



REACH

in der Praxis

REACH in der Praxis III

Vorbereitungspapier zum Fachworkshop Nr. 4

Instrumente zur umweltbezogenen Risikobewertung

Antonia Reihlen, Olaf Wirth, Dirk Jepsen, Dirk Bunke

September 2012

Impressum

UFOPLAN-Vorhaben 3711 67 430
**REACH in der Praxis III –
Unterstützung von Akteuren bei Aufbau
und Erhalt von REACH-Expertise**

Im Auftrag des
Umweltbundesamtes

und des
Bundesministeriums für
Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit

Inhaltliche Konzeption und Durchführung

**ÖKOPOL GmbH
Institut für Ökologie und Politik**

Nernstweg 32–34
D – 22765 Hamburg
☎ 0049-40-39 100 2 0
fax: 0049-40-39 100 2 33

Ansprechpartner:
Dirk Jepsen; jepsen@oekopol.de

in Kooperation mit

**Öko-Institut e.V.
Geschäftsstelle Freiburg**

Merzhauser Straße 173
79100 Freiburg, Deutschland
phone. +49 (0) 761 – 4 52 95-0
fax +49 (0) 761 – 4 52 95-88

Ansprechpartner:
Dirk Bunke; d.bunke@oeko.de

**Umwelt
Bundes
Amt** 
Für Mensch und Umwelt



Bundesministerium
für Umwelt, Naturschutz
und Reaktorsicherheit

okopol
Institut für Ökologie und Politik GmbH

 **Öko-Institut e.V.**
Institut für angewandte Ökologie
Institute for Applied Ecology

Inhalt

1	Einführung: Hintergrund des WS und Einordnung in das Konzept der Veranstaltungsreihe RidP.....	4
2	IT-Architektur der ECHA zur Registrierung.....	7
3	ECETOC Targeted Risk Assessment (TRA)	8
4	EUSES.....	11
5	CHESAR.....	13
6	Besonderheiten der Bewertung von Metallen	14
7	PBT Bewertung – Schließen von Datenlücken	15
8	Orientierendes Screening nach endokrin wirksamen Stoffen.....	16
9	Überblick zum derzeitigen Entwicklungsstand von Standards zur Erstellung erweiterter Sicherheitsdatenblätter	19

1 Einführung: Hintergrund des WS und Einordnung in das Konzept der Veranstaltungsreihe RidP

Die vorangegangenen Fachworkshops der REACH in der Praxis Reihe hatten die Bewertung der Stoffeigenschaften (WS 2, http://www.reach-konferenz.de/WS_2.htm) und die umweltbezogene Expositionsbewertung (WS 3, http://www.reach-konferenz.de/WS_3.htm) zum Thema.

Dabei wurde herausgearbeitet, dass es sich bei der Stoffsicherheitsbeurteilung unter REACH um einen eng verzahnten, gestuften Prozess handelt. Ergebnisse eines Arbeitsschrittes dienen hierbei häufig als Input für einen darauf folgenden Schritt. Über die inhaltlichen Konzepte und Methoden hinaus, die Gegenstand der vorausgegangenen Workshops waren, stehen eine Reihe von Instrumenten zur Unterstützung der REACH-Akteure zur Verfügung. Um diese zumeist IT-gestützten Instrumente zielgerichtet einsetzen zu können, ist es jedoch sehr wichtig, zu verstehen, was die Instrumente jeweils leisten, wo ihre Grenzen liegen und welche Schnittstellen zu anderen Hilfsmitteln bestehen.

In Fachworkshop 4 werden die Teilnehmer einen systematischen Überblick über die Instrumente erhalten, die für die umweltbezogene Stoffsicherheitsbeurteilung relevant sind. Damit sollen die Akteure in die Lage versetzt werden, gezielt zu entscheiden, wann und welche Instrumente sie für die eigenen Bewertungs- und Registrierungs-Aufgaben verwenden.

Der Fach-Workshop gliedert sich inhaltlich in die folgenden Abschnitte:

- ▶ Vorstellung der „offiziellen“ IT-Basis-Anwendungen der ECHA:
 - IUCLID (nun in der Version 5.4)
 - REACH-IT

Hier wird insbesondere ein Überblick gegeben, was diese Instrumente beinhalten, und wie sie miteinander zusammenhängen.

- ▶ Erläuterung des ECHA-Tools zur strukturierten Erstellung von Stoffsicherheitsberichten CHESAR, in seiner aktuellen Überarbeitungsstufe
- ▶ Darstellung der Funktionalitäten der (weiteren) IT-gestützten Instrumente zur Unterstützung der umweltbezogenen Expositionsbewertung EUSES und ECETOC TRA.
- ▶ Ausführungen zu Besonderheiten der Umweltbewertung von Metallen und zum Einsatz des IT-Tools PetroRisk für die Bewertung von Mineralölfraktionen
- ▶ Vorstellung von QSAR-Modellen zur Bewertung von PBT-Eigenschaften bzw. zum Screening von endokrin wirksamen Stoffen

Aufbauend auf diesem Instrumenten-Überblick werden für ausgewählte Schnittstellenprobleme bestehende Lösungsansätze und Lösungsbestrebungen erläutert. Dazu zählen beispielsweise

- ▶ die Standards für die IT-gestützte Expositionsszenarienübermittlung (ESComXML, SDSComXML) oder die Standardphrasenkataloge (EUPHRAC) für das Sicherheitsdatenblatt und die Expositionsszenarien.

Im Workshop werden in Bezug auf die verschiedenen IT-basierten Instrumente Kenntnisse zur Funktionalität vermittelt. Bedienerwissen einzelner Tools ist nicht Gegenstand der Veranstaltung.

Ziel des Workshops ist es, das Verständnis der Prinzipien einer umweltbezogenen Expositionsabschätzung zu vertiefen und zu diskutieren. Die Bewertung der Exposition von Arbeitnehmern/innen sowie Verbrauchern/innen ist hingegen nicht Gegenstand dieses Workshops. Die der Expositionsbeurteilung vorgelagerten Schritte der Ermittlung schädlicher Wirkungen waren Gegenstand des 2. RidP Workshops (siehe auch ECHA Leitlinien Teil B und C sowie die Vertiefungsleitlinien R2- R11). Die einzelnen Schritte der Umweltextpositionsbeurteilung wurden im 3. RidP Workshop dargestellt und geübt. Beides wird im 4. Workshop nicht erneut thematisiert. Der 5. Fachworkshop (13. Dez. 2012, Berlin) beschäftigt sich schließlich mit Fragen der Erstellung eines erweiterten Sicherheitsdatenblattes (eSDB, ECHA Leitlinien Teil G) und den Pflichten des nachgeschalteten Anwenders (engl. Downstream User oder kurz DU) bei Erhalt eines solchen eSDB. Die nachfolgende Abbildung 1 zeigt diese inhaltliche Abgrenzung der vier einschlägigen REACH in der Praxis Workshops nochmals im Überblick:



Abbildung 1: Thematische Abgrenzung der REACH in der Praxis Workshops 2012 zur Stoffsicherheitsbeurteilung

Dieses Vorbereitungspapier soll grundlegende Prinzipien, Konzepte und Methoden der umweltbezogenen Expositionsbeurteilung erläutern und Hinweise auf weitere Informationsquellen geben, um den Teilnehmenden des Fachworkshops die inhaltliche Vorbereitung zu erleichtern.

