des K_{OW} folgender Ausdruck formuliert werden:

$$(3) \quad I_{KOW} = 100 - 100 * (5 + \log K_{OW}) / 13.$$

Im Weiteren wird das Transferpotential als der arithmetische Mittelwert zwischen dem Index der Mobilität und der Sorptivität formuliert. Bei sehr hoher Löslichkeit und sehr geringer Sorptionsneigung kann diese Bewertungszahl also den Wert 100 annehmen. Praktisch werden vermutlich immer geringere Werte realisiert.

Alternativ kann die Bewertungszahl für das Transferpotential auch als geometrisches Mittel der beiden Indizes für die Wasserlöslichkeit und den K_{OW} -Wert gewonnen werden.

Zur Bewertung der Elimination aus dem Wasser wird keine Normierung vorgenommen sondern die DT_{50} im Bereich zwischen 0 (= keine Persistenz) und 1 (= sehr persistent) belegt. Hierzu werden im Grunde die Klasseneinteilung in Tabelle 6 mit zwei Abweichungen herangezogen. Eine $DT_{50} > 180$ d wird unterschiedslos mit dem Wert 1 belegt. Lediglich eine $DT_{50} < 1$ d wird mit 0 gewertet. Die übrigen Klassen werden mit den Faktoren 0,1, 0,2, 0,4, 0,6 und 0,8 in eine Indexzahl übersetzt.

Die nachfolgende Verknüpfung zwischen den Bewertungszahlen des Transfer- und des Eliminationspotentials erfolgt multiplikativ:

$$(4) \quad K = (I_S + I_{KOW}) / 2 * I_{DT50}$$

Bei hoher Persistenz ($I_{DT50} = 1$) wird die Bewertung also vollständig auf den Transferparameter gestützt, der aus der Bewertung von Wasserlöslichkeit und K_{OW} folgt. Umgekehrt kann bei sehr niedriger Persistenz das Potential für den Übergang in das Rohwasser den Wert 0 erhalten.

3.2.2 Anwendung auf nachgewiesene Spurenstoffe im Trinkwasser

Mit den Gleichungen 2 bis 4 werden wiederum Indexzahlen K für den Lerndatensatz der 151 im Trinkwasser nachgewiesenen Substanzen gewonnen.

Die maximale Indexzahl K liegt bei 66. Einer Verbindung, Dichlormethan, wird der Wert 0 aufgrund seiner schnellen Abbaubarkeit zugewiesen. Der erfolgte Nachweis im Trinkwasser kann in dieser Indizierungsregel nicht nachvollzogen werden.

Die mit den Gleichungen 2 bis 4 ermittelten Indexzahlen K werden in Abbildung 6 den Ergebnissen der bislang angewandten Indexsystemen für die stoffintrinsic Eigenschaften gegenüber gestellt. Die Gruppierung des Indexsummen K erfolgt in der gleichen Weise wie bei den anderen Indizierungen.

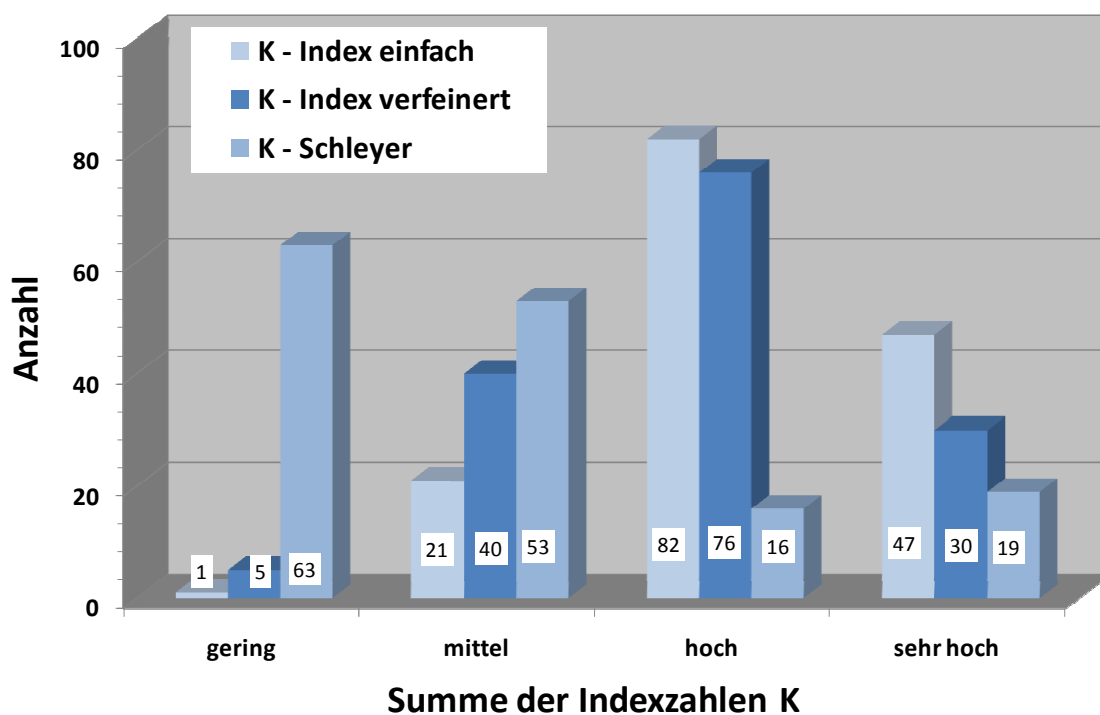


Abbildung 6: Vergleich der Klassierungsergebnisse auf der Grundlage verschiedener Annahmen für die Indizierung (Stoffe n = 151)

K – Index einfach KUHLMANN ET AL. 2010; K – Index verfeinert – Abschnitt 3.1.1,
K – Schleyer – Abschnitt 3.2.1

Abweichend von den Ergebnissen mit den bisherigen Indizierungsregeln erhalten lediglich 35 Stoffen hohe oder sehr hohe Bewertungen (23 % von n = 151). Umgekehrt fallen 63 Substanzen in die Kategorie geringes stoffintrinsic Rohwassergängigkeitspotential (ca. 42 % von n = 151).

Die Indizierungsregel nach den Gleichungen 2 bis 4 weist den im Trinkwasser nachgewiesenen Stoffen sehr viel geringere Bewertungsindizes zu. Allein aufgrund der Stoffeigenschaften erreichen viele Substanzen – auch wenn sie im Trinkwasser bereits nachgewiesen wurden – keine hohe Bewertung im Hinblick auf ein mögliches Auftreten im Trinkwasser. Das Modell nach SCHLEYER UND RAFFIUS (2000) wird daher nicht weiter berücksichtigt.

3.3 Fazit zur Bewertung der Rohwasserrelevanz auf der Grundlage von Stoffeigenschaften

Die verfeinerte Indizierung der Stoffeigenschaften in einer 7-stufigen Skala für die Parameter zur Beschreibung von Mobilität und Persistenz (Wasserlöslichkeit, $\log K_{OW}$ und DT_{50} , Tabelle 6) eignet sich durch die größere Anzahl der Klassen und die Spreizung der zugrunde liegenden Stoffkenndaten besser für eine Differenzierung von Stoffen mit einem Kontaminationspotential für Roh- und Trinkwasser als eine Indizierung nach einer 4- bis 5-stufigen Skala, wie sie im 1. Gutachten angewandt wurde (einfache Indizierung).

Mit einem alternativen Klassierungsansatz in Anlehnung an SCHLEYER UND RAFFIUS (2000) gelingt es hingegen nicht, das bereits nachgewiesene Auftreten von Stoffen des Lerndatensatzes im Trinkwasser durch Zuweisung hoher Roh- und Trinkwasserrelevanz abzubilden.

Im Weiteren wird deshalb auf die verfeinerte Indizierung nach Tabelle 6 aufgebaut.

4 Ergänzung um weitere Kriterien

4.1 Kriterien Produktionsmengen und Verwendung

Die verwendete Menge einer Chemikalie ist ein wesentlicher Faktor bei der Bewertung der Umweltrelevanz dieses Stoffes. Zusammen mit der Art der Verwendung ergeben sich wichtige Aussagen zur Abschätzung des Eintrags in die aquatische Umwelt.

Um die Kriterien Menge und Verwendung in das Screeningmodell zu integrieren ist, sind diese, wie die Kriterien Mobilität und Persistenz, mit Indexzahlen zu belegen. Die verwendete Menge wird, wie in der Tabelle 7 dargestellt, entsprechend dem Tonnageband in REACH in Stufen eingeteilt. Das Tonnageband von 1 bis 10 t betrifft dabei nur solche Stoffe, die CMR-Eigenschaften aufweisen und daher auf Grund ihrer Toxizität registriert werden.

Tabelle 7: Indizierung der Angaben zu Verbrauchsmengen

Jährlicher Verbrauch [t]	Indexzahl _{Menge}
1 - 10	1
> 10 - 100	2
> 100 - 1.000	3
> 1.000	4

Bei Chemikalien, die mehrfach registriert werden, sind die Mengen zu addieren.

In REACH wird zur Beschreibung der Verwendung von Chemikalien ein Deskriptorensystem eingesetzt, das in Bezug auf die Umweltexposition Umweltfreisetzungskategorien (Environmental Release Categories, ERC) verwendet. In insgesamt 12 Kategorien, die teilweise weiter unterteilt sind, werden die Verwendung von Stoffen und das damit verbundene Risiko einer Freisetzung in die Umwelt eingeordnet (ECHA, 2008c). In Bezug auf das Freisetzungspotential lassen sich diese in Gruppen einordnen (Tabelle 8).

Tabelle 8: Kategorisierte Verwendungen, Umweltfreisetzungskategorien nach REACH und Indizeszahlen

Bestimmungsgemäßer Gebrauch	Umweltfreisetzungskategorie (ERC)	Indexzahl (I _v)
Industrielle Verwendung in geschlossenen Systemen Zwischenprodukt	6a, 6c, 6d, 7	0,1
Industrielle Verwendung, Breite dispersive Verwendung mit geringem Freisetzungspotential z.B. - in geschlossenen Systemen, - mit Einschluss in oder auf einer Matrix - in langlebigen Erzeugnissen und Materialien mit geringer Freisetzung	1, 2, 3, 6b, 8c, 8f, 9a, 9b, 10a, 11a, 12a,	0,2
Breite dispersive Verwendung mit hohem Freisetzungspotential, z.B. - in offenen Systemen, - in langlebigen Erzeugnissen und Materialien mit hoher oder beabsichtigter Freisetzung	4, 5, 8a, 8b, 8d, 8e, 10b, 11b, 12b	0,5
Umweltoffene Verwendung	keine	1,0

Werden die ERC entsprechend dem von der ECHA im Guidance Document R16 (ECHA 2008c) empfohlenen Vorgehen berechnet, so wird als niedrigster Freisetzungsfaktor für Wasser ein Wert von 0,005 % errechnet.

Die Zuordnung von ERC zu Indexzahlen erleichtert bei unter REACH registrierten Chemikalien die Abschätzung des Freisetzungspotentials vor allem dann, wenn nur eine Kategorie vorhanden ist. Gleiches gilt für den Fall, dass für den Stoff zwar mehrere ERC angegeben werden, diese jedoch durch den gleichen Index repräsentiert werden.

Bei Stoffen, die mit unterschiedlichen ERC registriert sind, werden die Indexzahlen addiert.

Stoffe, für die eine ERC nicht bekannt ist, werden ihrem bestimmungsgemäßen Gebrauch entsprechend eingruppiert.

Das Verbreitungspotential VP wird durch Multiplikation des Mengenindex I_M mit dem Verwendungsindex I_V ermittelt:

$$(5) \text{ VP} = I_M * I_V$$

Die multiplikative Form der Verknüpfung stellt hier eine sinnvolle Verbindung der beiden Kriterien dar, da so die tatsächlich in die Umwelt eingetragene Menge eines Stoffes in die Bewertung eingeht.

4.2 Verknüpfung des Kriteriums intrinsische Stoffeigenschaften mit dem Verbreitungspotentials

Das Verbreitungspotential einer Chemikalie bestimmt entscheidend ihr Auftreten in der Umwelt. Eine Verbindung, der aufgrund ihrer Stoffeigenschaften eine hohe Relevanz für das Auftreten in Roh- und Trinkwasser zugeschrieben wird, wird dort nur vorkommen, wenn sie in hinreichender Menge und in einem gewissen Umfang umweltoffen eingesetzt wird. Deshalb geht das Verbreitungspotential als Ausschlusskriterium in die Stoffbewertung ein. Eine Verknüpfung der Bewertung der Stoffeigenschaften, die durch die Indexsumme K ausgedrückt wird, mit dem Verbreitungspotential VP zum Rohwassergängigkeitspotential (RGP) erfolgt daher multiplikativ.

$$(6) \text{ Rohwassergängigkeitspotential (RGP)} = K * \text{VP}$$

Das Rohwassergängigkeitspotential RGP nach Gleichung (6) kann Werte zwischen 0,3 und maximal 151,2 annehmen (für stoffintrinsische Indexsumme $K = 21$; Verwendungsindex $I_V = 1,8$ und Mengenindex $I_M = 4$).

5 Überprüfung des verfeinerten Screeningmodells anhand einer Testgruppe von Substanzen

5.1 Zusammenstellung der Substanzen der Testgruppe

Bei der neuen Testgruppe handelt es sich zum einen um ältere Daten aus einer Umfrage im Auftrag des Deutschen Vereinigung des Gas- und Wasserfachs (DVGW) bei Wasserwerken zum Auftreten von Pestiziden im Roh- und Trinkwasser (SKARK UND ZULLEI-SEIBERT, 1999). Dieser Datensatz umfasst auch Angaben zu Positivbefunden in Roh- und Trinkwässern.

Als zweite Quelle wurde eine aktuelle Kompilation von Untersuchungen zu organischen Spurenstoffen der Arbeitsgemeinschaft der Wasserwerke an der Ruhr (AWWR) verwendet. Diese umfasst ebenfalls Angaben zum Auftreten der untersuchten Stoffe in verschiedenen Wässern (Oberflächen- und Trinkwasser; vgl. SKARK ET AL. 2008).

Eine Literatur-Zusammenstellung von Funden von Arzneimitteln in Grund- und Trinkwässern, die vom UBA zur Verfügung gestellt wurden, wurde nur dann für den Testdatensatz genutzt, wenn sichergestellt war, dass es sich bei den genannten Stoffen um solche handelt, die auf Grund ihres bestimmungsgemäßen Gebrauchs in die Umwelt gelangt waren (UBA, 2011).

Ergänzt wurde diese Aufstellung um Stoffe, die bei den regelmäßigen Untersuchungen im Rahmen der Arbeitsgemeinschaft der Wasserwerke am Rhein (ARW) genannt werden (u.a. ARW, 2010). Auch hier wurden die Befunde mit in den Testdatensatz aufgenommen.

Es wurden jedoch nur Stoffe berücksichtigt, die nicht bereits im Lerndatensatz (im Trinkwasser nachgewiesen, $n = 151$, KUHLMANN ET AL. 2010) enthalten waren. Es werden in diesem Testdatensatz also nur zusätzliche Stoffe betrachtet.

Bei dem auf diese Weise zusammengestellten Testdatensatz handelt es sich nicht um eine beliebige Auflistung von Chemikalien. Vielmehr wurde bereits bei der Erstellung der berücksichtigten Studien eine Bewertung vorgenommen und nur solche Substanzen aufgenommen, die für Roh- und Trinkwasser relevant sind. Weiterhin lässt sich aus der Zusammenstellung der Positivbefunde in Oberflächen-, Grund- und Rohwasser keinesfalls entnehmen, dass Stoffe, die hier nicht mit einem Positivbefund erscheinen, grundsätzlich nicht in der aquatischen Umwelt auftreten. Bei den Befunden handelt es sich zum einen um regional begrenzte Angaben (Stoffe der AWWR und der ARW), zum anderen spiegeln die Befunde zu PBSM vor allem die Historie der Pestizidanwendung wider.

Die so erstellte Zusammenstellung von Stoffen wurde um Daten zur Mobilität (Wasserlöslichkeit und $\log K_{ow}$) und zur Persistenz (DT_{50}) ergänzt. Datenquellen hierfür waren vor allem öffentlich zugängliche Datenbanken. Daten zum Abbau wurden zum Teil nach US EPA 2009 modelliert.

Soweit Angaben zu Dissoziationskonstanten relevant und vorhanden waren, wurden auch diese berücksichtigt.

Als Problem stellte sich die Ermittlung von Daten zur Verwendung und zum Verbrauch vor allem für die Industriechemikalien dar. Dies gilt auch für REACH registrierte Chemikalien. Ein Zugang zu den insgesamt verbrauchten Mengen ist derzeit nicht möglich, da jeder Registrant die von ihm in den Verkehr gebrachte Tonnage angibt. Die unter REACH registrierten Umweltfreisetzungskriterien ERC konnten nicht eingesehen werden. Weder die Produktionsmengen aller Registrierungen noch der ortsgenaue Einsatz der Chemikalien ist nach Aussage des UBA derzeit bekannt. Mit einer diesbezüglichen Abfrage der IUCLID Datenbank konnten die entsprechenden Datenlücken zu Verwendung und Verbrauch ebenso wenig geschlossen werden (Stand 01.04.11).

Einige Angaben zum Verbrauch konnten aus verschiedenen Datenbanken zusammengestellt werden (RIPPEN 2010, ESIS 2011). Hierbei handelt es sich aber zum Teil um ältere Daten, die aus den 1990er Jahren stammen.

Aktuelle Daten liegen zu einer größeren Gruppe von Pestiziden und Arzneimitteln vor (BVL 2006, LANUV 2007). Aus den jährlich durch das Bundesamt für Verbraucherschutz publizierten Veröffentlichungen zum Absatz an Pflanzenschutzmitteln in Deutschland wurde auf die Daten aus dem Jahr 2005 zurückgegriffen.

5.2 Überprüfung der verfeinerten Indizierungsregeln

5.2.1 Überprüfung anhand von Stoffkenndaten

Um den oben genannten Testdatensatz für die Abschätzung des Kontaminationspotentials auf Grundlage der Stoffdaten einsetzen zu können, wurde dieser auf die Stoffe komprimiert, bei denen die Angaben der Stoffeigenschaften mit Ausnahme der Dissoziationskonstante vollständig waren. Dies ergab einen Datensatz von 342 Stoffen, wobei die PBSM mit fast zwei Dritteln die größte Gruppe darstellte.

Wird die Indexsumme entsprechend der Klassierung der Stoffdaten, wie sie in der Tabelle 6 aufgeführt sind, gebildet, ergibt sich eine Zahl von 30 Stoffen mit einer sehr hohen und weitere 150 Stoffe mit einer hohen Relevanz (Abbildung 7).

Die Verteilungen der Indexzahlen aufgrund der Stoffeigenschaften (S , $\log K_{OW}$, DT_{50} , Indexsumme K) werden in Anlage 4 wiedergegeben.

Die Einbeziehung der Dissoziationskonstante, die für 27 Stoffe ermittelt werden konnten, führt bei 2 Stoffen zu einer Einordnung in eine höhere Klasse.

Belastbare Daten zum anaeroben Abbau lagen nur für 3 Stoffe vor, so dass dieses Kriterium nicht bewertet werden kann.

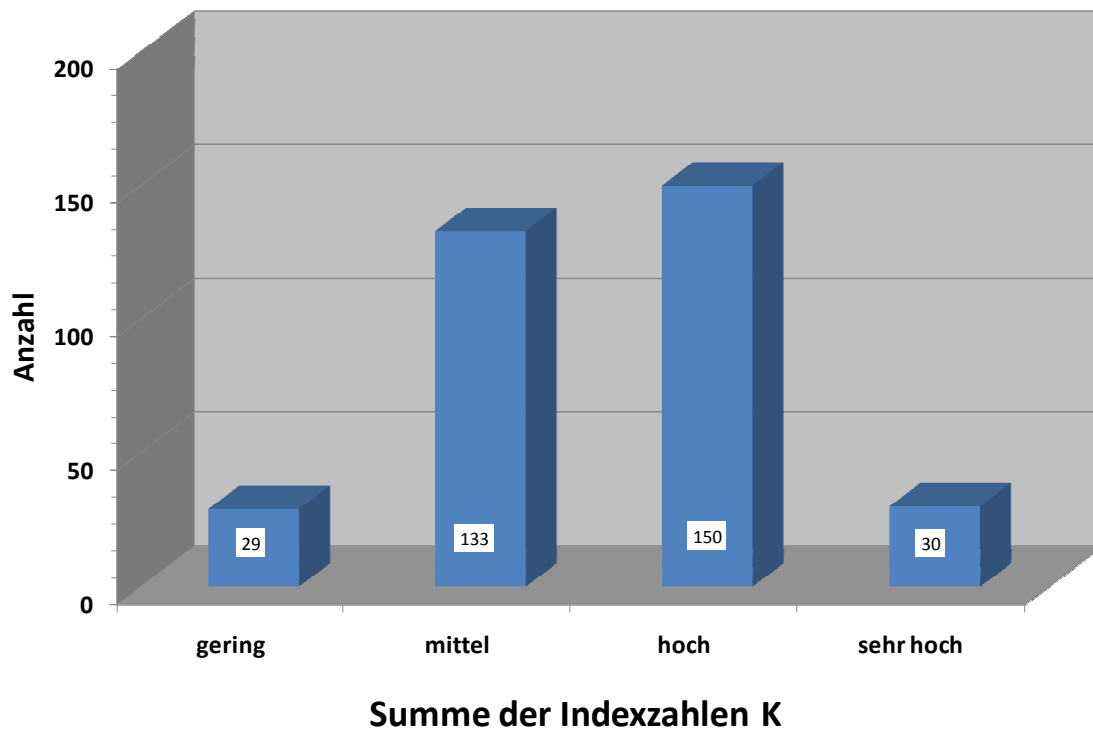


Abbildung 7: Bewertung der Stoffe des Testdatensatzes aufgrund ihrer Eigenschaften nach der verfeinerten Indizierung (n = 342)

Der Testdatensatz ermöglicht auch einen Vergleich zwischen den analytischen Befunden und der aus der Indizierung der Stoffeigenschaften abgeleiteten Bewertung (Abbildung 8).

Von den 180 Stoffen, die mit den modifizierten Indizierungsregeln als hoch oder sehr hoch relevant bewertet werden, wurden für 99 (55 %) Positivbefunde bei Untersuchungen in Oberflächen-, Grund- und Trinkwasser genannt. Der Anteil an Stoffen, denen aufgrund ihrer Stoffeigenschaften eine geringe oder mittlere Relevanz zugewiesen wurde (162 Stoffe) und bei deren Untersuchung gleichzeitig Positivbefunde auftraten, beträgt hingegen nur 43 %. Bei den Substanzen, denen das Screening der stoffintrinsic Eigenschaften eine hohe bis sehr hohe Relevanz für das Auftreten im Roh- und Trinkwasser zugewiesen hat, werden im Vergleich zu den Substanzen, deren Stoffeigenschaften eine geringe bis mittlere Relevanz ausweisen, für mehr Verbindungen tatsächlich Befunde berichtet.

