



Sachverständigengutachten

Definition und Bewertung von trinkwasserrelevanten Chemikalien im Rahmen der REACH-Verordnung und Empfehlungen zum Screening nach potentiell kritischen Substanzen

im Auftrag des Umweltbundesamtes

Birgit Kuhlmann
Christian Skark
Ninette Zullei-Seibert

Schwerte

Juli 2010

INHALTSVERZEICHNIS

Inhaltsverzeichnis	2
Tabellenverzeichnis	4
Abbildungsverzeichnis	4
Anlagenverzeichnis	5
Abkürzungsverzeichnis	6
Zusammenfassung	8
1 Einleitung	9
2 Definition des Expositionspfades „man via environment“	9
3 Dokumentationen von weltweiten Beispielen für die Kontamination von Trinkwasser durch Chemikalien	13
3.1 Nachweise zum Vorkommen von Spurenstoffen im Trinkwasser	13
3.2 Verhalten organischer Spurenstoffe während naturnaher Wasseraufbereitungsverfahren in ausgewählten Untersuchungen	15
4 Dokumentation des aktuellen Stands der Forschung zu den für die Trinkwasserrelevanz entscheidenden Stoffeigenschaften	16
4.1 Stoffbewertung	17
4.2 Schlüsseleigenschaften: Mobilität und Persistenz	17
4.2.1 Mobilität	19
4.2.2 Persistenz	19
4.3 Auftreten eines Stoffes	20
4.4 Weitere Priorisierungsmethoden	20
4.5 Bewertung von Stoffkriterien	22
4.6 Datenqualität und Modellierung von Daten	23
4.7 Schlussfolgerungen aus diesem Arbeitsschritt	24
5 Erarbeitung und Anwendung von Screening-Kriterien für trinkwasserrelevante Stoffe	24
5.1 Erarbeitung von Screening-Kriterien	24
5.1.1 Modellierung intrinsischer Stoffeigenschaften	24
5.1.2 Darstellung der Stoffeigenschaften	25
5.2 Stoffeigenschaften als Screening-Instrument für Trinkwasserrelevanz	31
5.2.1 Anwendung auf nachgewiesene Spurenstoffe im Trinkwasser	31
5.2.2 Test des Screening-Instruments an weiteren Substanzen	33

6	Weitere Kriterien für die Trinkwasserrelevanz von Stoffen	34
6.1	Eintragspfade	34
6.2	Weitere Bewertungskriterien	37
7	Vorgehen bei der Stoffbewertung	38
8	Literatur	41
9	Anhang	49
9.1	Ergänzende stoffbezogene Darstellungen	49
9.1.1	Arzneimittel und deren Metabolite	49
9.1.2	PBSM und deren Metabolite	52
9.1.3	Lösemittel	53
9.1.4	Weichmacher	54
9.2	Möglichkeiten weiterer Differenzierungen aufgrund der Stoffeigenschaften	54
9.2.1	Schlechter Abbau unter anaeroben Verhältnissen	54
9.2.2	Dissoziierbarkeit acider und basischer Molekülbestandteile	55
9.2.3	Weitere Abstufungen für die Ausprägung von Wasserlöslichkeit, Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient und Abbaubarkeit	55
9.2.4	Zusammenfassung und Test öglicher Feinabstufungen	57

TABELLENVERZEICHNIS

Tabelle 1:	Ausgewählte Stoffgruppen mit der Anzahl von Stoffen mit Positivbefunden im Trinkwasser	15
Tabelle 2:	Elimination ausgewählter organischer Spurenstoffe während der Uferfiltration bei variierenden Redoxbedingungen	16
Tabelle 3:	Ansätze zur Priorisierung von Chemikalien im Hinblick auf ihre Trinkwasser- und Umwelrelevanz	17
Tabelle 4:	Kriterien zur Stoffbewertung bei verschiedenen Methoden zur Priorisierung von Stoffen	18
Tabelle 5:	Bewertung von Stoffkriterien nach verschiedenen Ansätzen	23
Tabelle 6:	Indizierung von Stoffeigenschaften in Klassen	31
Tabelle 7:	Stoffe mit mittlerer oder sehr hoher Trinkwasserrelevanz gemäß der Verknüpfung der Stoffeigenschaften in der Indexsumme K	33
Tabelle 8:	Eintragungspfade für verschiedene Stoffgruppen mit einer Einschätzung ihrer Relevanz	36

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abbildung 1:	Entwicklung des Redoxmilieus und der Abbauprozesse bei der Uferfiltration	10
Abbildung 2:	Exposition von Grund- und Oberflächenwasser nach ECHA und Elimination in Grund- und Oberflächenwasser sowie bei der naturnahen Wasseraufbereitung	12
Abbildung 3:	Klassierte Häufigkeit für Angaben zur Wasserlöslichkeit für im Trinkwasser nachgewiesene organische Spurenstoffe	26
Abbildung 4:	Klassierte Häufigkeit der Angaben zum Logarithmus des Oktanol-Wasser-Verteilungs-Koeffizienten ($\log K_{OW}$) für im Trinkwasser nachgewiesene organische Spurenstoffe	27
Abbildung 5:	Klassierte Häufigkeit der Angaben zur Halbwertszeit für die biologische Abbaubarkeit (DT_{50}) für im Trinkwasser nachgewiesene organische Spurenstoffe	28
Abbildung 6:	Sorptionsfähigkeit ($\log K_{OW}$) als Funktion der Wasserlöslichkeit von Stoffen mit Nachweis im Trinkwasser	29
Abbildung 7:	Im Trinkwasser nachgewiesene organische Spurenstoffe und deren intrinsische Eigenschaften	30
Abbildung 8:	Anzahl von Stoffen nach gruppierten Indexzahlsummen K	32
Abbildung 9:	Eintragungspfade ins Trinkwasser	35
Abbildung 10:	Charakterisierung von Stoffen mit Kontaminationspotential für das Trinkwasser	39
Abbildung 11:	Haupteintragungspfade von Human- und Tierarzneimitteln ins Trinkwasser	49
Abbildung 12:	Haupteintragungspfade von PBSM und deren Metaboliten	52

ANLAGENVERZEICHNIS

Anlage 1: Gefundene Belastungen im Trinkwasser

Anlage 2: Stoffkenndaten von Substanzen, die im Trinkwasser nachgewiesen wurden

Anlage 3: Stoffkenndaten von Substanzen mit Nachweis im Trinkwasser und Test

ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS

AHTN	Tonalid, Acetylhexamethyltetrahydronaphthalin
AMDOPH	1-acetyl-1-methyl-2-dimethyloxamoyl-2-phenylhydrazid
AMPA	Aminomethylphosphonsäure
ARW	Arbeitsgemeinschaft der Rhein-Wasserwerke
AWWA	American Water Works Association
AWWR	Arbeitsgemeinschaft der Wasserwerke an der Ruhr
BAFU	Bundesanstalt für Umweltschutz (CH)
BHT	Butylhydroxytoluol
BLV	Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit
BP	Bodenporenwasser
$c(x_i)$	Konzentration von Stoff x_i [Masse/Volumen]
CCL	Contaminant Candidate List
CDWC	Committee on Drinking Water Contaminants
CHAMP	Chemical Assessment and Management Program
COMMPS	Combined Monitoring-based and Modelling-based Priority Setting
DCPA	Dimethyltetrachlorterephthalat
DEHP	Diethylhexylphthalat
Diglyme	Diethylenglykoldimethylether
DT_{50}	Halbwertszeit
DTPA	Diethylentriaminpentaessigsäure
E	Elimination
ECB	European Chemicals Bureau
ECHA	European Chemicals Agency
EDTA	Ethylendiamintetraessigsäure
EU	Europäisches Union
EUSES	European Union System for the Evaluation of Substances
GLP	Gute Laboratoriums-Praxis
GW	Grundwasser
GWA	künstliche Grundwasseranreicherung
HELCOM	Helsinki Kommission
HET	Hexachlorendomethylentetrahydrophthalsäure
HHCB	Galaxolid, 1,3,4,6,7,8-hexahydro-4,6,6,7,8,8-hexamethyl-cyclopenta[g]-2-benzopyran
I	Indexzahlen
IAWR	Internationale Arbeitsgemeinschaft der Wasserwerke im Rheineinzugsgebiet

IKSR	Internationale Kommission zum Schutz des Rheins
k.A.	keine Angabe
K	Indexzahlensumme
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
K_{ow}	n-Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient
m/L	Masse an Aktivkohle im Verhältnis zum durchgesetzten Flüssigkeitsvolumen
Max	Maximalwert
MTBE	Methyltertiärbutylether
MW	arithmetischer Mittelwert
n. b.	nicht belegt
NCOD	National Contaminant Occurrence Database
NDMA	N-Nitrosodimethylamin
NP2EO	Nonylphenoldiethoxylat
NPYR	N-Nitrosopyrrolidin
OECD	Organisation for Economic Co-Operation and Development
OSPAR	Übereinkommen zum Schutz der Meeresumwelt des Nordost-Atlantiks
OW	Oberflächenwasser
P	Persistenz
PBSM	Pflanzenbehandlungs- und Schädlingsbekämpfungsmittel
PBT	persistent, bioakkumulierend, toxisch
PCP	Personal Care Products
PEC	predicted environmental concentration
QSAR	Quantitative Struktur-Wirkungsbeziehungen
QSPR	Quantitative Struktur-Eigenschaftbeziehung
REACH	Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung chemischer Stoffe
S	Wasserlöslichkeit [Masse/Volumen]
TCEP	Tris(2-chlorethyl)phosphat
TGD	Technical Guidance Documents
TOSU	2,4,8,10-Tetraoxaspiro[5.5]undecan
TW	Trinkwasser
UCM	Unregulated Contaminants Monitoring
UF	Uferfiltration
UP	Untergrundpassage
vP	very persistent

Zusammenfassung

In der hier vorgelegten Studie werden Kriterien abgeleitet, um die Trinkwasserrelevanz von Stoffen zu bewerten. Hierbei werden sowohl Substanzen betrachtet, die unter der EU-Verordnung REACH (Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung chemischer Stoffe, EU 2006) zu registrieren sind, als auch solche, die davon ausgenommen sind.

Basis hierfür war zunächst eine Literaturrecherche über bestehende Priorisierungsmodelle und die Zusammenstellung der dort verwendeten Bewertungskriterien. Mobilität und Persistenz werden dabei als die zentralen Eigenschaften herausgestellt, die das Umweltverhalten seines Stoffes bestimmen. Diese Eigenschaften lassen sich zahlenmäßig durch verschiedene Parameter charakterisieren. Unter dem Aspekt der Trinkwasserrelevanz lassen sich die Mobilität eines Stoffes am besten durch die Wasserlöslichkeit und den Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten und die Persistenz durch die Halbwertszeit DT_{50} erfassen.

Parallel zu diesem Arbeitsschritt wurde eine gezielte Literaturrecherche durchgeführt, die die Jahre 1995 bis 2009 umfasste und auf die Dokumentation von Trinkwasserkontaminationen mit organischen Spurenstoffen abzielte. Hierbei wurden weitere, nicht unter REACH fallende Stoffgruppen wie PBSM und Arzneimittel mit berücksichtigt.

Zu diesen Stoffen wurden Daten zu den oben genannten Schlüsselkriterien zusammengetragen. Datenlücken, wie sie vor allem bei in Trinkwasser detektierten Metaboliten von Arzneimitteln und PBSM auftraten, wurden durch QSAR-Modellierungen der Stoffeigenschaften geschlossen.

Mit diesen Daten wurden verschiedene Klassierungen durchgeführt, die zu einer Eingruppierung der Stoffe in solche mit geringer, mittlerer und hoher bis sehr hoher Trinkwasserrelevanz führten. Eine Einzelbetrachtung der Stoffe, deren Kontaminationspotential nur als gering oder mittel eingestuft wurden, zeigte, dass vor allem die eingesetzte Menge und die Art der Anwendung – umweltoffen oder in geschlossenen Systemen - eine weitere Rolle bei der Stoffbewertung spielen.

Das vorgeschlagene Priorisierungsmodell erwies sich grundsätzlich als geeignet für die Abschätzung der Trinkwasserrelevanz von Stoffen, vorausgesetzt, die dafür erforderlichen Daten sind vorhanden. Dies ist für die unter REACH registrierten Stoffe in der Regel der Fall, wenn eine Expositionsanalyse vorliegt bzw. bei einer hinreichend großen Verbrauchsmenge entsprechende Stoffmerkmale erhoben werden, so dass es für diese Substanzen erfolversprechend eingesetzt werden kann. Auch für andere Anwendungsgruppen, wie PBSM und Arzneimittel, bestehen Möglichkeiten entsprechende Stoffkenn-
daten und Anwendungsmenge zu recherchieren.

1 Einleitung

Im Rahmen der Registrierung von Chemikalien unter REACH wird bisher nicht auf die Trinkwasserrelevanz von Substanzen abgehoben. Die Belastung von Oberflächen- und Grundwässern etwa über Abwassereinleitungen oder Sickerwässer wird zwar berücksichtigt, der weitere Schritt vom Oberflächen- und Grundwasser zum Trinkwasser wird aber nicht betrachtet. Mit der Definition von Kriterien zur Bewertung der Trinkwasserrelevanz von Chemikalien soll ein Instrument geschaffen werden, aus der großen Zahl der unter REACH registrierungspflichtigen Stoffe, diejenigen zu selektieren, von denen potentiell eine Gefahr für das Trinkwasser ausgeht.

2 Definition des Expositionspfades „man via environment“

Im Rahmen der REACH-Verordnung werden zukünftig Chemikalien europaweit registriert, evaluiert und bewertet, um ihre Vermarktung ohne negative Beeinträchtigung für Mensch und Umwelt zu gestalten (EU, 2006).

Die European Chemicals Agency (ECHA) formuliert und präzisiert fortlaufend Richtlinien und Leitfäden, die bei der Chemikalien-Registrierung unter REACH zum Einsatz kommen. Im Kapitel R.16 wird dabei eine Leitlinie für die Abschätzung der Umweltexposition vorgenommen (ECHA, 2008a). Diese Leitlinie referiert und reformuliert Teile des Technical Guidance Documents on Risk Assessment, die durch das European Chemicals Bureau vorgelegt wurde (ECB, 2003). Darunter fällt auch der Expositionspfad „man via environment“, in dem mögliche Wirkungen auf den Menschen über Umweltmedien betrachtet werden. Das schließt auch den Weg einer Exposition über Trinkwasser ein.

In dieser Studie wird die Untersuchung auf diesen Trinkwasser-Pfad beschränkt. Weitere Einwirkungsmöglichkeit auf den Menschen durch die Luft, die unbeabsichtigte Aufnahme von Boden oder die Aufnahme von Stoffen, die über die Nahrung außer durch Trinkwasser erfolgen, bleiben unberücksichtigt.