Einen Überblick über die einzelnen Schritte einer Umweltbewertung und die den Prozess unterstützenden Tools wird in Abbildung 2 gegeben. Einige dieser Tools (CHESAR, EUSES, ECETOC TRA, PetroRisk) stellen eine Programmierung eines Modells zur Emissions- bzw.

Expositionsbeurteilung von Chemikalien dar. Dieses Modell ist wiederum eine Kombination aus Algorithmen zur Abschätzung der Emission sowie dem Verhalten und Verbleib von Stoffen in der Umwelt. Eingabeparameter sind dabei abhängig vom Prozess/Produkt oder der Umgebung, die entweder durch allgemein akzeptierte Annahmen definiert sein können (z. B. die in Kläranlagen durchschnittlich behandelte Abwassermenge von 2.000 m³/Tag) oder spezifische Information (z. B. Prozessbedingungen) für den jeweiligen Anwendungsfall darstellen.

Die vorgestellten Tools sind prinzipiell von allen REACH-Akteuren nutzbar. Naturgemäß werden allerdings vorwiegend Hersteller und Importeure IUCLID zur Übermittlung von Registrierungs dossiers nutzen. Die Instrumente zur Stoffsicherheitsbewertung können hingegen auch für nachgeschaltete Anwender hilfreich sein, wobei diese ggf. nicht zu allen benötigten Informationen Zugang haben. Im Folgenden werden die Tools in Bezug auf ihren Zweck beschrieben und es werden nur dann akteursbezogene Unterscheidungen getroffen, wenn dies für das Verständnis der Anwendbarkeit eines Instrumentes wichtig ist.

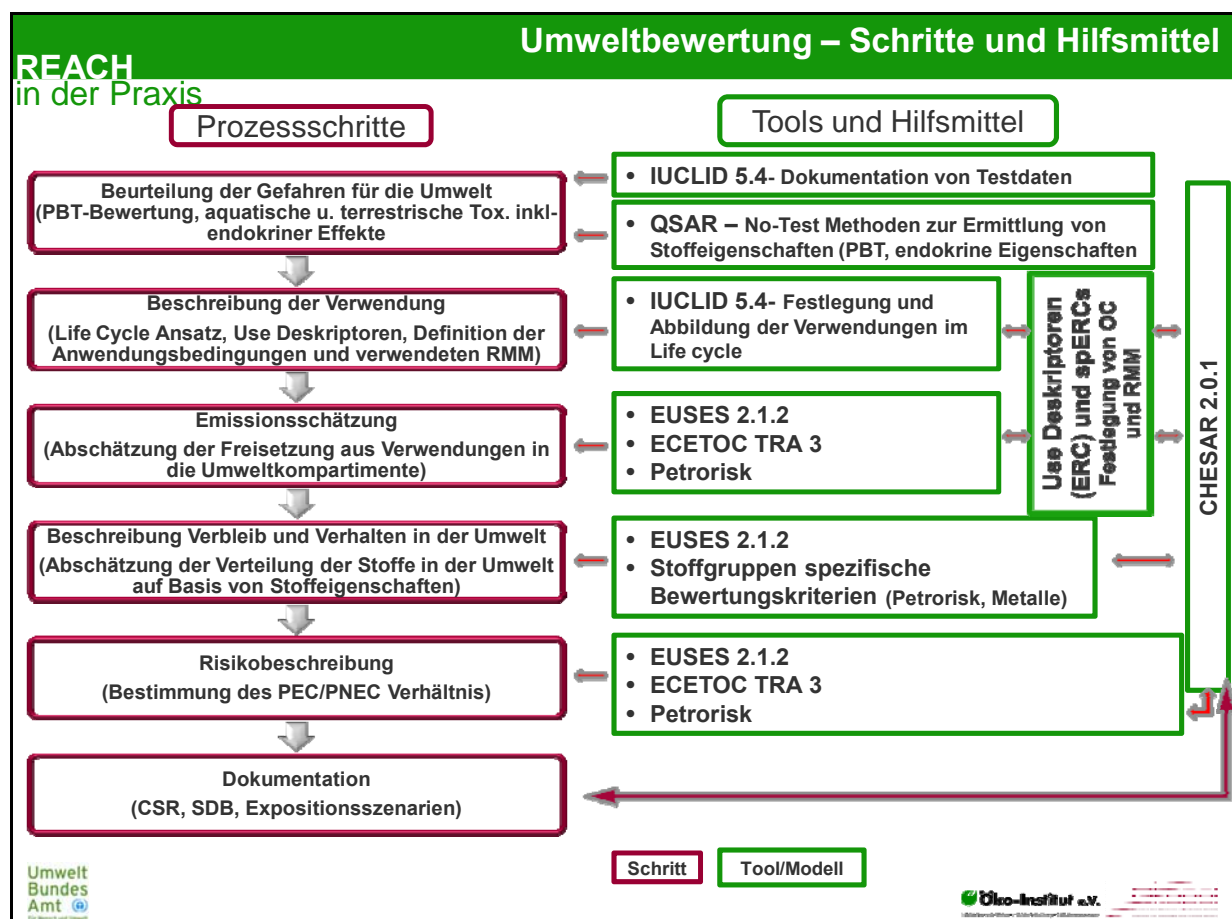


Abbildung 2: Übersicht über Tools für die Umweltbewertung

2 IT-Architektur der ECHA zur Registrierung

Ein Registrierungsvorgang unter REACH soll mittels moderner Informationstechnologie erfolgen. Eine „physische“ Einreichung von Registrierungen in Form von dicken Ordnern mit Registrierungsdossiers, Studien und Begründungen ist unter REACH nicht vorgesehen. Um diese Aufgabe zu bewältigen, wurde auf Seiten der ECHA eine komplexe IT-Struktur aufgebaut, die als REACH-IT bezeichnet wird.

Das inhaltlich komplementäre Gegenstück bei den Akteuren, die Dossiers an die ECHA versenden müssen, stellt die Anwendung IUCLID (International Uniform Chemical Information Database) dar. Als wesentliches Element der REACH-Umsetzung wurde das bereits 1993 für das Altstoffprogramm der EG (RL 793/94/EWG) entwickelte Programm weiterentwickelt und als IUCLID 5 am 13.6.2007 zum kostenlosen Download von der ECHA bereitgestellt. Technisch stellte der Sprung von IUCLID 5 eine komplette Neuentwicklung dar. Sie erfolgte auf Basis der OECD Harmonised Templates und der SNIFs, dem Datenaustauschformat für die Neustoffe. Aktuell ist es im Juli diesen Jahres in der Version 5.4 erschienen, begleitet von einem Update der behördenseitigen REACH-IT. Einreichungen von Dossiers sind daher seit Mitte Juli 2012 nur noch möglich, wenn diese mit der Version 5.4 von IUCLID erstellt wurden. Für Ende September diesen Jahres ist bereits die Version 5.4.1 angekündigt, mit der dann auch die Anmerkungen zu Einträgen in das Dossier übernommen werden können.

Die REACH-IT ist das Kernstück der papierlosen Übermittlung der Registrierungen von Stoffen unter REACH und ist Anknüpfungspunkt für die Verteilung der Daten auf andere Systeme zur Bereitstellung bei den Behörden.