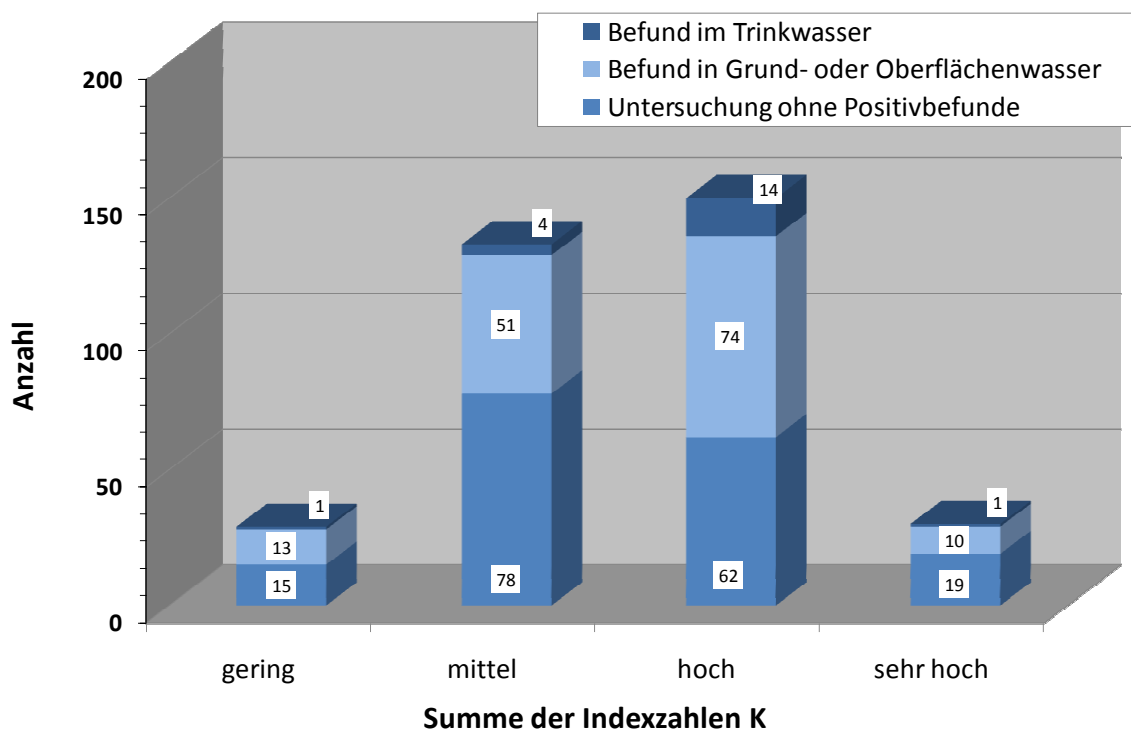


Abbildung 8: Stoffbewertung nach der verfeinerten Indizierung und Positivbefunde in Wasseruntersuchungen (n = 342)

Umgekehrt werden mittels des Screeningmodells Substanzen aufgrund ihrer Stoffeigenschaften eine hohe bis sehr hohe Relevanz zugewiesen, ohne dass für diese Stoffe in den berücksichtigten Untersuchungen auch Positivbefunde registriert werden. Dies lässt sich mit mehreren Gründen erklären:

Auf dieser Stufe sind die Anwendungsmenge und die Art der Verwendung noch nicht berücksichtigt.

Weiterhin eignet sich das Screeningmodell nur zur Erkennung von möglichen Problemstoffen. Ob eine mögliche Kontamination auch eintritt, bleibt einer analytischen Prüfung vorbehalten. Ein Ergebnis dieser analytischen Prüfung kann sein, dass der Stoff trotz seiner an dem untersuchten Standort Eigenschaften nicht auftritt.

Schließlich spiegeln die hier berücksichtigten Angaben aus den Monitoringprogrammen der AWR und der AWWR die regionalen Gegebenheiten wider. Bei den PBSM verweist das Auftreten und die Detektion vor allem auf deren vorangegangene regionale Anwendung.

5.2.2 Überprüfung unter Einbeziehung des Verbreitungspotentials

Die Verbrauchsdaten konnten für insgesamt 94 Stoffe des Testdatensatzes recherchiert werden. Hierbei handelt es sich zum überwiegenden Teil um PBSM und Arzneimittel. Zu den 19 in die Gruppen Chemikalien, Flammenschutzmittel und Lösemittel eingeordneten Stoffen konnten einige wenige Zahlen ermittelt werden. In den meisten dieser Fälle konnte über einen Abgleich mit der ESIS-Datenbank (ESIS 2011) ermittelt werden, ob es sich um Chemikalien mit einem hohen oder niedrigen Produktionsvolumen (HPV bzw. LPV) handelt. Entsprechend dieser Zuordnung konnten die Substanzen in Kategorien < 1.000 t für LPV-Chemikalien oder > 1.000 t für die HPV-Stoffe eingruppiert werden.

Eine Bewertung der Anwendung im Hinblick auf ihre Umweltoffenheit soll entsprechend den in Tabelle 8 zusammengestellten Vorgaben an Hand der Produktgruppe vorgenommen. Für Stoffe, die nicht unter REACH reguliert werden, jedoch im Testdatensatz enthalten sind, werden mit den in Tabelle 9 angegebenen Zahlen indiziert.

Auf diese Weise lässt sich für 69 Stoffe ein Verbreitungspotential entsprechend Gleichung (5) berechnen. Aus der multiplikativen Verknüpfung mit der aus den intrinsischen Stoffeigenschaften ermittelten Indexsumme K ergibt sich nach Gleichung (6) ein Rohwassergängigkeitspotential RGP, das ca. zwischen 2 und 58 lag (Abbildung 9).

Die Verteilung der Indexzahlen für die Indexzahlen der Produktionsmenge, Verwendung, Verbreitungspotential VP und Rohwassergängigkeitspotential RGP sind in Anlage 5 wiedergegeben.

Das unter Einbeziehung der Verbrauchsmengen (I_M), der Anwendung (I_V) und der Stoffeigenschaften (Indexsumme K) ermittelte Rohwassergängigkeitspotential RGP zeigt ein anderes Bild als die Bewertung ausschließlich nach Stoffkriterien.

Der Mehrzahl der Stoffe wird nun ein geringes bis mittleres Kontaminationspotential zugeschrieben.

Tabelle 9: Zur Bewertung eingesetzte Indexzahlen für die Verwendung

Stoffgruppen	Indexzahl (I_V)
Herbizide	1
alle anderen PBSM	0,9
Arzneimittel	0,5
RKM	0,9

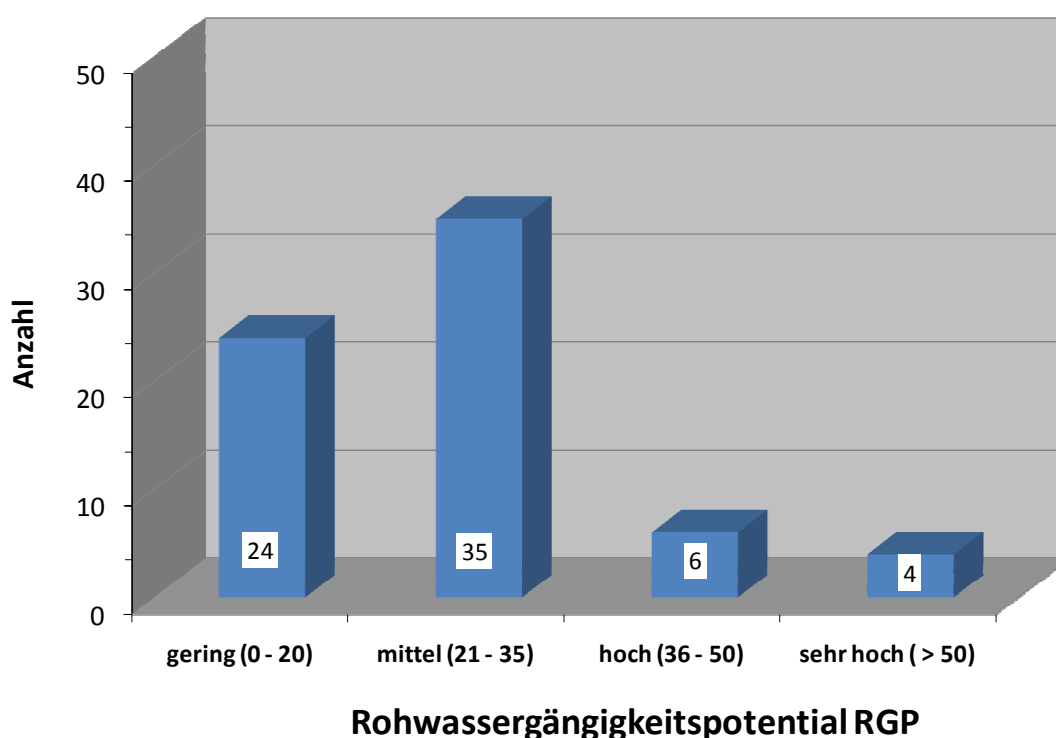


Abbildung 9: Abschätzung des Rohwassergängigkeitspotentials unter Berücksichtigung des Verbreitungspotentials (n = 69)

Von 24 Stoffen mit geringem RGP sind 10 Arzneimittel, die, verglichen mit den bei Industriechemikalien üblichen Tonnagen, in den meisten Fällen nur in geringeren Mengen verbraucht werden. Will man das Screeningmodell ausschließlich auf die Priorisierung von Arzneimitteln anwenden, so muss die Klassenbildung bei den Verbrauchsmengen (Tabelle 7) anders angelegt werden.

Die größte Gruppe bei den Stoffen, denen unter Anlegung der weiteren Kriterien Menge und Verwendung, ein geringes oder mittleres Rohwassergängigkeitspotential zugeschrieben wird, sind PBSM. Bei diesen Stoffen war die Zuordnung von Verbrauchsmengen nur unter Einschränkungen möglich. Die berücksichtigte Zusammenstellung von Stoffen stammt vor allem aus einer älteren Arbeit (SKARK UND ZULLEI-SEIBERT 1999), während die Verbrauchsmengen aus dem Jahr 2005 zugeordnet werden. Beide Datenangaben decken also nicht den gleichen Zeitraum ab. Eine Einbeziehung der Verbrauchsmengen kann aber nur dann sinnvoll und zielgerichtet sein, wenn diese jeweils zeitnah erfolgt.

Von den 69 Stoffen, die letztlich in diese Auswertung eingehen, sind nur 6 Chemikalien, die unter REACH registriert werden bzw. schon registriert sind. Eine Validierung des Screeningmodells kann mit einer so kleinen Zahl an Stoffen nicht als sinnvoll angesehen werden.

6 Ermittlung des Rohwassergängigkeitspotentials mit einem verfeinerten Screeningmodell

Das im 1. Sachverständigengutachten erarbeitete Screeningmodell wurde hinsichtlich der Indizierung der Stoffkriterien Mobilität und Persistenz durch eine Spreizung der Klassen verfeinert. Erweitert wurde das Modell vor allem durch die Einbeziehung des Verbreitungspotentials.

Im Detail wird folgendes Vorgehen vorgeschlagen:

1) Ermittlung der **Indexsumme K** zur Bewertung der stoffintrinsicischen Eigenschaften:

Indizierung der Wasserlöslichkeit, des Log K_{OW} und der DT_{50} entsprechend der Tabelle 6

- Liegen Hinweise auf eine Verschlechterung des Abbaus unter anaeroben Bedingungen vor, sind diese bei der Indizierung der DT_{50} einzubeziehen.
- Bei ionaren Verbindungen, zu denen Dissoziationskonstanten vorliegen, so wird bei pK_a -Werten < 7 wegen der schlechteren Sorbierbarkeit ein zusätzlicher Indexpunkt addiert.

Summierung der Indexzahlen zur stoffintrinsicischen Indexsumme K erfolgt entsprechend Gleichung 1.

2) Ermittlung des **Verbreitungspotentials VP**

Indizierung der Menge entsprechend der Tabelle 7

- bei mehreren Registrierungen werden die Mengen addiert.

Indizierung für die Anwendung aus den in den Registrierungs dossiers hinterlegten ERC (Tabelle 8).

- bei mehreren ERC in unterschiedlichen Indexklassen werden diese addiert.

Multiplikation der Indexzahlen Menge und Verwendung nach Gleichung 5 ergibt das Verbreitungspotential

3) Ermittlung des **Rohwassergängigkeitspotentials RGP**

Aus dem Verbreitungspotential VP und der Indexsumme K, die die Stoffeigenschaften charakterisiert, ergibt sich durch Multiplikation das Rohwassergängigkeitspotential RGP (Gleichung 6).

Das Vorgehen bei der Ermittlung des Rohwassergängigkeitspotentials ist zusammenfassend in der Abbildung 10 als Entscheidungsbaum dargestellt.

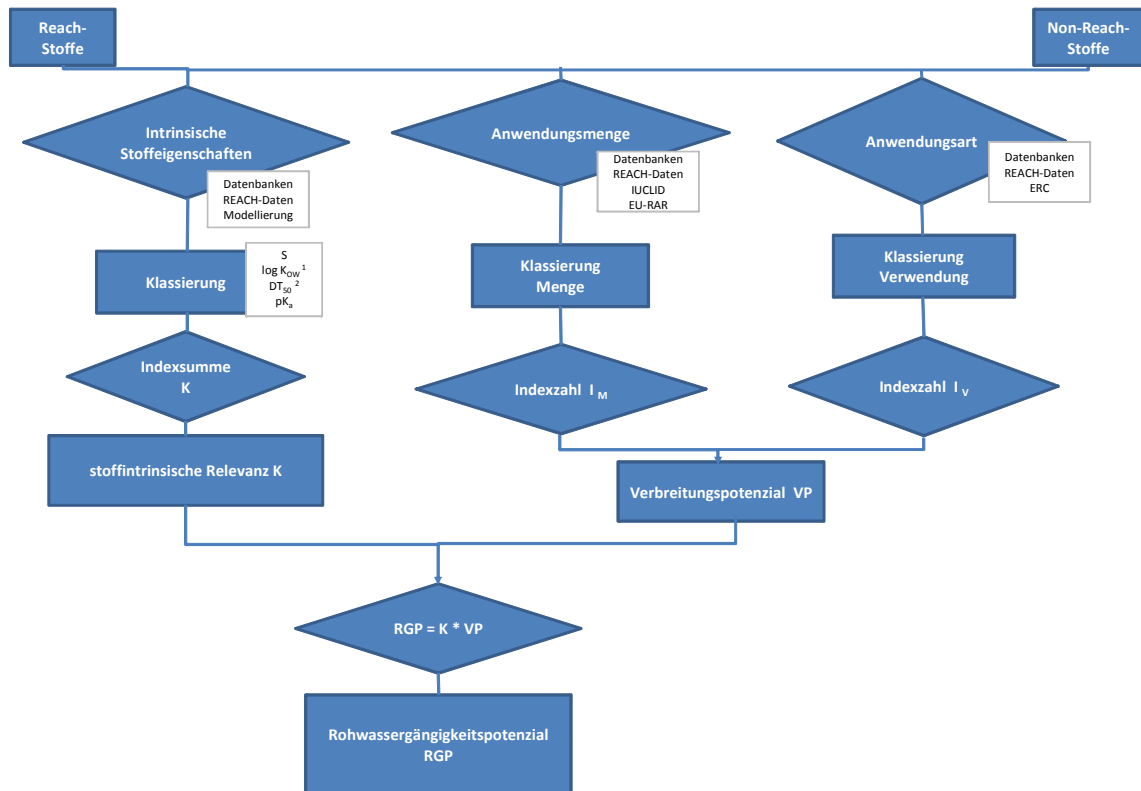


Abbildung 10: Charakterisierung von Stoffen mit einem Kontaminationspotential für Rohwasser (¹ s. Abbildung 11, ² s. Abbildung 12)

In den Abbildungen 11 und 12 sind die besonderen Indizierungsangaben für die Veränderung der Sorbierbarkeit infolge einer Dissoziation und die Berücksichtigung verschiedener Angaben zur Persistenz in Form von Entscheidungsbäumen dargestellt (vgl. Abschnitte 2.1.1 und 2.2.2).

1

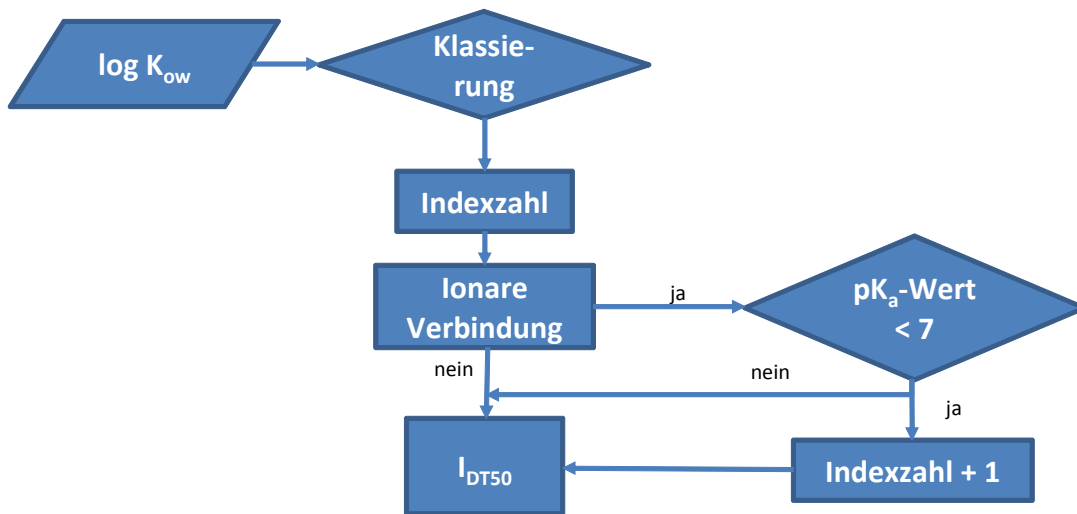


Abbildung 11: Berücksichtigung einer möglichen Dissoziation

2

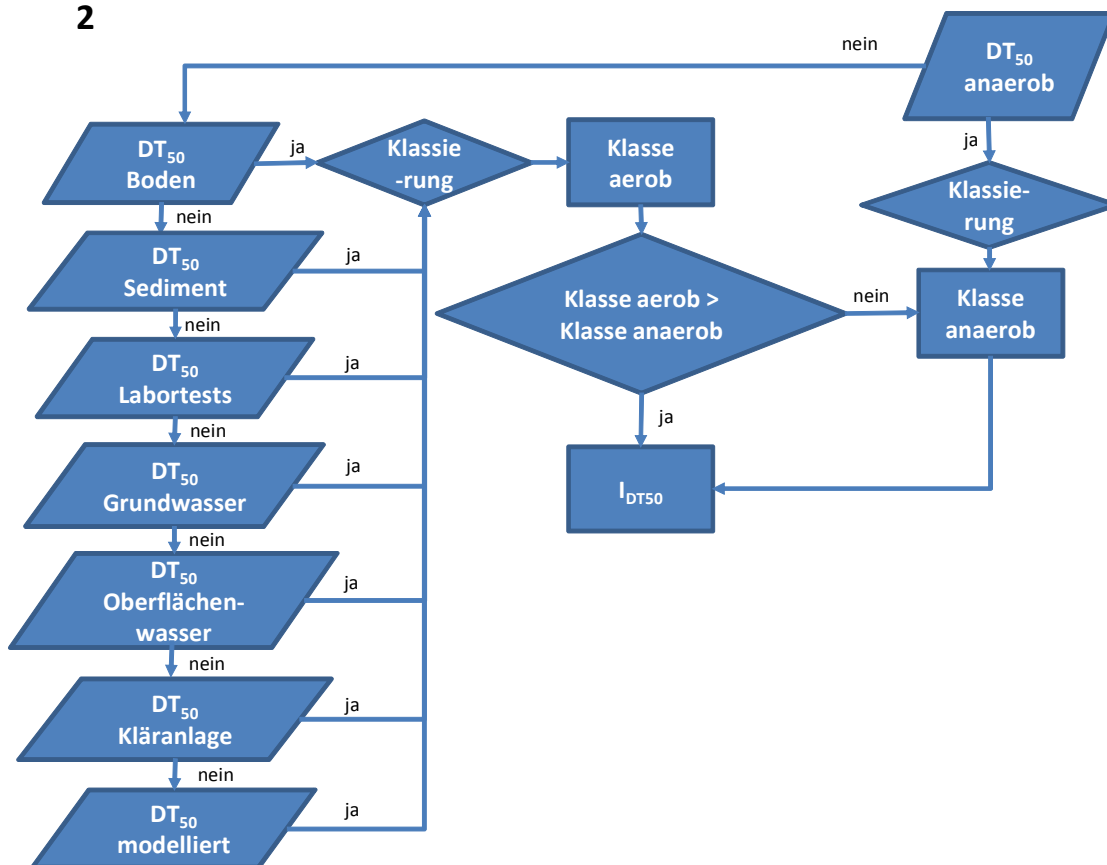


Abbildung 12: Hierarchisierung verschiedener Angaben zur Persistenz

7 Zusammenfassende Diskussion

In diesem Gutachten wurde das im 1. Gutachten erarbeitete Screeningmodell zur Priorisierung von Chemikalien im Hinblick auf ihr Rohwassergängigkeitspotential in zwei Richtungen weiter entwickelt. Zunächst wurde die Parametrisierung und Indizierung des stoffintrinsic Potentials für eine Rohwassergängigkeit überprüft und modifiziert. In einem zweiten Schritt wurde das Verbreitungspotential von Chemikalien parametrisiert und in das Screeningmodell für die Ermittlung der Rohwassergängigkeitspotentials eingefügt.

Nachdem Alternativen zu den bisher zur Charakterisierung von Persistenz und Mobilität eingesetzten Parametern geprüft wurden, bestätigte sich, dass die bisher gewählten Parameter für die Sorbierbarkeit $\log K_{OW}$ und für die Persistenz DT_{50} eine entsprechende Aussagekraft haben, die durch andere Parameter nicht gesteigert werden kann. Gleichzeitig sind diese Stoffkenndaten gemäß den Datenanforderungen für die Registrierung von Chemikalien unter REACH am einfachsten zugänglich.

Weiterhin wurde die Indizierung verfeinert, indem für alle Parameter zur Beschreibung der stoffintrinsic Eigenschaften eine weitere Abstufung der Klassen vorgenommen wurde. Infolge dieser neuen Klassengrenzen werden insgesamt 7 Stufen gebildet und sowohl die Wasserlöslichkeit als auch der Oktanol-Wasserverteilungskoeffizient in einem strengen logarithmischen Maßstab klassiert. Die neue Abstufung für DT_{50} bindet die Persistenzkriterien der Richtlinien der ECHA (2008) ein.

Diese veränderte Abbildungsvorschrift für die Indizierung der Stoffeigenschaften ermöglicht eine bessere Differenzierung als die 4- bis 5-stufige Klassierung, wie sie im 1. Gutachten vorgenommen wurde. Dies war das Ergebnis der Überprüfung an dem Lerndatensatzes von 151 Stoffen, die bereits im Trinkwasser nachgewiesen wurden. In der weiteren Bearbeitung wurde diese verfeinerte Indizierung angewandt.

Für eine weitere Überprüfung wurde ein Testdatensatz von 342 zusätzlichen Stoffen zusammengestellt. Alle Stoffe dieser Zusammenstellung wurden zumindest regional auf ihr Vorkommen im Oberflächen-, Grund-, Roh- und Trinkwasser untersucht und die Basisdaten zu Wasserlöslichkeit, Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient und Abbaubarkeit waren zugänglich. Dieser Testdatensatz enthält wie schon der Lerndatensatz Stoffe, die nicht unter REACH registriert werden, wie PBM und Arzneimittel.