Somit beschränkt sich die Betrachtung auf die Frage, inwieweit Stoffe potentiell im Trinkwasser auftreten können. Dabei steht zunächst die Frage im Vordergrund, wie sich dies für Stoffe entwickelt, die unter REACH reguliert werden bzw. regulierungsfähig sind. Im Weiteren treten auch Stoffe in den Fokus, die anderweitig reguliert oder gar nicht reguliert sind.

Die ECHA hebt bei der Beschreibung einer Belastung durch Trinkwasser darauf ab, dass der Rückhalt von organischen Spurenstoffen in den Trinkwasserressourcen sowohl bei der Nutzung von Grundwasser als auch bei der Nutzung von Oberflächenwasser gering ist (ECHA 2008a, R.16). Die Expositionsanalyse zielt auf die Abschätzung möglicher Konzentrationen in verschiedenen Umweltkompartimenten (predicted environmental concentrations PEC). Die Ergebnisse können nach ECHA (2008a, R.16, S. 100) vor allem auf worst-case-Situationen hinweisen.

Für das Grundwasser geht in die Vorhersage die Porenwasserkonzentration des landwirtschaftlich genutzten Bodens ein, in den über Klärschlamm oder durch atmosphärische Deposition verschiedene Stoffe eingetragen werden.

Für die PEC des Oberflächenwassers werden vor allem die abgeschätzten Konzentrationen der Kläranlagenabläufe sowie die Verminderung dieser Konzentration durch Verdünnung herangezogen. Weitere Konzentrationsminderungen können durch Abbau (photolytisch, hydrolytisch und biologisch) sowie durch die Sorption an Schwebstoffe und Sedimente erfolgen.

Die Trinkwassergewinnung in Deutschland stützt sich im Wesentlichen auf die Nutzung von Grundwasserressourcen (BGW 2003). Regional können jedoch beträchtliche Anteile der Trinkwasserversorgung aus Oberflächenwasser gespeist sein. Neben der direkten Aufbereitung von Oberflächenwasser aus Fließgewässern, Seen und Talsperren mittels technischer Verfahren kommen vielfach naturnahe Verfahren der Wasseraufbereitung wie die Uferfiltration und die künstliche Grundwasseranreicherung über Langsandsandfilter zum Einsatz. Auf der Fließstrecke im Untergrund können sich dabei unterschiedliche Redoxbedingungen einstellen. Während bei der künstliche Grundwasseranreicherung durch entsprechende Belüftung des Wassers vor der Infiltration sowohl bei der Infiltration als auch bei der nachfolgende Untergrundpassage zumeist ausreichend Sauerstoff zur Verfügung steht, wird die Uferfiltration vor allem durch eine rasche Sauerstoffzehrung und die Ausbildung eines an Sauerstoff mehr oder weniger stark verarmten Milieus im Untergrund geprägt (PREUSS UND SCHULTE-EBBERT 2000, Abbildung 1).

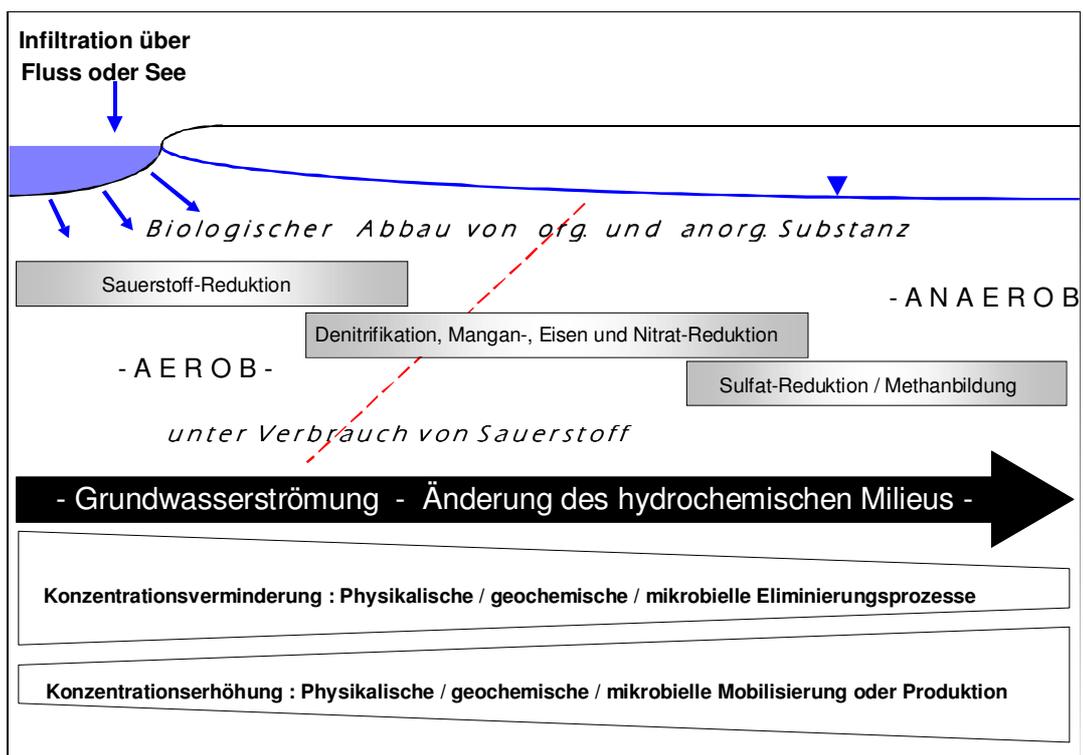


Abbildung 1: Entwicklung des Redoxmilieus und der Abbauprozesse bei der Uferfiltration (Schulte-Ebbert 2004)

Diese unterschiedliche Sauerstoffverfügbarkeit wirkt sich unter Umständen auf die Abbauraten organischer Spurenstoffe aus (SCHMIDT UND LANGE, 2005, STUYFZAND UND LÜERS 1996, STUYFZAND 1997, KUHLMANN 1997). Neben der Filtration und Sedimentation, die

hauptsächlich zur Entfernung partikulär gebundener Stoffe und mobiler Festphasen dienen, tragen Sorption und mikrobieller Abbau bereits unmittelbar während der Infiltration und der anschließenden Untergrundpassage zur Reinigungsleistung bei dieser Art der Wasseraufbereitung bei.

Eine Trinkwasserversorgung, die sich auf Oberflächenwasser und den Einsatz naturnaher Aufbereitungsverfahren stützt, ist in Deutschland vor allem längs der Flüsse Rhein, Elbe, Havel und Ruhr verbreitet. Große urbane Ballungszentren, wie das Ruhrgebiet, der Kölner Raum und Berlin werden so mit Trinkwasser versorgt (MUNLV, 2002). Dabei kann das naturnahe Aufbereitungsmodul durch weitere technische Verfahren wie Ozon-Behandlung und Aktivkohle-Filtration ergänzt sein.

Expositionsszenarien unter REACH betrachten gemäß ECHA (2008a) für das Oberflächenwasser die Abschätzung eines möglichen Stoffeintrags infolge des Zuflusses geklärten Abwassers und deren Modifikation durch Abbau und Sorption im Gewässer (Abbildung 2). Weitere Eliminationsprozesse, die während der Uferfiltration oder Grundwasseranreicherung und der daran anschließenden Untergrundpassage erfolgen, werden in der Erstellung der Expositionsszenarien nicht berücksichtigt. Dies entspricht der Absicht, vor allem worst-case-Situationen offenzulegen.

Ebenso wird in den Expositionsszenarien unter REACH nach ECHA (2008a) ein möglicher Eintrag von Stoffen ins Grundwasser auf 2 zentrale Wege begrenzt, die Ausbringung von Klärschlamm sowie die atmosphärische Deposition auf den Ackerboden (PEC_{BP} in Abbildung 2). Die Predicted Environmental Concentration (PEC) im Bodenporenwasser wird der im Grundwasser gleichgesetzt. Weitere Einträge können durch eine direkte, beabsichtigte Ausbringung von Chemikalien, z.B. Pflanzenschutzmittel, oder eine indirekte, unbeabsichtigte Verbreitung von Chemikalien, z.B. Tierarzneimittel oder Reinigungsmittel mit Wirtschaftsdünger erfolgen. Zu einem großen Teil sind diese Stoffgruppen bzw. ihre Anwendungen nicht unter REACH registrierungsfähig.

Obwohl in den Expositionsszenarien nach ECHA (2008a) die Konzentration des Bodenporenwassers im wesentlichen durch den Klärschlamminput und die atmosphärische Deposition gesteuert wird, gehen über die verschiedenen Verteilungsgleichgewichte zusätzlich die Volatilität und die Speicherung in der Bodenluft sowie Verluste durch Auswaschung ein. Ebenso sind die Abbaudaten mehr oder weniger klassiert. Aufgrund der Einschätzung eines Stoffes in OECD-Tests wird er einer Abbauklasse von gut bis gar nicht abbaubar zugewiesen. Dies impliziert dann entsprechende Abbauraten – kalkuliert auf der Basis eines quasi 1. Ordnung Abbaus aus der DT_{50} -, mit denen die Verluste über die Zeit im Boden abgeschätzt werden können. Die Kalkulationen setzen die Kenntnis von Verteilungskoeffizienten zwischen verschiedenen Umweltkompartimenten sowie die Größe von Abbauraten voraus. Stehen diese nicht zur Verfügung lassen sie sich durch Standardannahmen sowie QSAR-Abschätzungen bereitstellen (ECHA 2008b-d, R.6, R.7). In Abbildung 2 sind die berücksichtigten Minderungen der Konzentration als E_{BP} berücksichtigt

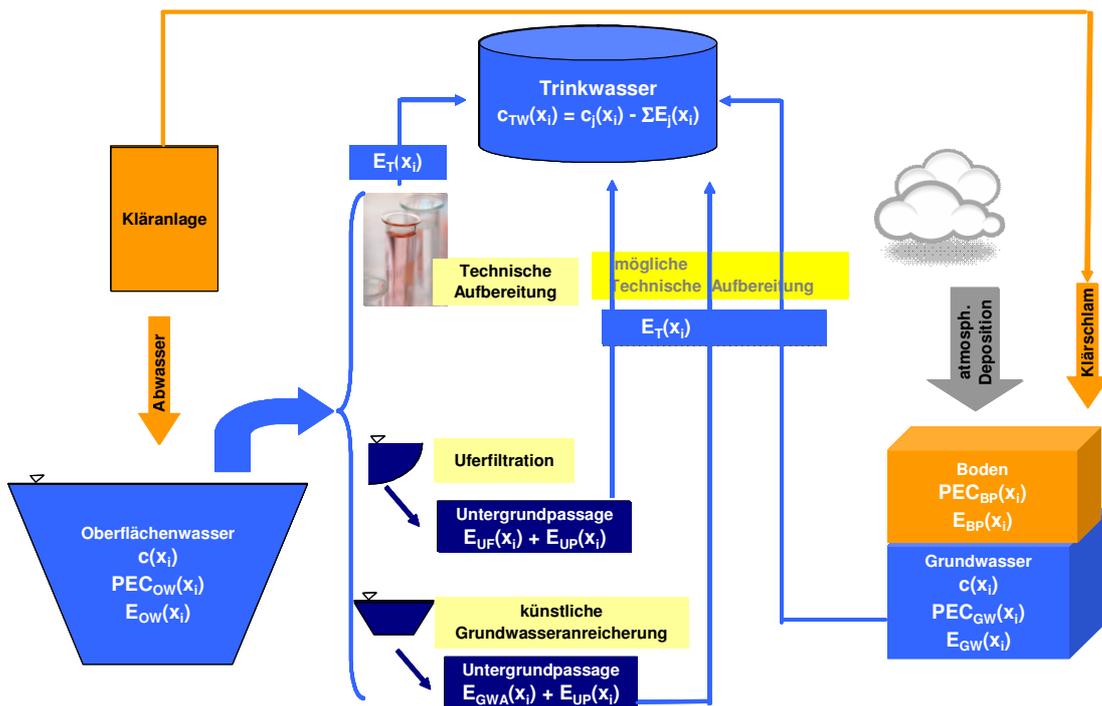


Abbildung 2: Exposition von Grund- und Oberflächenwasser nach ECHA (2008a) und Elimination in Grund- und Oberflächenwasser sowie bei der naturnahen Wasseraufbereitung

BP – Bodenporenwasser, $C(x_i)$ – gemessene Konzentration des Stoffes x_i , E – Eliminationsleistung, GW – Grundwasser, GWA – Grundwasseranreicherung, OW – Oberflächenwasser, PEC – predicted environmental concentration, UF – Uferfiltration, UP - Untergrundpassage

Bei abgeschätztem Auftreten dieser Stoffe im Bodenporenwasser der landwirtschaftlich genutzten Fläche gemäß ECHA (2008a) können die Verbindungen sowohl in der ungesättigten Zone auf der Sickerstrecke zur Grundwasseroberfläche als auch im Grundwasserleiter durch Sorption und mikrobiellen Abbau vermindert werden (E_{GW} in Abbildung 2). Auch dies wird in den REACH-Expositionsszenarien im Sinne einer worst-case Betrachtung nicht berücksichtigt.

Gemessene Konzentrationen können von den abgeschätzten PEC abweichen ($c(x_i)$ in Abb. 2). Während der Wasseraufbereitung können für das jeweilige Aufbereitungsverfahren spezifische Konzentrationsvermindierungen eintreten ($E_j(x_i)$ in Abb. 2). Insbesondere bei der Uferfiltration kann die stoffspezifische Reinigungsleistung in starkem Maße vom Redoxmilieu abhängen. In den naturnahen Aufbereitungsverfahren können sich vor allem durch Bioabbau Metabolite bilden. Bei den technischen, oxidativen Verfahren findet die Metabolitenbildung in einem stärkeren Ausmaß statt. Die residuale Trinkwasserkonzentration erscheint dann als die Konzentration eines Stoffes in der Rohwasserressource vermindert durch die jeweilige Elimination der verschiedenen Aufbereitungsschritte (Abb. 2).

Festzuhalten gilt jedoch, dass die Trinkwassergewinnung bei der Nutzung sowohl von Oberflächenwasser mit naturnahen Aufbereitungsverfahren als auch von Grundwasser

auf Eliminationsprozesse durch Sorption und mikrobiellen Abbau zugreift. Diese Prozesse gilt es bei der Stoffbewertung mit geeigneten Parametern zu berücksichtigen.

Dabei ist zunächst unerheblich, ob es sich bei den zu betrachtenden Stoffen um besonders besorgniserregende Substanzen im Sinne von Artikel 57 der REACH-Verordnung handelt oder nicht, da es in jedem Fall gilt, das Auftreten organischer Spurenstoffe, die durch menschliches Handeln in die aquatische Umwelt gelangen, im Trinkwasser zu minimieren.