In einem gemeinsamen Projekt der EG-Generaldirektionen Unternehmen (DG ENTR) und Umwelt (DG ENV) wurden die notwendigen Arbeiten vorangetrieben und finanziert. Dabei war es wesentlich, dass die Kommunikation zwischen der Wirtschaft und den Behörden funktionierte. Deshalb wurde insbesondere im RIP 2 – „REACH-IT: Development of the IT-system set up to support REACH implementation“ sehr eng mit der Wirtschaft kooperiert.

Rechtlich ist die Verwendung der IUCLID-5-Software in Art. 111 der REACH-Verordnung abgedeckt, der die Verwendung des IUCLID-Formats für die Registrierung vorschreibt. Gleichzeitig wird im selben Artikel darauf hingewiesen, dass die Weiterentwicklung dieses Formats zukünftig mit der OECD koordiniert wird. Der Datenaustausch über IUCLID basiert auf einem XML-Template, welches auf Vorgaben unter Federführung der OECD, den „OECD Harmonised Templates“¹ entwickelt wurde.

Die Verwendung dieser Austauschformate ermöglicht einerseits die Kommunikation zwischen verschiedenen Akteuren der chemischen Lieferkette, einschließlich deren Dienstleistern. Andererseits dienen die Formate dem Informationsaustausch zwischen der Industrie und der ECHA und zwischen der ECHA und den zuständigen Behörden der Mitgliedstaaten („Competent Authorities“). Die Struktur ist in Abbildung 3 dargestellt:

¹ <http://www.oecd.org/ehs/templates/>

Die Anwendung der IUCLID-5-Software ist nicht alleine auf die Registrierung unter REACH beschränkt. Schon jetzt sind weitere internationale Programme zur Chemikaliensicherheit damit abzubilden und Dossiers zu erstellen.

Gesetzgebungsbereiche und Programme, unter denen IUCLID-5 als Austauschformat bereits verwendet wird, sind die CLP-Verordnung (hier sind auch PSM betroffen) das OECD-HPV-Chemicals-Programm, US-HPV-Challenge-Programm und das Japan-HPV-Challenge-Programme (sofern die OECD-Anleitungen für SIDS-Dossiers befolgt werden²). Aktuell ist in der neuen Biozid-Verordnung³ in Artikel 79 IUCLID5 als Software für die Erstellung des technischen Dossiers festgeschrieben worden.

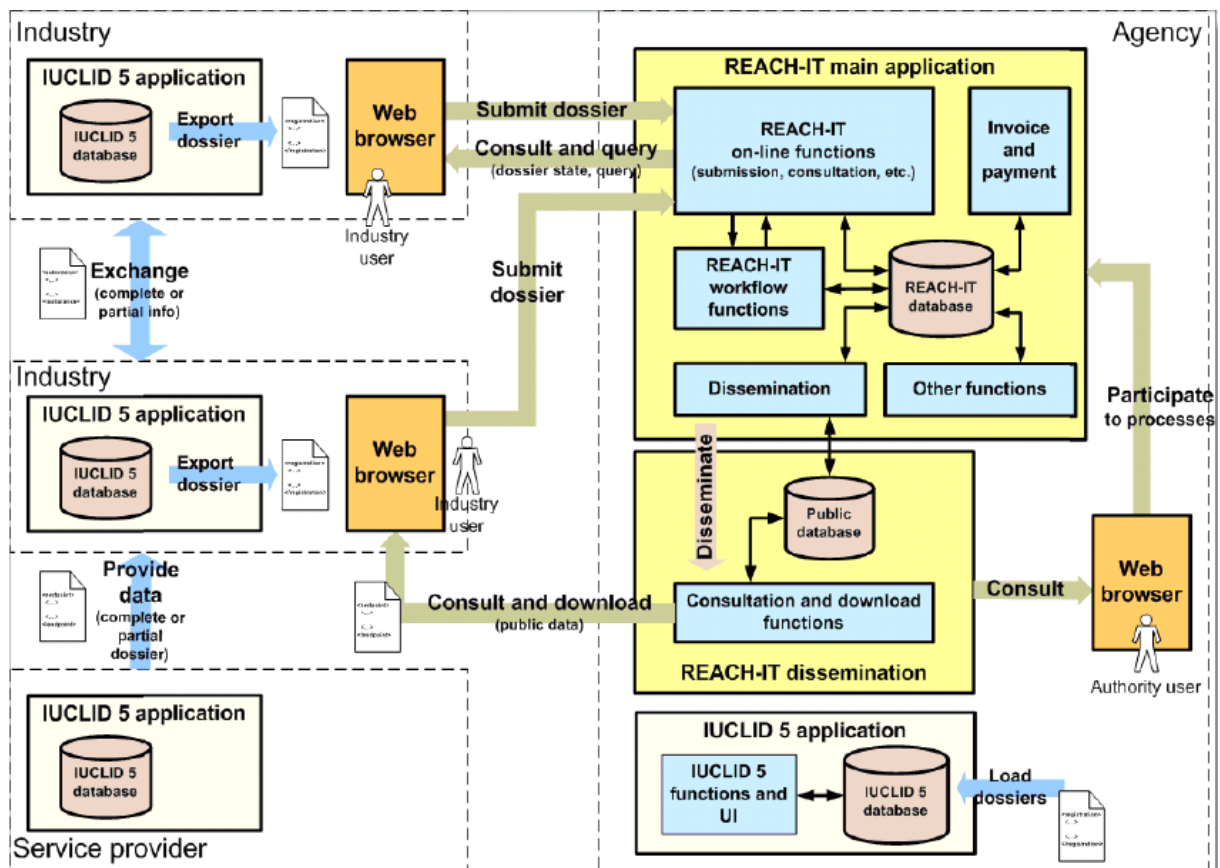


Abbildung 3: Architektur von REACH-IT (Quelle: ECHA Nutzerhandbuch für die Industrie - Teil 1: Erste Schritte mit REACH-IT, UI = User Identification http://echa.europa.eu/documents/10162/13654/reachit_getting_started_de.pdf)

3 ECETOC Targeted Risk Assessment (TRA)

Die Organisation ECETOC (European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals) ist eine europäische Vereinigung mit Mitgliedern aus zahlreichen Unternehmen der chemischen Industrie. Diese Organisation hat es sich zum Ziel gesetzt, den Stand der Wissenschaft im Bereich der chemischen Toxikologie und der Ökotoxikologie zu erarbeiten und im Sinne der chemischen Industrie gegenüber den zuständigen Behörden zu vertreten.

² Screening Information Dataset, für weitere Erläuterungen siehe Internetauftritt der OECD unter: <http://www.oecd.org/fr/env/securitedesproduitschimiquesetbiosecurite/evaluationdesproduitschimiques/publishedassessments.htm>

³ Verordnung (EU) Nr. 528/2012 <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2012:167:FULL:DE:PDF>

In diesem Kontext hat ECETOC ein Tool namens „ECETOC TRA“ (TRA für targeted risk assessment) zur Ermittlung von Risiken, die von Chemikalien für Mensch (Arbeiter und Verbraucher) und Umwelt ausgehen, entwickelt (<http://www.ecetoc.org/tra>). Mit diesem Tool kann eine Stoffsicherheitsbeurteilung nach REACH durchgeführt werden. War die Version 1 noch webbasiert, liegen die neuen integrierten Versionen 2 und 3 als Microsoft-Excel-basierte Anwendung vor. Dabei sind mehrere Excel-Arbeitsblätter über Makros, also automatisch ausführbare Computerbefehle, miteinander verbunden. Um „ECETOC TRA“ nutzen zu können, muss daher auf dem Rechner die Erlaubnis bestehen, Makros ausführen zu dürfen, was beim Programmstart aber abgefragt wird.