Das Screeningmodell wurde um die Kriterien Menge und Art der Anwendung erweitert. Durch die multiplikative Verknüpfung mit der Indexsumme, die sich aus den Stoffeigenschaften ergibt, werden diese Kriterien besonders gewichtet. Dies führt dazu, dass Chemikalien, die nur in geschlossenen Systemen eingesetzt werden, ein um 90 % geringeres Rohwassergängigkeitspotential zugewiesen wird als einer Substanz, die bei ähnlichen Stoffeigenschaften umweltoffen angewendet wird.

Als Screeningmodell kann das vorgeschlagene System nur dann sinnvoll eingesetzt werden, wenn bestimmte Voraussetzungen erfüllt sind und einige Randbedingungen eingehalten werden. Das Screeningmodell eignet sich nur zur Bewertung von organischen Stoffen, und integriert keine Bewertung human- oder ökotoxikologischer Wirkungen.

Die Betrachtung der möglichen Verbreitung bezieht nur den bestimmungsgemäßen Gebrauch ein. Einträge in die aquatische Umwelt als Folge von Unfällen oder einem verbotswidrigen Einsatz sowie ein daraus folgender Eintrag in Roh- und Trinkwasser lassen sich mit dem entwickelten Screeningmodell nicht vorhersagen oder bewerten.

Biotische und abiotische Transformationsprodukte, die nach einem Eintreten in die Umwelt entstehen, können nur dann betrachtet werden, wenn diese Substanzen einem REACH-konformen Registrierungsprozess unterworfen werden und infolge dessen die Stoffeigenschaften bekannt werden und eine definierte Aussage zum Verbreitungspotential gemacht werden kann.

Mit dem entwickelten Screeningmodell lassen sich potentielle Kontaminanten des Rohwassers erkennen und in einer priorisierenden Rangliste bewerten. Konzentrationen in der aquatischen Umwelt lassen sich hingegen damit nicht vorhersagen

Sowohl eine modellhafte Darstellung der Bedeutung für Standorte, deren naturräumliche Gegebenheiten ein Risikopotential für einen Eintrag organischer Spurenstoffe haben, als auch der tatsächliche Nachweis eines Auftretens an einem gegebenen Standort (sachliche Verifizierung) sind nachgelagerten Untersuchungsschritten vorbehalten und werden nicht in diesem Screeningmodell abgebildet.

Ein standortbezogenes Risikopotential, das z.B. die spezifischen lokalen Gegebenheiten und Randbedingungen einer Wassergewinnungsanlage mit Uferfiltration einbezieht, lässt sich mit dem hier vorgestellten Screeningmodell nicht ermitteln. Für die Aufdeckung eines standörtlichen Risikopotentials eignen sich Modellrechnungen, in die die spezifischen Standortfaktoren eingehen (z.B. ZIPPEL et al. 2010).

Das Screeningmodell ermittelt das Potential eines Stoffes im Roh- und Trinkwasser aufzutreten, vermag aber nicht, die in der Umwelt auftretenden Konzentrationen zu prognostizieren. Inwieweit ein bereits weit verbreiteter Stoff, der als potentieller Kontaminant von Roh- und Trinkwasser identifiziert wird, auch tatsächlich im Roh- und Trinkwasser nachgewiesen werden kann, bleibt einer analytischen Überprüfung in der Praxis oder in Labor- und Simulationsversuchen (wie z.B. Lysimeter) vorbehalten.

Mit dem Screeningmodell können weiterhin auch keine ökotoxischen Wirkungen in der aquatischen Umwelt angezeigt werden.

Das verfeinerte und erweiterte Screeningmodell konnte bisher nur auf einen stark verkleinerten Testdatensatz angewendet werden, da nur in sehr beschränktem Ausmaß Angaben zur Verwendungsart und der Verwendungsmenge zugänglich waren. Um den Nutzen des Modells abschließend zu testen, ist ein Datensatz erforderlich, bei dem zu jedem Stoff alle Kriterien, auch zur Verwendungsmenge und -art belegt sind. Dies ist der Fall bei Chemikalien, die bereits unter REACH registriert sind und zu denen Registrierungs dossiers vorliegen. Im Rahmen dieses Gutachtens waren diese Daten nicht verfügbar. Erst unter der Voraussetzung, dass die kompilierten Daten aus den Registrierungs dossiers zugänglich sind, könnten aus dem Pool der registrierten Stoffe mit Hilfe des Screeningmodells eine Zusammenstellung potentieller Trinkwasserkontaminanten ermittelt werden.

8 Literatur

- ARW (ARBEITSGEMEINSCHAFT DER RHEIN-WASSERWERKE, 2010): ARW - Jahresbericht 2009.- ISSN 0343 – 0391, Köln, 197 S..
- BVL (BUNDESAMT FÜR VERBAUCHERSCHUTZ UND LEBENSMITTELSICHERHEIT, 2006): Absatz an Pflanzenschutzmitteln in Bundesrepublik Deutschland – Ergebnisse der Meldungen gemäß § 19 Pflanzenschutzgesetz für das Jahr 2005
- CHEMIDPLUS 2011 (2011): <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus>
- ECHA (EUROPEAN CHEMICALS AGENCY, 2008): Endpoint specific guidance.- in: ECHA (ed.): Guidance on information requirements and chemical safety assessment.- Chapter R.7b, Helsinki, 234 p. Siehe auch http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/information_requirements_de.htm.
- EC (EUROPEAN COMMISSION, 2003): Technical Guidance Document in Support of the Commission Directive 93767/EEC on Risk Assessment for New Notified Substances and the Commission Regulation (EC) 1488/94 on Risk Assessment of Existing Substances. European Chemicals Bureau, Ispra, Italy
- ECHA (EUROPEAN CHEMICALS AGENCY, 2008b): Endpoint specific guidance.- in: ECHA (ed.): Guidance on information requirements and chemical safety assessment.- Chapter R.7a, Helsinki, 428 p. Siehe auch http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/information_requirements_de.htm.
- ECHA (EUROPEAN CHEMICALS AGENCY, 2008c): Environmental exposure estimation.- in: ECHA (ed.): Guidance on information requirements and chemical safety assessment.- Chapter R.16, Helsinki, 138 p. Siehe auch http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/information_requirements_de.htm.
- ESIS (2011): <http://ecb.jrc.ec.europa.eu/esis/>
- FINLAND'S ENVIRONMENTAL ADMINISTRATION (2011) <http://www.ymparisto.fi>
- FOOTPRINT (2011): <http://www.eu-footprint.org>
- GRATHWOHL, P: (2007): Natürlicher Abbau und Rückhalt von Schadstoffen.- In: FÖRSTNER, U.; GRATHWOHL, P. (Ed.): Ingenieurgeochemie.- Springer, Berlin, Heidelberg, 151-242.
- HEALTH CANADA (2011): <http://www.hc-sc.gc.ca>
- INERIS (2011): <http://chimie.ineris.fr>,
- IUCLID (2011): <http://ecb.jrc.ec.europa.eu/esis>
- KERNDORFF, H.; SCHLEYER, R.; DIETER, H. H. (1993): Bewertung der Grundwassergefährdung von Altablagerungen. Standardisierte Methoden und Maßstäbe.- Institut für Wasser-, Boden- und Lufthygiene des Bundesgesundheitsamtes, WaBoLu-Hefte 1/1993, Berlin, 145 S.
- KUHLMANN, B.; SKARK, C.; ZULLEI-SEIBERT, N. (2010): Definition und Bewertung von trinkwasserrelevanten Chemikalien im Rahmen der REACH-Verordnung und Empfehlungen zum Screening nach potentiell kritischen Substanzen. FKZ 363 01 241. Gutachten im Auftrag des UBA. Schwerte
- LANUV (Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen, 2007): Eintrag von Arzneimitteln und deren Verhalten und Verbleib in der Umwelt.- Fachbericht 2. Recklinghausen, 357 S..
- LÜSKOW, H., WIRTH, O., REIHLEN, A., JEPSEN, D.(2011): Standardisation of Emission Factors for the Exposure Assessment under REACH. UBA-Texte 12/2011, Umweltbundesamt, Dessau-Roßlau



- MUSOLFF, A.; LESCHIK, S.; REINSTORF, F.; STRAUCH, G.; MÖDER, M., SCHIRMER, M. (2007): Xenobiotika im Grundwasser und Oberflächenwasser der Stadt Leipzig.- Grundwasser, 12, (3), 217-231.
- OECD (2009): Guidelines for the Testing of Chemicals. PDF Edition (ISSN 1607-310X), Stand September 2009
- RIPPEN, G. (2010): Umweltchemikalien. Ecomed-Verlag, Landsberg
- SACHER, F.; GABRIEL, S.; METZINGER, M.; STRETZ, A.; WENZ, M.; LANGE, F. T.; BRAUCH, H.-J.; BLANKENHORN, I. (2002): Arzneimittelwirkstoffe im Grundwasser - Ergebnisse eines Monitoring-Programms in Baden-Württemberg.- Vom Wasser, 99, 183-195.
- SCHEYTT, T., MÜLLER, B., ZIPPEL, M., HANNAPPEL, S. (2011): Abschätzung des Stoffeintrags bei der Uferfiltration. Beitrag UBA-Fachgespräch, Dessau
- SCHLEYER, R.; RAFFIUS, B. (2000): Grundwassergefährdung durch organische Luftschadstoffe.- Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau (DVWK), DVWK Materialien 1/2000: GFA Gesellschaft zur Förderung der Abwassertechnik e. V., Hennef, 385 S..
- SCHÜSSLER, W.; SENGL, M.; MIKLER, R.; WEHRLE-VON BORZYSKOWSKI, R. (2004): Arzneimittel in der Umwelt. Bayerisches Landesamt für Wasserwirtschaft, Materialien Nr. 114, München, 89 S..
- SCHWARZENBACH, R. P.; GSCHWEND, P. M.; IMBODEN, D. M. (1993): Environmental Organic Chemistry.- John Wiley, New York, 681 S..
- SKARK, C.; SCHULTE-EBBERT, U.; ZULLEI-SEIBERT, N. (2008): Organische Spurenstoffe und ihre Entfernung in der Trinkwasseraufbereitung an der Ruhr – Ergebnisse im Rahmen der Arnsberger Vereinbarung.- in: Ruhrverband & AWWR (Hg.): Ruhrgütebericht 2007.- Gevelsberg, Essen, 144-148.
- SKARK, C.; ZULLEI-SEIBERT, N. (1999): Vorkommen von Pflanzenbehandlungs- und Schädlingsbekämpfungsmittel in Roh- und Trinkwässern der Bundesrepublik Deutschland.- Veröffentlichungen des Instituts für Wasserforschung GmbH und der Dortmunder Energie- und Wasserversorgung GmbH, Bd. 58, Dortmund, 105 S..
- SKARK, C.; ZULLEI-SEIBERT, N.; SCHÖTTLER, U.; SCHLETT, C. (1998): The occurrence of glyphosate in surface water. International Journal of Environmental Analytical Chemistry 70, 93-104
- TOXNET (2011): <http://toxnet.nlm.nih.gov/>
- UBA (2011): Literaturzusammenstellung zu Funden von Arzneimitteln in Grund- und Trinkwässern.- Fachbereich IV.
- US EPA (2000) Interim Guidance for Using Ready and Inherent Biodegradability Tests to Derive Input Data for Multimedia Models and Wastewater Treatment Plants (WWT) Models, <http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/half-life.htm>
- US EPA (2009): Estimation Program Interface (EPI) Suite.- siehe auch: <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>
- US EPA (2010): <http://fedbbs.access.gpo.gov/library>
- US-EPA (2011a): <http://www.epa.gov/safewater/databases2>
- US-EPA (2011b): <http://www.epa.gov/chemrtk/hpvis>
- WATER RESEARCH FOUNDATION AND DVGW-TECHNOLOGIEZENTRUM WASSER (2010): Removal and Fate of EDCs and PCCPs in Bank Filtration Systems. Water Research Foundation, Denver
- WOLF, L.; EISWIRTH, M.; HÖTZL, H. (2006): Assessing sewer-groundwater interaction at the city scale based on individual sewer defects and marker species distributions. Environmental Geology, 49, (6), 849-857.

ZIPPEL, M.; SCHEYTT, T.; HANNAPPEL, S.; MÜLLER, B. (2010): Mathematische Simulation des Eintrags von Arzneimitteln aus Oberflächengewässern in das Grundwasser durch Uferfiltration.- UBA-Texte 14/10, Berlin, 160 S.

Anlagen

ANLAGENVERZEICHNIS

- Anlage 1:** Stoffkenndaten der Substanzen des Testdatensatzes
- Anlage 2:** Rohwassergängigkeitspotential der Substanzen des Testdatensatzes
- Anlage 3:** Verteilung stoffintrinsischer Indexzahlen für den Lerndatensatz (n = 151)
- Anlage 4:** Verteilung stoffintrinsischer Indexzahlen für den Testdatensatz (n = 342)
- Anlage 5:** Verteilung der Indexzahlen für das Verbreitungspotential VP und das Rohwassergängigkeitspotential RGP des Testdatensatzes (n = 342)

Anlage 1

Stoffkennndaten der Substanzen des Testdatensatzes

Lfd. Nr	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Wasser- löslichkeit [mg/L]	Log K _{ow}	Bioabbau									pK _a		
						Matrix 1			Matrix 2			Matrix 3					
						DT ₅₀ [d] Min	DT ₅₀ [d] Max		DT ₅₀ [d] Min	DT ₅₀ [d] Max		DT ₅₀ [d] Min	DT ₅₀ [d] Max				
1	Acenaphthen	PAK	83-32-9	3,9	3,92	15											
2	Aclonifen	Herbizid	74070-46-5	1,4	4,37	13	195	Boden		4,2			14,3	Wasser/Sediment		-3,15	
3	Aldicarb	Insektizid	116-06-3	6000	1,14	2	10	Boden		8			6	Wasser/Sediment		dissoziiert nicht	
4	Aldrin	Insektizid	309-00-2	0,027	6,50	28	365	Boden								dissoziiert nicht	
5	Alpha-Cypermethrin	Insektizid	67375-30-8	0,004	5,50	25	125	Boden	1	101	Wasser (pH 7)		31	Boden (anaerob)		5	
6	Ametryn	Herbizid	834-12-8	200	2,63	11	120	Boden								4,1, 10,01	
7	Amitrol	Herbizid	61-82-5	280000	-0,97	5	22	Boden (aerob)	47	94	Wasser		56	Boden (anaerob)		4,2(1), 10,7 (2)	
8	Anilazin	Fungizid	101-05-3	8	3,02		1	Boden		1	Wasser		1	Wasser/Sediment		dissoziiert nicht	
9	Anthracen	PAK	120-12-7	0,0434	4,45	30											
10	Asulam	Herbizid	3337-71-1	5000	0,15	6	14	Boden					72	Wasser/Sediment		1,29, 4,68 (pka2)	
11	Atraton	Herbizid	1610-17-9	1800	2,69	15											
12	Azinphos-ethyl	Insektizid	2642-71-9	4,5	3,18		50	Boden									
13	Azinphos-methyl	Insektizid	86-50-0	28	2,96	10	31	Boden								5	
14	Aziprotryn	Herbizid	4658-28-0	55	3,00		5	Boden									
15	Barban	Herbizid	101-27-9	11	3,41	4	15	Boden									
16	Benalaxyl	Fungizid	71626-11-4	28,6	3,54	36	85	Boden (aerob)	365		Wasser	20	98	natürl. Böden		dissoziiert nicht	
17	Benazolin	Herbizid	3813-05-6	500	1,34		21	Boden								3,04	
18	Bendiocarb	Insektizid	22781-23-3	260	1,70		5	Boden		187	Wasser					8,8	
19	Benfluralin	Herbizid	1861-40-1	0,1	5,29	20	86	Boden		0,75	Wasser		1,2	Wasser/Sediment		-0,59	
20	Benodanil	Fungizid	15310-01-7	20	3,72	21	28	Boden									
21	Bensulfuronmethyl	Herbizid	83055-9-66	120	4,10		4	Boden		143	Wasser					5,2	
22	Benzo(a)pyren	PAK	50-32-8	0,00162	6,13	30											
23	Benzo(b)fluoranthen	PAK	205-99-2	0,0015	5,78	30											
24	Benzo(g,h,i)perylen	PAK	191-24-2	0,00026	6,63	50											
25	Benzo(k)fluoranthen	PAK	207-08-9	0,0008	6,11	30											
26	Benzthiazuron	Herbizid	1929-88-0	12	2,10	70	84	Boden								9,76	
27	Betaxolol	Arzneimittel	63659-18-7	451	2,81	15											
28	Bifenox	Herbizid	42576-02-3	0,1	3,64	6	32	Boden					0,11	Wasser/Sediment		dissoziiert nicht	
29	Bromacil	Herbizid	314-40-9	700	1,88	150	180	Boden								9,27	
30	Bromdichlormethan	Lösemittel	75-27-4	3030	2	15											
31	Bromfenoxim	Herbizid	13181-17-4	9	3,17	0,5	5	Boden								5,46	
32	Bromfenvinphos	Insektizid	33399-00-7	7,3	2,68	83	137	Boden	7	70	Wasser	34	40	Wasser/Sediment			
33	Bromophos	Insektizid	2104-96-3	40	5,07	15											
34	Bromophosethyl	Insektizid	4824-78-6	0,44	6,15		8	Boden									
35	Bromophosmethyl	Insektizid	2104-96-3	0,3	5,21	15											
36	Bromoxynil	Herbizid	1689-84-5	130	1,04		14	Boden	9,6	16	Wasser					3,86	
37	Bupirimat	Fungizid	41483-43-6	22	3,80	35	90	Boden		6,2	Wasser		42,5	Wasser/Sediment		4,4	
38	Butralin	Herbizid	33629-47-9	1	4,93		14	Boden								dissoziiert nicht	
39	Buturon	Herbizid	3766-60-7	30	3,00	15											
40	Butylat	Herbizid	2008-41-5	45	4,15	10	70	Boden									
41	Butylbenzol	Sonstige	104-51-8	11,8	4,38	9											
42	Captafol	Fungizid	2425-06-1	1,4	3,80		7	Boden		0,125	Wasser (pH5, 50°C)						
43	Captan	Fungizid	133-06-2	5,2	2,79		2	Boden (Lehm)					6	Boden (Sand)			
44	Carbaryl	Insektizid	63-25-2	120	1,85	14	28	Boden (aerob) Lehm		12	Wasser	7	14	Boden (aerob) Sand			
45	Carbendazim	Fungizid	10605-21-7	8	1,50	25	502	Boden (aerob)	350		Wasser		18	Boden (Feldbedingung)		4,2	
46	Carbetamid	Herbizid	16118-49-3	3500	0,03		30	Boden									
47	Carbofuran	Insektizid	1563-66-2	320	1,52	8	13	Boden									
48	Chinomethionat	Akarizid	2439-01-2	1	3,78	1	3	Boden									
49	Chlor-2-nitrobenzol, 1-	Chemikalie	88-73-3	441	2,24	15											
50	Chlor-2-nitrotoluol, 4-	Chemikalie	89-59-8	61,2	3,05	15											
51	Chlor-3-nitrobenzol, 1-	Chemikalie	121-73-3	273	2,46	15											

Lfd. Nr	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Wasser- löslichkeit [mg/L]	Log K _{OW}	Bioabbau									pK _a		
						DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix1	DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix 2	DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix 3			
						[d] Min	[d] Max		[d] Min	[d] Max		[d] Min	[d] Max				
52	Chlor-4-nitrobenzol, 1-	Chemikalie	100-00-5	225	2,39	15											
53	Chlor-4-nitrotoluol, 2-	Chemikalie	121-86-8	67,2	3,00	15											
54	Chloranilin, 2-	Sonstige	95-51-2	8160	1,90	38											2,661
55	Chloranilin, 3-	Sonstige	108-42-9	5400	1,88	15											3,521
56	Chloranilin, 4-	Sonstige	106-47-8	3900	1,83	15											3,982
57	Chlorbenzol	Sonstige	108-90-7	498	2,84	15											
58	Chlorbromuron	Herbizid	13360-45-7	35	2,90	28	45	Boden		28	77	Wasser (biol. Aktiv)					
59	Chlorbufam	Herbizid	1967-16-4	540	3,02	15											
60	Chlordan (cis + trans)	Insektizid	57-74-9	0,1	2,78		365	Boden									dissoziiert nicht
61	Chlorfenson	Akarizid	80-33-1	2.960	4,21	15											
62	Chlorfenvinphos	Insektizid	470-90-6	145	2,99	83	137	Boden (Lehm)		16,6		Wasser					
63	Chloridazon, Iso-	Herbizid	1698-60-8	422	1,19	31		Boden		51.5		Wasser	137		Wasser/Sediment		3,38
64	Chlormephos	Insektizid	24934-91-6	60	3,04	9											
65	Chlormequat	Wuchsstoff	7003-89-6	1000000	-2,30	1	28	Boden									
66	Chloroform (Trichloromet)	Lösemittel	67-66-3	7950	1,97	15											
67	Chlor-o-toluidin, 5-	Sonstige	95-79-4	832	2,27	15											
68	Chloroxuron	Herbizid	1982-47-4	3,7	3,70	15											
69	Chlorpropham	Herbizid	101-21-3	112	3,75	22	27	Boden (aerob)		18	39	Wasser					
70	Chlorpyrifos	Insektizid	2921-88-2	1,05	4,70	11	141	Boden			5	Wasser		36,5	Wasser/Sediment		dissoziiert nicht
71	Chlorpyrifosmethyl	Insektizid	5598-13-0	2,74	4,00	1	4	Boden (aerob)			21	Wasser	1,5	33	Boden (Feldbedingung)		
72	Chlorsulfuron	Herbizid	64902-72-3	12500	-0,99	160		Boden(aerob)		21		Wasser	26		Wasser/Sediment		3,4
73	Chlorthalmethyl (Dacthal)	Herbizid	1861-32-1	0,21	4,28	25	97	Boden			130	Wasser		39	Wasser/Sediment		dissoziiert nicht
74	Chlorthalonil	Fungizid	1897-45-6	0,6	2,89	40	90	Boden									
75	Chlorthion	Insektizid	500-28-7	40	3,45	15											
76	Chlorthiophos	Insektizid	60238-56-4	0,3	4,34	15											
77	Chlortoluron	Herbizid	15545-48-9	70	2,50		40	Boden		200		Wasser					
78	Clarithromycin	Arzneimittel	81103-11-9	0,342	3,16	50											8,99
79	Clopyralid	Herbizid	1702-17-6	143000	-2,63	13	39	Boden (aerob)		30		Wasser	8	14	Boden (Feldbedingung)		2
80	Coumaphos	Insektizid	56-72-4	1,5	4,13		24	Boden									
81	Crimidin	Rodentizid	535-89-7	9360	1,31	30											
82	Cyanofenphos	Insektizid	13067-93-1	0,6	4,29	15											
83	Cyclohexan	Sonstige	110-82-7	55	3,44	15											
84	Cycluron	Herbizid	2163-69-1	1200	2,84	15											
85	Cyfluthrin	Insektizid	68359-37-5	0,0066	6,00		17				17	Wasser					
86	Cyhalothrin (lambda)	Insektizid	91465-08-6	0,005	7,00	28	84	Boden			20	Wasser					
87	Cypermethrin	Insektizid	52315-07-8	0,009	5,3-5,6		88	Boden (aerob)		17,2		Wasser		16	Boden (Feldbedingung)		
88	Dalapon	Herbizid	75-99-0	500000	0,78								30		Boden (Feldbedingung)		1,79
89	Dazomet	Nematizid	533-74-4	3000	0,15	15											
90	DB, 2,4-	Herbizid	94-82-6	46	1,35	2,3	17,1	Boden (aerob)					24		Boden (Feldbedingung)		4,1
91	DDD (TDE), 4,4-	Insektizide, Metabol	72-54-8	0,09	6,02	1000		Boden				Wasser			Wasser/sediment		dissoziiert nicht
92	DDT, 4,4-	Insektizid	50-29-3	0,006	6,91	6200		Boden				Wasser			Wasser/Sediment		
93	Deiquat	Herbizid	2764-72-9	700000	-4,60	15											
94	Deltamethrin	Insektizid	52918-63-5	0,0002	4,60		26	Boden (aerob)		48		Wasser					
95	Demeton-S-methyl	Insektizid	919-86-8	3300	1,32						65	Wasser					
96	Demeton-S-methylsulfon	Insektizid	17040-19-6	3300	-0,47	9											
97	Desmedipham	Herbizid	13684-56-5	7	3,39		34	Boden			0,83	Wasser					
98	Desmetryn	Herbizid	1014-69-3	580	2,38		50	Boden									4
99	Diazinon	Insektizid	333-41-5	60	3,95	11	21	Boden (aerob)		185		Wasser					
100	Dibenz(a,h)anthracen	PAK	56-56-4	0,00249	6,75	50											
101	Dibromchlormethan	Lösemittel	124-48-1	2700	2,16	15											
102	Dibromchlorpropan, 1,2-	Nematizid	96-12-8	1230	2,43	70	450	Boden									
103	Dibromethan, 1,2-	Insektizid	106-93-4	3910	1,96	15											
104	Dicamba	Herbizid	1918-00-9	6500	-1,00		31	Boden (aerob)					58		Boden (anaerob)		1,97