3 Dokumentationen von weltweiten Beispielen für die Kontamination von Trinkwasser durch Chemikalien

3.1 Nachweise zum Vorkommen von Spurenstoffen im Trinkwasser

In diesem Teilschritt werden Befunde von Spurenstoffen im Trinkwasser zusammengestellt werden. Hierbei werden nicht nur unter REACH registrierungsfähige Stoffe berücksichtigt sondern alle Spurenstoffe, deren Auftreten im Trinkwasser anthropogen bedingt ist, also auch Arzneimittel und Biozide.

Bei der hierzu erforderlichen Literaturrecherche wurden die Jahrgänge 1995 bis 2009 der folgenden Zeitschriften einbezogen:

- Environmental Science and Technology
- The Science of the Total Environment
- Chemosphere
- Water Research
- Water Science & Technology
- Environmental Health Perspectives.

Mit den genannten Zeitschriften wurden die wichtigsten Publikationen der internationalen Wasserforschung erfasst. Aus diesen Zeitschriften wurden alle Artikel ausgewählt, die sich mit dem Auftreten von Kontaminanten im Trinkwasser befassen.

Zudem konnte auf den umfangreichen Zeitschriften- und Buchbestand des IfW zurückgegriffen werden, der in einem EDV-System erfasst ist. Über eine Stichwortsuche ist hier ein gezielter Zugriff auf über 30.000 Literaturzitate möglich.

Eine weitere Quelle von Daten zu Trinkwasserkontaminationen waren Monitoringprogramme auf nationaler und internationaler Ebene. Berichte hierzu lagen zum Teil vor, wie zum Beispiel das Monitoring der Wasserwerke an Rhein und Ruhr, anderes wurde im Internet recherchiert. Gezielt wurde hier nach Daten von Trinkwasseruntersuchungen bei den entsprechenden Behörden und Institutionen der Bundesländer und der EU-Staaten gesucht. Außerhalb der EU wurden nationale Programme in der USA, Kanada und Australien in die Recherche einbezogen.

Bei der Recherche wurde schnell deutlich, dass, verglichen mit der großen Zahl an Daten über die Belastung von Grund- und Oberflächenwassern, relativ wenige Daten über Trinkwasserkontaminationen publiziert wurden. Die Suche in den oben genannten Zeitschriften und dem EDV-Literaturspeicher des IfW führte insgesamt zu etwa 100 Literaturstellen, von denen aber nur ein Teil tatsächlich für die Auswertung geeignete Daten bein-

halten. Hierbei handelt es sich in den meisten Fällen um Veröffentlichungen aus Forschungsprojekten, bei denen gezielt einzelne Stoffgruppen untersucht wurden.

Auf der Ebene der Bundesländer existieren zum Teil Berichte oder Datenzusammenstellungen zur Trinkwasserqualität, die in der Regel auf den im Rahmen der Qualitätskontrolle der Wasserwerke durchgeführten Untersuchungen basieren (zum Beispiel: MUNLV 2008). Hierbei ist Parameterumfang und Häufigkeit der Untersuchungen durch die Vorgaben der Trinkwasserverordnung festgelegt. Diese beinhaltet nur relativ wenige organische Spurenstoffe und auch für diese werden einzelne Positivbefunde zwar benannt, aber nicht mit Messwerten belegt. Andere Stoffgruppen, von denen bekannt ist, dass sie im Trinkwasser auftauchen können (zum Beispiel Arzneimittel), werden bei größeren Versorgern untersucht, Daten dazu aber in der Regel nicht veröffentlicht. Eine Zusammenfassung der in Bayern im Jahre 2005 durchgeführten Untersuchungen auf Pestizide im Trinkwasser gibt zumindest einige wenige Angaben zur Belastungssituation (BAYERISCHES LANDESAMT FÜR UMWELT 2006). Grundlage hierzu sind die Erhebungen der Gesundheitsbehörden.

Auch nationale Programme, bei denen Daten zur Trinkwasserqualität zusammengetragen und ausgewertet werden, geben in der Regel keine Auskunft über Kontaminanten, die als Spurenstoffe im Trinkwasser auftreten. Eine Ausnahme macht hier die Datenbank der US EPA "National Contaminant Occurrence Database (NCOD)", in der landesweit Analyseergebnisse zu insgesamt 27 Stoffen aus den Jahren 2000 bis 2009 zusammengetragen wurden (US EPA 2009e). Bei diesem so genannten „Unregulated Contaminants Monitoring (UCM)“ werden gezielt Daten zu solchen Stoffen zusammengetragen, die bisher in der US-Trinkwassergesetzgebung noch nicht berücksichtigt werden, bei denen aber der Verdacht besteht, dass sie im Trinkwasser auftreten können. Die Stoffliste wird alle 5 Jahre überarbeitet. Grundlage hierfür ist die „Contaminant Candidate List“ (CCL, s. unten).

Die Auswertung der Literatur erfolgt im Hinblick auf

- die gemessene Kontaminante
- die zugehörige Stoffgruppe
- die in Roh- und Trinkwasser gemessenen Konzentrationen (Mittel- und Maximalwert)
- die Rohwasserherkunft
- die Aufbereitung
- das Untersuchungsgebiet und den –zeitraum.

Die aus diesen Daten zusammengestellte Tabelle befindet sich in Anlage 1. Diese lässt sich nach verschiedenen Kriterien sortieren, so dass sie im Hinblick auf unterschiedliche Fragestellungen ausgewertet werden kann.

Aus den Daten lässt sich für die einzelnen Substanzen nur selten der gesamte Weg vom Rohwasser über einzelne Aufbereitungsschritte bis hin zum Trinkwasser anhand von Konzentrationsprofilen nachvollziehen.

In der Recherche wurden insgesamt 151 Stoffe identifiziert. Als wesentliche Stoffgruppen treten Arzneimittel (einschl. deren Metabolite, Antibiotika, Hormone und Röntgenkontrastmittel), Flammschutzmittel, PBSM und deren Metabolite, Lösemittel, Personal Ca-

re Products (einschl. Duftstoffe) und Weichmacher auf, deren Anzahl in Tabelle 1 zusammengestellt sind und sich auf 117 Substanzen summiert. Die restlichen 34 Stoffe verteilen sich auf verschiedene Stoffgruppen. Befunde werden auch für Abbauprodukte von Detergentien (Nonylphenole), die Komplexbildner EDTA und DTPA und das Benzinadditiv MTBE genannt.

Tabelle 1: Ausgewählte Stoffgruppen mit der Anzahl von Stoffen mit Positivbefunden im Trinkwasser
PCP – Personal Care Products

Stoffgruppe	Arzneimittel	PCP	Flammschutzmittel	PBSM	Lösemittel	Weichmacher
Zahl der Stoffe	33	10	3	45	18	8

Eine gewisse Sonderstellung nehmen die in Trinkwasser detektierten Nitrosamine ein, die bei der Chlorung und Ozonung aus organischen Stickstoffverbindungen oder auch bei einer Reihe von technischen Prozessen aus Aminen gebildet werden. Weitere Stoffe wie Nitrobenzol oder Toluol können keinen spezifischen Gruppen zugeordnet werden, sondern treten in einer Vielzahl von industriellen Prozessen als End- oder Zwischenprodukt auf (in Anlage 1 unspezifisch als „Chemikalie“ bezeichnet).

3.2 Verhalten organischer Spurenstoffe während naturnaher Wasseraufbereitungsverfahren in ausgewählten Untersuchungen

Verschiedene Studien zielten unter anderem auf die Untersuchung des Stoffverhaltens organischer Spurenstoffe bei naturnahen Wasseraufbereitungsverfahren, insbesondere bei der Uferfiltration (SCHMIDT UND LANGE, 2005, STUYFZAND UND LÜERS 1996, STUYFZAND 1997, GRÜTZMACHER ET AL. 2010). Hierbei lag das Hauptaugenmerk auf dem Systemverständnis verschiedener Standorte und deren resultierender Reinigungsleistung, während die Qualität des Trinkwassers nach weiteren Aufbereitungsschritten nicht oder nur am Rande betrachtet wurde. Das Verhalten ausgewählter Stoffe während der Uferfiltration und einer anschließenden Untergrundpassage bei verschiedenen Redoxmilieus wird in Tabelle 2 aufgeführt. Darüberhinaus finden sich im Rahmen einer Literaturstudie Angaben zum Verhalten von verschiedenen Tensiden, Moschusverbindungen, Weichmachern, Industriechemikalien, phosphororganischen Flammschutzmitteln, Hormonen, aromatische Kohlenwasserstoffe und deren Derivate und Pestiziden verschiedener stofflicher Zusammensetzung auf. Wegen oftmals geringer Elimination erscheinen über die in Tabelle 2 beispielhaft aufgeführten Vertreter einzelner Stoffgruppen hinaus vor allem einzelne Pestizide sowie chlorierte aromatische Verbindungen als problematisch.

Das Verhalten der Beispielstoffe in Tabelle 2 belegt, dass die Reduktion der Oberflächenwasserkonzentration bei einigen Stoffen in Abhängigkeit von der Sauerstoffverfügbarkeit sehr unterschiedlich ausfallen kann. Neben einer guten Reinigungsleistung in der Untergrundpassage unabhängig vom Redoxmilieu sind Stoffe identifiziert, bei denen entweder bei guter Sauerstoffverfügbarkeit oder umgekehrt bei reduzierenden Bedingungen die Entfernung vermindert abläuft. Gerade für Stoffe, deren Auftreten im Trinkwasser nicht zu erwarten ist, kann die Redoxabhängigkeit der Elimination während der Uferfiltration das Vorkommen erklären.

Tabelle 2: Elimination ausgewählter organischer Spurenstoffe während der Uferfiltration bei variierenden Redoxbedingungen (SCHMIDT UND LANGE 2005)

Substanz	aerob	suboxisch	anoxisch	anaerob
Komplexbildner				
EDTA	++	++	o	o
NTA	++++	++++	++++	++++
Naphthalinsulfonate				
Naphthalin-2-sulfonat	++++	++++	++++	++++
Naphthalin-1,5-disulfonat	o	+	o	+
Naphthalin-1,6-disulfonat	++++	++++	+++	o
Arzneimittel				
Carbamazepin	o	o	+	++++
Diclofenac	++++	++++	++++	++++
Sotalol	++++	++++	++++	++++
Sulfamethoxazol	o	o	+++	++++
Clindamycin	++++	+++	+++	+++
Röntgenkontrastmittel				
Iopromid	++++	++++	++++	++++
Iopamidol	+	++	+++	++++
Amidotrizoesäure	o	o	+	++++

o ≤ 25 % + ≤ 50 % ++ ≤ 70 % +++ < 80 % ++++ > 80 %

4 Dokumentation des aktuellen Stands der Forschung zu den für die Trinkwasserrelevanz entscheidenden Stoffeigenschaften

Um aus der Vielzahl von Chemikalien, die produziert und angewendet werden, diejenigen zu selektieren, die potentiell in aquatischen Medien auftreten können, wurden von den Umweltministerien und -agenturen verschiedener Staaten, von internationalen Organisationen, Interessenverbänden und Zusammenschlüssen betroffener Ländern und Regionen Verfahren entwickelt, mit deren Hilfe Listen von prioritären Stoffen aufgestellt wurden. Grundlagen sind hierbei in der Regel

- Chemisch-physikalische Stoffeigenschaften,
- Daten zum Auftreten in der aquatischen Umwelt,
- Angaben zur Toxizität und zur
- Abbaubarkeit.

In Tabelle 3 sind solche in der Gewässer- und/oder Trinkwasserüberwachung eingesetzte Listen zusammengestellt. Berücksichtigt wurden dabei nur Stofflisten, die explizit auf die Belastung von Grund-, Oberflächen- und Trinkwasser zielen. Auch Stofflisten, die primär auf die Verschmutzung mariner System fokussieren, wie zum Beispiel die OSPAR List of Priority Action (OSPAR 2002) oder die HELCOM Helsinki Convention (HELCOM 1998), wurden in der Tabelle nicht einbezogen. Hingegen wurden Drinking Water Guidelines einzelner Länder mit berücksichtigt, bei denen organische Spurenstoffe einzeln und begrün-

det aufgelistet werden, die somit implizit auch eine Liste prioritärer Stoffe im Trinkwasser darstellen.

Tabelle 3: Ansätze zur Priorisierung von Chemikalien im Hinblick auf ihre Trinkwasser- und Umweltrelevanz

Liste prioritärer Stoffe	Grundlage	Fokus	Anzahl Stoffe	Jahr	Quelle
Liste Prioritärer Stoffe im Bereich Wasserpolitik	Wasserrahmenrichtlinie (Richtlinie 2000/60/EG)	Oberflächen- und Grundwasser	33	2001	EG 2001
Stoffliste Rhein 2007	IKSR (Internationale Kommission zum Schutz des Rheins)	Oberflächenwasser	65	2007	IKSR 2007
Liste CH-relevanter Stoffe	Projekt "Strategie MicroPoll"	Oberflächenwasser	50	2009	BAFU (2009)
Monitoring zum Vorkommen anthropogener Spurenstoffe in der Ruhr	AWWR	Oberflächenwasser	36	2007	AWWR (2007)
Drinking Water Contaminant Candidate List	Safe Drinking Water Act	Trinkwasser	116	2009	US EPA 2009a
Guidelines for Canadian Drinking Water Quality	Health Canada	Trinkwasser	ca. 80	2008	Health Canada 2009
Australian Drinking Water Guidelines	Australian Government NHMRC	Trinkwasser	ca. 70	2004	Australian Government 2009
Unregulated Contaminant Monitoring List	Safe Drinking Water Act	Trinkwasser	30	2009	US EPA 2009b

4.1 Stoffbewertung

Zum Teil werden in den Listen über- oder beigeordneten Dokumenten die Kriterien aufgeführt, die zur Priorisierung dieser Stoffe geführt haben. Schlüsseleigenschaften zur Trinkwasserrelevanz im Einzelnen und zur Umweltrelevanz insgesamt werden auch in verschiedenen Methoden zur Stoffklassifizierung und –priorisierung benannt. Diese Angaben wurden im Folgenden tabellarisch zusammengefasst (Tabelle 4). Grundlage hierfür sind unter anderem Bewertungsmethoden der US EPA sowie der kanadischen und dänischen Umweltbehörden. Das ebenfalls berücksichtigte COMMPS-Verfahren wird zur Priorisierung von Stoffen im Rahmen der Wasserrahmenrichtlinie eingesetzt.

