

# Priorisierung REACH-registrierter, persistenter und mobiler organischer Chemikalien hinsichtlich ihrer erwarteten Emission in die Umwelt

Stefanie Schulze<sup>a</sup>, Daniel Sättler<sup>b</sup>, Michael Neumann<sup>b</sup>, Urs Berger<sup>a</sup>, Hans Peter H. Arp<sup>c</sup>, Thorsten Reemtsma<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung – UFZ, Leipzig, Deutschland,  
<sup>b</sup> Umweltbundesamt, Dessau-Roßlau, Deutschland,  
<sup>c</sup> Norwegian Geotechnical Institute, Oslo, Norwegen



## Schlussfolgerungen

- Die umfangreichen Datenmengen, die unter REACH vorliegen, können zur Abschätzung einer potentiellen Umweltemission REACH-registrierter Chemikalien genutzt werden
- Die Validierung des entwickelten „emission score“ mittels Web-of-Science zeigt stimmige Korrelation von „emission score“ und Anzahl der Hits pro Stoffidentität
- Mit Hilfe des „emission score“ werden bisher nicht diskutierte Persistente und Mobile Organische Chemikalien (PMOCs) priorisiert & dem EU-Verbundprojekt PROMOTE zugeführt, um analytische Methoden zu entwickeln, ein Monitoring-Programm aufzustellen sowie die Entfernung in der Trinkwasseraufbereitung zu prüfen
- Der „emission score“ ist mit kleineren Anpassungen auch auf andere Fragestellungen außerhalb des PROMOTE-Projektes anwendbar

## Motivation

Persistente, hochpolare organische Spurenstoffe, kurz PMOCs (Persistente und Mobile Organische Chemikalien) können aufgrund ihrer chemisch-physikalischen Eigenschaften natürliche und technische Barrieren im Wasserkreislauf durchbrechen. Sie besitzen daher besondere Relevanz in Bezug auf Wasserqualität bis hin zur Trinkwassergewinnung.

Innerhalb des PROMOTE-Projektes galt es, von 13159 REACH-registrierten Stoffidentitäten (Stand: Anfang 2015) die umweltrelevanten PMOCs zu identifizieren. Ziel dieser Arbeit war es, eine Priorisierung hinsichtlich möglicher Umweltemission (Abb.1) vorzunehmen.