In „ETETOC TRA“ sind Modelle hinterlegt, die eine Abschätzung der Emission aus einer Verwendung eines Stoffs in den Bereichen der menschlichen Gesundheit (Arbeitnehmer und Verbraucher) und Umwelt ermöglichen. Dabei werden folgende Schritte durchlaufen:

1. Um in der Grundeinstellung, Tier 1, die Exposition für alle Pfade berechnen zu können, braucht man folgende Angaben, die in das Tool über eine Eingabemaske eingegeben werden müssen:
 - ▶ Molekulargewicht
 - ▶ Dampfdruck
 - ▶ Wasserlöslichkeit
 - ▶ Verteilungskoeffizient Oktanol/Wasser (KOW)
 - ▶ biologische Abbaubarkeit
2. Weiter ist es noch nötig, die entsprechenden Schwellenwerte anzugeben, also die DNELs und PNECs, aber auch bestehende Grenzwerte, wie ein Arbeitsschutzgrenzwert (AGW), können angegeben werden. Bei der Eingabe sind die geforderten Einheiten zu beachten, Umrechnungen innerhalb des Programms werden nicht durchgeführt. Neben den obligatorischen Angaben können noch weitere spezifische Angaben gemacht werden, die sich aus toxikologischen und ökotoxikologischen Daten ergeben.
3. Anschließend wird für die jeweiligen Verwendungen eine Expositionshöhe für die verschiedenen Wege berechnet. Dabei werden Annahmen zu Rahmenbedingungen abgefragt und der Berechnung zugrunde gelegt, z. B. die Verarbeitungstemperatur oder die Dauer des Umgangs mit einem Stoff. Zum Teil können auch bestimmte Risikomanagementmaßnahmen berücksichtigt werden. Die Gesamtheit dieser Grundannahmen sind die „conditions of use“. Die mit „ECETOC TRA“ berechneten Werte werden anschließend mit den DNELs bzw. PNECs verglichen. Nur wenn die Expositionshöhen unterhalb dieser Schwellenwerte liegen, kann eine Verwendung als sicher angesehen werden. Im Fall einer Registrierung gilt diese dann als abgedeckt und wird im Sicherheitsdatenblatt als identifizierte Verwendung aufgeführt.

„ECETOC TRA“ in der Grundeinstellung berechnet Schätzwerte auf Ebene der „Tier 1“, lässt jedoch Modifikationen für höhere „Tiers“ zu. Dabei können für die umweltbezogene Bewertung z. B. die spERCs verwendet werden (Standardmäßig werden auch in ECETOC TRA zur Umweltemissionsschätzung die ERC verwendet). Diese sind in der neusten Version 3 bereits integriert (zu spERCs siehe auch WS 3 http://www.reach-konferenz.de/WS_3.htm, insbesondere

Vortrag von Herrn Tolls). Eine Anpassung über die vorinstallierten Einstellungen hinaus erfordert Expertenwissen und sollte nicht ohne tieferes Verständnis der Methodik einer Emissionsabschätzung vorgenommen werden. Für den Bereich des Arbeitsschutzes empfiehlt die Leitlinie der ECHA ECETOC TRA als das bevorzugte Modell⁴

ECETOC TRA liegt nur in einer englischen Sprachversion vor. Benutzerhandbücher sind für alle seine Bestandteile verfügbar.

Weitere Informationsquellen:

► Das Tool ist verfügbar unter

- Integrierte Version:

http://www.ecetoc.org/index.php?mact=MCSOap,cntnt01,getDocument,0&cntnt01document_id=1324&cntnt01returnid=157

- zugehöriges Nutzerhandbuch:

http://www.ecetoc.org/index.php?mact=MCSOap,cntnt01,getDocument,0&cntnt01document_id=1448&cntnt01returnid=157

- Verbraucher als „Stand Alone Tool:

http://www.ecetoc.org/index.php?mact=MCSOap,cntnt01,getDocument,0&cntnt01document_id=1481&cntnt01returnid=157 .

- zugehöriges Nutzerhandbuch:

http://www.ecetoc.org/index.php?mact=MCSOap,cntnt01,getDocument,0&cntnt01document_id=1445&cntnt01returnid=157

► Daneben ist dort ein Hintergrunddokument, ECETOC Technical Report 114, zur neusten Version 3 erschienen:

http://www.ecetoc.org/index.php?mact=MCSOap,cntnt01,details,0&cntnt01by_category=22&cntnt01order_by=date%20Desc&cntnt01template=display_list_v2&cntnt01display_template=display_details_v2&cntnt01document_id=6371&cntnt01returnid=59

Es erläutert u.a. die Grundlagen zur Emissionsschätzung und wie die ERCs und spERCs im Tool in der Version 3 verwendet werden.

► Das grundlegende Verfahren des TRA (Targeted Risk Assessment) wird in Technical Report 93 beschrieben

http://www.ecetoc.org/index.php?mact=MCSOap,cntnt01,getDocument,0&cntnt01document_id=271&cntnt01by_category=5&cntnt01template=display_list_v2&cntnt01order_by=Reference%20Desc&cntnt01display_template=display_details_v2&cntnt01returnid=89

- Zu diesem Dokument gibt es ein Aktualisierungsdokument, Technical Report 107:

http://www.ecetoc.org/index.php?mact=MCSOap,cntnt01,getDocument,0&cntnt01document_id=2013&cntnt01by_category=5&cntnt01template=display_list_v2&cntnt01ord

⁴ECHA Leitlinie zur Erstellung des Stoffsicherheitsberichts Teil D, Kapitel 5.3.3
http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_part_d_de.pdf

[er_by=Reference%20Desc&cntnt01display_template=display_details_v2&cntnt01returnid=89](#)

- ▶ Ein weiteres Dokument stellt Fragen und Antworten rund um die Installation des Tools zusammen:

<http://www.ecetoc.org/uploads/Documents/TRA/FAQs%20on%20downloading%20and%20installation%20the%20TRA%20tool%20April%202012.pdf>

- ▶ Zudem beschäftigt sich ein Fragen und Antworten Dokument mit Aspekten der Tool-Bedienung:

<http://www.ecetoc.org/uploads/Documents/TRA/FAQs%20on%20using%20the%20tool.pdf>

4 EUSES

EUSES ist ein Tool das ursprünglich entwickelt wurde, um Behörden, Forschungseinrichtungen und Industrieunternehmen die Möglichkeit zu geben, eine schnelle, vereinfachte Abschätzung von Risiken vorzunehmen, welche von chemischen Stoffen gegenüber der Umwelt oder Personen über den Umweltpfad ausgehen.

EUSES bedeutet European Union System for the Evaluation of Substances und wurde ursprünglich von den niederländischen Behörden des RIVM⁵ und der EU-Kommission entwickelt. Bereit gestellt wird es vom kommissionseigenen Wissenschaftsinstitut „Joint Research Centre“ (JRC). Es basiert auf den EU Technical Guidance Documents (TGD)⁶ dessen Teil II sich mit der Umweltexpositionsabschätzung befasst.