Bei der Erstellung der Listen prioritärer Stoffe im US-amerikanischen, kanadischen und australischen Raum spielt allerdings – im Gegensatz zu der Deutschland vorherrschenden Philosophie – die toxische Wirkung auf den Menschen eine entscheidende Rolle. Während bei der Einschätzung von Spurenstoffen im Trinkwasser in Deutschland von dem Minimierungs-Grundsatz ausgegangen wird und nur in Einzelfällen toxikologisch begründete Höchstwerte festgelegt sind, werden im englischsprachigen nicht EU-Raum toxikologische Daten in großem Umfang in Risikobetrachtungen einbezogen.

4.2 Schlüsseleigenschaften: Mobilität und Persistenz

In allen Modellen wird von der Grundannahme ausgegangen, dass die Mobilität und die Persistenz eines Stoffes die Schlüsseleigenschaften für das Verhalten in aquatischen

Medien sind. Unter anderem aus der Kombination beider lässt sich das Potential eines Stoffes, in Gewässern aufzutreten, abschätzen.

Tabelle 4: Kriterien zur Stoffbewertung bei verschiedenen Methoden zur Priorisierung von Stoffen

Lfd. Nr.	Methode/Projekt	Fokus	Stoffgruppe	Chemisch-physikalische Eigenschaften							Auftreten		Quelle
				Wasserlöslichkeit	K _{ow}	K _{oc}	K _d	Henry-Konst.	Dampfdruck	Bioabbau	Konzentration	Häufigkeit	
1	Cadmus Risk Index Approach 1992	Trinkwasser	alle		X					X	X	X	Committee on Drinking Water Contaminants et al. 1999
2	American Water Works Association Screening Process 1993	Trinkwasser	alle								X		Committee on Drinking Water Contaminants et al. 1999
3	American Water Works Association Regulation Development Process 1998	Trinkwasser	alle								X	X	Committee on Drinking Water Contaminants et al. 1999
4	Health Canada 2009	Trinkwasser	alle								X	X	Health Canada 2009
5	COMMPS	Oberflächen- und Grundwasser	alle	X	X					X	X	X	Fraunhofer-Institut 1999
6	CCL -Contaminant Candidate List	Trinkwasser	alle	X	X	X	X	X		X		X	US EPA 2009c
7	Unregulated Contaminant Monitoring	Trinkwasser	alle								X	X	US EPA 2009b
8	Biozide als Mikroverunreinigungen in Abwasser und Gewässer	Gewässer	Biozide							X			Gälli et al. 2009
9	Priorisierung von Umwandlungsprodukten von Mikroverunreinigungen	Gewässer	PBSM-Metabolite		X						X		Gälli et al. 2009
10	Physiko-chemische Kenngrößen zur Beurteilung der Trinkwasserrelevanz von Abbauprodukten von Pflanzenschutzmitteln	Trinkwasser	PBSM	X	X	X					X		Litz & Dieter 2009a
11	Physiko-chemische Kenngrößen zur Beurteilung der Trinkwasserrelevanz von Chemikalien	Trinkwasser	alle	X	X	X					X		Litz & Dieter 2009b
12	Modulares System zur Gesamtbewertung von Umweltkontaminanten in Boden, Gewässern und Trinkwasser	Boden, Gewässer, Trinkwasser	alle	X							X		Mulisch et al. 2003
13	BIOMIK	Gewässer	Biozide	X	X					X	X		Bürgi et al. 2007
14	Projekt "Strategie MicroPoll"	Oberflächenwasser	alle		X			X			X		BAFU 2009

4.2.1 Mobilität

Als Eigenschaften, die die Mobilität entscheidend beeinflussen, gehen insbesondere die Wasserlöslichkeit und verschiedene Verteilungskoeffizienten in die Bewertung ein. Von den Verteilungskoeffizienten werden der zwischen Oktanol/Wasser (K_{ow}), der zwischen Organischem Kohlenstoff/Wasser (K_{oc}) und Boden/Wasser (K_d) genannt, wobei dem K_{ow} -Wert die größte Aussagekraft zugeschrieben wird. Als weitere Größen, die den Transport eines Stoffes mit beeinflussen, werden für die Verteilung zwischen wässriger und gasförmiger Phase die Henry-Konstante und der Dampfdruck genannt.

Die Bestimmung dieser Stoffeigenschaften erfolgt in der Regel experimentell, wobei aus den Ergebnissen (Daten) in den meisten Fällen nicht das Vorgehen zu ihrer Bestimmung hervorgeht, was sicherlich ein Grund dafür ist, dass aus verschiedenen Quellen unterschiedliche Angaben stammen. Während bei Angaben zur Abbaubarkeit häufig die verwendete Testmethode (meist OECD) angegeben wird (s. u.), ist dies bei chemisch-physikalischen Daten oft nicht der Fall. Eine Abschätzung ist auch über Modelle möglich, wie zum Beispiel durch Quantitative Struktur-Wirkungsbeziehungen (QSAR).

Weitere Verteilungskoeffizienten zwischen Sediment bzw. Boden und Wasser (K_d) oder zwischen dem organischen Kohlenstoff und Wasser (K_{oc}) werden experimentell mit spezifischen Bodenmaterial und der darin vorliegenden spezifischen Ausformung von Huminstoffen durchgeführt. Sie können nicht als intrinsische Stoffeigenschaft angesehen werden, sondern gelten nur für das geprüfte Sorbens. Modellhafte Verallgemeinerungen und Modellableitungen sind möglich, müssen aber eine weitgehende homogene Zusammensetzung und Verteilung der Sorbentien in Sedimenten und Boden unterstellen, was in der Realität kaum vorkommt. Sowohl die Struktur der organischen Substanz auf der molekularen Ebene von Huminstoffen als auch das Vorkommen von Tonmineralen als wesentlicher Sorbentien variieren räumlich in den Sedimentkörpern stark (standörtlich, vertikal und horizontal), so dass ohne Ortsbezug nicht von vergleichbarer Reaktivität gegenüber zu bindenden Spurenstoffen auszugehen ist. Dies wurde bereits im Zusammenhang mit dem Rückhalt von Pestiziden in der gesättigten und ungesättigten Bodenzone diskutiert (u.a. WAUCHOPE ET AL. 1992). Wegen dieser problematischen Randbedingungen wird auf eine weitere Betrachtung dieser zusätzlichen Sorptionskenngrößen verzichtet.

In der Arbeit von MULISCH et al. (2003) wird zur Bewertung von Umweltkontaminanten in Boden, Gewässer und Trinkwasser ein modulares System vorgestellt, bei dem sich die Mobilität eines Stoffes aus der Wasserlöslichkeit und der Sorbierbarkeit an Aktivkohle oder Adsorberharze zusammensetzt.

4.2.2 Persistenz

Unter Persistenz wird im Allgemeinen verstanden, dass ein Stoff in der Umwelt mikrobiellen Abbauprozessen nicht zugänglich ist. Die Abbaubarkeit wird zum einen durch strukturelle Eigenschaften und zum anderen durch das umgebende Milieu bestimmt. Bestimmte Strukturmerkmale wie z. B. der Grad der Chlorierung eines Aromaten können einen mikrobiellen Abbau deutlich verschlechtern. Ebenso ist die mikrobielle Besiedlung eines Standortes sowohl in der Zahl als auch in der Struktur entscheidend für das Ausmaß der dort ablaufenden Abbau- und Umsetzungsprozesse. Die mikrobielle Abbaubarkeit eines

Stoffes stellt sich insofern nicht als eine feste Größe dar, sondern muss immer unter Einbeziehung der vorhandenen Randbedingungen betrachtet werden. Einen wesentlichen Einfluss auf den Abbau organischer Stoffe nehmen unter anderem die Konzentration des Stoffes, seine zeitliche Präsenz, die vorhandene mikrobielle Besiedlung und Umgebungsbedingungen wie die Temperatur und das Redoxmilieu. Stoffe, die bei einem kontinuierlichen Eintrag unter den Bedingungen einer Kläranlage (hohe Bakteriendichte, Wärme, Adaptationszeit) gut abbaubar sind, können sich, wenn sie in niedrigen Konzentrationen in den Grundwasserleiter gelangen, unter den dort herrschenden Bedingungen als persistent erweisen. Ebenso können wechselnde Redoxbedingungen, wie sie häufig in Uferfiltrationsstrecken auftreten, zu einem völlig veränderten Abbauverhalten führen.

Die Abbaubarkeit von Stoffen wird im Allgemeinen durch standardisierte Laborversuche bestimmt, wie sie in den OECD Guidelines beschrieben werden (OECD 2009). Je nach Fragestellung kommen hier unterschiedliche Testsysteme zum Einsatz, mit denen der biologische Abbau zum Beispiel in der Kläranlage oder aerob in Gewässern simuliert wird. Bei Einbeziehung solcher Daten sollte die Aussagekraft der verschiedenen Testmethoden mit berücksichtigt werden.

Die Abbaubarkeit eines Stoffes wird in der Regel als Halbwertszeit (DT_{50}) in dem jeweiligen Medium angegeben.

Der Begriff Persistenz wird aber auch anders gebraucht: der CADMUS RISK INDEX APPROACH definiert Persistenz als Funktion aus der Halbwertszeit in Wasser und dem $\log K_{ow}$, woraus sich ein Persistenzfaktor zwischen 0,001 und 1 ergibt (COMMITTEE ON DRINKING WATER CONTAMINANTS ET AL. 1999).

4.3 Auftreten eines Stoffes

Während die oben genannten chemisch-physikalischen Stoffkriterien nur einen Hinweis auf potentielle Kontaminanten geben, so ist das Auftreten eines Stoffes in Gewässern ein Beleg für sein Kontaminationspotenzial. Obwohl aus dem Auftreten in Oberflächen- oder Grundwasser nicht direkt auf eine Beeinträchtigung von Trinkwasser geschlossen werden kann, so wird dieses doch auch bei der Erstellung von Listen für prioritäre Stoffe im Trinkwasser berücksichtigt. Häufig gehen hier sowohl die gemessenen Konzentrationen als auch die Befundhäufigkeit mit ein, wobei diese unterschiedlich miteinander verknüpft sein können. In einem Vorschlag der AWWA (American Water Works Association) werden zur Bewertung Diagramme empfohlen, bei denen die Häufigkeit der Befunde gegen deren Höhe aufgetragen wird.

4.4 Weitere Priorisierungsmethoden

Außer den Modellen, die zur Erstellung von „offizieller“ Monitoringprogramme von staatlicher oder institutioneller Seite eingesetzt werden, existieren auch Priorisierungsmodelle, die im Rahmen von Forschungsprojekten entwickelt wurden und zum Teil auf einzelne Stoffgruppen wie Pestizide oder Arzneimittel fokussieren.

Von MULISCH ET AL. (2003) wird zur Bewertung des Gefährdungspotentials von Umweltkontaminanten in Boden und Trinkwasser ein modulares System vorgeschlagen, bei dem

die Humantoxizität, die Abbaubarkeit in Boden und Gewässern, die Mobilität (zusammengesetzt aus Adsorbierbarkeit und Wasserlöslichkeit) und die aquatische Toxizität in Form standardisierter Koeffizienten eingehen und miteinander verknüpft werden.

Bedingt durch den Grenzwert für PBSM in die Trinkwasserverordnung stellte sich für die Wasserversorgung schon in den 1980iger Jahren die Frage, nach welchen Kriterien aus der Vielzahl der Wirkstoffe diejenigen herausgefiltert werden können, die im eigenen Einzugsgebiete relevant sind und als Kontaminanten im Rohwasser auftreten können. Zur Erstellung von PBSM-Monitoringprogrammen wurden neben der Empfehlung des damaligen Bundesgesundheitsamtes, die insgesamt 97 Wirkstoffe und etwa 50 Metabolite als trinkwasserrelevant benannte, auch Datensammlungen zu Befunden und chemisch-physikalischen Eigenschaften herangezogen. Bereits bei der Zulassung von PBSM werden Daten zum Umweltverhalten gefordert und von der Zulassungsstelle bewertet. Hierbei wird unter anderem die Abbaubarkeit im Boden, im System Wasser/Sediment und im Oberflächenwasser beurteilt. Die Grundwassergängigkeit wird in der Regel über eine Modellrechnung (PELMO) ermittelt, ebenso wird der mögliche Run-off berechnet (bzw. die Breite des Randstreifens, die erforderlich ist, um den Run-off auf $< 0,1 \mu\text{g/l}$ zu reduzieren). Als weitere Kriterien werden vor allem Daten zur Ökotoxizität einbezogen (BLV 2009).

Ein weiteres im Zulassungsverfahren eingesetztes Modell zur Beurteilung des Stoffverhaltens (EXPOSIT) verwendet Daten zur Wasserlöslichkeit, zum Abbau im Boden und den K_{oc} -Wert zur Einteilung von PSM-Wirkstoffen in Gefährdungsgruppen (WINKLER 2001 zit. nach STURM ET AL. 2006).

Einige Wasserversorger sind dazu übergegangen, sich vor allem auf die im Einzugsgebiet eingesetzten Pestizide zu konzentrieren, die meist in Zusammenarbeit mit der Landwirtschaft gelistet werden (z.B. Kooperation Landwirtschaft und Wasserwirtschaft im Einzugsgebiet der Stevertalsperre 2009).

Im Rahmen eines Forschungsvorhabens wurden von STURM ET AL. (2006) PBSM-Befunde vor allem von Wasserversorgern zusammengestellt und im Hinblick auf die Befundhäufigkeit ausgewertet. Bei den am häufigsten auftretenden Wirkstoffen wurden unter Einbeziehung von Anwendungsdaten und Stoffkriterien versucht, mögliche Kausalketten aufzuzeigen. Die Autoren bewerten die Stoffeigenschaften dieser Wirkstoff mit den Kategorien „aus Sicht des Gewässerschutzes günstige, ungünstige oder indifferente Stoffeigenschaft“, wobei die Bewertungskriterien hierfür nicht zahlenmäßig benannt werden.

Ein anderer Ansatz zur Definition der Trinkwasserrelevanz von Stoffen wurde von LINDNER ET AL. (1996, 2000 und 2003) entwickelt. In dieser Vorstellung werden die Größen mikrobieller Abbau und Sorptionstendenz in geeigneter Weise parametrisiert, um stoffbezogen eine Einstufung als wasserwerks- oder trinkwasserrelevant vorzunehmen. Zeigt ein Stoff nur eine geringe aerobe Abbauneigung ($DT_{50} < 25 \text{ d}$), gilt er bereits als wasserwerksrelevant. Wird der Stoff darüber hinaus auch noch schlecht an Aktivkohle sorbiert, wird er als trinkwasserrelevant identifiziert. Diese Sorptionsneigung wurde in den vorgenannten Studien zum einen in einem Standardverfahren ermittelt und zum anderen in der Größe des Feststoff-zu-Flüssigkeits-Verhältnis (m/L – Masse Aktivkohle/Volumen Wasser auch spezifischer Durchsatz) parametrisiert. Werte für m/L über 200 mg/L werden

als sehr schlechte Adsorbierbarkeit qualifiziert. Es bedarf für diese Stoffe einer Zugabe von mehr als 200 mg Aktivkohle je Liter, um eine Konzentrationsminderung um 90 % zu erreichen. In Kombination mit einer schlechten Abbaubarkeit hat eine schlechte oder sehr schlechte Adsorbierbarkeit eine Einstufung eines Stoffes als trinkwasserrelevant zur Folge.