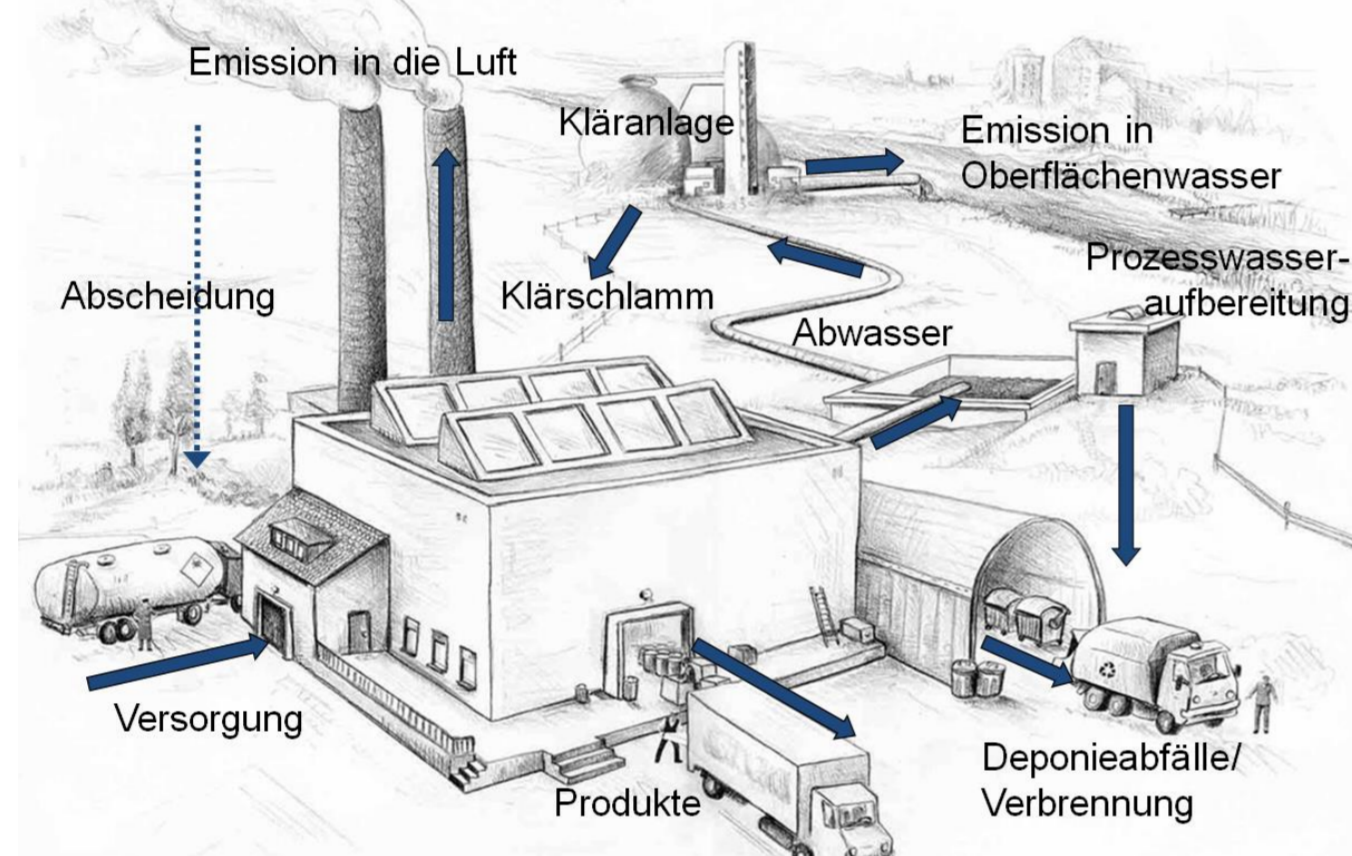


Abb.1. Emission von Chemikalien in die Umwelt (Quelle: Ginzky, Heiß; UBA-interner Vortrag)

## Vorgehensweise

### 1. Entwicklung eines Berechnungsverfahrens für einen „emission score“ (E-Score) für 13159 Stoffidentitäten

... basierend auf:

- **Gesamttonnage** der Registrierungen (Art. 10 REACH-VO)
- generischen **Verwendungsbeschreibungen** der Registranten:

- High Release to Environment
- Wide Dispersive Use
- Closed System Use
- Intermediate Use
- Consumer Use
- Professional Use
- Substance in Article

Wichtung hinsichtlich einer potentiellen Emission in die Umwelt

Diese auf den Dossierangaben der Registranten beruhenden Informationen wurden in Zusammenarbeit mit dem Umweltbundesamt bei der Europäischen Chemikalienagentur (ECHA) abgefragt. Es erfolgte eine Zuordnung numerischer Wichtungen zu den oben genannten Verwendungsbeschreibungen. Mittels folgender Formel wurde ein Score pro Stoffidentität berechnet:

$$\text{E-Score} = \text{Summe der Wichtungen aus Verwendungsbeschreibungen} \cdot \log(\text{Tonnage} + 1.1)$$

- ✓ **E-Score** für **8912** Stoffidentitäten (von 13159) (Sortierung bezogen auf den Grad der erwarteten Umweltemission)
- ✓ **Nichtvergabe** eines E-Scores in **4247** Fällen aufgrund nicht verfügbarer, relevanter Informationen in den REACH-Listen zur Verwendungsbeschreibung

... **Qualitätssicherung des E-Scores über Anzahl der Hits pro Stoffidentität bei Web-of-Science:**