Lfd. Nr	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Wasser- löslichkeit [mg/L]	Log K _{OW}	Bioabbau									pK _a	
						DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix1	DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix 2	DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix 3		
						[d] Min	[d] Max		[d] Min	[d] Max		[d] Min	[d] Max			
105	Dichlobenil	Herbizid	1194-65-6	21,2	2,70	3	70	Boden			10,5	Wasser		142	Wasser/Sediment	dissoziiert nicht
106	Dichlofenthion	Nematizid	97-17-6	0,245	5,14	15										
107	Dichlofluamid	Fungizid	1085-98-9	2	3,70		6	Boden			> 0,75	Wasser				
108	Dichlor-2-nitrobenzol, 1,4-	Chemikalie	89-61-2	14	3,09	30										
109	Dichlor-3-nitrobenzol, 1,2-	Chemikalie	3209-22-1	62,4	3,05	30										
110	Dichlor-4-nitrobenzol, 1,2-	Chemikalie	99-54-7	121	3,12	30										
111	Dichloran	Fungizid	99-30-9	6,3	2,80	39	78	Boden			1,7	Wasser				
112	Dichloranilin, 2,6-	Chemikalie	608-31-1	295	2,76	30										0,422
113	Dichloranilin, 3,4-	Chemikalie	95-76-1	92	2,69	30										2,968
114	Dichloranilin, 3,5-	Chemikalie	626-43-7	784	2,90	30										2,509
115	Dichlorbenzol, 1,4-	Sonstige	106-46-7	81,3	3,44	15										
116	Dichlorethen, cis, 1,2-	LHKW	156-59-2	6410	1,86	15										
117	Dichlorethen, trans, 1,2-	LHKW	156-60-5	4520	2,09	15										
118	Dichlorprop (2,4 DP)	Herbizid	120-36-5/7547	350	2,29	10		Boden					12		Wasser/Sediment	3
119	Dichlorvos	Insektizid	62-73-7	8800	1,43		0,41	Boden		0,8	3,29	Wasser				
120	Diclofopmethyl	Herbizid	51338-27-3	0,8	4,58						0,52	Wasser	1	57	Boden (Freiland)	
121	Dicofol	Akarizid	115-32-2	0,8	4,28	40	50	Boden		1	4	Wasser				
122	Dieldrin	Insektizid	60-57-1	0,1	5,40	110										
123	Diethyltoluamid (DEET)	Insektizid	134-62-3	912	2,18	15										
124	Difenoxuron	Herbizid	14214-32-5	20	2,54		12	Boden								
125	Diffubenzuron	Insektizid	35367-38-5	0,08	3,89		56	Boden					90	150	Boden (Lehm)	
126	Dimetfuron	Herbizid	34205-21-5	16	2,51	30										
127	Dimethachlor	Herbizid	50563-36-5	2300	2,17	4	15	Boden		9	23	Wasser				
128	Dimethoat	Insektizid	60-51-5	28700	0,70	2	16	Boden			5	Wasser				
129	Dimethylanilin	Insektizid	121-69-7	1450	2,31	15										5,15
130	Dinobuton	Akarizid	973-21-7	3.970	3,94	30										
131	Dinoseb	Herbizid	88-85-7	50	3,56	15										4,62
132	Dinosebacetat	Herbizid	2813-95-8	2200	3,17	15										
133	Dinoterb	Herbizid	1420-07-1	4,5	3,64	30										
134	DIPE (Diisopropylether)	Additive	108-20-3	8800	1,52	15										
135	Diphenylsulphon	PSM	127-63-9	314	2,40	15										
136	Dipropetryn	Herbizid	4147-51-7	16	3,81	30										
137	Disulfoton	Insektizid	298-04-4	25	3,95	9										
138	Ditalimfos	Fungizid	5131-24-8	133	3,48	15										
139	Endosulfan (Isomere)	Insektizid	115-29-7	0,33	4,70	30	70	Boden								
140	Endrin	Insektizid	72-20-8	0,25	5,20	110										
141	Epoxiconazol	Fungizid	106325-08-0	7	3,44					7	14	Wasser	62	109	Boden (Freiland)	
142	EPTC	Herbizid	759-94-4	375	3,20	9										
143	ETBE	Additive	637-92-3	12000	1,92	15										
144	Ethidimuron	Herbizid	30043-49-3	3000	0,43	90	120	Boden								
145	Ethiofencarb	Insektizid	29973-13-5	1800	2,04	15										
146	Ethion	Akarizid	563-12-2	2	5,07		90	Boden								
147	Ethofumesat	Herbizid	26225-79-6	50	2,70		84	Boden (aerob)		8	13	Wasser		30	Boden (Freiland)	
148	Ethoprophos	Insektizid	13194-48-4	840	3,59	14	28	Boden (sand, Lehm)								
149	Ethylhexanol	Sonstige	104-76-7	880	2,73	9										
150	Ethyltoluol, 2-	Sonstige	611-14-3	74,6	3,53	15										
151	Ethyltoluol, 3-	Sonstige	620-14-4	40	3,98	15										
152	Ethyltoluol, 4-	Sonstige	622-96-8	94,9	3,63	15										
153	Etrimphos	Insektizid	38260-54-7	40	2,94	13		Boden								
154	Fenamiphos	Nematizid	22224-92-6	345	3,30		0,85	Boden (aerob)		304	Wasser					
155	Fenarimol	Fungizid	60168-88-9	13,7	3,69	365		Boden (aerob)		0,5	Wasser					
156	Fenchlorazothyl	Herbizid	103112-35-2	0,9	4,52	50										
157	Fenchlorphos	Insektizid	299-84-3	1	4,88	15										

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Wasser- löslichkeit [mg/L]	Log K _{OW}	Bioabbau									pK _a
						DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix1	DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix 2	DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix 3	
						[d] Min	[d] Max		[d] Min	[d] Max		[d] Min	[d] Max		
158	Fenitrothion	Insektizid	122-14-5	21	3,43	12	28	Boden	0,3	3,5	Wasser				
159	Fenoxaprop-p-ethyl	Herbizid	71283-80-2	0,7	4,12	1	2	Boden							
160	Fenpropimorph	Fungizid	67546-91-4	4,3	4,10		93	stark hum. lehm. Sand					15	mäßig hum. Lehm. Sand	6,98
161	Fenthion	Insektizid	55-38-9	4,2	4,84					101,7	Wasser				
162	Fenuron	Herbizid	101-42-8	3850	0,96					43,1	Wasser		60	Boden (Freiland)	
163	Fenvalerat	Insektizid	51630-58-1	0,001	5,01	75	80	Boden							
164	Flamprop-methyl	Herbizid	52756-25-9	35	3,09	15									
165	Fluazifop-butyl	Herbizid	69806-50-4	1	4,50	3	25	Boden							-3,1
166	Fluazifop-p-butyl	Herbizid	79241-46-6	0,93	4,50	1	38	Boden	0,1		Sediment				
167	Fluchloralin	Herbizid	33245-39-5	0,9	5,07		60	Boden							
168	Flufenacet	Herbizid	142459-58-3	56	3,20	15									
169	Fuometuron	Herbizid	2164-17-2	110	2,38		30	Boden							
170	Fluoranthen	PAK	206-44-0	0,26	5,16	30									
171	Flurchloridon	Herbizid	61213-25-0	21,9	3,36	9	55	Boden		4,3	Wasser				
172	Flurenol	Herbizid	467-69-9	36,5	2,48		1,5	Boden	1	4	Wasser				1,09
173	Fluroxypyr	Herbizid	69377-81-7	6500	0,04		50	Boden		185	Wasser				2,94
174	Fluroxypyr (methylheptylester-)	Herbizid	69377-81-7	6500	0,04	1		Boden	10,5		Wasser	34,7		Wasser/Sediment	2,94
175	Flurtamone	Herbizid	96525-23-4	10,7	3,20	56		Boden	23		Wasser	80		Wasser/Sediment	dissoziiert nicht
176	Formothion	Insektizid	2540-82-1	2600	1,48		1	Boden (Lehm)							
177	Furalaxyl	Fungizid	57646-30-7	230	2,70	31	65	Boden							
178	Furmecycloz	Fungizid	60568-05-0	0,3	4,38	15									
179	Haloxyfop	Herbizid	69806-34-4	1,59	1,34	55	100			73	Wasser				2,9
180	Haloxyfop-ethoxyethyl	Herbizid	87237-48-7	0,58	4,33	1		Boden		5	Wasser				
181	HCH, alpha-	PSM	319-84-6	2	3,80	30									
182	HCH, beta-	PSM	319-85-7	0,24	3,78	30									
183	HCH, d-	PSM	319-86-8	10	4,14	30									
184	Heptachlor	Insektizid	76-44-8	0,18	6,10	270	300	Boden							
185	Heptenophos	Insektizid	23560-50-0	2800	2,10		0,16	Boden (aerob)	1,125	3,2	Wasser		1,4	Boden (Freiland)	
186	Hexachlorbenzol	Fungizid	118-74-1	0,0047	3,93		2000	Boden							
187	Hexachlorbutadien	Lösemittel	87-68-3	3,20	4,78	30									
188	Hexazinon	Herbizid	51235-04-2	3300	1,20	30	180	Boden							
189	Indan	Sonstige	496-11-7	109	3,18	15									
190	Inden	Sonstige	95-13-6	332	2,92	15									
191	Indeno-1,2,3-(cd)pyren	PAK	193-39-5	0,00019	6,70	50									
192	Indometacin	Arzneimittel	53-86-1	0,937	4,27	15									
193	Ioxynil	Herbizid	1689-83-4	539	0,23		10	Boden		5	Wasser				4,1
194	Iprodion	Fungizid	36734-19-7	13	3,10		26	Boden (aerob)		67	Wasser	42	215	Boden (Feldbedingungen)	
195	Isocarbamid	Herbizid	30979-48-7	1300	1,03	15									
196	Isodrin	Insektizid	465-73-6	0,014	6,75	15									
197	Isophenphos	Insektizid	25311-71-1	24	4,04	150		Boden							
198	Isopropylbenzol	Sonstige	98-82-8	61,3	3,66	15									
199	Karbutilat	Herbizid	4849-32-5	325	1,66	15									
200	Lenacil	Herbizid	2164-08-1	2,9	1,69				82	150	Wasser	40	60	Boden (Freiland)	10,3
201	Lindan (HCH, gamma)	Insektizid	58-89-9	8,5	3,50	30									
202	Malathion	Insektizid	121-75-5	145	2,75	0,1	0,3	Boden					1	Boden (Freiland)	
203	Maneb	Fungizid	12427-38-2	259	-0,45					8,6	Wasser		7	Boden (Freiland)	
204	MCPA	Herbizid	94-74-6	273,9	0,46		7	Boden		25,4					3,07
205	MCPB	Herbizid	94-81-5	4400	1,32	2	11	Boden							4,84
206	Mecoprop (MCPP)	Herbizid	7085-19-0	250000	-0,19	8		Boden	37		Wasser	50		Wasser/Sediment	3,11
207	Mesotrion	Herbizid	104206-82-8	160	0,11	5		Boden	5,3		Wasser	5,2		Wasser/Sediment	3,12
208	Metalaxyl	Fungizid	57837-19-1	8400	1,75	21	56	Boden							<<0
209	Metamitron	Herbizid	41394-05-2	1700	0,83	2	44	Boden		30,8	Wasser				dissoziiert nicht

Lfd. Nr	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Wasser- löslichkeit [mg/L]	Log K _{OW}	Bioabbau									pK _a	
						Matrix1			Matrix 2			Matrix 3				
						DT ₅₀ [d] Min	DT ₅₀ [d] Max		DT ₅₀ [d] Min	DT ₅₀ [d] Max		DT ₅₀ [d] Min	DT ₅₀ [d] Max			
210	Metazachlor	Herbizid	67129-08-2	430	2,13	30	90	Boden								
211	Methabenzthiazuron	Herbizid	18691-97-9	59	2,64	28		Boden (Lehm)								
212	Methamidophos	Fungizid	10265-92-6	200000	-0,80	15										
213	Metham-Natrium	Nematizid	137-42-8	722000	-2,04	0,02	4	Boden		0,04	Wasser					
214	Methfuroxam	Fungizid	28730-17-8	10	3,16		1250	Boden								
215	Methidathion	Insektizid	950-37-8	250	2,52	3	14	Boden		40,8	Wasser					
216	Methoprotryn	Herbizid	841-06-5	320	2,82	30										
217	Methoxyanilin (o-Anisidin), 2-	Sonstige	90-04-0	14000	1,18	38										4,53
218	Methyl-4,6-dinitrophenol, 2-	Sonstige	534-52-1	198	2,12	38										4,31
219	Methylisothiocyanat	Nematizid	556-61-6	8200	1,37	15										12,3
220	Methylnaphthalin, 1-	PAK	1321-94-4	25	3,72	15										
221	Metobromuron	Herbizid	3060-89-7	330	2,41		30	Boden		14	140	Wasser				
222	Metoxuron	Herbizid	19937-59-8	678	1,60	10	30	Boden								
223	Metribuzin	Herbizid	21087-64-9	1165	1,65	12		Boden		41		Wasser	50		Wasser/Sediment	0,99
224	Metronidazol	Arzneimittel	443-48-1	9500	-0,02	15										
225	Metsulfuronmethyl	Herbizid	74223-64-6	550	-1,74	7	28	Boden		41		Wasser				3,3
226	Mevinphos	Insektizid	26718-65-0	1000000	0,13					35		Wasser				
227	Mirex	Insektizid	2385-85-5	0,085	6,89	410										
228	Monolinuron	Herbizid	1746-81-2	580	2,20	45	60	Boden								
229	Monuron	Herbizid	150-68-5	230	1,98	3	7	Boden		45,1		Wasser				
230	Nadolol	Arzneimittel	42200-33-9	8330	0,81	15										
231	Naled	Insektizid	300-76-5	1,5	1,38		1	Boden		4		Wasser				
232	Napropamid	Herbizid	15299-99-7	73	3,30	46	131	Boden								
233	Naproxen	Arzneimittel	22204-53-1	15,9	3,18	9										
234	Neburon	Herbizid	555-37-3	4,8	4,10	15										
235	Nicosulfuron	Herbizid	111991-09-4	7500	0,61	26		Boden		65		Wasser	41,5		Wasser/Sediment	4,78
236	Nitralin	Herbizid	4726-14-1	0,6	2,92		54	Boden (trocken)								
237	Nitrofen	Herbizid	1836-75-5	0,95	3,40		50	Boden								
238	Nitrothal-isopropyl	Fungizid	10552-74-6	2,7	2,04	1	12	Boden								
239	Nitrotoluol, 2-	Sonstige	88-72-2	650	2,30	15										
240	Nitrotoluol, 3-	Sonstige	99-08-1	500	2,45	38										
241	Nitrotoluol, 4-	Sonstige	99-99-0	442	2,37	15										
242	NMOR	Nitrosamine	59-89-2	1000000	-0,44	15										
243	NTA	Komplexbildner	139-13-9	5,91E+04	-4	1										3,03
244	Oxadixyl	Fungizid	77732-09-3	3400	0,65		300	Boden (aerob)					60	90		
245	Oxazepam	Arzneimittel	604-75-1	179	2,24	15										
246	Oxolinic acid	Arzneimittel	14698-29-4	3,2	0,94	15										
247	Oxydemeton-methyl	Insektizid	301-12-2	1000000	-0,74	1				3		Wasser	3		Wasser/Sediment	
248	Paracetamol	Arzneimittel	103-90-2	14000	0,46	9										
249	Paraquat	Herbizid	4685-14-7	620000	-4,50	2800	5000	Boden					2409		Boden (Sand)	
250	Parathion-ethyl	Insektizid	56-38-2	12,4	3,83	9										
251	Parathion-methyl	Insektizid	298-00-0	55	3,00	45	160	Boden								
252	Penconazol	Fungizid	66246-88-6	70	3,72	133	343	Boden								1,51
253	Pencycuron	Fungizid	66063-05-6	0,3	4,68					460		Wasser				
254	Pendimethalin (Stomp)	Herbizid	40487-42-1	0,33	5,20	90		Boden		4		Wasser	16		Wasser/Sediment	2,8
255	Pentachlorphenol	Fungizid	87-86-5	1000	3,32	50										4,73
256	Pentoxifyllin	Arzneimittel	6493-05-6	77000	0,29	15										
257	Permethrin	Insektizid	52645-53-1	0,2	6,10		38	Boden								
258	PFDa	Per- und polyfluorier	307-55-1	0,0000048	10,16	410										
259	Phenacetin	Arzneimittel	62-44-2	766	1,58	9										
260	Phenanthren	PAK	85-01-8	1,15	4,46	30										
261	Phosphorsäuretributylester	Flammschutzmittel	126-73-8	280	4	1										
262	Phosphorsäuretriethylester	Flammschutzmittel	78-40-0	500000	0,8	9										

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Wasser-löslichkeit [mg/L]	Log K _{OW}	Bioabbau									pK _a		
						DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix1	DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix 2	DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix 3			
						[d] Min	[d] Max		[d] Min	[d] Max		[d] Min	[d] Max				
263	Phosphorsäuretrimethylester	Flammschutzmittel	512-56-2	500000	-0,66	9											
264	Phosphorsäuretriphenylester	Flammschutzmittel	115-86-6	1,9	4,59	9											
265	Picloram	Herbizid	1918-02-1	430	0,30	30	90	Boden			2,6	Wasser					2,3
266	Pindolol	Arzneimittel	13523-86-9	7880	1,75	15											
267	Piperonylbutoxid	Synergist	51-03-6	14,3	4,75		14	Boden (aerob)									
268	Pirimicarb	Insektizid	23103-98-2	270	1,70	29	143	Boden (aerob)	17	25	Wasser		1	5	Boden (Feldbedingungen)		4,4
269	Pirimiphosethyl	Insektizid	23505-41-1	93	4,85	21	70										
270	Pirimiphosmethyl	Insektizid	29232-93-7	8,6	3,90	5	6	Boden									3,71
271	Prochloraz	Fungizid	67747-09-5	34	3,53	6	28	Boden									3,8
272	Procymidon	Fungizid	32809-16-8	2,46	2,98	30											
273	Prometryn	Herbizid	7287-19-6	48	3,10		30	Boden (sand. Lehm)									4,1
274	Propachlor	Herbizid	1918-16-7	700	1,90		4	Boden									
275	Propanil	Herbizid	709-98-8	95	2,29	15											19,1
276	Propham	Herbizid	122-42-9	320	2,59		15	Boden									
277	Propiconazol	Fungizid	60207-90-1	150	3,72	29	70	Boden (aerob)	94	249	Wasser		17	411	Boden (Freiland)		1,09
278	Propoxur	Insektizid	114-26-1	1900	1,56	9											
279	Propranolol	Arzneimittel	525-66-6	61,7	3,48	15											
280	Propyzamid	Herbizid	23950-58-5	9000	3,00	18	85	Boden (aerob)		41	Wasser			55,5	Boden (Freiland)		
281	Pyrazophos	Fungizid	13457-18-6	4,2	3,80							10	21		Boden (Freiland)		
282	Pyren	PAK	129-00-0	0,135	4,88	30											
283	Pyrethrine	Insektizid	8003-34-7	0,001	5,90	15											
284	Pyridate	Herbizid	55512-33-9	1,5	0,50		2,8	Boden		1,1	1,6	Wasser		8	20	Boden (Feldversuch)	
285	Quinmerac	Herbizid	90717-03-6	107000	-1,41	30		Boden	88,7		Wasser		179,4		Wasser/Sediment		4,31
286	Quintozen	Fungizid	82-68-8	0,44	4,46	120	300										
287	Rimsulfuron	Herbizid	122931-48-0	7300	-1,46	24		Boden (aerob)		4	Wasser			6		Wasser/Sediment	4
288	Salicylsäure	Arzneimittel	69-72-7	2240	2,26	15											
289	Secbumeton	Herbizid	26259-45-0	620	3,64	15											
290	Sethoxydim	Herbizid	74051-80-2	4390	1,38	1	3	Boden (aerob)					1	3	Boden (anaerob)		4,62
291	Siduron	Herbizid	1982-49-6	18	2,70	120	150	Boden		290	Wasser						
292	Sotalol	Arzneimittel	3930-20-9	5510	0,24	15											
293	Sulcotrion	Herbizid	99105-77-8	1670	-1,7	25		Boden		9,5	Wasser			63,9		Wasser/sediment	3,13
294	Sulfadiazin	Arzneimittel	68-35-9	77	-0,09	15											6,36
295	Sulfamethazin	Arzneimittel	57-68-1	1500	0,89	30											
296	Sulfapyridin	Arzneimittel	144-83-2	268	0,35	15											8,43
297	Sulfotep	Insektizid	3689-24-5	12	3,99		28	Boden		8,2	Wasser						
298	Swep	Herbizid	1918-18-9	50,3	3,32	15											
299	T, 2,4,5-	Herbizid	93-76-5	278	3,31	14	42	Boden		68	Wasser						2,833
300	TAME (tert-Amylmethylether)	Additive	994-05-8	2640	1,92	15											
301	Tebuconazol	Fungizid	107534-96-3	36	3,70	62		Boden aerob		42,6	Wasser		365		Wasser/sediment		
302	Tebutam	Herbizid	35256-85-0	120	3,00		60	Boden									
303	Tebuthiuron	Herbizid	34014-18-1	230	1,79	360	420	Boden									
304	Tecnazen	Fungizid	117-18-0	2,09	4,38	50											
305	Teflubenzuron	Insektizid	83121-18-0	0,01	4,30	14	84	Boden		5	Wasser						
306	Terbacil	Herbizid	5902-51-2	710	1,91	15											
307	Terbufos	Insektizid	13071-79-9	4,5	4,51	5	12	Boden					29	39	Boden (Freiland)		
308	Terbumeton	Herbizid	33693-04-8	130	3,04		300	Boden									
309	Terbutryn	Herbizid	886-50-0	25	3,72	19	113	Boden (aerob)						1428	Boden (Freiland)		4,3
310	Terbutylazin	Herbizid	5915-41-3	6,6	3,40	75		Boden		6	Wasser		70		Wasser/Sediment		1,9
311	Tetrachlorbenzol, 1,2,4,5-	Sonstige	95-94-3	0,595	4,64	30											
312	Tetrachlorethan, 1,1,1,2-	Lösemittel	630-20-6	1070	2,93	30											
313	Tetrachlorvinfos	Insektizid	22248-79-9	11	3,53	30											
314	Tetradifon (Tedion)	Insektizid	116-29-0	0,08	4,61	50											