Die Studien von LINDNER ET AL. (1996, 2000 und 2003) gehen im Detail mehreren Fragestellungen nach, deren Beantwortung und Umsetzung einen unmittelbaren Einfluss auf die jeweiligen Einstufungen von Stoffen hinsichtlich der Trinkwasserrelevanz haben können. Im Bereich der Untersuchungen der mikrobiellen Abbaubarkeit sind dies u. a. der systematische Ausschluss von konkurrierenden Sorptionseffekten während des Abbaueversuchs, die als vermeintliche Abbauneigung missinterpretiert werden können, sowie die Möglichkeiten eines mikrobiellen Abbaus bei realitätsnahen, nanomolaren Konzentrationen zu ermitteln. Hierbei wurden in Abhängigkeit von den untersuchten Stoffen zumeist Konzentrationen zwischen 0,1 µg/L und 2 mg/L als Schwellenwerte identifiziert, unterhalb derer in der Regel ein Abbau nicht mehr anzuregen war. Zum anderen bedarf der mikrobielle Abbau einer hinreichend großen Zahl, möglichst adaptierter Mikroorganismen, wobei sich Inokula aus Kläranlagen als besonders geeignet erwiesen. Diese können teilweise auf verschiedene Verbindungen schnell reagieren und sind unabhängig vom Entnahmeort der Wasserproben allgemein verfügbar („Generalisten“). Zum Teil bedurfte der Abbau jedoch stoffbezogener Spezialisten, die in Abhängigkeit von der Wasserentnahmestelle auftraten und langsamer als die „Generalisten“ wirkten.

Von SCHULTE-OEHLMANN ET AL. (2007) werden verschiedene Modelle zur Bewertung von Arzneimitteln zusammengestellt. Es handelt sich hierbei sowohl um nationale (Österreich, Italien) als auch regionale (Brandenburg) Ansätze zur Ermittlung der Umweltrelevanz von Pharmaka. Alle Modelle beziehen die Verbrauchsmengen und verschiedene Stoffeigenschaften wie $\log K_{OW}$, Abbaubarkeit und Biokonzentrationsfaktoren in die Bewertung mit ein. Zum Teil werden auch gemessene Befunde oder PEC berücksichtigt.

4.5 Bewertung von Stoffkriterien

Um numerisch erfasste Stoffdaten in ein Bewertungsmodell einzubringen, ist es üblich, diese in Klassen einzuteilen. In der US-amerikanischen Literatur wird hierbei häufig ein Punktesystem von 1 bis 10 verwendet, was die mathematische Verknüpfung verschiedener Attribute vereinfacht.

Andere Autoren bevorzugen eine Einteilung nach groberen Kriterien, wie sie in der Tabelle 5 zusammengestellt sind. Deutlich wird aus der Tabelle auch die unterschiedliche Bewertung. Zum Beispiel werden als hohe Wasserlöslichkeit je nach Denkansatz Zahlenwerte zwischen 1 mg/L und 1000 mg/L angegeben.

Bei der Bewertung der Umweltverhaltens von PBSM-Wirkstoffen wurde im Zulassungsverfahren der damaligen Biologischen Bundesanstalt (BBA) davon ausgegangen, dass bei einer Wasserlöslichkeit von über 30 mg/L ein Eintrag ins Grundwasser möglich ist und ein K_{oc} -Wert von weniger als 500 Anlass zur Besorgnis gibt. Ebenso gelten Stoffe hinsichtlich ihrer Verlagerungstendenz als kritisch, wenn ihre Halbwertszeit im Boden bei über 21 Tagen liegt.

Tabelle 5: Bewertung von Stoffkriterien nach verschiedenen Ansätzen

- [1] CHAMP – US EPA (2009d)
 [2] CCL3 - US EPA (2009c)
 [3] CDWC - COMMITTEE ON DRINKING WATER CONTAMINANTS ET AL. (1999)
 [4] UBA – LITZ UND DIETER (2009a, b)

Bewertung	Wasserlöslichkeit [mg/L]				Mobilität log K _{ow}		Persistenz DT ₅₀	
	CHAMP [1]	CCL3 [2]	CDWC [3]	UBA [4]	CCL3 [2]	UBA [4]	CDWC [3]	CCL3 [2]
Negligible	< 10 ⁻³							
Low	10 ⁻³ - 1	<1	0,1		> 4		< 1 Tag	Tage - Wochen
Moderate	1 - 1000	1 - 1000	0,1 - 1		1 - 4		Tage - Wochen	Wochen - Monate
High	> 1000	> 1000	> 1	> 100	< 1	< 3	> Wochen	Monate

In den oben beschriebenen Untersuchungen von LINDNER ET AL. (2000) wird ein Stoff dann als trinkwasserrelevant bezeichnet, wenn seine Sorbierbarkeit an Aktivkohle über 50 mg/L als Quotient m/L (Masse Aktivkohle/Volumen Wasser) liegt.

4.6 Datenqualität und Modellierung von Daten

Werden chemisch-physikalische Stoffkriterien sowie Daten zum biologischen Abbau als wesentliche Kriterien in eine Stoffklassifizierung einbezogen, so kommt dem Vorhandensein entsprechender Daten und deren Qualität eine entscheidende Bedeutung zu. Als abgesichert können vor allem solche Angaben gelten, die nach standardisierten Verfahren und/oder unter GLP-Bedingungen ermittelt wurden. Maßgebend sind hier vor allem die Guidelines der OECD (OECD), die standardisierte Verfahren zur Bestimmung von chemisch-physikalischen Stoffdaten und zum Abbau in verschiedenen Kompartimenten beschreiben.

In der Regel wird bei der Erhebung solcher Daten auf Datenbanken zurückgegriffen. Da es dem Nutzer in den meisten Fällen nicht möglich ist, die Qualität der dort gelisteten Daten zu evaluieren, ist es sinnvoll, Datenbanken zu verwenden, die auf den Websites entsprechender Behörden als Hilfsmittel genannt werden (zum Beispiel die auf der UBA-REACH-Seite unter Arbeitshilfen verlinkten Datenbanken).

Fehlen die wesentlichen Daten zu Stoffeigenschaften, wie dies häufig bei Metaboliten der Fall ist, so muss auf modellierte Daten zurückgegriffen werden. Eine Beschreibung solcher Modelle findet sich bei DEARDEN UND WORTH (2007), die hier vor allem betrachten, wie Modelle sinnvoll bei der Registrierung von Chemikalien unter REACH eingesetzt werden können. Im Vordergrund stehen dabei QSAR-Modelle. Von den Autoren werden als wesentliche Vorteile solcher Modelle gegenüber herkömmlichen Laboruntersuchungen genannt, dass sie schneller und kostengünstiger akkurate Ergebnisse liefern.

Die Anforderungen, die an Daten gestellt werden, die in die REACH-Registrierung eingehen, Möglichkeiten ihrer Beschaffung und ihre Evaluierung sind in den ECHA Guidance Documents 2 bis 7 dargestellt. Neben der Beschreibung von Testmethoden im Labor sind hier auch Handbücher, Datenbanken und QSPR-Modelle aufgeführt, die zur Ermittlung von evaluierten Daten für Stoffeigenschaften geeignet sind.

4.7 Schlussfolgerungen aus diesem Arbeitsschritt

Vergleicht man die verschiedenen Priorisierungsmodelle miteinander, so wird deutlich, dass in der Mehrzahl folgende Schlüsselkriterien in die Bewertung eingehen:

- die Wasserlöslichkeit
- der Oktanol-Wasserverteilungskoeffizient
- der biologische Abbau.

Als weitere wesentliche Information zur Stoffbewertung werden Befunde in Gewässern allgemein, besonders aber solche im Trinkwasser, genannt.

In der Anlage 1 sind die Befunde zusammengestellt, die aus der Literatur herausgearbeitet wurden (vgl. Abschnitt 3). In Anlage 2 sind für die Stoffe aus Anlage 1 Daten zu den oben genannten Stoffkriterien abgelegt.

Die weitere Auswertung zielt darauf, die Bewertungskriterien so miteinander zu verknüpfen, dass sie als eine Art von Werkzeug für eine vorausschauende Einordnung einer möglichen Trinkwasserrelevanz nutzbar werden.

5 Erarbeitung und Anwendung von Screening-Kriterien für trinkwasserrelevante Stoffe

5.1 Erarbeitung von Screening-Kriterien

Mit den in Abschnitt 4.7 beschriebenen Schlüsselkriterien werden die wesentlichen Eigenschaften beschrieben, die Mobilität und Persistenz und somit die potentielle Trinkwassergängigkeit von Chemikalien entscheidend beeinflussen. In der Datenrecherche hierzu wurden im Wesentlichen öffentlich zugängliche Datenbanken (z. B. <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus>, <http://chimie.ineris.fr>) genutzt, aber stoffbezogen auch andere Datenkompilationen ausgewertet (z.B. RIPPEN 2009, NAGY ET AL. 2002). Allerdings erwies es sich insbesondere bei dem Parameter biologische Abbaubarkeit als schwierig, valide Daten zu finden. Verbleibende Datenlücken - vor allem für die Metabolite von Pestiziden und Arzneimitteln - wurden über gezielte Modellierungen geschlossen.

5.1.1 Modellierung intrinsischer Stoffeigenschaften

Für die Modellierung von Stoffeigenschaften, die über andere Datenkompilationen nicht zu erschließen waren, wurde vor allem auf den Programmkomplex Estimation Program Interface (EPISUITE™) der US EPA und der Syracuse Research Corporation (SRC) mit den Modulen KOWIN, WATERNT und BIOWIN zurückgegriffen (US EPA 2009f). Daneben wurden Modelldaten zum Bioabbau auch mit Ergebnissen verglichen, die durch das Programm CATALOGIC zu erhalten waren (JAWORSKA ET AL. 2002; DIMITROV ET AL. 2005, 2007).

Im wesentlichen handelt es sich hierbei um hybride Modelle, bei denen eine zentrale Anzahl von Stoffen expertenbasiert bewertet und unterschiedlichen Modellalgorithmen unterworfen wurden, die auf einer Bewertung von Molekülfragmenten aufbauend, lineare und nichtlineare Abschätzungen ableiten. Hierbei werden im Programm CATALOGIC auch wahrscheinlichkeitbasierte Algorithmen für die Bewertung des Bioabbaus eingebaut.

Insbesondere CATALOGIC bietet auf der Basis eines modellierten biologischen Sauerstoffbedarfs Ergebnisse für den möglichen beobachtbaren Zeitrahmen eines Abbaus. Dieser Modellierungsschritt führt regelmäßig zu hohen Halbwertszeiten. Entsprechend werden auch unter BIOWIN die Ergebnisse berücksichtigt, die über einen primären Abbau eine weitergehende Dekonstruktion der Verbindungen angeben. Diese Werte spiegeln für die betrachteten Umweltkompartimente (Oberflächenwasser, Infiltration in den Untergrund bei der Uferfiltration und eine nachfolgende Untergrundpassage) eher den Zeitrahmen wieder, der für einen Abbau der Verbindungen erforderlich wird.

Für stark halogenierte Verbindungen muss teilweise von den modellierten Ergebnissen für den Bioabbau abgewichen werden, da solche Verbindungen in der Ableitung der Modelle nicht hinreichend berücksichtigt wurden (US EPA 2009f). Dies gilt insbesondere für perfluorierte Verbindungen und iodierte Röntgenkontrastmittel (STEGE-HARTMANN ET AL. 1998; SCHULZ ET AL. 2008; PARSONS ET AL. 2008).

Bei Derivaten und Transformationsprodukten von Pestiziden und Arzneimitteln besteht zusätzlich ein alternatives Vorgehen darin, von den Daten der Muttersubstanzen auf die Tochterprodukte zu schließen. Hierbei wird immer angenommen, dass die Transformationsprodukte polarere und somit wasserrelevantere Substanzen im Vergleich zum Ausgangsstoff darstellen (vgl. LERCH ET AL. 1996; DAUGHTON UND TERNES 1999, MONTEIRO UND BOXALL 2010, SCHULZ 2010). Gleichzeitig belegt die Detektion von Metaboliten im Trinkwasser deren offensichtliche Persistenz. Entsprechend kann das Transformationsprodukt hinsichtlich einer möglichen Trinkwassergängigkeit als mindestens so geeignet wie die Muttersubstanz aufgrund deren Stoffeigenschaften bewertet werden. Mittels dieses Verfahrens einer stetigen Ergänzung der recherchierbaren Daten können Stoffdaten für die Transformationsprodukte ermittelt werden, die in der Regel in der gleichen Größenordnung liegen, wie sie eine QSAR-Stoffdatenmodellierung ergibt. Aus dem Datensatz in Anlage 2 wurde dies für insgesamt 16 Verbindungen parallel vorgenommen. Lediglich bei 3 Substanzen ergeben die QSAR-Modellierungen geringere Werte, was sowohl auf niedrigere Modellwerte für die Wasserlöslichkeit als auch für den $\log K_{OW}$ zurückzuführen ist. Für alle anderen Substanzen ergeben sich durch die QSAR Modellierung Stoffkenndaten, die in einer gleichen oder höheren Bewertung der Trinkwasserrelevanz resultieren. In jedem Fall ergibt eine stetige Ergänzung der Stoffkenndaten für Derivate und Abbauprodukte eine zusätzliche Möglichkeit fehlende Stoffkenndaten zu ergänzen.

5.1.2 Darstellung der Stoffeigenschaften

Unter den Stoffen, die im Trinkwasser detektiert wurden, waren besonders viele mit einer **Wasserlöslichkeit** von über 1000 mg/L und nur 12 Stoffe - von insgesamt 151 - wiesen eine Wasserlöslichkeit unter 1 mg/L auf (Abbildung 3). QSAR-Modellergebnisse wurden dabei für 29 Stoffe berücksichtigt (vgl. Abschnitt 5.1.1).