Der Schwerpunkt des Programms liegt auf der Berechnung möglicher Expositionen in verschiedenen Umweltkompartimenten. Es ist aber auch möglich, potenzielle Expositionen von Arbeitern und Verbrauchern zu berechnen. Für letzteren Fall wurde eine Schnittstelle zu „ConsExpo“ im Programm etabliert, mit der „ConsExpo“ aus „EUSES“ heraus gestartet werden kann und die daraus resultierenden Daten wieder in „EUSES“ importiert werden können. „EUSES“ ist ein Tool für Experten und erfordert eine eingehende Einarbeitung in die Modelle und die Software.

EUSES besteht prinzipiell aus vier Bausteinen, die unabhängig voneinander genutzt werden können:

1. Eingabe oder Ermittlung von PNECs anhand von Daten aus ökotoxikologischen Studien und physikalisch-chemischen Stoffeigenschaften.
2. Ermittlung der lokalen und regionalen Emissionsmengen anhand von standardisierten Punktquellen oder für diffuse Verwendungen in unterschiedlichen Verwendungen
3. Ermittlung der Expositionshöhen verschiedener Umweltkompartimente nach Verteilung und Abbau in der Umwelt (PEC_{local} und $PEC_{regional}$). Dieses Modul ist sehr komplex und beruht auf diversen Standardisierungen von Umweltkompartimenten. Es ist weltweit akzeptiert und ist in vielen anderen Tools integriert (z. B. CHESAR, ECETOC TRA)

⁵Rijksinstituut voor Volksgezondheid en Milieu

⁶http://ihcp.jrc.ec.europa.eu/our_activities/public-health/risk_assessment_of_Biocides/doc/tgd/technical-guidance-document-tgd

4. Ermittlung detaillierter lokaler und regionaler Risikoquotienten für alle Umweltkompartimente

Alternativ zur EUSES Software kann ein (vereinfachtes) programmiertes Excel Instrument genutzt werden, welches von ECETOC überarbeitet wurde und die Grundlage für die Umweltbewertung des neuen ECETOC TRA ist (siehe Kapitel 3).

EUSES verfügt zwar über ein Modul für eine konservative Emissionsabschätzung (s.o.). Die Annahmen über die Verwendungsbedingungen und Risikomanagementmaßnahmen, die den Emissionsfaktoren dieser Abschätzung (aus den A- und B-Tabellen des EU-TGD) zu Grunde liegen, sind allerdings nicht bekannt⁷ und eine Nutzung für die Stoffsicherheitsbeurteilung unter REACH ist damit schwierig. Es ist jedoch möglich, nur den „Expositionsteil von EUSES“ – die Modellierung der Verteilung und des Abbaus in der Umwelt (Environmental fate) – zu nutzen und die Emissionsabschätzung stärker an die Vorgehensweisen unter REACH anzulehnen. Hier gibt es zwei Möglichkeiten:

Anstelle der EUSES Standard-Abschätzung können die Emissionsfaktoren aus den definierten Umweltfreisetzungsklassen (environmental release classes; ERC) manuell eingegeben werden oder alternativ können die Gesamtemissionen pro Verwendung separat mit Hilfe der im REACH Leitlinie Kapitel R.16 vorgegebenen Gleichungen (http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r16_en.pdf) berechnet und manuell in EUSES eingegeben werden. Alle Eingabewerte und Vorgabewerte für die umweltbezogene Expositionsabschätzung insbesondere die Abweichungen von den Standardangaben und die Begründung für die Abweichung sollte verantwortungsvoll dokumentiert werden.

Für Abschätzungen mit den Basiseinstellungen des Tools (TIER 1), sind – neben Informationen zur Ökotoxizität - mindestens noch einige physikalisch chemische Eigenschaften der Stoffe als Eingabeparameter erforderlich (zusätzliche Informationen können für anorganische Stoffe notwendig sein).

Als Ergebnis dieser Expositionsabschätzung erhält man die geschätzten Umweltkonzentrationen (PEC-Werte) für die verschiedenen Umweltkompartimente. EUSES erstellt automatisch einen elektronischen Bericht, der neben den Ergebnissen auch alle Eingabeparameter auflistet. Dies umfasst aber explizit NICHT die Verwendungsbedingungen und Risikomanagementmaßnahmen, die den Emissionsfaktoren aus dem in EUSES integrierten Emissionsmodell zugrunde liegen.

EUSES (Version 2.1.2) sowie das zugehörige Handbuch zum Programm können kostenlos im Internet von der Website http://ihcp.jrc.ec.europa.eu/our_activities/public-health/risk_assessment_of_Biocides/euses heruntergeladen und auf dem eigenen Rechner installiert werden.

Weitere Informationsquellen:

- ▶ Seite des JRC zu EUSES: http://ihcp.jrc.ec.europa.eu/our_activities/public-health/risk_assessment_of_Biocides/euses

⁷ Diese Werte wurden bei Erstellung des Technical Guidance Documents basierend auf „Expertenwissen“ festgelegt. Eine detaillierte Begründung hierfür gibt es nicht.

5 CHESAR

Im Juli 2012 wurde von der ECHA die Version 2.0 des IT-Tools zur Durchführung der Chemikaliensicherheitsbewertung und Dokumentation des Chemikaliensicherheitsberichts veröffentlicht. Im August wurde bereits ein weiteres Update freigegeben, so dass die letzte derzeit verfügbare Version 2.0.1 ist. Weiter können mit dem neuen CHESAR Tool (im Vergleich zu den Vorversionen) auch Expositionsszenarien für die Kommunikation in der Lieferkette generiert werden. Grundlage für eine solche Kommunikation ist der sogenannte Life Cycle Ansatz, bei dem alle Verwendungen im Lebenszyklus eines chemischen Stoffs baumartig von der Herstellung bis zu seiner Endnutzung mittels der Use Deskriptoren abgebildet wird. Das Tool setzt auf den Daten von IUCLID 5.4 auf, so dass z.T. hier bereits diese Struktur angelegt werden muss, um eine anschließende Nutzung des Instruments zu gewährleisten.

Weiter sind verschiedene Modelle enthalten, die zur Bewertung von Chemikalien angewendet werden, darunter Modelle aus EUSES für die Umwelt sowie ECETOC TRA für die Exposition von Arbeitnehmern und ConExpo für die Bewertung der Verbraucherexposition. Weiter soll CHESAR auch andere Ansätze zur REACH-Umsetzung integrieren. So wird es z. B. möglich sein, die Emissionsfaktoren der spERCs (siehe Fachworkshop 3 http://www.reach-konferenz.de/WS_3.htm) zu importieren und auch die Phrasenkataloge zur Erstellung der Expositionsszenarien sollen ihre Anwendung finden können (vgl. Vortrag Dirk Henkels beim 4. Fachworkshop).

Das Instrument läuft browserbasiert. Das bedeutet, dass der Nutzer die Anwendung startet und dann eine Bedienoberfläche mit seinem Standardinternetbrowser aufrufen kann (siehe Abbildung 4).