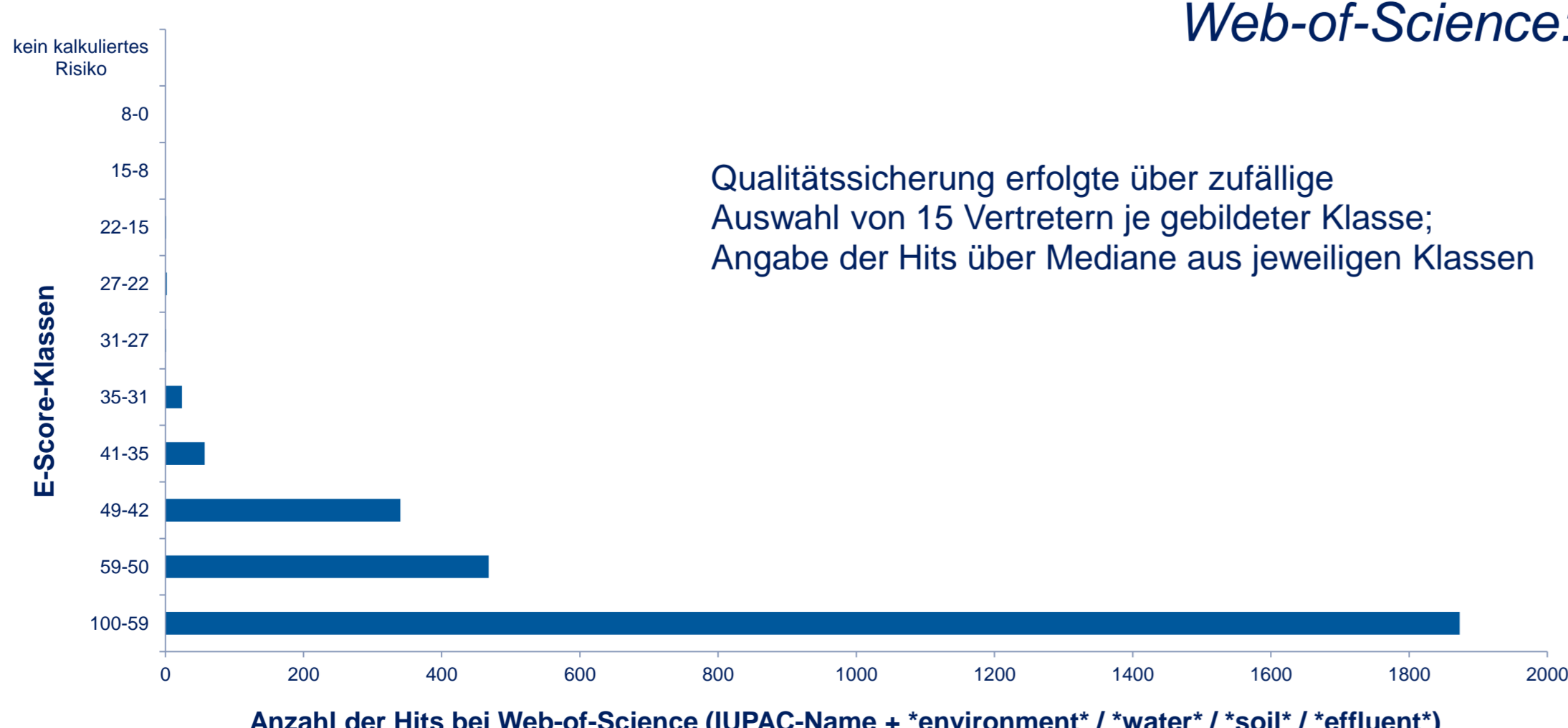


Abb.2. Qualitätsüberprüfung des E-Scores

### 2. Anwendung des E-Scores auf persistente, mobile Spurenstoffe (PMOCs)

... innerhalb des PROMOTE-Projektes Filterung der PMOCs bezüglich:

- **Persistenz** (DT50 > 40d; Hydrolyse, aerobe Biotransformation, Phototransformation, Flüchtigkeit)
- **Mobilität** (log Koc, log Doc bzw. H<sub>2</sub>O-Löslichkeit)

- ✓ **2158** identifizierte **PMOCs**
- ✓ Anwendung des E-Scores auf die dadurch identifizierten PMOCs (3 PMOCs nicht bewertbar)