Lfd. Nr	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Wasser- löslichkeit [mg/L]	Log K _{ow}	Bioabbau									pK _a
						DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix1	DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix 2	DT ₅₀	DT ₅₀	Matrix 3	
						[d] Min	[d] Max		[d] Min	[d] Max		[d] Min	[d] Max		
315	Tetramethrin	Insektizid	7696-12-0	1,83	4,58	3		Boden		1	Wasser				
316	Tetrasul	Akarizid	2227-13-6	0,03	6,87	50									
317	Thiabendazol	Fungizid	148-79-8	30	2,39	365		Boden (aerob)		203	Wasser	730		Boden (Freiland)	4,73
318	Thiazafluron	Herbizid	25366-23-8	2100	1,85	30									
319	Thifensulfuronmethyl	Herbizid	79277-27-3	2240	-1,70	2	6	Boden (aerob)	18	26	Wasser	3	20	Boden (Freiland)	4
320	Thiometon	Insektizid	640-15-3	200	3,46		2	Boden							
321	Thionazin	Nematizid	297-97-2	1140	1,86	9									
322	Tolyfluanid	Fungizid	731-27-1	0,9	3,90	3	6	Boden		1,2	Wasser				
323	TP, 2,4,5- (Fenoprop)	Herbizid	93-72-1	71	3,80		14	Boden		68	Wasser				2,84
324	Triadimefon	Fungizid	43121-43-3	64	3,11		18	Boden (sand, Lehm)	360		Wasser				
325	Triadimenol	Fungizid	55219-65-3	62	3,08				356		Wasser	300		Boden (Freiland)	
326	Triallat	Herbizid	2303-17-5	4	4,55	56	77	Boden	2	15	Wasser				
327	Triazophos	Insektizid	24017-47-8	35	3,30	6	12	Boden (aerob)	3		Wasser				
328	Tribenuronmethyl	Herbizid	101200-48-0	2040	0,79		8	Boden							5
329	Tribrommethan (Bromoform)	Lösemittel	75-25-2	3100	2,40	15									
330	Trichlorbenzol, 1,3,5-	Sonstige	108-70-3	6,01	4,19	30									
331	Trichlorethan, 1,1,1-	Lösemittel	71-55-6	1290	2,49	30									
332	Trichlornitromethan (Chlorpiki)	Insektizid	76-06-2	10000	2,50	4	22	Boden							dissoziiert nicht
333	Trichlorphon	Insektizid	52-68-6	130000	0,43	7	30	Boden				5	30	Boden (Freiland)	
334	Triclopyr	Herbizid	55335-06-3	8000	-0,45		46	Boden		1	Wasser				3,97
335	Tridemorph	Fungizid	81412-43-3	1,1	4,40	20	50	Boden (aerob)		0,7	Wasser	13	34	Boden (Freiland)	6,5
336	Trietazin	Herbizid	1912-26-1	20	3,34		60	Boden							1,88
337	Trifluormethylanilin, 3-	Sonstige	98-16-8	5460	2,29	30									3,49
338	Trifluralin	Herbizid	1582-09-8	0,221	5,07		116	Boden (aerob)				57	126	Boden	
339	Triglyme	Additive	112-49-2	249000	-0,76	15									
340	Trimethoprim	Arzneimittel	738-70-5	400	0,91		15								
341	Tylosin	Arzneimittel	1401-69-0	5	1,63	2		Boden							7,73
342	Vinclozolin	Fungizid	50471-44-8	3,4	3,02	30									

farbig unterlegt Daten sind modelliert

Anlage 2

Rohwassergängigkeitspotential der Substanzen des
Testdatensatzes

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Messwerte > BG			Indexzahlen			Indexsumme K	Menge [t]	Indexzahlen		Indexsumme VP	RGP
				OW	GW	TW	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}			I _M	I _V		
1	Acenaphthen	PAK	83-32-9	x	x		2	3	2	7					
2	Aclonifen	Herbizid	74070-46-5	x			2	2	6	10	100 - 250	3	1	3	30
3	Aldicarb	Insektizid	116-06-3		x		5	5	1	11					
4	Aldrin	Insektizid	309-00-2		x	x	1	1	6	8					
5	Alpha-Cypermethrin	Insektizid	67375-30-8				1	1	4	6	10 - 25	2	1	2	12
6	Ametryn	Herbizid	834-12-8		x	x	4	4	4	12					
7	Amitrol	Herbizid	61-82-5				7	7	4	18	25 - 100	2	1	2	36
8	Anilazin	Fungizid	101-05-3				2	3	1	6					
9	Anthracen	PAK	120-12-7	x	x		1	2	2	5					
10	Asulam	Herbizid	3337-71-1				5	6	4	15					
11	Atraton	Herbizid	1610-17-9		x	x	5	4	2	11					
12	Azinphos-ethyl	Insektizid	2642-71-9	x			2	3	3	8					
13	Azinphos-methyl	Insektizid	86-50-0	x			3	4	2	9					
14	Azirotryn	Herbizid	4658-28-0				3	4	1	8					
15	Barban	Herbizid	101-27-9				3	3	2	8					
16	Benalaxyl	Fungizid	71626-11-4				3	3	6	12					
17	Benazolin	Herbizid	3813-05-6				4	5	2	11					
18	Bendiocarb	Insektizid	22781-23-3				4	5	6	15					
19	Benfluralin	Herbizid	1861-40-1				1	1	1	3					
20	Benodanil	Fungizid	15310-01-7				3	3		6					
21	Bensulfuronmethyl	Herbizid	83055-9-66				4	2	5	11					
22	Benzo(a)pyren	PAK	50-32-8	x	x	x	1	1	3	5					
23	Benzo(b)fluoranthren	PAK	205-99-2	x	x		1	1	3	5					
24	Benzo(g,h,i)perlylen	PAK	191-24-2	x	x		1	1	3	5					
25	Benzo(k)fluoranthren	PAK	207-08-9	x	x		1	1	3	5					
26	Benzthiazuron	Herbizid	1929-88-0				3	4	4	11					
27	Betaxolol	Arzneimittel	63659-18-7				4	4	2	10					
28	Bifenox	Herbizid	42576-02-3	x			1	3	3	7	25 - 100	2	1	2	14
29	Bromacil	Herbizid	314-40-9				4	5	5	14					
30	Bromdichlormethan	Lösemittel	75-27-4	x		x	5	5	2	12					
31	Bromfenoxim	Herbizid	13181-17-4				2	3	1	6					
32	Bromfenvinphos	Insektizid	33399-00-7				2	4	4	10					
33	Bromophos	Insektizid	2104-96-3				3	1	2	6					
34	Bromophosethyl	Insektizid	4824-78-6				1	1	1	3					
35	Bromophosmethyl	Insektizid	2104-96-3				1	1	2	4					
36	Bromoxnyl	Herbizid	1689-84-5				4	5	2	11	25 - 100	2	1	2	22
37	Bupirimat	Fungizid	41483-43-6				3	3	3	9					
38	Butralin	Herbizid	33629-47-9				2	2	2	6					
39	Buturon	Herbizid	3766-60-7				3	4	2	9					
40	Butylat	Herbizid	2008-41-5				3	2	4	9					
41	Butylbenzol	Sonstige	104-51-8	x			3	2	1	6	10	1			

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Messwerte > BG			Indexzahlen			Indexsumme K	Menge [t]	Indexzahlen		Indexsumme VP	RGP
				OW	GW	TW	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}			I _M	I _V		
42	Captafol	Fungizid	2425-06-1				2	3	1	6					
43	Captan	Fungizid	133-06-2				2	4	1	7	100 - 250	3	0,9	2,7	18,9
44	Carbaryl	Insektizid	63-25-2				4	5	2	11					
45	Carbendazim	Fungizid	10605-21-7				2	5	6	13	25 - 100	2	0,9	1,8	23,4
46	Carbetamid	Herbizid	16118-49-3	x			5	6	2	13					
47	Carbofuran	Insektizid	1563-66-2		x		4	5	2	11					
48	Chinomethionat	Akarizid	2439-01-2				2	3	1	6					
49	Chlor-2-nitrobenzol, 1-	Chemikalie	88-73-3	x			4	4	2	10					
50	Chlor-2-nitrotoluol, 4-	Chemikalie	89-59-8	x			3	3	2	8	<1000	2			
51	Chlor-3-nitrobenzol, 1-	Chemikalie	121-73-3	x			4	4	2	10	>1000	4			
52	Chlor-4-nitrobenzol, 1-	Chemikalie	100-00-5	x			4	4	2	10	<1000	2			
53	Chlor-4-nitrotoluol, 2-	Chemikalie	121-86-8	x			3	4	2	9	>1000	4			
54	Chloranilin, 2-	Sonstige	95-51-2	x			5	5	2	12					
55	Chloranilin, 3-	Sonstige	108-42-9	x			5	5	2	12					
56	Chloranilin, 4-	Sonstige	106-47-8	x			5	5	2	12	500-1000	3			
57	Chlorbenzol	Sonstige	108-90-7	x			4	4	2	10	60000-70000	4			
58	Chlorbromuron	Herbizid	13360-45-7	x			3	4	3	10					
59	Chlorbufam	Herbizid	1967-16-4				4	3	2	9					
60	Chlordan (cis + trans)	Insektizid	57-74-9	x			1	4	6	11					
61	Chlorfenson	Akarizid	80-33-1				5	2	2	9					
62	Chlorfenvinphos	Insektizid	470-90-6			x	4	4	5	13					
63	Chloridazon, Iso-	Herbizid	1698-60-8	x			4	5	5	14	25 - 100	2	1	2	28
64	Chlormephos	Insektizid	24934-91-6				3	3	1	7					
65	Chlormequat	Wuchsstoff	7003-89-6				7	7	2	16	> 1000	4	0,9	3,6	57,6
66	Chloroform (Trichlormet)	Lösemittel	67-66-3	x	x	x	5	5	2	12	>1000	4	0,7	2,8	33,6
67	Chlor-o-toluidin, 5-	Sonstige	95-79-4	x			4	4	2	10					
68	Chloroxuron	Herbizid	1982-47-4				2	3	2	7					
69	Chlorpropham	Herbizid	101-21-3				4	3	2	9	10 - 25	2	1	2	18
70	Chlorpyrifos	Insektizid	2921-88-2	x			2	2	5	9					
71	Chlorpyrifosmethyl	Insektizid	5598-13-0				2	3	2	7					
72	Chlorsulfuron	Herbizid	64902-72-3				6	7	5	18					
73	Chlorthalmethyl (Dacthal)	Herbizid	1861-32-1				1	2	5	8					
74	Chlorthalonil	Fungizid	1897-45-6				2	4	4	10	250 - 1000	3	0,9	2,7	27
75	Chlorthion	Insektizid	500-28-7				3	3	2	8					
76	Chlorthiophos	Insektizid	60238-56-4				1	2	2	5					
77	Chlortoluron	Herbizid	15545-48-9		x	x	3	4	6	13					
78	Clarithromycin	Arzneimittel	81103-11-9	x	x		1	3	3	7	7	1	0,5	0,5	3,5
79	Clopyralid	Herbizid	1702-17-6				7	7	2	16	10 - 25	2	1	2	32
80	Coumaphos	Insektizid	56-72-4				2	2	2	6					
81	Crimidin	Rodentizid	535-89-7				5	5	2	12					
82	Cyanofenphos	Insektizid	13067-93-1				1	2	2	5					
83	Cyclohexan	Sonstige	110-82-7	x			3	3	2	8	>1000	4			
84	Cycluron	Herbizid	2163-69-1				5	4	2	11					

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Messwerte > BG			Indexzahlen			Indexsumme K	Menge [t]	Indexzahlen		Indexsumme VP	RGP
				OW	GW	TW	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}			I _M	I _V		
85	Cyfluthrin	Insektizid	68359-37-5				1	1	2	4					
86	Cyhalothrin (lambda)	Insektizid	91465-08-6				1	1	4	6	25 - 100	2	0,9	1,8	10,8
87	Cypermethrin	Insektizid	52315-07-8				1	1	6	8					
88	Dalapon	Herbizid	75-99-0				7	6	2	15					
89	Dazomet	Nematizid	533-74-4				5	6	2	13					
90	DB, 2,4-	Herbizid	94-82-6			x	3	5	2	10					
91	DDD (TDE), 4,4-	Insektizide, Metabolit	72-54-8	x			1	1	7	9					
92	DDT, 4,4-	Insektizid	50-29-3	x			1	2	7	10					
93	Deiquat	Herbizid	2764-72-9				7	7	2	16	25 - 100	2	1	2	32
94	Deltamethrin	Insektizid	52918-63-5				1	2	3	6					
95	Demeton-S-methyl	Insektizid	919-86-8				5	5	4	14					
96	Demeton-S-methylsulfon	Insektizid	17040-19-6				5	7	1	13					
97	Desmedipham	Herbizid	13684-56-5				2	3	2	7					
98	Desmetryn	Herbizid	1014-69-3		x		4	4	3	11					
99	Diazinon	Insektizid	333-41-5				3	3	2	8					
100	Dibenz(a,h)anthracen	PAK	56-56-4	x	x		1	1	3	5					
101	Dibromchlormethan	Lösemittel	124-48-1	x	x	x	5	4	2	11					
102	Dibromchlorpropan, 1,2-	Nematizid	96-12-8				5	4	7	16					
103	Dibrommethan, 1,2-	Insektizid	106-93-4				5	5	2	12					
104	Dicamba	Herbizid	1918-00-9				5	7	3	15	25 - 100	2	1	2	30
105	Dichlobenil	Herbizid	1194-65-6	x			3	4	4	11					
106	Dichlofenthion	Nematizid	97-17-6				1	1	2	4					
107	Dichlofluanid	Fungizid	1085-98-9				2	3	1	6					
108	Dichlor-2-nitrobenzol, 1,4-	Chemikalie	89-61-2	x			3	3	2	8	>1000	4			
109	Dichlor-3-nitrobenzol, 1,2-	Chemikalie	3209-22-1	x			3	3	2	8	<1000	2			
110	Dichlor-4-nitrobenzol, 1,2-	Chemikalie	99-54-7	x			4	3	2	9	>1000	4			
111	Dichloran	Fungizid	99-30-9				2	4	4	10					
112	Dichloranilin, 2,6-	Chemikalie	608-31-1	x			4	4	2	10	<1000	2			
113	Dichloranilin, 3,4-	Chemikalie	95-76-1	x			3	4	2	9	>1000	4			
114	Dichloranilin, 3,5-	Chemikalie	626-43-7	x			4	4	2	10	<1000	2			
115	Dichlorbenzol, 1,4-	Sonstige	106-46-7	x			3	3	2	8	15000-20000	4			
116	Dichlorethen, cis, 1,2-	LHKW	156-59-2	x			5	5	2	12					
117	Dichlorethen, trans, 1,2-	LHKW	156-60-5	x			5	4	2	11					
118	Dichlorprop (2,4 DP)	Herbizid	120-36-5/7547	x			4	4	2	10	250 - 1000	3	1	3	30
119	Dichlorvos	Insektizid	62-73-7				5	5	1	11					
120	Diclofopmethyl	Herbizid	51338-27-3				1	2	3	6					
121	Dicofol	Akarizid	115-32-2				1	2	3	6					
122	Dieldrin	Insektizid	60-57-1		x		1	1	4	6					
123	Diethyltoluamid (DEET)	Insektizid	134-62-3		x		4	4	2	10					
124	Difenoxuron	Herbizid	14214-32-5				3	4	2	9					
125	Diflubenzuron	Insektizid	35367-38-5				1	3	5	9					
126	Dimefuron	Herbizid	34205-21-5	x			3	4	2	9					
127	Dimethachlor	Herbizid	50563-36-5				5	4	2	11	100 - 250	3	1	3	33

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Messwerte > BG			Indexzahlen			Indexsumme K	Menge [t]	Indexzahlen		Indexsumme VP	RGP
				OW	GW	TW	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}			I _M	I _V		
128	Dimethoat	Insektizid	60-51-5				6	6	2	14	100 - 250	3	0,9	2,7	37,8
129	Dimethylanilin	Insektizid	121-69-7				5	4	2	11					
130	Dinobuton	Akarizid	973-21-7				5	3	2	10					
131	Dinoseb	Herbizid	88-85-7				3	3	2	8					
132	Dinosebacetat	Herbizid	2813-95-8				5	3	2	10					
133	Dinoterb	Herbizid	1420-07-1				2	3	2	7					
134	DIPE (Diisopropylether)	Additive	108-20-3				5	5	2	12	>1000	4			
135	Diphenylsulphon	PSM	127-63-9	x			4	4	2	10					
136	Dipropetryn	Herbizid	4147-51-7				3	3	2	8					
137	Disulfoton	Insektizid	298-04-4				3	3	1	7					
138	Ditalimfos	Fungizid	5131-24-8				4	3	2	9					
139	Endosulfan (Isomere)	Insektizid	115-29-7	x			1	2	4	7					
140	Endrin	Insektizid	72-20-8		x		1	1	4	6					
141	Epoxiconazol	Fungizid	106325-08-0				2	3	4	9	100 - 250	3	0,9	2,7	24,3
142	EPTC	Herbizid	759-94-4	x			4	3	1	8					
143	ETBE	Additive	637-92-3	x	x		6	5	2	13	>1000	4			
144	Ethidimuron	Herbizid	30043-49-3	x			5	6	5	16					
145	Ethiofencarb	Insektizid	29973-13-5				5	4	2	11					
146	Ethion	Akarizid	563-12-2				2	1	4	7					
147	Ethofumesat	Herbizid	26225-79-6				3	4	2	9	25 - 100	2	1	2	18
148	Ethoprophos	Insektizid	13194-48-4				4	3	2	9					
149	Ethylhexanol	Sonstige	104-76-7	x			4	4	1	9	575500	4			
150	Ethyltoluol, 2-	Sonstige	611-14-3	x			3	3	2	8					
151	Ethyltoluol, 3-	Sonstige	620-14-4	x			3	3	2	8					
152	Ethyltoluol, 4-	Sonstige	622-96-8	x			3	3	2	8					
153	Etrimphos	Insektizid	38260-54-7	x			3	4	2	9					
154	Fenamiphos	Nematizid	22224-92-6				4	3	3	10					
155	Fenarimol	Fungizid	60168-88-9				3	3	3	9					
156	Fenchlorazolethyl	Herbizid	103112-35-2				1	2	3	6					
157	Fenchlorphos	Insektizid	299-84-3				2	2	2	6					
158	Fenitrothion	Insektizid	122-14-5				3	3	2	8					
159	Fenoxaprop-p-ethyl	Herbizid	71283-80-2				1	2	1	4					
160	Fenpropimorph	Fungizid	67546-91-4		x		2	2	4	8	250 - 1000	3	0,9	2,7	21,6
161	Fenthion	Insektizid	55-38-9				2	2	4	8					
162	Fenuron	Herbizid	101-42-8				5	6	4	15					
163	Fenvalerat	Insektizid	51630-58-1				1	1	4	6					
164	Flamprop-methyl	Herbizid	52756-25-9				3	3	2	8					
165	Fluazifop-butyl	Herbizid	69806-50-4				2	2	2	6					
166	Fluazifop-p-butyl	Herbizid	79241-46-6	x			1	2	2	5	25 - 100	2	1	2	10
167	Fluchloralin	Herbizid	33245-39-5	x			1	1	4	6					
168	Flufenacet	Herbizid	142459-58-3	x			3	3	2	8	250 - 1000	3	1	3	24
169	Fluometuron	Herbizid	2164-17-2	x			4	4	2	10					
170	Fluoranthen	PAK	206-44-0	x	x		1	1	2	4					

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Messwerte > BG			Indexzahlen			Indexsumme K	Menge [t]	Indexzahlen		Indexsumme VP	RGP
				OW	GW	TW	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}			I _M	I _V		
171	Flurchloridon	Herbizid	61213-25-0				3	3	3	9					
172	Flurenol	Herbizid	467-69-9				3	4	1	8					
173	Fluroxypr	Herbizid	69377-81-7	x			5	6	6	17	100 - 250	3	1	3	51
174	Fluroxypr (methylheptylester-)	Herbizid	69377-81-7	x			5	6	2	13					
175	Flurtamone	Herbizid	96525-23-4	x			3	3	4	10	100 - 250	3	1	3	30
176	Formothion	Insektizid	2540-82-1				5	5	1	11					
177	Furalaxyl	Fungizid	57646-30-7				4	4	4	12					
178	Furmecyclo	Fungizid	60568-05-0				1	2	2	5					
179	Haloxyfop	Herbizid	69806-34-4				2	5	4	11	10 - 25	2	1	2	22
180	Haloxyfop-ethoxyethyl	Herbizid	87237-48-7				1	2	1	4					
181	HCH, alpha-	PSM	319-84-6	x			2	3	2	7					
182	HCH, beta-	PSM	319-85-7	x			1	3	2	6					
183	HCH, d-	PSM	319-86-8	x			3	2	2	7					
184	Heptachlor	Insektizid	76-44-8				1	1	6	8					
185	Heptenophos	Insektizid	23560-50-0				5	4	1	10					
186	Hexachlorbenzol	Fungizid	118-74-1			x	1	3	7	11					
187	Hexachlorbutadien	Lösemittel	87-68-3	x			2	2	2	6					
188	Hexazinon	Herbizid	51235-04-2	x	x	x	5	5	6	16					
189	Indan	Sonstige	496-11-7	x			4	3	2	9	<10	1			
190	Inden	Sonstige	95-13-6	x			4	4	2	10	3-300	2			
191	Indeno-1,2,3-(cd)pyren	PAK	193-39-5	x	x		1	1	3	5					
192	Indometacin	Arzneimittel	53-86-1	x			1	2	2	5	4	1	0,5	0,5	2,5
193	Ioxynil	Herbizid	1689-83-4				4	6	2	12	25 - 100	2	1	2	24
194	Iprodion	Fungizid	36734-19-7				3	3	6	12	10 - 25	2	0,9	1,8	21,6
195	Isocarbamid	Herbizid	30979-48-7				5	5	2	12					
196	Isodrin	Insektizid	465-73-6				1	1	2	4					
197	Isophenphos	Insektizid	25311-71-1	x			3	2	5	10					
198	Isopropylbenzol	Sonstige	98-82-8	x			3	3	2	8	100-500	3			
199	Karbutilat	Herbizid	4849-32-5				4	5	2	11					
200	Lenacil	Herbizid	2164-08-1	x			2	5	5	12					
201	Lindan (HCH, gamma)	Insektizid	58-89-9	x	x	x	2	3	2	7					
202	Malathion	Insektizid	121-75-5				4	4	1	9					
203	Maneb	Fungizid	12427-38-2				4	7	1	12	100 - 250	3	0,9	2,7	32,4
204	MCPA	Herbizid	94-74-6		x		4	6	2	12	250 - 1000	3	1	3	36
205	MCPB	Herbizid	94-81-5	x			5	5	2	12					
206	Mecoprop (MCP)	Herbizid	7085-19-0	x			7	7	3	17	100 - 250	3	1	3	51
207	Mesotrion	Herbizid	104206-82-8	x			4	6	1	11	25 - 100	2	1	2	22
208	Metalaxyl	Fungizid	57837-19-1				5	5	3	13	25 - 100	2	0,9	1,8	23,4
209	Metamitron	Herbizid	41394-05-2				5	6	3	14	250 - 1000	3	1	3	42
210	Metazachlor	Herbizid	67129-08-2	x	x	x	4	4	4	12	250 - 1000	3	1	3	36
211	Methabenzthiazuron	Herbizid	18691-97-9	x			3	4	2	9					
212	Methamidophos	Fungizid	10265-92-6				7	7	2	16	25 - 100	2	0,9	1,8	28,8