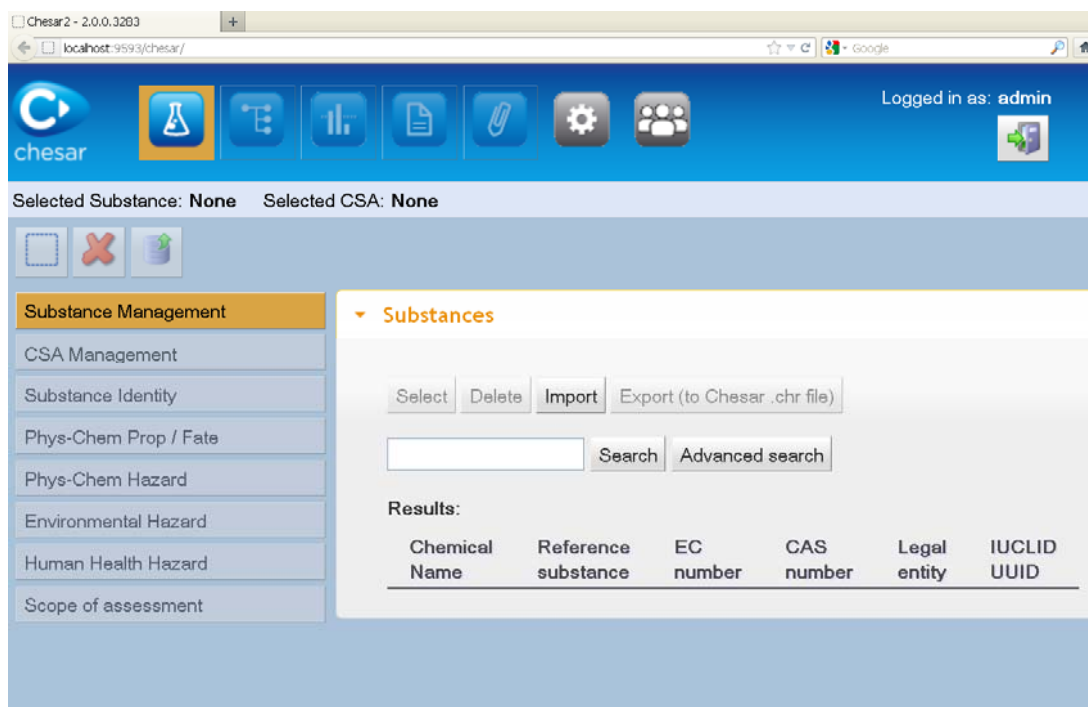


Abbildung 4: CHESAR Benutzeroberfläche

CHESAR 2.0 ist in zwei Versionen erschienen

1. Als Einzelplatzversion
2. Als Netzwerkversion für mehrere Nutzer

Das Tool wird kostenfrei von der ECHA zur Verfügung gestellt. Der Download der Software ist auf einer speziellen CHESAR-Internetseite der ECHA möglich <http://chesar.echa.europa.eu/chesar-tool.jsessionid=32FE1E1462139FE012CF93F4FE7E13E5.live1>

Weitere Informationen:

- ▶ Es gibt eine Reihe von Leitfäden, die den Nutzer bei der Installation und dem Einstieg in die Anwendung unterstützen sollen:
<http://chesar.echa.europa.eu/web/chesar/support/manuals-tutorials>
- ▶ Daneben sammelt die ECHA häufige Fragen und die dazugehörigen Antworten unter:
<http://chesar.echa.europa.eu/web/chesar/support/frequently-asked-questions>
- ▶ Im Mai 2012 hat die ECHA ein Webinar zum neuen CHESAR 2.0 veranstaltet. Die Aufzeichnung der Inhalte kann unter http://echa.europa.eu/de/view-article/-/journal_content/fc1131e0-ed42-4884-8ff9-a840dac532aa eingesehen werden
(insgesamt etwa 2,5 Stunden Material)

6 Besonderheiten der Bewertung von Metallen

Metalle zeichnen sich in ihrem Umweltverhalten durch einige Besonderheiten aus. Sie können in unterschiedlichen Oxidationsstufen (Wertigkeiten, Speziationen) vorliegen. Umweltfaktoren, z. B. der pH-Wert oder der Härtegrad des Wassers, beeinflussen, in welchem Verhältnis die verschiedenen Oxidationsstufen vorliegen. Diese Oxidationsstufen können sich in ihrer (Öko-)Toxizität deutlich unterscheiden. Neben der Speziation kann bei Metallen auch die Bioverfügbarkeit stark standortabhängig sein. Organische Verbindungen können Metallionen komplexieren. Schwebstoffe können sie binden. Diese Vorgänge können standortspezifisch die Konzentrationen der verfügbaren Metallionen verringern. Dies ist in hohem Umfang abhängig von der regionalen bzw. lokalen Gewässer- bzw. Bodenbeschaffenheit.

Hinzu kommt, dass die Gesamtexposition von geogenen und anthropogenen Hintergrundkonzentrationen mitbestimmt wird. Diese können regional sehr unterschiedlich sein.

Da Metalle nicht abgebaut werden, können Sie über die Umweltmedien und die Nahrungskette auch zu (indirekten) Belastungen des Menschen führen.

Diese Besonderheiten sind bei der Expositionsbewertung von Metallen zu berücksichtigen. Auf dem Fachworkshop werden hierzu Instrumente und Erfahrungen vorgestellt.

Weitere Informationen:

- ▶ Im Leitfaden R7 der ECHA zur Umweltexpositionsabschätzung wird speziell auf Metalle eingegangen. http://www.reach-info.de/dokumente/information_requirements_r7_13_2_en.pdf

- ▶ Der internationale Metallverband (ICCM) hat eine Methode zur Umweltbewertung von Metallen entwickelt und in einem mehrteiligen eigenen Leitliniendokument veröffentlicht (<http://www.icmm.com/page/1185/metals-environmental-risk-assessment-guidance-merag>):
 - Fact sheet 1 Risk Characterization – general aspects
 - Fact sheet 2 Exposure Assessment
 - Fact sheet 3 Effects Assessment - Data compilation, selection and derivation of PNEC values for the risk assessment of different environmental compartments (water, STP, soil, sediment)
 - Fact sheet 4 Marine Risk Assessment - Use of freshwater data for the derivation of ecotoxicity thresholds for marine species
 - Fact sheet 5 Bioavailability - Water and Sediment
 - Fact sheet 6 Bioavailability – Soils
 - Fact sheet 7 Uncertainty Analysis
- ▶ Fact sheet 8 Classification - Classification for effects on the aquatic environment of metals/metal compounds and alloys
- ▶ Vom Umweltbundesamt ist in einem Gutachten die durch die Metallverbände entwickelte Methode zur Umweltbewertung von Metallen kritisch hinterleuchtet und zusätzliche Einflussfaktoren dargestellt worden, die die Bioverfügbarkeit von Metallen verändern können und bei der Bewertung berücksichtigt werden sollten. (<http://www.umweltbundesamt.de/uba-info-medien/3739.html>).

7 PBT Bewertung – Schließen von Datenlücken

Bei persistenten (schlecht abbaubaren) und bioakkumulierbaren (sich in Lebewesen anreichernden) und toxischen Chemikalien sind der Eintrag in die Umwelt und mögliche Auswirkungen auf Mensch und Umwelt zeitlich und räumlich voneinander entkoppelt. Eine belastbare Vorhersage der Exposition ist wegen der Eigenschaften Persistenz und Bioakkumulation kaum möglich. Zur Risikobewertung von diesen Stoffen sind daher eigene Methoden erforderlich, die über die „klassische“ quantitative Risikobewertung hinausgehen. Da die Vorhersage möglicher langfristiger Schäden durch PBT oder vPvB-Eigenschaften nicht möglich ist, wird hier der Vorsorgegedanke in der Chemikalienverordnung verankert.