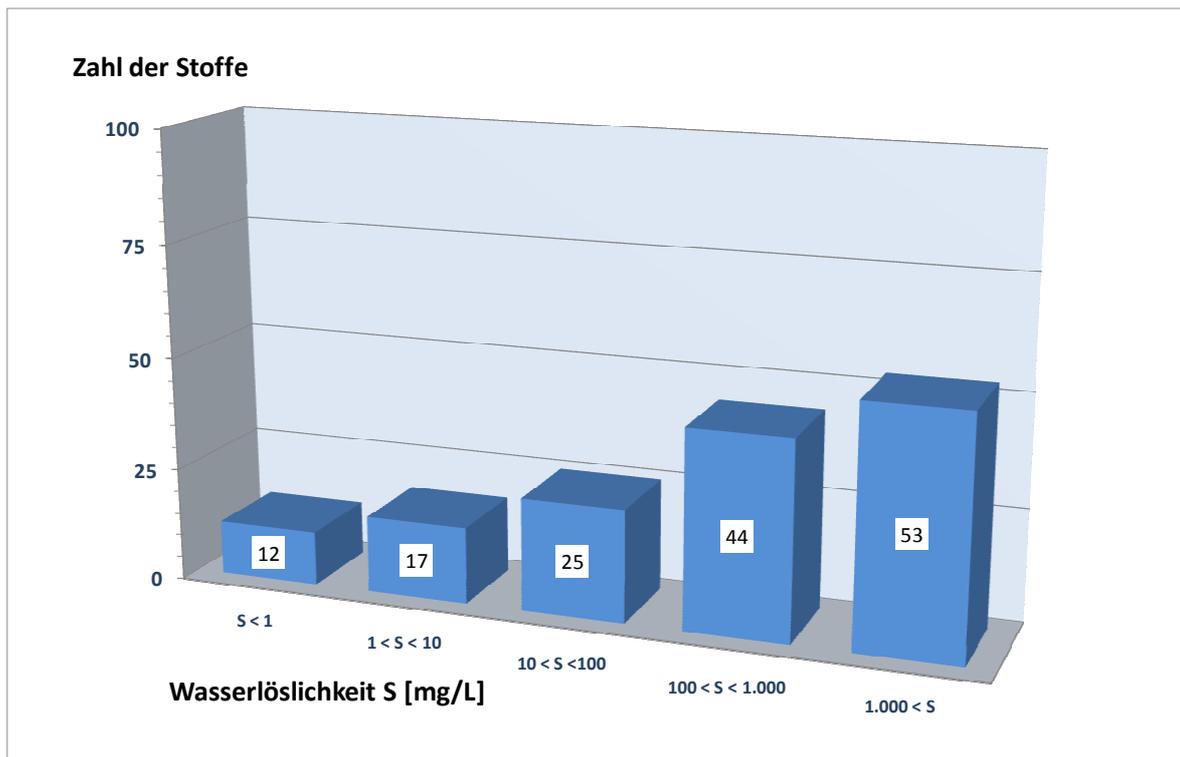


Abbildung 3: Klassierte Häufigkeit für Angaben zur Wasserlöslichkeit für im Trinkwasser nachgewiesene organische Spurenstoffe (n = 151)

Betrachtet man den Logarithmus des **Oktanol-Wasserverteilungskoeffizient** ($\log K_{OW}$) dieser Stoffe, so liegt dieser in der großen Mehrzahl bei Werten von unter 4 (Abbildung 4). Neben recherchierten Daten werden hierbei QSAR-Modellerggebnisse für 26 Substanzen eingefügt. Dabei werden hier die hohen Modellerggebnisse ($\log K_{OW} > 6$) für die Verbindungen Perfluorooctansäure (PFOA) sowie Perfluorooctansulfonsäure (PFOS) berücksichtigt, die möglicherweise die Lipophilie der Substanzen überschätzen, da eine so starke Halogenierung bei der Ableitung der Modelle nicht berücksichtigt wurde (vgl. Abschnitt 5.1.1). Die K_{OW} -Werte dieser Substanzen lassen sich wegen ihrer oberflächenaktiven Eigenschaften nur schlecht experimentell bestimmen. PFOA und PFOS zeigen in Versuchen mit belasteten Böden eine deutliche Eluierbarkeit, was auch ihr Auftreten in Trinkwässern belegt, die durch naturnahe Aufbereitungsverfahren gewonnen werden (LANGE ET AL. 2006, DELSCHEN ET AL. 2007, SKARK UND ZULLEI-SEIBERT 2007).

Die Angaben für den **biologischen Abbau**, hier erfasst als DT_{50} , zeigen ein Problem bei diesem Stoffkriterium: Für viele der Stoffe lassen sich hierzu keine Daten recherchieren. Verbale Einschätzungen zur Abbaubarkeit gehen in folgender Form ein:

nicht abbaubar	> 100 d
non biodegradable (MITI)	> 100 d
wenig abbaubar	$10 < DT_{50} < 100$ d
Schnell	< 10 d

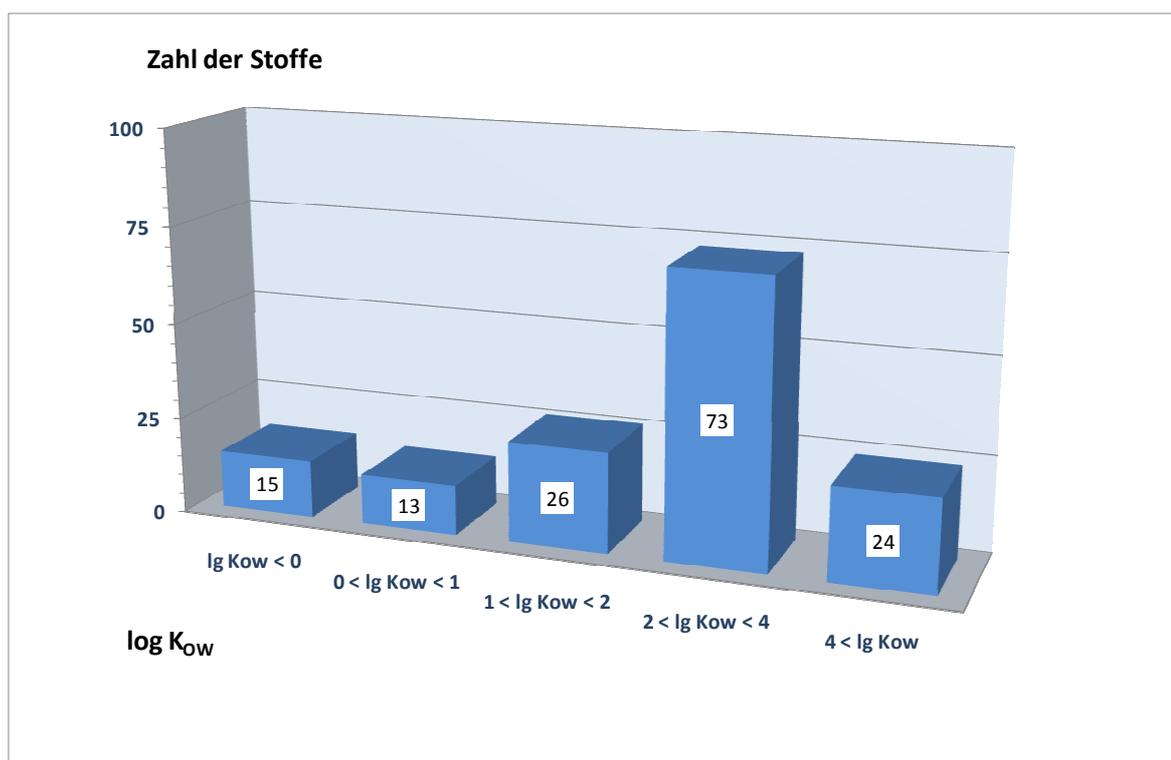


Abbildung 4: Klassierte Häufigkeit der Angaben zum Logarithmus des Oktanol-Wasser-Verteilungs-Koeffizienten ($\log K_{ow}$) für im Trinkwasser nachgewiesene organische Spurenstoffe ($n = 151$)

Für insgesamt 48 weitere Stoffe erfolgt eine Modellierung aus den Strukturmerkmalen.

Aus Abbildung 5 wird deutlich, dass vor allem Stoffe mit Halbwertszeiten von über 10 Tagen im Trinkwasser auftreten.

Dabei gilt es zu berücksichtigen, dass der biologische Abbau eines Stoffes keine feste Größe ist, sondern vielmehr von einer Vielzahl von Faktoren bestimmt wird. Auf den Einfluss wechselnder Redoxbedingungen im Verlauf von Uferfiltratstrecken wurde bereits in Abschnitt 3 hingewiesen. Neben weiteren Standortbedingungen wie pH-Wert und Temperatur spielen auch Art und Umfang der mikrobiellen Besiedlung sowie deren Adaptation an den Abbau anthropogener Stoffe eine Rolle. Bei standardisierten Abbautests wird dem insofern Rechnung getragen, als dass versucht wird, unterschiedliche natürliche Gegebenheiten zu simulieren. Dennoch lassen Abbautests unter Laborbedingungen immer nur relativ grobe Aussagen über die in der Natur tatsächlich ablaufenden Prozesse zu. Ein besonderes Problem tritt bei der Beurteilung der Abbaubarkeit von Stoffen auf, die, wie die hier berücksichtigten Trinkwasserkontaminanten, nur in sehr niedrigen Konzentrationen auftreten. Die in Abbautests im Milligramm- oder Gramm-Bereich ermittelten Daten sagen nichts über die Abbaubarkeit im Spurenbereich aus, wo in vielen Fällen die Substanzen in Höhe einer Schwellenkonzentration vorliegen, bei der kein mikrobieller Abbau mehr stattfindet, und in dieser Konzentration persistent sind (vgl. Abschnitte 4.2.2 und 4.4, ALEXANDER 1985, LINDER ET AL. 2003). Die in Anlage 2 zusammengestellten Daten zur DT_{50} beziehen sich auf unterschiedliche Matrices. Oft ist die Matrix oder Test zur Ablei-

zung der DT_{50} nicht bekannt. Dennoch geben diese Daten einen wertvollen Hinweis auf die mögliche Persistenz der betrachteten Substanzen.

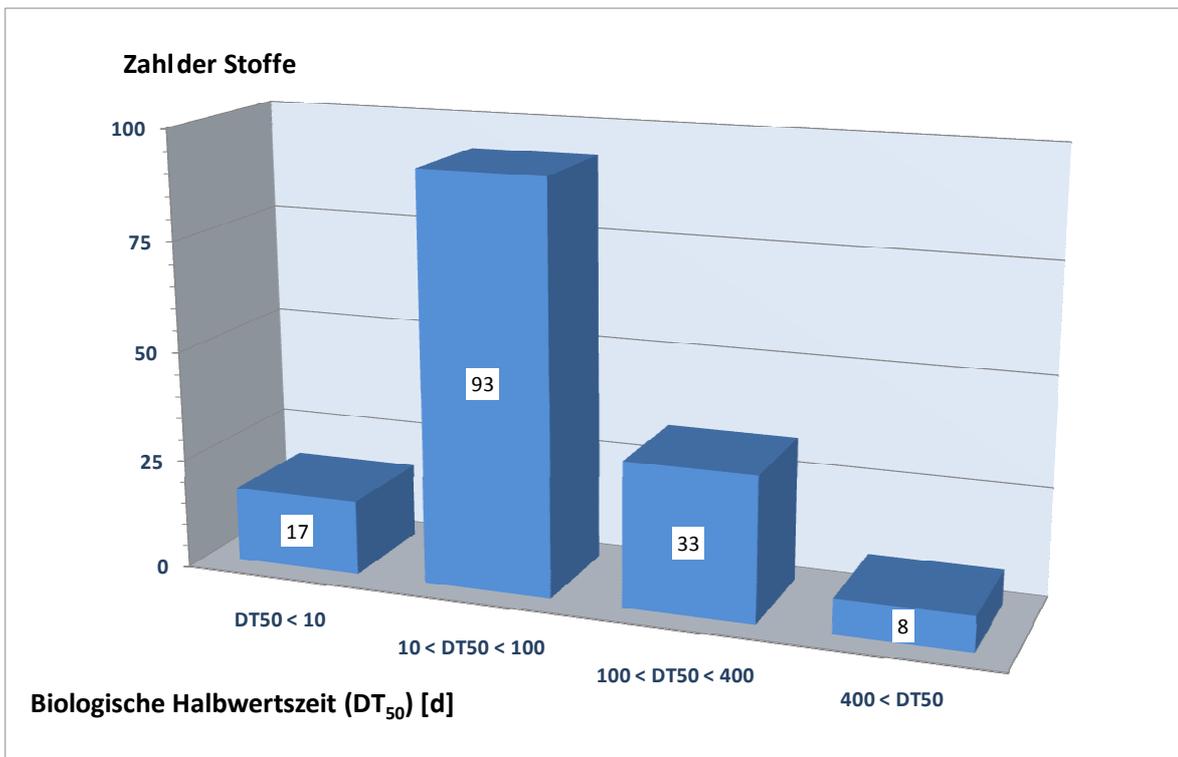


Abbildung 5: Klassierte Häufigkeit der Angaben zur Halbwertszeit für die biologische Abbaubarkeit (DT_{50}) für im Trinkwasser nachgewiesene organische Spurenstoffe ($n = 151$)

Eine bivariate Darstellung der Eigenschaften Wasserlöslichkeit gegen $\log K_{OW}$ gibt Abbildung 6. Die beiden Eigenschaften sind nur in geringem Maße miteinander korreliert. Auch eine Betrachtung von Teilmengen – sowohl hinsichtlich unterschiedlicher Größenausprägung der verschiedenen Merkmale als auch hinsichtlich der gemeinsamen Betrachtung recherchierter und modellierter Daten - ergibt keine besseren Korrelationen dieser beiden Parameter. Dabei erfüllen insgesamt 115 Substanzen sowohl das Kriterium Löslichkeit ≥ 10 mg/L als auch das Kriterium $\log K_{OW} \leq 4$ (vgl. Abbildung 7).

Um die genannten chemisch-physikalischen Eigenschaften als Stoffkriterien zur Bewertung der Trinkwassergängigkeit zu nutzen, sind verschiedene Vorgehensweisen möglich. In einfacher Näherung lässt sich aus den vorliegenden Daten erkennen, dass Stoffe

- mit einer Wasserlöslichkeit von über 10 mg/L
- einem $\log K_{OW}$ von < 4 und
- einer biologischen Halbwertszeit von über 10 Tagen

potentielle Kontaminanten darstellen.

Mit diesen Kriterien weisen von den in der Anlage 2 aufgeführten Substanzen ($n = 151$) 122 Stoffe eine Wasserlöslichkeit von über 10 mg/L auf, 127 Substanzen einen $\log K_{OW} < 4$ und 134 Verbindungen eine Halbwertszeit von über 10 Tagen auf (Abbildung 7). Legt

man neben den Kriterien Wasserlöslichkeit ≥ 10 mg/L und $\log K_{OW} \leq 4$ zusätzlich das Kriterium „Biologische Halbwertszeit > 10 Tage“ an, so ergibt sich eine Schnittmenge von 99 Stoffen, deren intrinsische Eigenschaften deutlich auf eine Trinkwassergängigkeit hinweisen.