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Messwerte > BG			Indexzahlen			Indexsumme K	Menge [t]	Indexzahlen		Indexsumme VP	RGP
				OW	GW	TW	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}			I _M	I _V		
213	Metham-Natrium	Nematizid	137-42-8				7	7	1	15					
214	Methfuroxam	Fungizid	28730-17-8				3	3	7	13					
215	Methidathion	Insektizid	950-37-8				4	4	3	11					
216	Methoprotryn	Herbizid	841-06-5		x		4	4	2	10					
217	Methoxyanilin (o-Anisidin), 2-	Sonstige	90-04-0	x			6	5	2	13					
218	Methyl-4,6-dinitrophenol, 2-	Sonstige	534-52-1	x			4	4	2	10	<1000	3			
219	Methylisothiocyanat	Nematizid	556-61-6				5	5	2	12					
220	Methylnaphthalin, 1-	PAK	1321-94-4	x			3	3	2	8					
221	Metobromuron	Herbizid	3060-89-7	x	x		4	4	5	13					
222	Metoxuron	Herbizid	19937-59-8				4	5	2	11					
223	Metribuzin	Herbizid	21087-64-9	x			5	5	3	13	25 - 100	2	1	2	26
224	Metronidazol	Arzneimittel	443-48-1		x		5	7	2	14	9	1	0,5	0,5	7
225	Metsulfuronmethyl	Herbizid	74223-64-6				4	7	3	14					
226	Mevinphos	Insektizid	26718-65-0				7	6	2	15					
227	Mirex	Insektizid	2385-85-5				1	1	7	9					
228	Monolinuron	Herbizid	1746-81-2	x			4	4	4	12					
229	Monuron	Herbizid	150-68-5	x			4	5	3	12					
230	Nadolol	Arzneimittel	42200-33-9	x			5	6	2	13	0,2	1	0,5	0,5	6,5
231	Naled	Insektizid	300-76-5				2	5	1	8					
232	Napropamid	Herbizid	15299-99-7				3	3	5	11	25 - 100	2	1	2	22
233	Naproxen	Arzneimittel	22204-53-1		x	x	3	3	1	7	5	1			
234	Neburon	Herbizid	555-37-3				2	2	2	6					
235	Nicosulfuron	Herbizid	111991-09-4	x			5	6	4	15	10 - 25	2	1	2	30
236	Nitralin	Herbizid	4726-14-1				1	4	3	8					
237	Nitrofen	Herbizid	1836-75-5				1	3	3	7					
238	Nitrothal-isopropyl	Fungizid	10552-74-6				2	4	2	8					
239	Nitrotoluol, 2-	Sonstige	88-72-2	x			4	4	2	10	34400	4			
240	Nitrotoluol, 3-	Sonstige	99-08-1	x			4	4	2	10	2500	4			
241	Nitrotoluol, 4-	Sonstige	99-99-0	x			4	4	2	10					
242	NMOR	Nitrosamine	59-89-2	x	x		7	7	2	16					
243	NTA	Komplexbildner	139-13-9	x	x		6	7	1	14					
244	Oxadixyl	Fungizid	77732-09-3				5	6	6	17					
245	Oxazepam	Arzneimittel	604-75-1		x		4	4	2	10					
246	Oxolinic acid	Arzneimittel	14698-29-4			x	2	6	2	10					
247	Oxydemeton-methyl	Insektizid	301-12-2				7	7	1	15					
248	Paracetamol	Arzneimittel	103-90-2			x	6	6	1	13	621	3	0,5	1,5	19,5
249	Paraquat	Herbizid	4685-14-7				7	7	7	21					
250	Parathion-ethyl	Insektizid	56-38-2	x			3	3	1	7					
251	Parathion-methyl	Insektizid	298-00-0		x		3	4	5	12					
252	Penconazol	Fungizid	66246-88-6	x			3	3	6	12					
253	Pencycuron	Fungizid	66063-05-6				1	2	7	10	25 - 100	2	0,9	1,8	18
254	Pendimethalin (Stomp)	Herbizid	40487-42-1	x			1	1	4	6	250 - 1000	3	1	3	18
255	Pentachlorphenol	Fungizid	87-86-5	x			5	3	3	11					

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Messwerte > BG			Indexzahlen			Indexsumme K	Menge [t]	Indexzahlen		Indexsumme VP	RGP
				OW	GW	TW	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}			I _M	I _V		
256	Pentoxifyllin	Arzneimittel	6493-05-6	x			6	6	2	14	75	2	0,5	1	14
257	Permethrin	Insektizid	52645-53-1				1	1	2	4					
258	PFDoA	Per- und polyfluorierte Verbindungen	307-55-1	x			1	1	7	9					
259	Phenacetin	Arzneimittel	62-44-2				4	5	1	10					
260	Phenanthren	PAK	85-01-8	x	x		2	2	2	6					
261	Phosphorsäuretributylester	Flammschutzmittel	126-73-8	x			4	3	1	8	>1000	4	0,5	2	16
262	Phosphorsäuretriethylester	Flammschutzmittel	78-40-0	x			7	6	1	14	>1000	4	0,5	2	28
263	Phosphorsäuretrimethylester	Flammschutzmittel	512-56-2	x			7	7	1	15					
264	Phosphorsäuretriphenylester	Flammschutzmittel	115-86-6	x			2	2	1	5	>1000	4	0,5	2	10
265	Picloram	Herbizid	1918-02-1				4	6	4	14					
266	Pindolol	Arzneimittel	13523-86-9				5	5	2	12					
267	Piperonylbutoxid	Synergist	51-03-6				3	2	2	7					
268	Pirimicarb	Insektizid	23103-98-2				4	5	1	10	10 - 25	2	0,9	1,8	18
269	Pirimiphosethyl	Insektizid	23505-41-1				3	2	4	9					
270	Pirimiphosmethyl	Insektizid	29232-93-7				2	3	1	6					
271	Prochloraz	Fungizid	67747-09-5				3	3	2	8	100 - 250	3	0,9	2,7	21,6
272	Procymidon	Fungizid	32809-16-8				2	4	2	8					
273	Prometryn	Herbizid	7287-19-6		x		3	3	2	8					
274	Propachlor	Herbizid	1918-16-7				4	5	1	10					
275	Propanil	Herbizid	709-98-8				3	4	2	9					
276	Propham	Herbizid	122-42-9				4	4	2	10					
277	Propiconazol	Fungizid	60207-90-1				4	3	6	13	100 - 250	3	0,9	2,7	35,1
278	Propoxur	Insektizid	114-26-1				5	5	1	11					
279	Propranolol	Arzneimittel	525-66-6		x		3	3	2	8	6,5	1	0,5	0,5	4
280	Propyzamid	Herbizid	23950-58-5				5	4	4	13	25 - 100	2	1	2	26
281	Pyrazophos	Fungizid	13457-18-6				2	3	2	7					
282	Pyren	PAK	129-00-0	x	x		1	2	2	5					
283	Pyrethrine	Insektizid	8003-34-7				1	1	2	4					
284	Pyridate	Herbizid	55512-33-9	x			2	6	2	10					
285	Quinmerac	Herbizid	90717-03-6	x			7	7	5	19	100 - 250	3	1	3	57
286	Quintozen	Fungizid	82-68-8				1	2	6	9					
287	Rimsulfuron	Herbizid	122931-48-0				5	7	2	14					
288	Salicylsäure	Arzneimittel	69-72-7		x		5	4	2	11	72	2	0,5	1	11
289	Secbumeton	Herbizid	26259-45-0				4	3	2	9					
290	Sethoxydim	Herbizid	74051-80-2				5	5	1	11					
291	Siduron	Herbizid	1982-49-6				3	4	6	13					
292	Sotalol	Arzneimittel	3930-20-9		x		5	6	2	13	27	2	0,5	1	13
293	Sulcotrion	Herbizid	99105-77-8	x			5	7	4	16	25 - 100	2	1	2	32
294	Sulfadiazin	Arzneimittel	68-35-9	x	x		3	7	2	12					
295	Sulfamethazin	Arzneimittel	57-68-1		x		5	6	2	13					
296	Sulfapyridin	Arzneimittel	144-83-2	x			4	6	2	12					

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Messwerte > BG			Indexzahlen			Index- summe K	Menge [t]	Indexzahlen		Index- summe VP	RGP
				OW	GW	TW	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}			I _M	I _V		
297	Sulfotep	Insektizid	3689-24-5				3	3	2	8					
298	Swep	Herbizid	1918-18-9				3	3	2	8					
299	T, 2,4,5-	Herbizid	93-76-5				4	3	4	11					
300	TAME (tert-Amylmethylether)	Additive	994-05-8				5	5	2	12	>1000	4	0,7	2,8	33,6
301	Tebuconazol	Fungizid	107534-96-3				3	3	6	12	250 - 1000	3	0,9	2,7	32,4
302	Tebutam	Herbizid	35256-85-0				4	4	4	12					
303	Tebuthiuron	Herbizid	34014-18-1				4	5	7	16					
304	Tecnazen	Fungizid	117-18-0				2	2	3	7					
305	Teflubenzuron	Insektizid	83121-18-0				1	2	3	6					
306	Terbacil	Herbizid	5902-51-2				4	5	2	11					
307	Terbufos	Insektizid	13071-79-9				2	2	2	6					
308	Terbumeton	Herbizid	33693-04-8				4	3	6	13					
309	Terbutryn	Herbizid	886-50-0				3	3	7	13					
310	Terbutylazin	Herbizid	5915-41-3	x			2	3	4	9	250 - 1000	3	1	3	27
311	Tetrachlorbenzol, 1,2,4,5-	Sonstige	95-94-3	x			1	2	2	5					
312	Tetrachlorethan, 1,1,1,2-	Lösemittel	630-20-6	x			5	4	2	11					
313	Tetrachlorinfos	Insektizid	22248-79-9				3	3	2	8					
314	Tetradifon (Tedion)	Insektizid	116-29-0				1	2	3	6					
315	Tetramethrin	Insektizid	7696-12-0				2	2	1	5					
316	Tetrasul	Akarizid	2227-13-6				1	1	3	5					
317	Thiabendazol	Fungizid	148-79-8				3	4	7	14					
318	Thiazafuron	Herbizid	25366-23-8				5	5	2	12					
319	Thifensulfuronmethyl	Herbizid	79277-27-3				5	7	2	14					
320	Thiometon	Insektizid	640-15-3				4	3	1	8					
321	Thionazin	Nematizid	297-97-2				5	5	1	11					
322	Tolyfluanid	Fungizid	731-27-1				1	3	1	5	100 - 250	3	0,9	2,7	13,5
323	TP, 2,4,5- (Fenoprop)	Herbizid	93-72-1		x		3	3	4	10					
324	Triadimefon	Fungizid	43121-43-3				3	3	3	9					
325	Triadimenol	Fungizid	55219-65-3	x			3	3	6	12	25 - 100	2	0,9	1,8	21,6
326	Triallat	Herbizid	2303-17-5				2	2	4	8					
327	Triazophos	Insektizid	24017-47-8				3	3	2	8					
328	Tribenuronmethyl	Herbizid	101200-48-0				5	6	1	12					
329	Tribrommethan (Bromoform)	Lösemittel	75-25-2	x	x	x	5	4	2	11	<1000	2	0,7	1,4	15,4
330	Trichlorbenzol, 1,3,5-	Sonstige	108-70-3	x			2	2	2	6					
331	Trichlorethan, 1,1,1-	Lösemittel	71-55-6	x	x	x	5	4	2	11	>1000	4	0,7	2,8	30,8
332	Trichlornitromethan (Chlorpikrin)	Insektizid	76-06-2				6	4	2	12					
333	Trichlorphon	Insektizid	52-68-6				7	6	2	15					
334	Triclopyr	Herbizid	55335-06-3				5	7	3	15					
335	Tridemorph	Fungizid	81412-43-3				2	2	3	7					
336	Trietazin	Herbizid	1912-26-1				3	3	4	10					
337	Trifluormethylanilin, 3-	Sonstige	98-16-8	x			5	4	2	11					
338	Trifluralin	Herbizid	1582-09-8	x			1	1	5	7	100 - 250	3	1	3	21
339	Triglyme	Additive	112-49-2	x			7	7	2	16					

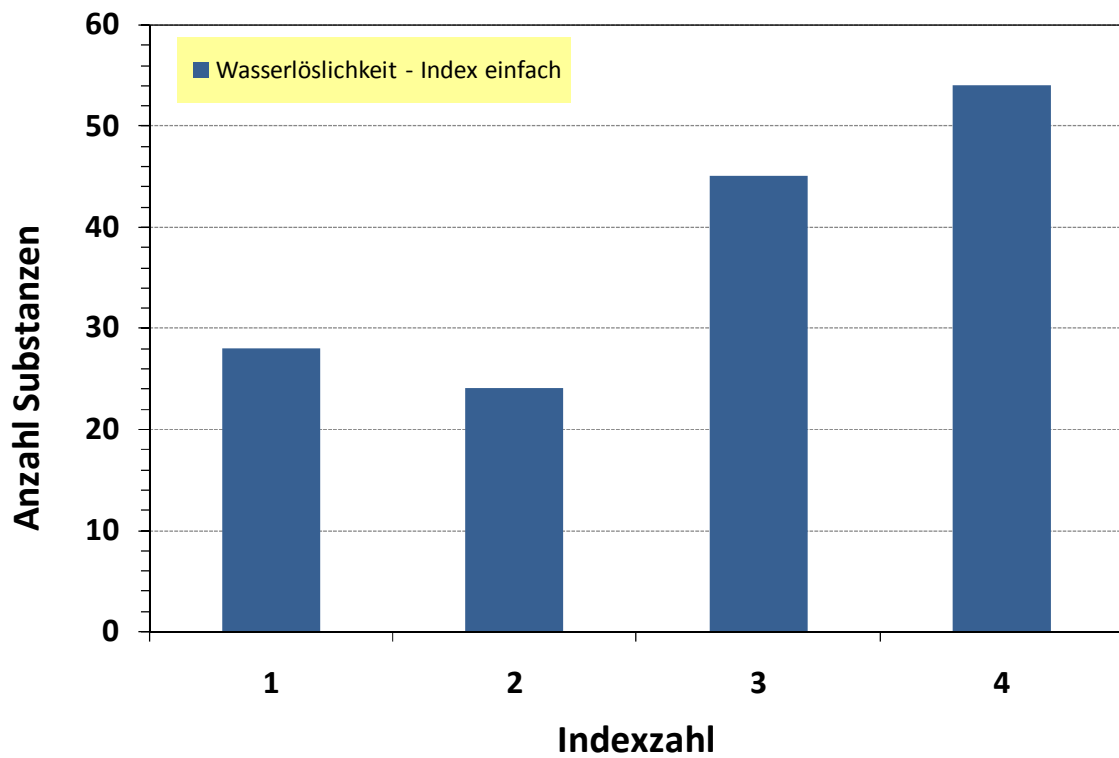
Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	CAS-Nr.	Messwerte > BG			Indexzahlen			Index- summe K	Menge [t]	Indexzahlen		Index- summe VP	RGP
				OW	GW	TW	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}			I _M	I _V		
340	Trimethoprim	Arzneimittel	738-70-5		x		4	6	2	12	11	2	0,5	1	12
341	Tylosin	Arzneimittel	1401-69-0			x	2	5	1	8					
342	Vinclozolin	Fungizid	50471-44-8				2	3	2	7					

OW=Oberflächenwasser
 GW=Grundwasser
 TW=Trinkwasser

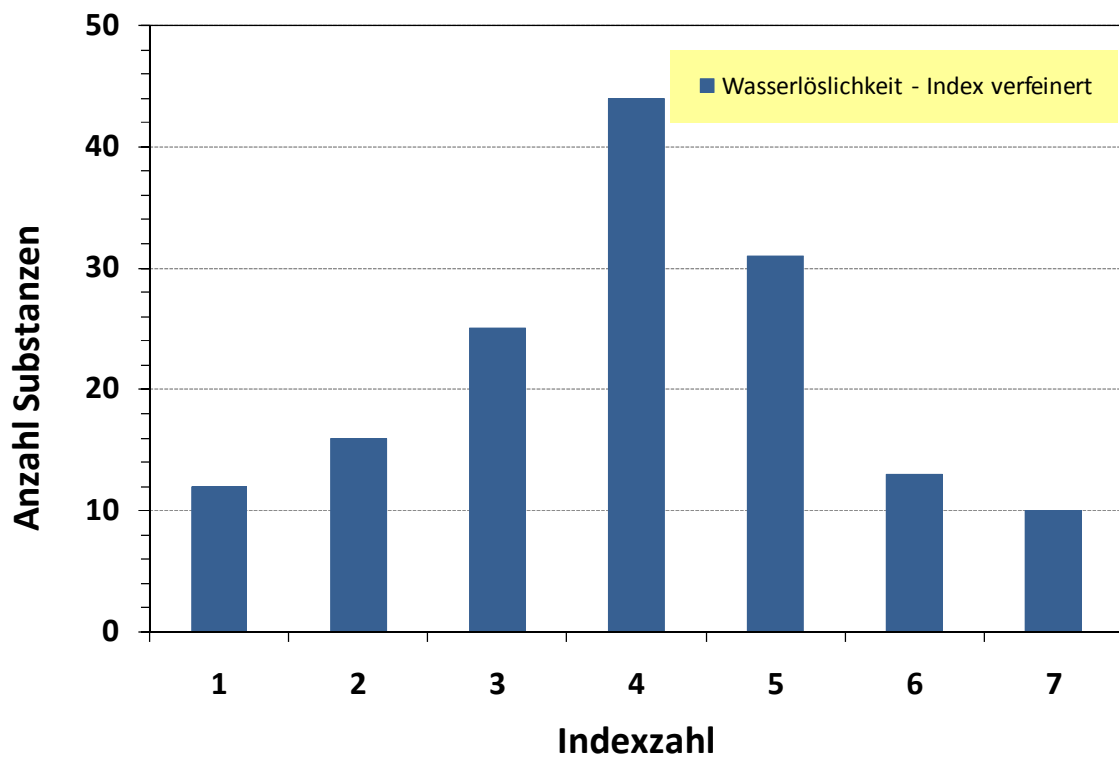


Anlage 3

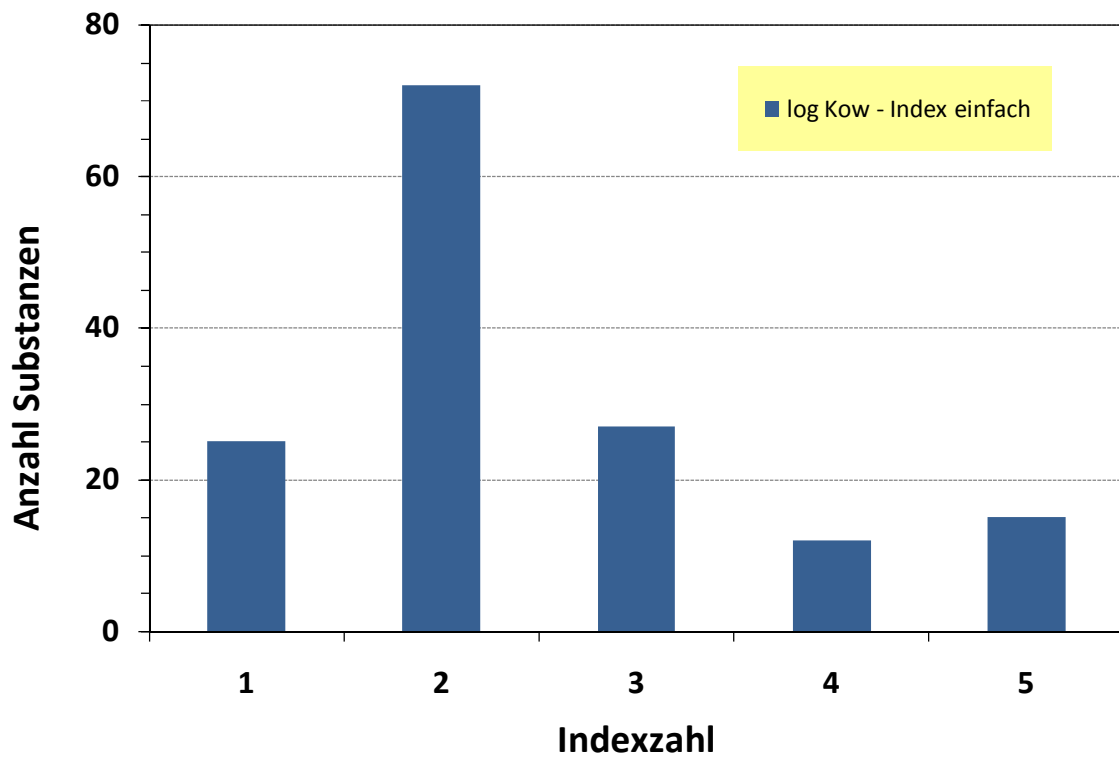
Verteilung stoffintrinsischer Indexzahlen für den Lerndatensatz ($n = 151$)



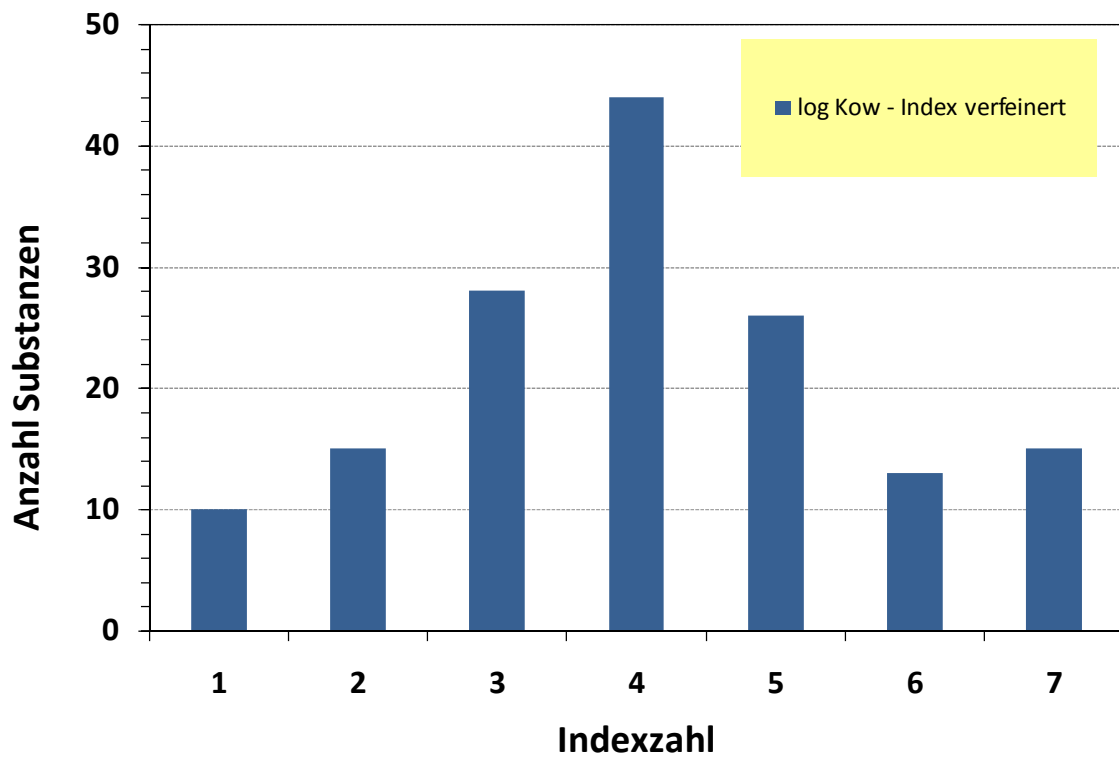
Verteilung Wasserlöslichkeit, Lerndatensatz, Index einfach