- ✓ **1105 PMOCs** mit einem potentiellen **Risiko** der **Umweltemission**

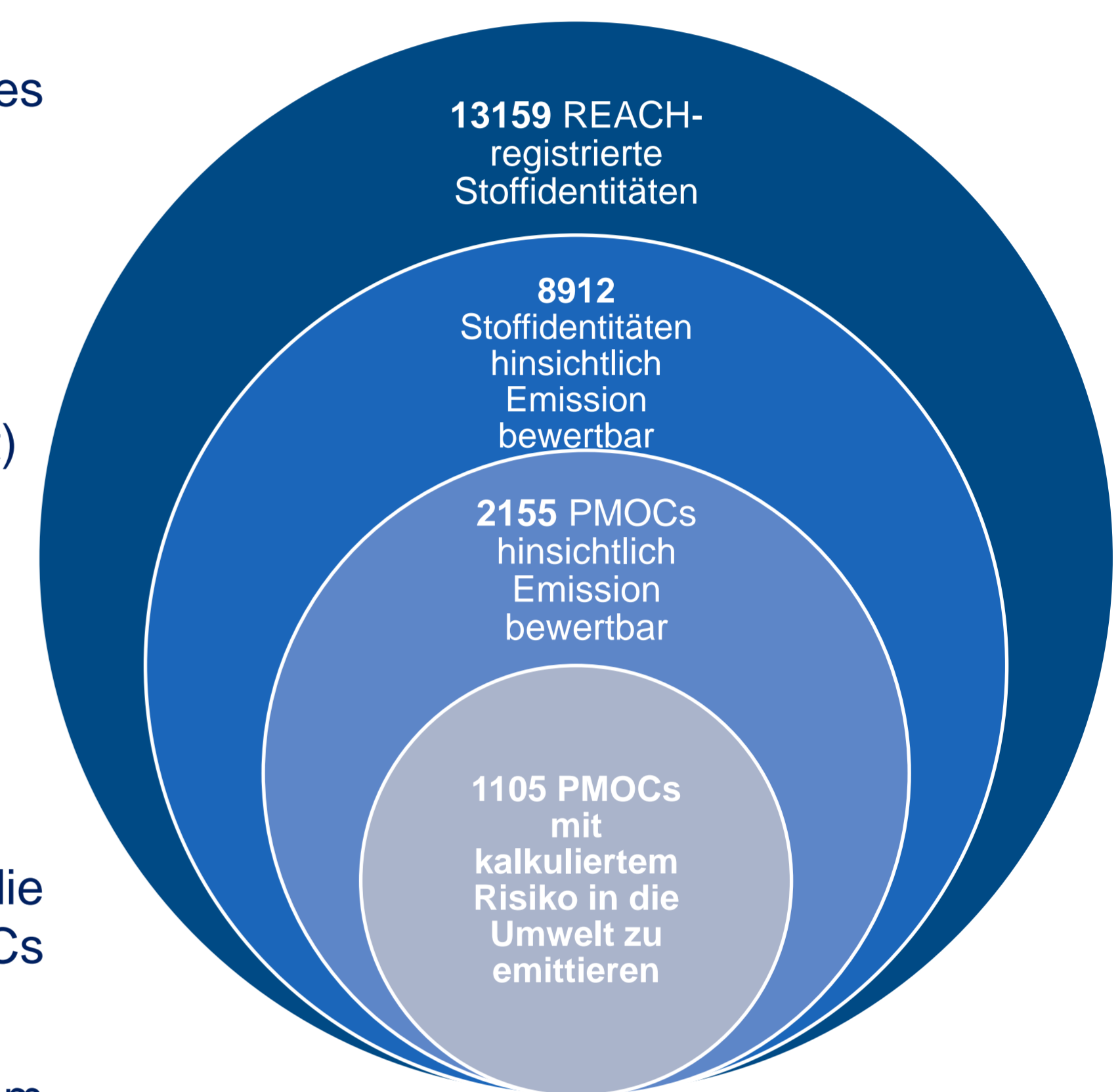


Abb.3. Verschneiden des kalkulierten E-Scores mit den identifizierten PMOCs

## Ergebnisse

Der in dieser Arbeit entwickelte E-Score konnte auf die im PROMOTE-Projekt als PMOCs definierten Verbindungen angewendet werden. Daraus resultiert eine Liste von **1105 persistenten, mobilen** Chemikalien, die ein potentielles **Risiko** besitzen, in größerem Umfang in die **Umwelt emittiert** zu werden. In dieser sind **viele neue**, in der Literatur bisher nicht beschriebene **Verdachtsstoffe** enthalten, wie auch Verifizierungsstoffe, welche **bereits untersucht** sind und von denen bekannt ist, dass sie zu Kontaminationen im Trinkwasser führen. Tabelle 1 zeigt einige dieser hoch priorisierten Substanzen auf.

Tabelle 1. Auswahl an hoch priorisierten PMOCs (Verifizierungsstoffe) mit potentiell erhöhter Wahrscheinlichkeit in die Umwelt zu emittieren

Substanz	CAS-Nr.	E-Score	log P (Chemaxon)	Struktur
2,3-Dimethylbenzensäure	25321-41-9	41	2,18	
Acesulfam K	55589-62-3	31	- 0,69	
Bisphenol S	80-09-1	39	2,32	
Cyanursäure	108-80-5	31	- 1,03	
Dapson	80-08-0	29	1,27	
epsilon-Caprolactam	105-60-2	22	0,31	
Melamin	108-78-1	61	- 0,59	
Saccharin	81-07-2	22	0,45	
Sulfanilsäure	121-57-3	37	0,10	
Tris-(1-chlor-2-propanyl)-phosphat	13674-84-5	45	3,36	

### Danksagung

Wir danken der EU Initiative zur Programmplanung (Joint Programming Initiative „Water Challenges for a Changing World“) und der finanziellen Förderung des Projektes durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung (02WU1347A) sowie dem norwegischen Forschungsrat (241358/E50).