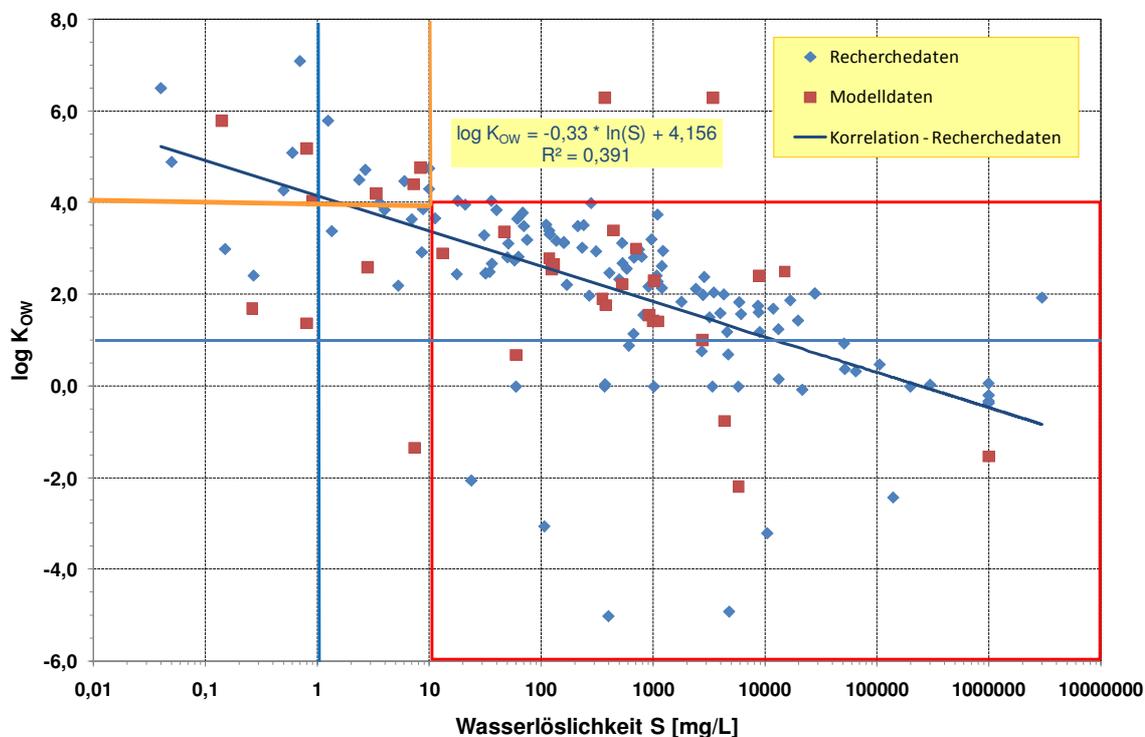


Abbildung 6: Sorptionsfähigkeit ($\log K_{OW}$) als Funktion der Wasserlöslichkeit von Stoffen mit Nachweis im Trinkwasser
 Roter Rahmen: Stoffe mit $\log K_{OW} \leq 4$ und einer Wasserlöslichkeit ≥ 10 mg/L können vermehrt im Trinkwasser erwartet werden

Für diese Eingruppierung werden qualitative Angaben zur Biotransformation und der Wasserlöslichkeit ebenso eingebunden wie modellierte Stoffeigenschaften aus QSAR-Beziehungen (vgl. Abschnitt 5.1.1). So werden insgesamt 103 Daten (29 Daten für die Wasserlöslichkeit, 26 für $\log K_{OW}$, 48 für DT_{50}) gewonnen, mit denen vor allem Pestizid-Abbauprodukte, untergeordnet aber auch Arzneimittel-Metabolite und Röntgenkontrastmittel charakterisiert werden.

Bei dieser Betrachtung der Stoffeigenschaften erweist sich der überwiegende Teil aller im Trinkwasser nachgewiesenen Substanzen als zu erwartende Kontaminanten, da die Kriterien eingehalten werden. Ca. zwei Drittel aller Stoffe erfüllen alle 3 Diskriminierungskriterien (99 Stoffe). Bei weiteren 35 Stoffe (ca. 23 %) treffen 2 Kriterien zu. 16 Substanzen (ca. 11 %) halten zumindest ein Qualifikationsmerkmal für eine Trinkwassergängigkeit ein. Somit geben die Stoffeigenschaften bei 150 der 151 betrachteten Stoffe einen Hinweis auf ein mögliches Auftreten im Trinkwasser.

Nur wenige Stoffe verfehlen die Diskriminierungskriterien für eine mögliche Trinkwassergängigkeit: Insgesamt weisen 29 Stoffe eine Wasserlöslichkeit unter 10 mg/L, 24 Stoffe einen $\log K_{OW}$ über 4 und 17 Stoffe eine DT_{50} unter 10 d auf (vgl. Abbildungen. 6 und 7).

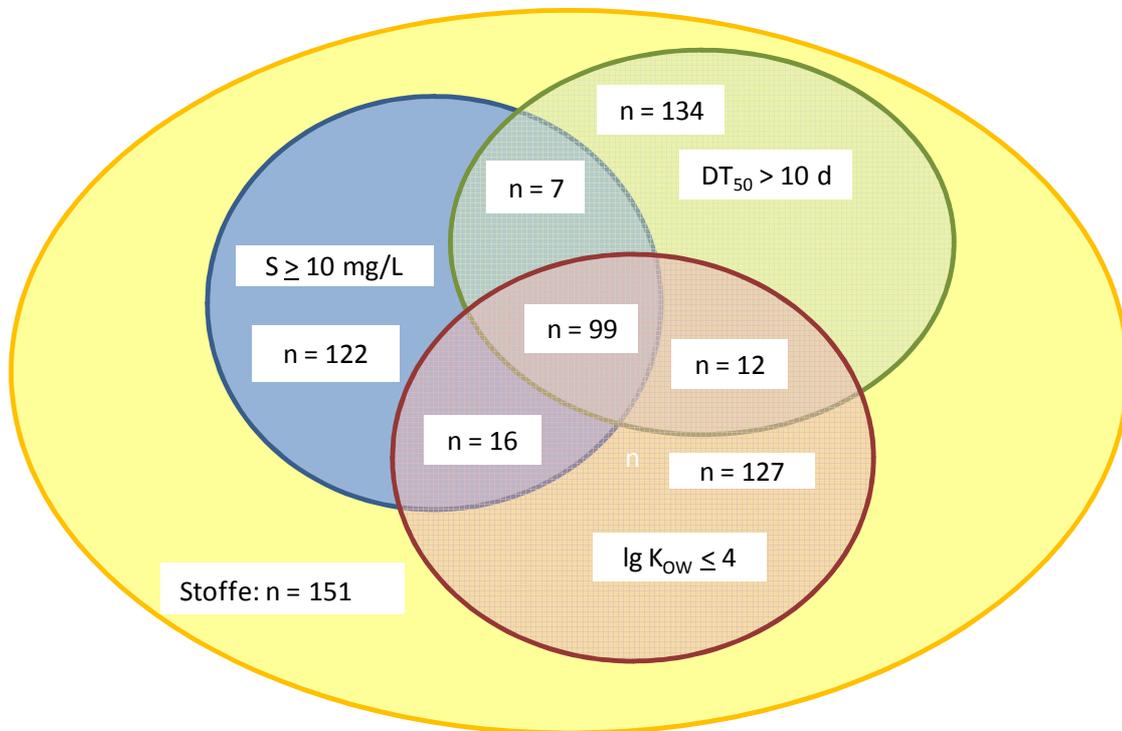


Abbildung 7: Im Trinkwasser nachgewiesene organische Spurenstoffe und deren intrinsische Eigenschaften (Auswertung unter Berücksichtigung numerischer und qualitativer Angaben zu S und DT_{50})

Von den schlechter wasserlöslichen Verbindungen weisen wiederum 17 Substanzen zusätzlich einen $\log K_{OW} > 4$ auf. Für 16 dieser 17 Substanzen wird mit $DT_{50} > 10 \text{ d}$ zumindest ein Kriterium – der Persistenz-Parameter - für eine mögliche Trinkwasserrelevanz erfüllt.

Lediglich für einen Stoff, Butylbenzylphthalat (BBP), wird trotz einer Wasserlöslichkeit $< 10 \text{ mg/L}$, einem $\log K_{OW} > 4$ und einer $DT_{50} < 10$ Tage ein Nachweis im Trinkwasser berichtet. Allerdings werden für Phthalate wie BBP unter anaeroben Bedingungen sehr viel höhere Abbauezeiten beobachtet, so dass diese Stoffe unter gegebenen Umständen wenigstens das Persistenzkriterium erfüllen. Zumindest in einem Fall (LUKS-BETLEJ ET AL. 2001) kann vermutet werden, dass die berichtete Kontamination auf geringe Sauerstoffverfügbarkeit bei der Untergrundpassage nach der Uferfiltration zurückzuführen ist.

Die Kategorisierung potentieller Trinkwasserkontaminanten anhand von 3 Stoffkriterien hat sich somit als geeignet erwiesen.

5.2 Stoffeigenschaften als Screening-Instrument für Trinkwasserrelevanz

In einem weiteren Schritt werden die Angaben zur Wasserlöslichkeit, dem Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten sowie der Abbaubarkeit klassiert mit Indexzahlen I_x bewertet und eine Indexzahlen-Summe K gebildet. Somit gilt:

$$(1) K = \sum_3 I_x$$

Die Indizierung erfolgt in 4 oder 5 Stufen. Als Klassierungsgrenzen werden die in Tabelle 6 angegebenen numerischen Werte für die 3 betrachteten Stoffeigenschaften gewählt. Die maximale Summe K beträgt 13. Es können sowohl numerische (recherchierte und modellierte) als auch qualitative Angaben zu den Stoff-Eigenschaften berücksichtigt werden. Qualitative Angaben werden in entsprechende numerische Werte überführt.

Mit diesem Instrument können mehrere Stoffeigenschaften miteinander verknüpft und so eine integrale Maßzahl für eine mögliche Trinkwasserrelevanz geschaffen werden.

Die Maßzahlen lassen sich weiter gruppieren. Mit $K = 3$ werden Stoffe belegt, deren Auftreten im Trinkwasser zwar nicht als unmöglich, jedoch als unerwartet angesehen wird (geringe Trinkwasserrelevanz, TWR). In einer Gruppe $K = 4 \div 5$ kann eine Trinkwasserrelevanz als gegeben angenommen werden (mittlere TWR). In dieser Gruppe wird für ein bis zwei Kriterien die Schwelle für einen potentiell kontaminierenden Stoff überschritten. Für $K \geq 6$ kann ein Auftreten im Trinkwasser erwartet werden (hohe oder sehr hohe TWR). Für eine solche Größe von K sind entweder alle Kriterien erfüllt oder ein Kriterium überragt alle weiteren.

Tabelle 6: Indizierung von Stoffeigenschaften in Klassen
 x – betrachtete Eigenschaft, n. b. – nicht belegt

Indexzahl I_x	1	2	3	4	5
Eigenschaft	Klasse				
S [mg/L]	$x < 10$	$10 \leq x < 100$	$100 \leq x < 1.000$	$1.000 < x$	n. b.
$\log K_{OW}$	$x > 4$	$4 \geq x > 2$	$2 \geq x > 1$	$1 \geq x > 0$	$0 \geq x$
DT_{50} [d]	$x < 10$	$10 < x < 100$	$100 < x < 400$	$400 < x$	n. b.

5.2.1 Anwendung auf nachgewiesene Spurenstoffe im Trinkwasser

Angewandt auf die 151 bereits im Trinkwasser nachgewiesenen Substanzen aus Anlage 2 ergibt sich Abbildung 8, in der das gruppierte Ergebnis des Klassierungsprozesses mit Gleichung 1 dargestellt wird. Die überwiegende Anzahl der Stoffe fällt in den Bereich hoher bis sehr hoher Trinkwasserrelevanz ($n = 129$, ca. 85 % aller betrachteten Stoffe).

Lediglich ein Stoff wird mit $K = 3$ bewertet, wobei es sich um das oben angesprochene BBP handelt.

In die Gruppe mittlerer Trinkwasserrelevanz fallen 21 Stoffe. Die 10 Stoffe, die mit $K = 4$ belegt sind, erfüllen zumindest das Persistenzkriterium mit einer $DT_{50} > 10$ d. Hierbei sind 7 modellierte DT_{50} -Werte enthalten. Mit $K = 5$ werden 11 Substanzen bewertet, wovon 9 Verbindungen eine Löslichkeit unter 10 mg/L und 4 einen $\log K_{OW}$ über 4 aufweisen. Le-

diglich eine Verbindung ist schnell abbaubar. Diese Substanzen verteilen sich relativ breit über 9 Anwendungsgruppen.

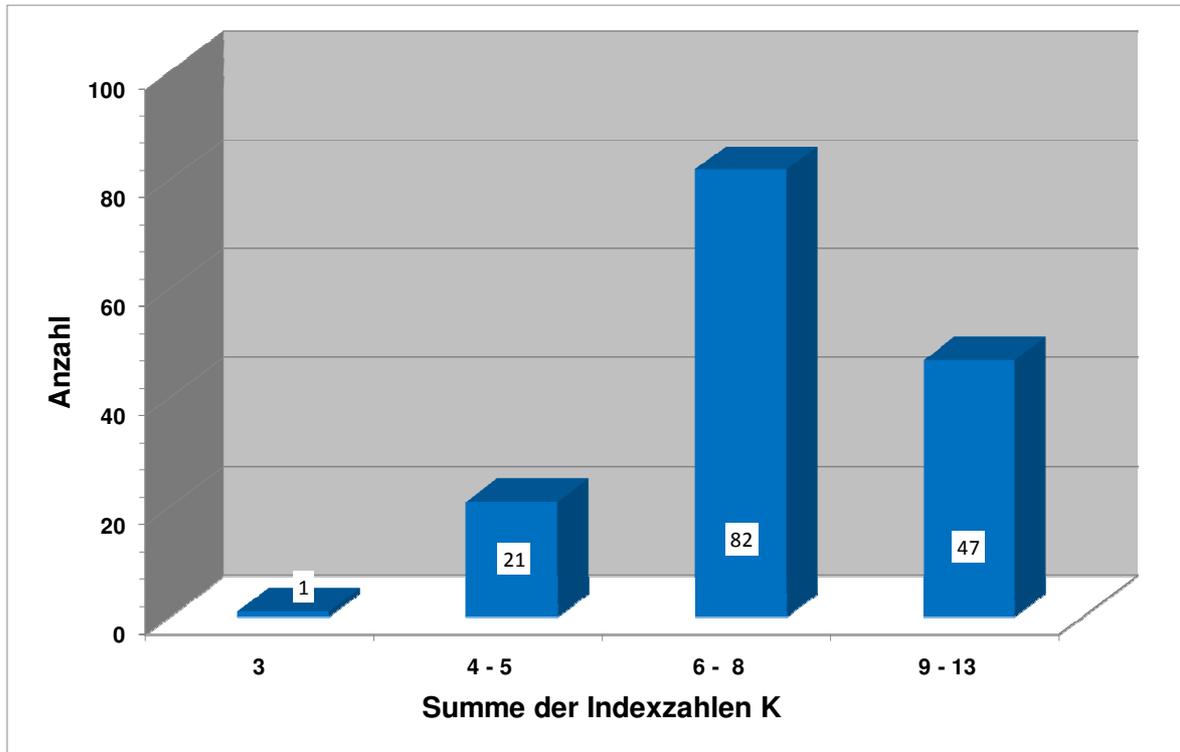


Abbildung 8: Anzahl von Stoffen nach gruppierten Indexzahlsummen K

Mit mehreren Stoffen sind die Gruppen der Arzneimittel (7 Substanzen: 2 Lipidsenker, das Analgetikum Diclofenac, ein Schmerzmitteltransformationsprodukt Ibuprofen-methylester, das Antidepressivum Fluoxetin und 2 Hormone) ebenso wie Kosmetika im weitesten Sinne (3 Substanzen: 2 Duftstoffe – AHTN und HHCB, 1 UV-Inhibitor - Octylmethoxyzimtsäure), Weichmacher (2 Substanzen: DBP und DEHP) und Detergentienmetabolite (2 Substanzen: NP, NP2EO) vertreten (Tabelle 7).