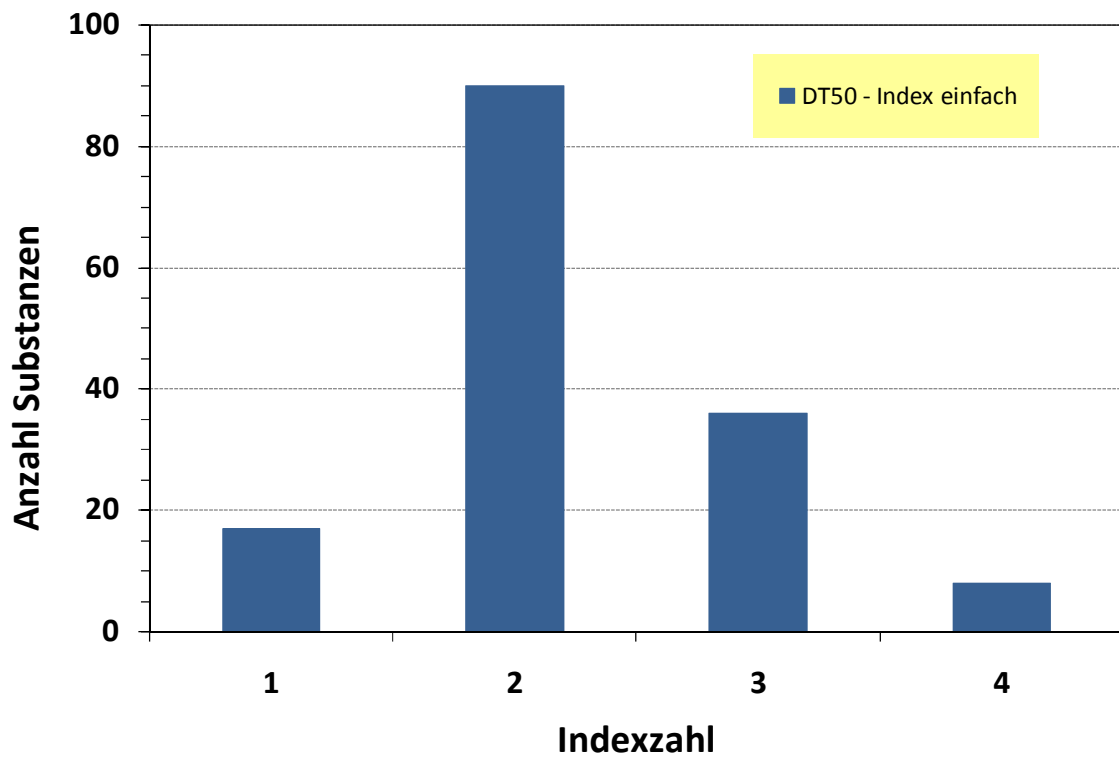
Verteilung Wasserlöslichkeit, Lerndatensatz, Index verfeinert



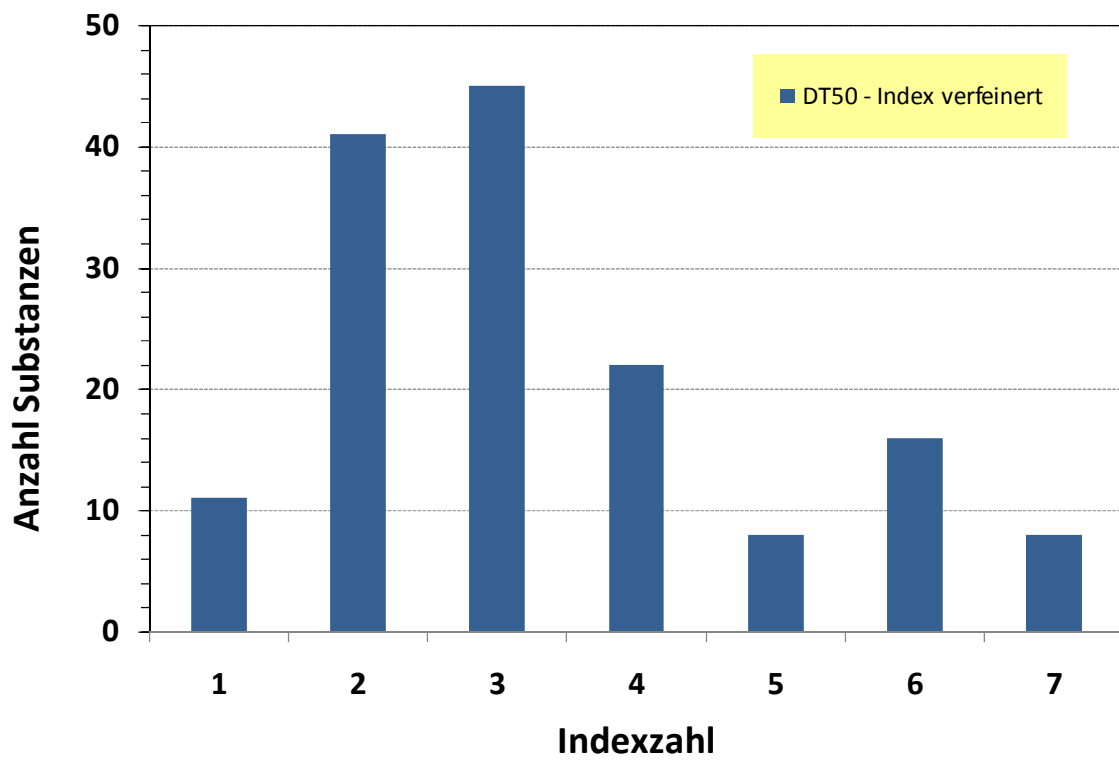
Verteilung log K_{ow} , Lerndatensatz, Index einfach



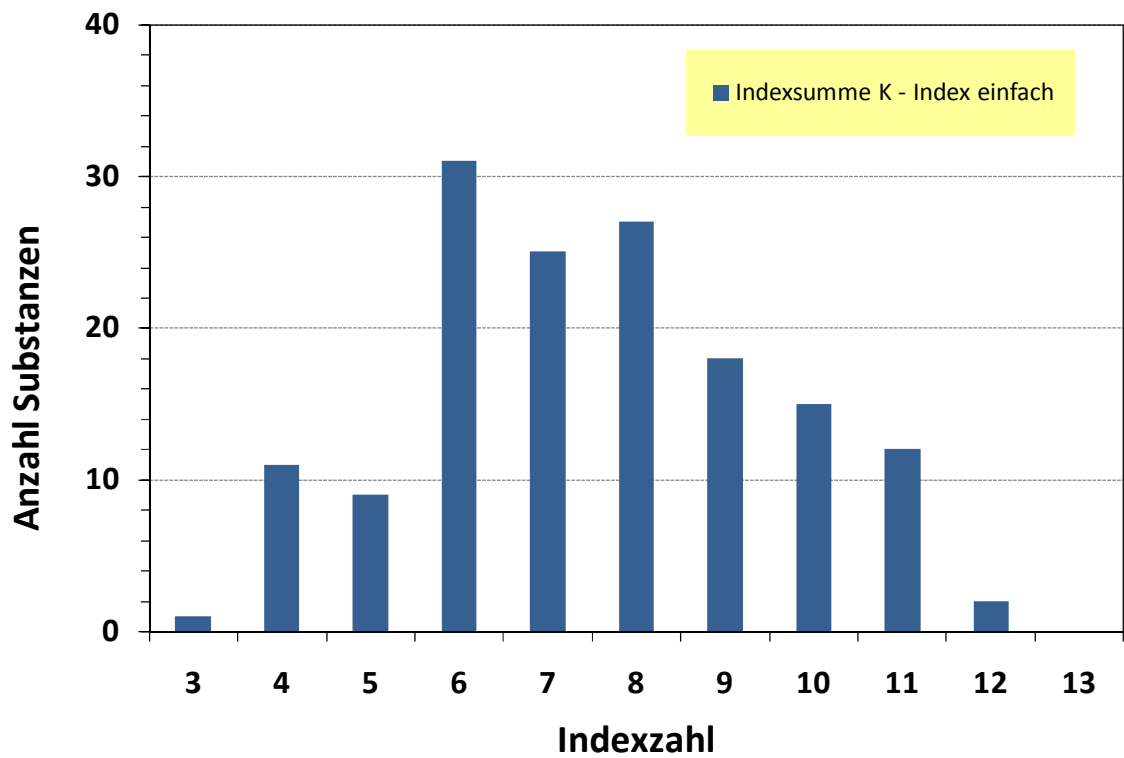
Verteilung log K_{ow} , Lerndatensatz, Index verfeinert



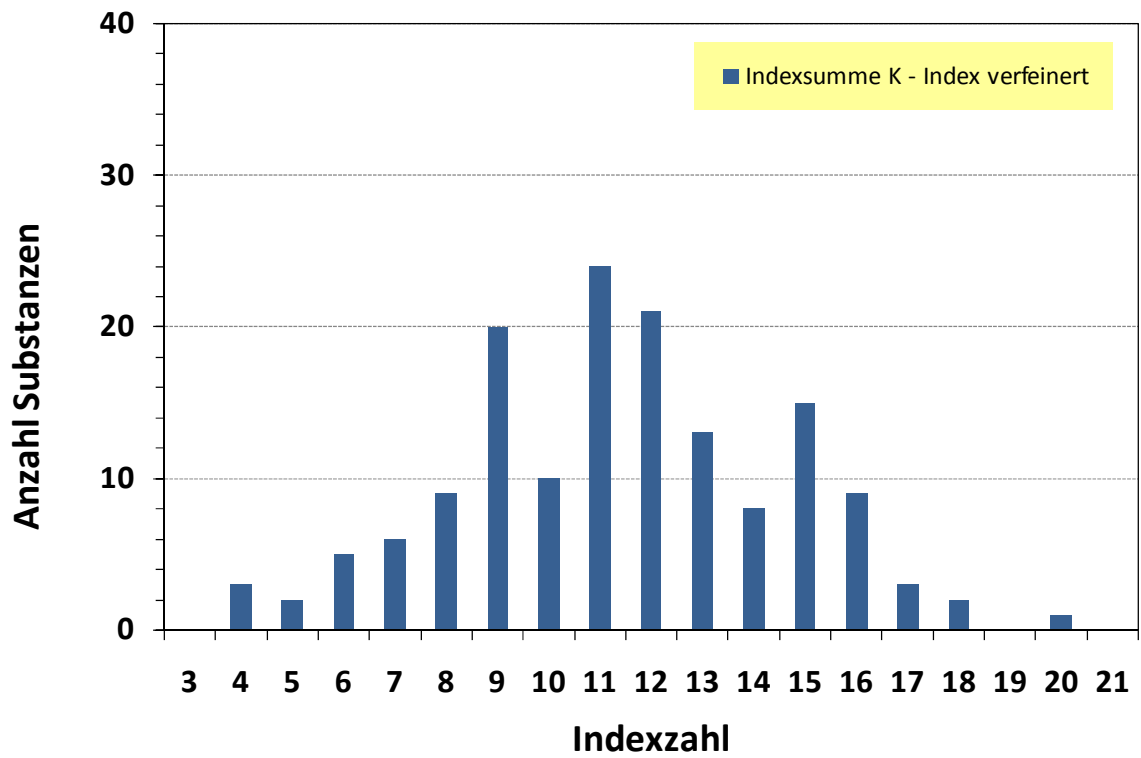
Verteilung DT_{50} , Lerndatensatz, Index einfach



Verteilung DT_{50} , Lerndatensatz, Index verfeinert



Verteilung Indexsumme K, Lerndatensatz, Index einfach

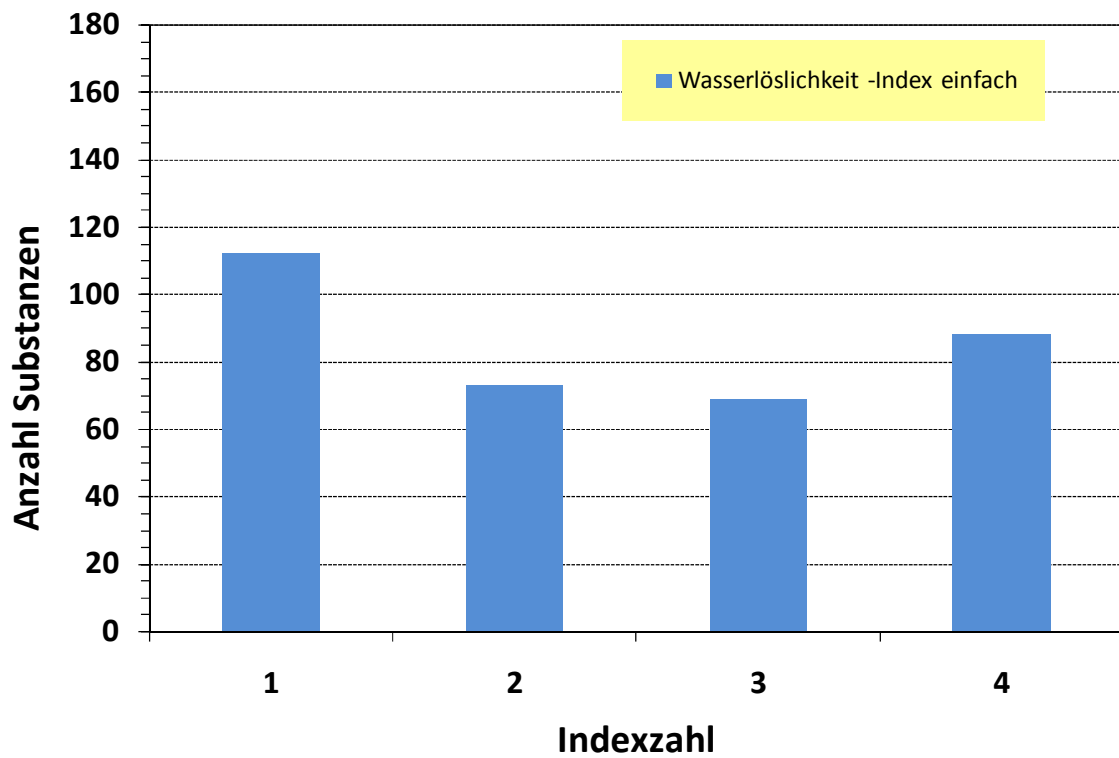


Verteilung Indexsumme K, Lerndatensatz, Index verfeinert

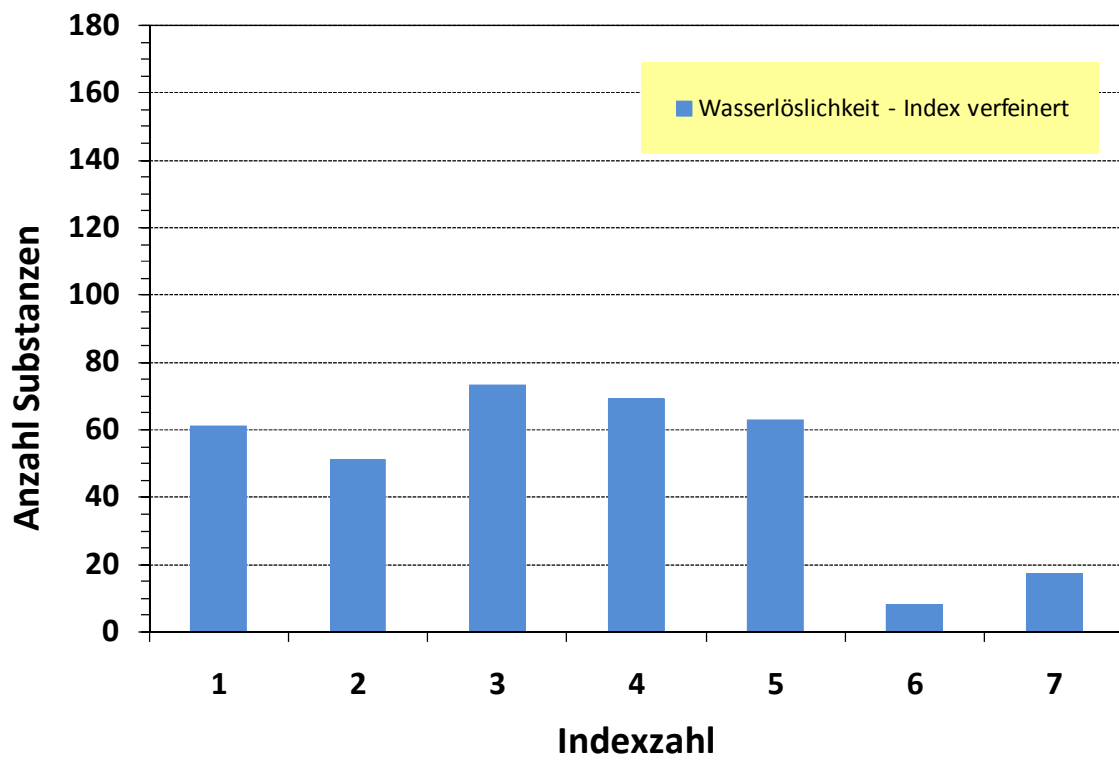


Anlage 4

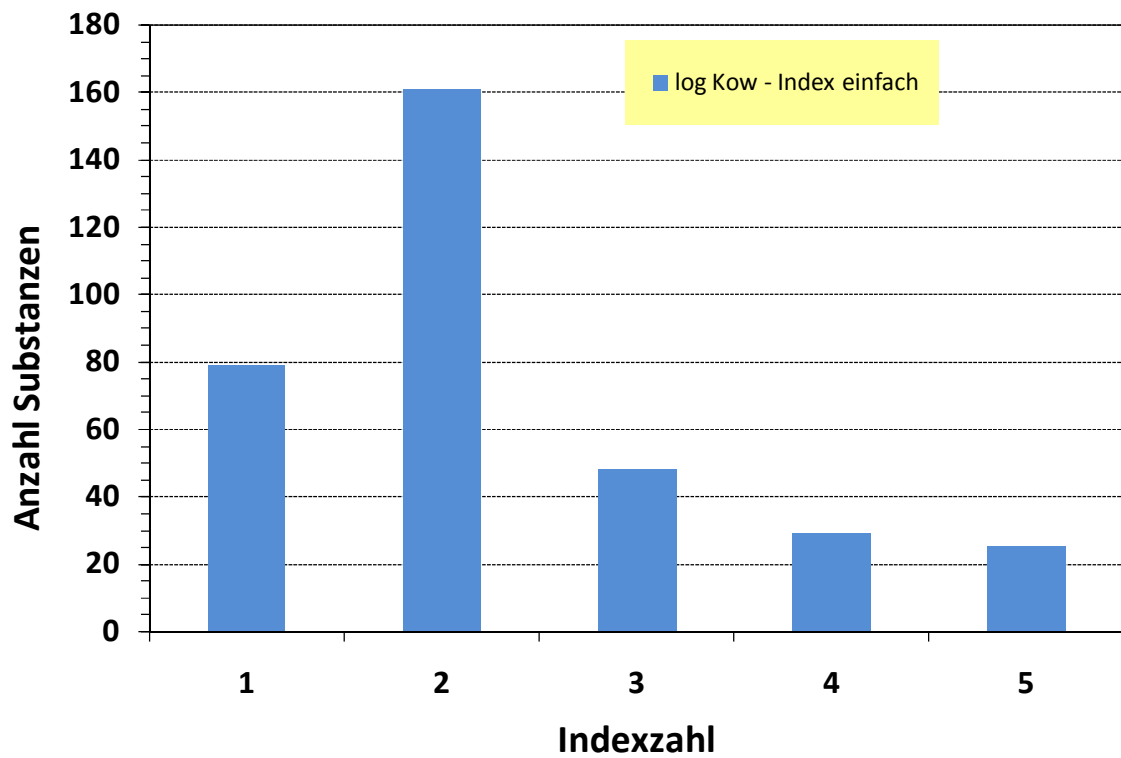
Verteilung stoffintrinsischer Indexzahlen für den Testdatensatz ($n = 342$)



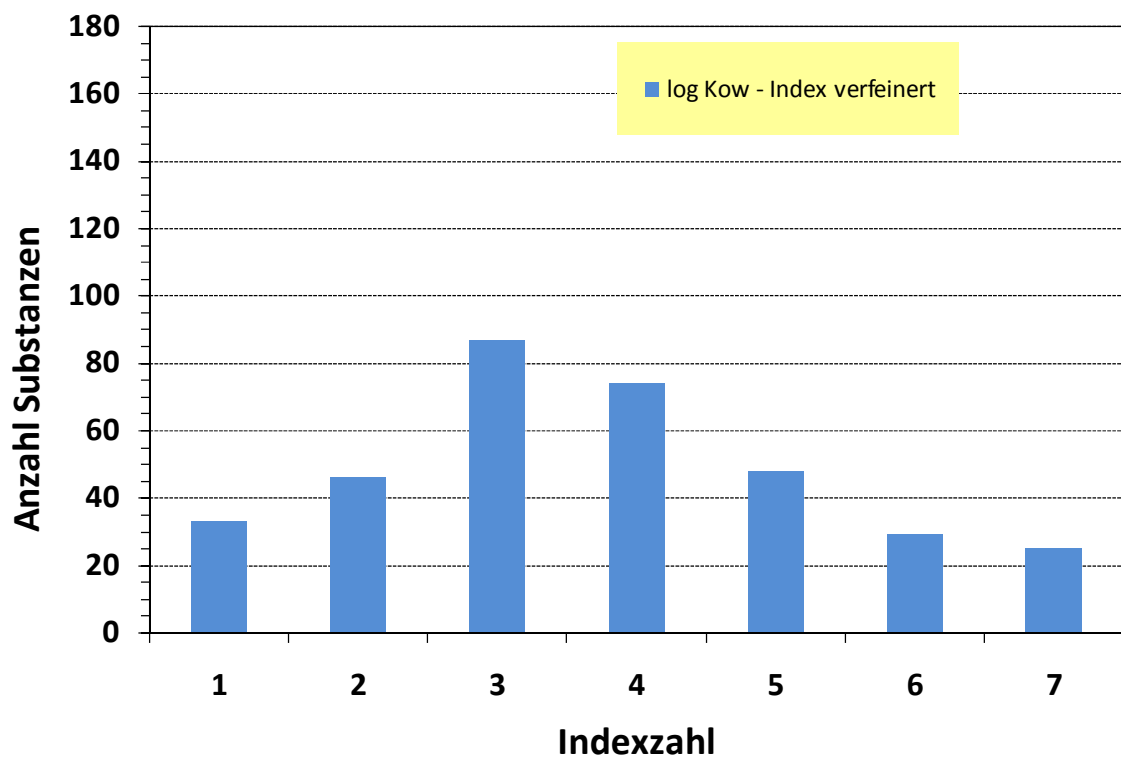
Verteilung Wasserlöslichkeit, Testdatensatz, Index einfach