Anhang XIII legt die Kriterien fest, nach denen Stoffe als persistent, bioakkumulierbar und toxisch (PBT) bzw. als sehr persistent und sehr bioakkumulierbar (vPvB) zu bewerten sind. Diese Kriterien sind im Frühjahr 2011 überarbeitet worden. Hersteller bzw. Importeure müssen in ihrer Registrierung im Schritt 4 der Stoffsicherheitsbeurteilung (Art. 14 (3) REACH-VO) prüfen, ob der betrachtete Stoff PBT-Eigenschaften oder vPvB-Eigenschaften aufweist. Wenn die PBT-Eigenschaften mit den vorliegenden Informationen nicht ermittelt werden können, ist ein Vorschlag für eine weitergehende Prüfung einzureichen. Die PBT-Bewertung wird in den ECHA-Leitlinien zur Stoffsicherheitsbeurteilung im Teil C und im Teil R.11 beschrieben.

Die auf dem Fachworkshop 2 von Herrn Scheringer (vgl. http://www.reach-konferenz.de/Docs_RidPIII/WS2/02_Scheringer_PBTs_RidP_neu.pdf) vorgestellten Screeninguntersuchungen belegen, dass PBT-Eigenschaften bei einer hohen Zahl von Stoffen auftreten können (Größenordnung 3.000 Stoffe). Der Anteil an PBTs ist bei den ehemaligen Neustoffen höher als bei den ehemaligen Altstoffen. Dies verdeutlicht, dass PBT-Eigenschaften nicht nur bei vor REACH wenig untersuchten phase-in-Stoffen von Bedeutung sind. Zum Screening empfahl Herr Scheringer die Anwendung von Kriterien aus der ECHA Guidance R.11.

Die frei verfügbaren Modelle unter EpiSuite ermöglichen beispielsweise eine rasche erste Einschätzung durch den Vergleich mit den PBT-Kriterien. Herr Scheringer wies darauf hin, dass ein hoher Verteilungskoeffizient Octanol-Wasser keine Entlastung darstellt, da trotzdem die Bioakkumulation und die Toxizität hoch sein können. Für die Entscheidung, ob ein Stoff die PBT-Kriterien erfüllt, ist in vielen Fällen die Bewertung zur Persistenz ausschlaggebend.

Weitere Informationen:

- ▶ Die aktuelle Fassung der Kriterien für PBTs/vPvBs (REACH Anhang XIII) ist auf folgender Internet-Seite verfügbar: <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2011:069:0007:0012:DE:PDF>
- ▶ Die PBT/vPvB- Bewertung wird in zwei Teilen der ECHA Leitlinien zu den Informationsanforderungen und zur Stoffsicherheitsbeurteilung beschrieben: im Teil C und detaillierter im Teil R.11:
 - http://echa.europa.eu/documents/10162/17235/information_requirements_part_c_en.pdf
 - http://echa.europa.eu/documents/10162/17224/information_requirements_r11_en.pdf
- ▶ Auf der Internet-Seite des Umweltbundesamtes steht eine Einführung in die Bewertung von PBT- und vPvB- Stoffen zur Verfügung (<http://www.reach-info.de/pbt.htm>) sowie eine Beschreibung der Vorgehensweise des Umweltbundesamtes bei der Identifizierung von PBT/vPvB (http://www.reach-info.de/pbt_vpvb_eigenschaften.htm).
- ▶ Von Herrn Dr. Christoph Schulte vom Umweltbundesamt ist in 2006 ein Übersichtsartikel zu PBT-Stoffen veröffentlicht worden („Persistente, bioakkumulierende und toxische Stoffe in der EU – Anspruch und Wirklichkeit <http://www.oekochemie.tu-bs.de/ak-umweltchemie/mblatt/2006/b1h306.pdf>).

8 Orientierendes Screening nach endokrin wirksamen Stoffen

REACH verpflichtet Registranten im Rahmen ihrer Registrierung Umfassend alle Risiken zu beschreiben, die von ihren Stoffen ausgehen. Artikel 14 (3) von REACH verlangt die Ermittlung schädlicher Wirkungen auf die Gesundheit des Menschen und die Umwelt. In erster Linie sind darunter zwar Wirkungen adressiert für die nach den Anhängen der REACH-Verordnung Daten erbracht werden müssen, aber auch andere bekannte Wirkungen müssen hier beschrieben werden.

Das können unter anderem auch solche sein die das Hormonsystem von Organismen beeinflussen und hier schädliche Effekte hervorrufen. Daher sind auch solche Informationen auszuwerten. Im Rahmen dieses Workshops sollen hierzu Informationsquellen und Vorgehensweisen beschrieben werden.

Hormonähnliche (endokrine) Eigenschaften eines Stoffes sind unter REACH potenziell Anlass für weitergehende regulatorische Maßnahmen (z. B. SVHC-Identifizierung und anschließende Aufnahme in Anhang XIV der zulassungspflichtigen Stoffe (vgl. Vorbereitungspapier Fachworkshop 2, Kapitel 3 http://www.reach-konferenz.de/Docs_RidP/20120314_UBA_RidP_3_WS_2_Vorbereitungspapier_kom_db_v7.pdf sowie Vortrag Frauke Stock, UBA http://www.reach-konferenz.de/Docs_RidP/WS2/05_Stock_Vortrag-endocrine-wirkung_final.pdf)). Eine besondere Schwierigkeit, endokrine Effekte zu belegen, besteht in der Tatsache, dass diese in den nach REACH Verordnung in den Anhängen VII – IX geforderten Ökotoxikologischen Tests nicht identifiziert werden können. Des Weiteren ist der Zeitpunkt einer Exposition, also der Entwicklungsphase des Organismus (Embryonalentwicklung, Entwicklung der Geschlechtsreife, Fortpflanzungsphase) für die Art und das Ausmaß eines Effekts bedeutsam. Z.T. können Effekte erst deutlich nach der eigentlichen Exposition beobachtet werden. So kann z.B. eine Exposition während der Entwicklung der Fortpflanzungsorgane schwerwiegende Effekte auf die Fortpflanzungsfähigkeit haben

Unter Berücksichtigung der besonderen Situation bei endokrinen Stoffen stellt sich die Frage: „Welche Tests können Hinweise auf mögliche endokrine Wirkungen geben?“. Unterstützung für Registranten bei dieser Frage geben der Teil R.7b der ECHA Leitlinie zu Informationsanforderungen und zur Stoffsicherheitsbeurteilung im Anhang R.7.8-5, (http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/information_requirements_r7b_en.pdf) und der entsprechende OECD Leitfaden (Draft Guidance Document on Standardised Test Guidelines for Evaluating Chemicals for Endocrine Disruption, <http://www.oecd.org/chemicalsafety/testingofchemicals/50459967.pdf>⁸⁾). Sie bieten eine Einordnung verschiedener Tests und eine Hilfestellung bei der Frage, wie die Testergebnisse zu interpretieren sind. Darüber hinaus wurden in Fachworkshop 2 folgende Informationsquellen zu endokrinen Stoffen angesprochen:

- ▶ QSAR-Abschätzungen zur endokrinen Wirkungsweise: die OECD QSAR Toolbox; <http://www.oecd.org/env/chemicalsafetyandbiosafety/assessmentofchemicals/theoecdqsartoolbox.htm>
- ▶ In vitro – Datenbanken: die Datenbank des National Center for Toxicological Research zur Östrogenrezeptorbindung (NCTRER); http://www.epa.gov/ncct/dsstox/sdf_nctrer.html
- ▶ Die Datenbank der EU-Kommission im Rahmen der europäischen Strategie zu endokrinen Stoffen; http://ec.europa.eu/environment/endocrine/strategy/substances_en.htm#priority_list

^{8(a)} Dieses Dokument befindet sich noch im Entwurf, wurde aber am April 2012 von der Arbeitsgruppe der OECD akzeptiert.