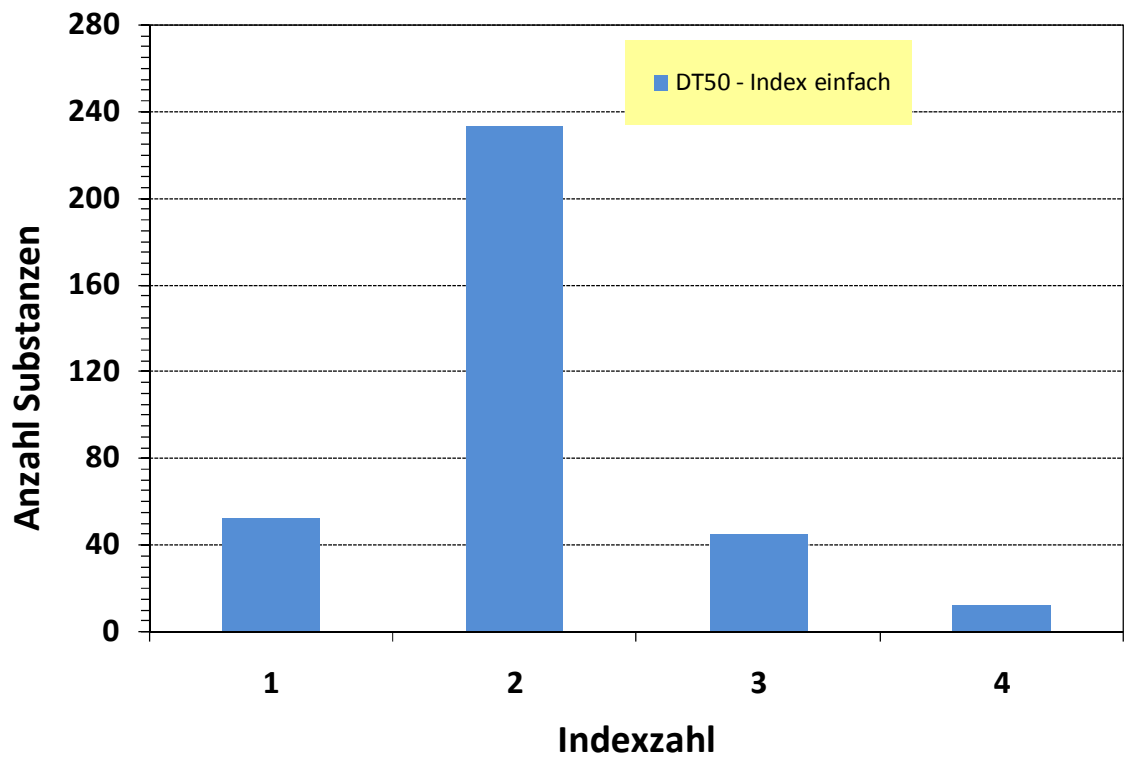
Verteilung Wasserlöslichkeit, Testdatensatz, Index verfeinert



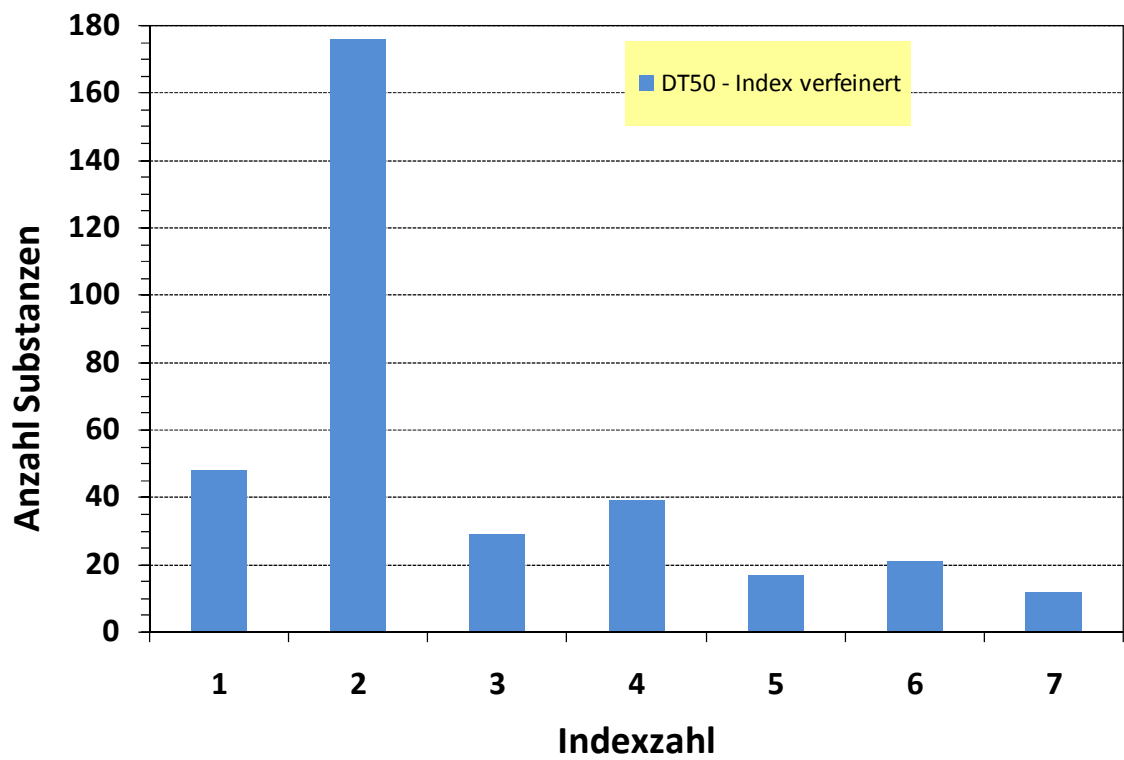
Verteilung log K_{ow} , Testdatensatz, Index einfach



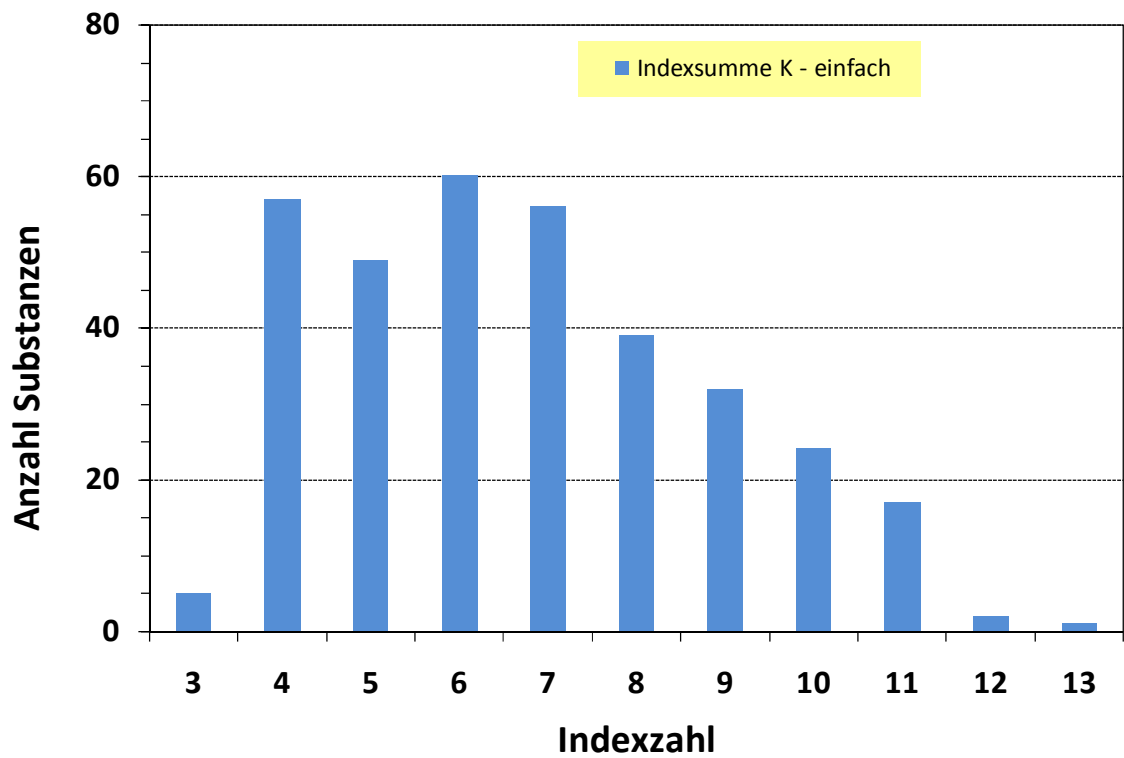
Verteilung log K_{ow} , Testdatensatz, Index verfeinert



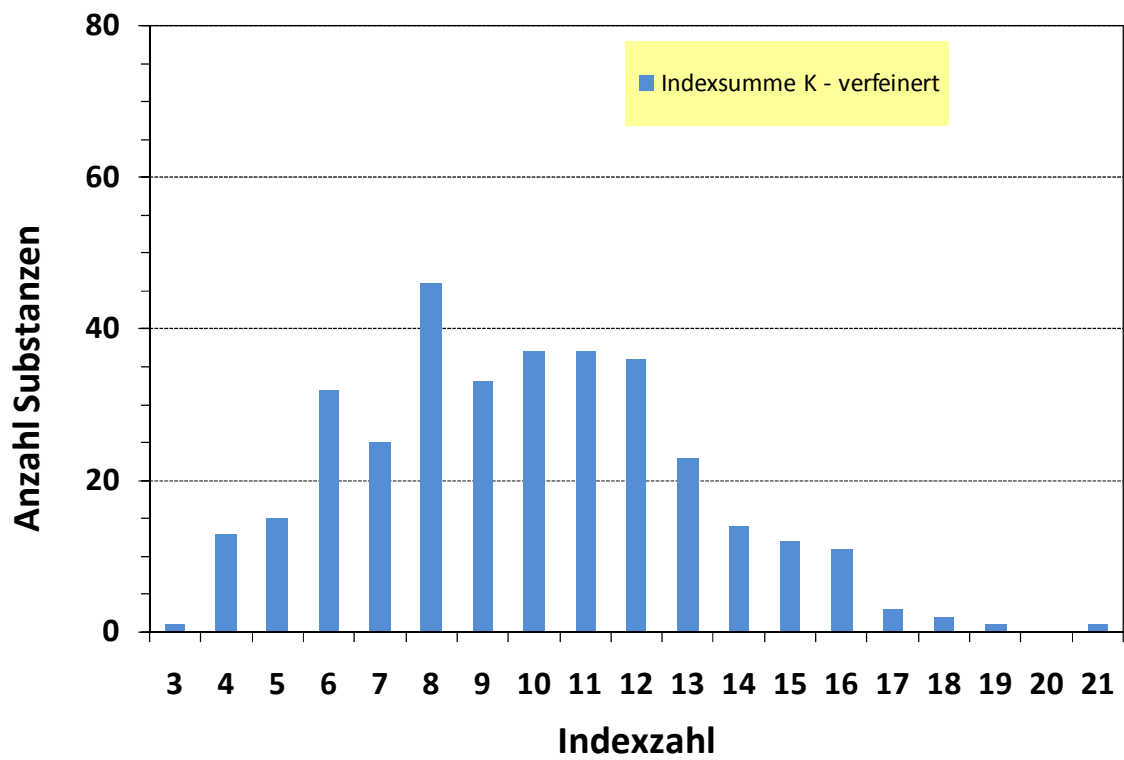
Verteilung DT₅₀, Testdatensatz, Index einfach



Verteilung DT₅₀, Testdatensatz, Index verfeinert



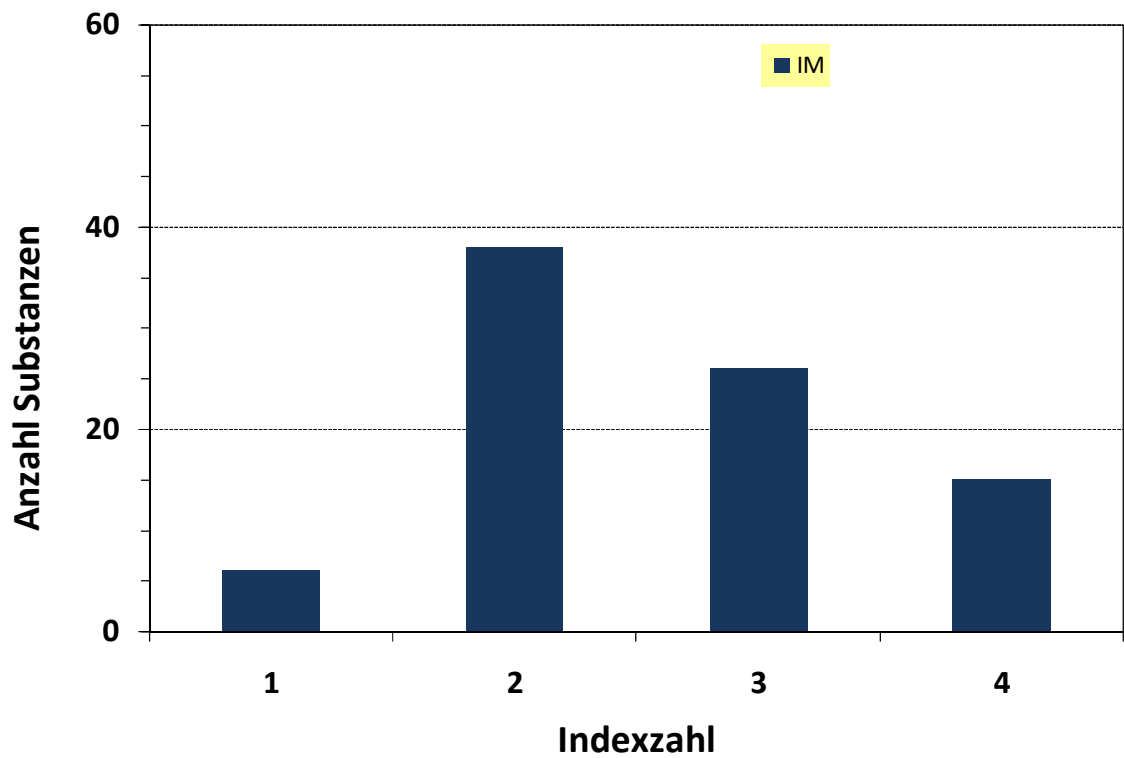
Verteilung Indexsumme K, Testdatensatz, Index einfach



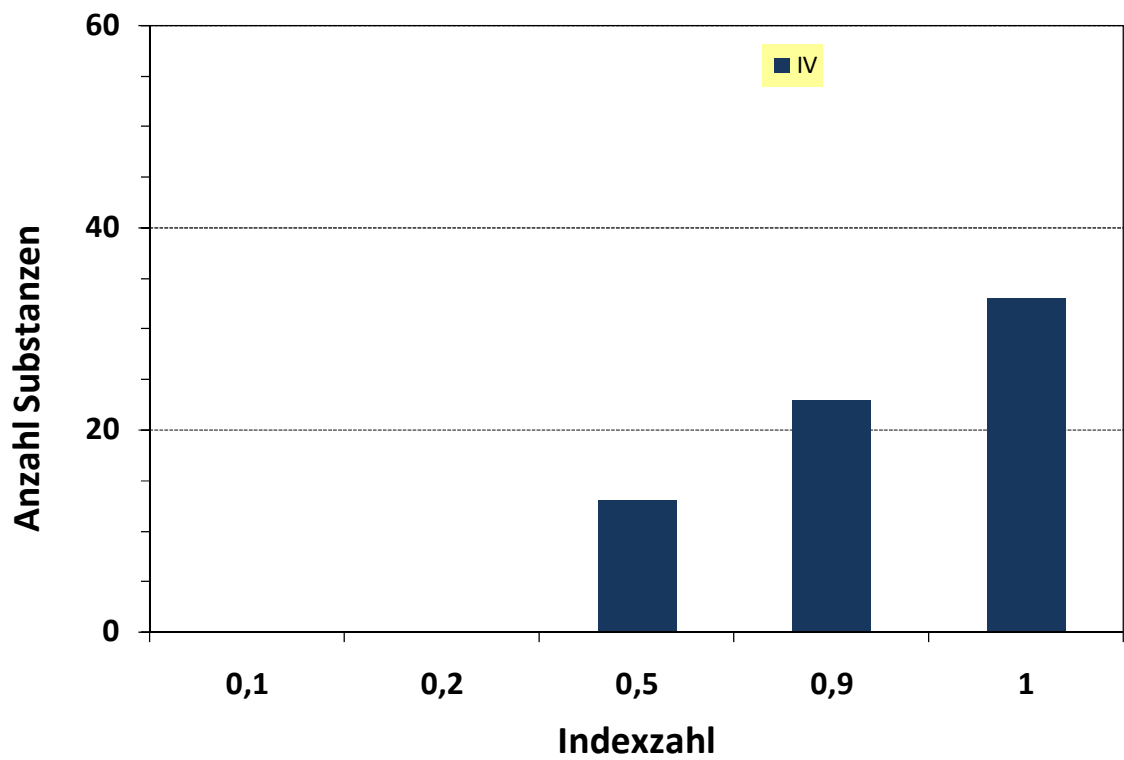
Verteilung Indexsumme K, Testdatensatz, Index verfeinert

Anlage 5

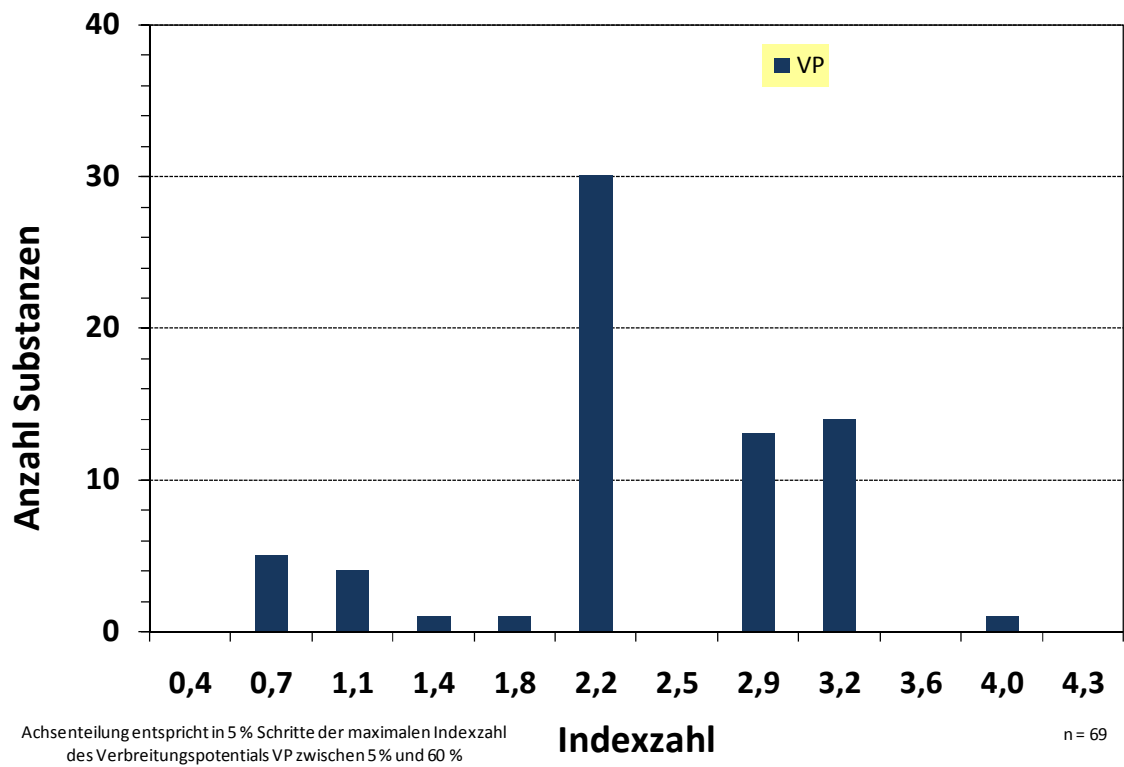
Verteilung der Indexzahlen für das Verbreitungspotential VP und das Rohwassergängigkeitspotential RGP des Testdatensatzes (n = 342)



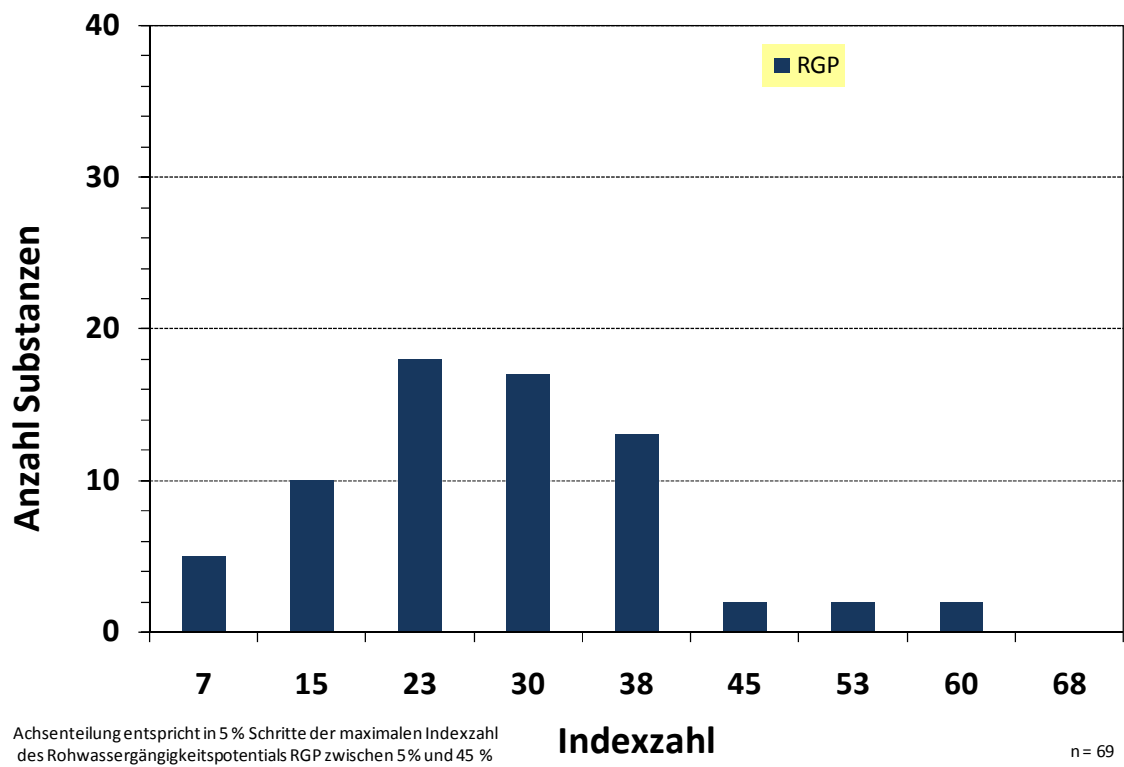
Verteilung Indexzahl Menge, Testdatensatz



Verteilung Indexzahl Verwendung, Testdatensatz



Verteilung Verbreitungspotential, Testdatensatz



Verteilung Rohwassergängigkeitspotential, Testdatensatz