- ▶ die US-amerikanische Datenbank TEDX: List of Potential Endocrine Disruptors;
<http://www.endocrinedisruption.com/endocrine.TEDXList.overview.php>
- ▶ die Substitute It Now (SIN)-Liste; <http://w3.chemsec.org/>

Einige dieser Elemente sollen in diesem Workshop ein wenig näher vorgestellt werden. Dabei soll dargestellt werden, was die einzelnen Tools oder Datenbanken beinhalten und welche Informationen dort zu finden sind.

Weitere Informationen:

- ▶ Workshop der EU-Kommission, Generaldirektion Umwelt im Juni 2012
Beschreibung (Startseite der Internetseite zu Endokrinen Stoffen):
http://ec.europa.eu/environment/endocrine/index_en.htm
Präsentationen (ZIP-File):
http://ec.europa.eu/environment/endocrine/documents/endocrine_presentations.zip
- ▶ OECD Seite zu QSAR:
<http://www.oecd.org/env/chemicalsafetyandbiosafety/oecdquantitativestructure-activityrelationshipsprojectqsars.htm>
- ▶ OECD Seite zu Tests hinsichtlich endokriner Wirkung von Stoffen:
<http://www.oecd.org/chemicalsafety/testingofchemicals/seriesontestingandassessmenttestingforendocrinedisrupters.htm>
- ▶ OECD Seite zu der Entwicklung weiterer Test für die Untersuchung endokriner Wirkungen:
<http://www.oecd.org/chemicalsafety/testingofchemicals/draftguidanceandreviewdocumentmonographs.htm>
- ▶ Übersicht zu den Arbeiten der Europäischen Gemeinschaft zu hormonell wirkenden Stoffen: http://ec.europa.eu/environment/endocrine/documents/studies_en.htm
- ▶ Octylphenol ist der erste Stoff auf der Kandidatenliste, der aufgrund seiner endokrinen Wirkung als besonders besorgniserregend bewertet wurde. Das zugehörige Anhang XV-Dokument ist auf Internet-Seite der ECHA verfügbar:
<http://echa.europa.eu/documents/10162/17157361-4016-40ff-bc90-ae8e58e9f12b>
- ▶ Auf der Internet-Seite des Umweltbundesamtes steht eine Einführung zu endokrinen Stoffen zur Verfügung: <http://www.reach-info.de/endokrin.htm>
- ▶ Auf der nachfolgenden Internet-Seite des Umweltbundesamtes wird seine Strategie zur Identifikation besonders besorgniserregender Stoffe beschrieben: http://www.reach-info.de/svhc_strategie.htm

9 Überblick zum derzeitigen Entwicklungsstand von Standards zur Erstellung erweiterter Sicherheitsdatenblätter

Ein wichtiges Element für die Nutzung von Tools ist eine standardisierte Aufbereitung von Informationen. Dazu zählt zum einen eine strukturierte Zusammenstellung verfügbarer Informationen zu Stoffen wie sie in IUCLID vorgenommen werden kann, um dann anschließend in die REACH-IT der ECHA oder das CHESAR-Tool transferiert zu werden und hier zielgerichtet einer Auswertung oder Weiterverarbeitung zugeführt zu werden. An dieser Stelle wurde von den Behörden ein Standard für den Eingang in den Registrierungsprozess unter REACH definiert.

Um eine ähnlich strukturierte Weitergabe der Informationen in der Lieferkette als Output des Registrierungsprozesses vornehmen zu können, müssen auch für diesen Schritt Standards festgelegt werden. REACH schreibt dazu lediglich vor, dass für Stoffe, die in den Geltungsbereich des Artikel 31 fallen, ein Sicherheitsdatenblatt erstellt werden muss und gibt in Anhang II der Verordnung die grundlegende Kapitelstruktur vor und welche Inhalte aus den Dossiers sich dort wiederfinden sollen. Um eine vereinfachte und standardisierte Kommunikation im Sicherheitsdatenblatt zu erreichen, müssen aber weitergehende Standardisierungsarbeiten vorgenommen werden. Diese Aufgabe obliegt unter REACH den Wirtschaftsakteuren. So hat sich unter der Federführung des BDI und der CEFIC eine Arbeitsgruppe gegründet, die verschiedene Bausteine für die Kommunikation zu Stoffen entwickelt haben:

- ▶ EUPHRAC⁹ Standardsatzkatalog, <http://reach.bdi.info/380.htm>

Der EUPHRAC Standardsatzkatalog formuliert Phrasen für die Beschreibung der Inhalte zu den 16 Kapiteln des Sicherheitsdatenblatts.

- ▶ ES-Phrasen und Sektor spezifische Phrasen

Der EUPHRAC Standardsatzkatalog für die Expositionsszenarien beinhaltet auch sektorspezifische Beschreibungen von Inhalten.

Download der Phrasen (16 Kapitel und ES) zum Import in IT Systeme im CSV Format:

http://reach.bdi.info/Standardsatzkatalog/EuPhraC-1_1-20110727.zip

Datenbank der Phrasen mit der Möglichkeit, neue Phrasen zu etablieren:

<http://content.euphrac.eu/Default.aspx?Language=de>

- ▶ EComXML,

Das EComXML ist ein Austauschformat mit dem Expositionsszenario auf elektronischem Wege verwaltet, übermittelt und auf der Empfängerseite elektronisch verarbeitet werden können.

Download des Standards bei CEFIC: <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/Request-Form-/ECom-package-request-form/>

⁹ European Phrase Catalogue = EuPhraC

Weitere Informationen zu den IT-Voraussetzungen bei CEFIC: <http://www.cefic.org/Industry-support/Implementing-reach/IT-Tools/>

► SDSComXML

Das SDSComXML ist ein Austauschformat, mit dem die sechszehn zentralen Kapitel der Sicherheitsdatenblätter auf elektronischem Wege verwaltet, übermittelt und auf der Empfängerseite elektronisch verarbeitet werden können. Basis des Formats wird das EComXML, das EDAS Format der Firma ESKA (<http://www.edas.eu/>) und das Austauschformat der Norwegischen Umweltbehörde KILF sein (<http://www.pib.no/Mainx.aspx?Ctrls/UnitSetCtrl#Top>), bei der auch weitere Vorschläge zu Inhalten gemacht werden können.

Gegenwärtig ist die Entwicklung dieses Teils der Instrumente noch nicht abgeschlossen. Eine Seite stellt den gegenwärtigen Stand der Arbeiten dar <http://www.esdscom.eu/#roadmap>

Zusammen bilden die vier Elemente die Grundlage für den standardisierten Austausch der Informationen zwischen Akteuren. Inwieweit sich eine Umsetzung in den Unternehmen etabliert, wird von zahlreichen weiteren Aspekten abhängen. Ein wichtiger Aspekt dabei ist sicher, in welchem Umfang der Standard Eingang in die Entwicklung von IT-Instrumenten zur Erstellung der Sicherheitsdatenblättern findet, da der Austausch nur dann erfolgreich ist, wenn beide – Sender und Empfänger – den gleichen Standard verwenden.