Sehr hohe Bewertungen werden bei 2 Stoffen mit $K = 12$ und für 12 Substanzen mit $K = 11$ erreicht. Auch hier sind verschiedene Anwendungsgruppen vertreten. Mit mehreren Substanzen treten Arzneimittel (4 Stoffe: 1 Röntgenkontrastmittel, N-(phenylsulfonyl)sarkosin, Schmerzmitteltransformationsprodukt AMDOPH), Lösemittel im weitesten Sinn (3 Stoffe, Diglyme, Dioxan und MTBE), Nitrosamine, Komplexbildner und Herbizidmetabolite auf (Tabelle 7).

Insbesondere Stoffe, die sich bei geringer Sauerstoffverfügbarkeit als schlechter abbaubar erweisen, können eine höhere Trinkwasserrelevanz besitzen, als die Bewertung des aeroben Abbauverhaltens nahe legt. Dies wird im Anhang in Abschnitt 9.2 näher betrachtet.

Tabelle 7: Stoffe mit mittlerer oder sehr hoher Trinkwasserrelevanz gemäß der Verknüpfung der Stoffeigenschaften in der Indexsumme K

Indexsumme K =			
4	5	11	12
BHT	AHTN	AMDOPH	Diglyme
DCPA	Anthrachinon	AMPA	Dioxan, 1,4-
Diclofenac	Dibutylphthalat	Dichlorbenzamid, 2,6-	
Estradiol	DEHP	DTPA	
Fenofibrat	Galaxolid	EDTA	
Fluoxetin	Nonylphenol	Iopamidol	
Gemfibrozil	Progesteron	Koffein	
Ibuprofen-methylester	Propylbenzol, iso-	MTBE	
NP2EO	Simazin	N-(phenylsulfonyl)-sarcosin	
Octylmethoxyzimtsäure	Trimethylbenzol, 1,3,5-	NDMA	
	TCEP	NPYR	
		Sulfamethoxazol	

5.2.2 Test des Screening-Instruments an weiteren Substanzen

In einem weiteren Schritt wird das Verknüpfungsinstrument Indexsumme für die Stoffeigenschaften an einem Satz von insgesamt 6 Stoffen getestet, für die ebenfalls die Möglichkeit eines Auftretens im Trinkwasser berichtet wird. Es handelt sich hierbei um ein Flammenschutzmittel (Hexachlorendomethylen-tetrachlorsäure, HET), Abbauprodukte bzw. Monomere von Betonzuschlagstoffen (3 Naphthalinsulfonate), das Lösemittel Sulfolan sowie eine Chemikalie, die während eines Syntheseprozesses als Nebenprodukt entsteht (Tetraoxaspiro[5.5]undecan, TOSU). Auch wenn nicht für alle diese Substanzen experimentelle Stoffdaten vorliegen, lassen sich die fehlenden Daten über Modellierungen abschätzen. Die Daten sind im Detail in Anlage 3 dargestellt. Es handelt sich zumeist um sehr gut lösliche Verbindungen, für die ein möglicher Bioabbau angenommen werden kann. Von den 6 Verbindungen werden 5 mit einer sehr hohen Trinkwasserrelevanz identifiziert ($K \geq 10$). Die sechste Verbindung, HET, weist mit $K = 8$ zumindest eine hohe Trinkwasserrelevanz auf.

Da alle Halbwertszeiten über Modellierungen abgeschätzt werden müssen, lässt sich zwischen den 3 Naphthalinsulfonaten nicht weiter hinsichtlich einer möglichen Bedeutung als Trinkwasserkontaminante differenzieren, obwohl die beobachtete variierende Eliminierbarkeit bei der Uferfiltration (Tabelle 2) eine solche Unterscheidung nahelegt. Dies deutet darauf hin, dass die Charakterisierung eines Kontaminationspotentials aufgrund der Stoffeigenschaften eine nachfolgende Verifizierung der identifizierten Trinkwasserrelevanz mittels instrumenteller Analytik in Realproben erforderlich macht.

6 Weitere Kriterien für die Trinkwasserrelevanz von Stoffen

Im folgenden soll für die Stoffgruppen, die nach der in den vorangegangenen Kapiteln beschriebenen Recherchen als Kontaminanten von Trinkwasser bereits aufgetreten sind, untersucht werden, ob noch weitere Kriterien zu Ihrer Relevanz für das Trinkwasser beitragen.

Stoffgruppen, die sich in diesen Untersuchungen als besonders auffällig im Hinblick auf die Häufigkeit der Nennungen als Trinkwasserkontaminanten darstellten, waren

- Arzneimittel und deren Metabolite
- PBSM einschl. Metaboliten
- Lösemittel und
- Weichmacher.

Weiter Produktgruppen mit Mehrfachnennungen waren

- Detergentien
- Flammenschutzmittel
- Komplexbildner
- Personal Care Products

Bei den unter der Bezeichnung Chemikalien zusammengefassten Stoffe, die in einer Vielzahl von industriellen Prozessen eingesetzt werden und von daher nicht einer einzelnen Gruppe zugeordnet werden konnten, wird vor allem Benzol als ein Stoff genannt, dessen Auftreten im Trinkwasser häufiger detektiert wird.

6.1 Eintragspfade

Für die einzelnen Stoffgruppen sind unterschiedliche Expositionspfade möglich, die im Folgenden kurz dargestellt werden sollen.

Humanarzneimittel und deren Metaboliten werden vor allem in Trinkwasser nachgewiesen, das aus Oberflächenwasser gewonnen wird. Grundwasserkontaminationen treten in der Regel nur als Folge einer Beeinflussung durch belastetes Oberflächen- oder Abwasser auf.

PBSM finden sich als Kontaminanten in Grund- und Oberflächenwasser in Folge ihres Einsatzes in landwirtschaftlichen und nichtlandwirtschaftlichen Bereichen. Mengenmäßig stehen hier vor allem die in der Land- und Forstwirtschaft eingesetzten Herbizide im Vordergrund, aber auch die Verwendung von Totalherbiziden im nichtlandwirtschaftlichen Bereich, also etwa zur Unkrautfreihaltung von Wegen, Flächen und Gleisanlagen hat eine Bedeutung als potentielle Kontaminationsquelle. Die Art der Anwendung ist dabei umweltoffen, so dass eine direkte Beeinträchtigung von Oberflächengewässern möglich ist. Nach einer Bodenpassage, die je nach Standort zu unterschiedlichen Abbau- und Umsetzungsprozessen beiträgt, gelangen PBSM auch ins Grundwasser.

Lösemittel werden in großem Umfang und bei einer Vielzahl von industriellen und gewerblichen Prozessen eingesetzt. Ein Eintrag in Oberflächengewässer erfolgt zumeist über belastete Abwässer, kann jedoch infolge der oft hohen Flüchtigkeit der Verbindungen zusätzlich auf Einträge mit dem Niederschlag zurückgeführt werden. Im Grundwasser werden Lösemittel meist im Zuge von kontaminierten Standorten oder Leckagen detektiert.

Auch bei den Weichmachern handelt es sich um vielfältig und in großem Umfang eingesetzte Hilfsstoffe, die in der Regel nur in Trinkwässern, die aus Oberflächengewässer oder oberflächenwasserbeeinflussten Grundwässern auftreten. Haupteintragspfade sind hier Abwässer und, auf Grund ihrer Flüchtigkeit, auch Niederschläge (u.a. FURTMANN 1993).

Bei den weiteren Stoffe, die sich Produktgruppen zuordnen lassen, handelt es sich im wesentlichen um solche, die auf Grund ihrer bestimmungsgemäßen Verwendung vor allem in häuslichen und industriellen Abwässern auftreten und auf dem Weg über die Kläranlage schließlich in Oberflächengewässer gelangen.

Die Expositionswege für alle Stoffgruppen sind in der Abbildung 9 zusammengestellt. Je nach Stoffgruppe kommt den einzelnen Eintragspfaden eine unterschiedliche Bedeutung zu (Tabelle 8).

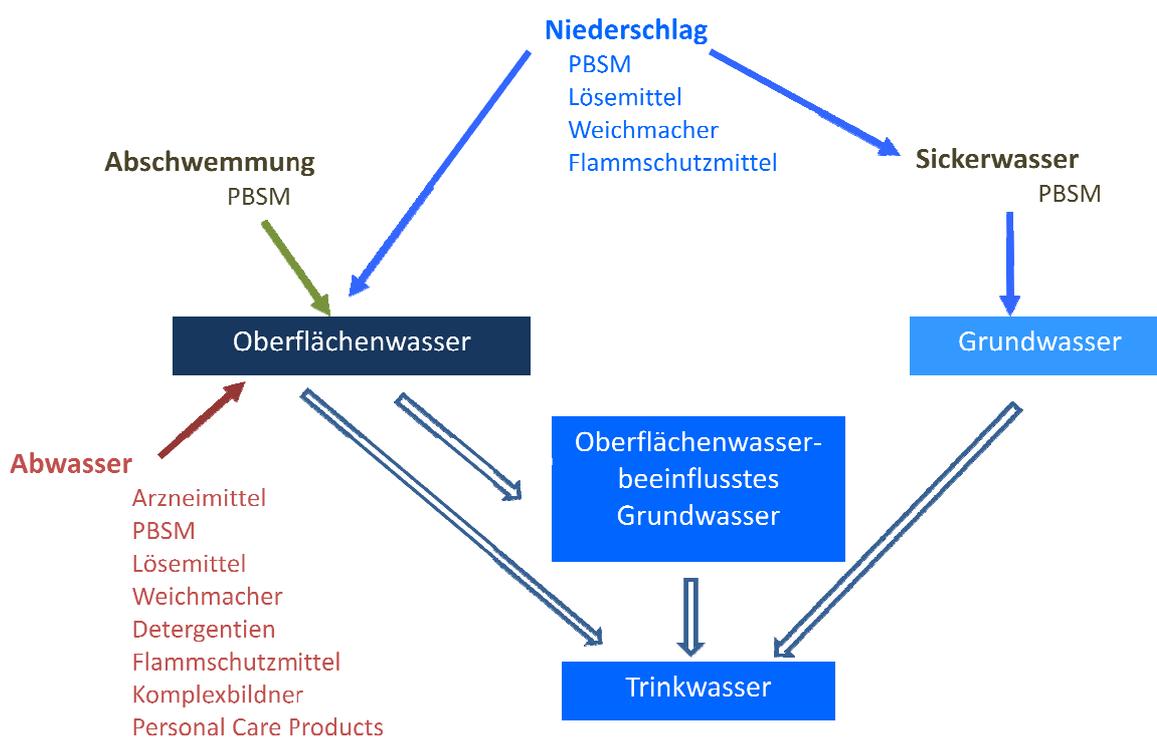


Abbildung 9: Eintragspfade ins Trinkwasser

Bei der Abbildung 9 und der Tabelle 8 wurde nur die Eintragspfade berücksichtigt, die sich bei einem bestimmungsgemäßen Gebrauch ergeben, während punktuelle Kontaminatio-

nen als Folge von Unfällen, Leckagen und regelwidrigen Anwendungen oder Einleitungen angenommen bleiben.

Eine Aufbringung vielfältiger organischer Spurenstoffe auf den Boden mit Sekundärrohstoff- oder Wirtschaftsdüngern (Klärschlamm, Kompost, Gärrückstände, Gülle) und eine nachfolgende Verlagerung mit dem Sickerwasser in das tiefere Bodenprofil und das Grundwasser kann nicht ausgeschlossen werden, ist jedoch bei vielen Substanzgruppen nur von untergeordneter Bedeutung (u. a. SKARK 2007).

Mit dem Niederschlag können Spurenstoffe sowohl in das Grundwasser als auch in das Oberflächenwasser eingetragen werden (u.a. SCHLEYER UND RAFFIUS 2000). Die Verbreitung von Stoffen kann auch für Stoffgruppen mit Niederschlag erfolgen, für die ein Vorkommen im Regen aufgrund ihrer relativ geringen Flüchtigkeit nicht zu erwarten ist. So weisen beispielsweise SENGL ET AL. (2002) polycyclische Moschusverbindungen, die Duftstoffe Galaxolid und Tonalid, bei Messungen von Niederschlagswasser nach, weshalb in Tabelle 8 dieser Eintragspfad als untergeordnet relevant eingestuft wird. Den Eintragspfaden lässt sich je nach betrachteter Stoffgruppe eine unterschiedliche Relevanz zuschreiben, wobei mit Ausnahme der PBSM der Abwasserpfad der wesentliche ist (Tabelle 8).

Tabelle 8: Eintragspfade für verschiedene Stoffgruppen mit einer Einschätzung ihrer Relevanz

- [1] einschließlich Transformationsprodukte
- o Eintrag über Klärschlamm, andere Sekundärrohstoffdünger oder Wirtschaftsdünger möglich
- XXX sehr relevant
- XX relevant
- X wenig relevant
- nicht relevant
- ? fraglich

Stoffgruppe	Industrielle Abwässer	Häusliche Abwässer	Abschwemmung	Niederschlag	Sickerwasser
Arzneimittel [1]	X	XXX	-	-	o
PBSM [1]	X	X	XXX	X	XXX
Lösemittel	X	X	-	X	o
Weichmacher	XX	XX	-	X	o
Detergenzien [1]	XX	XXX	-	X	o
Flammschutzmittel	XX	X	-	-	o
Komplexbildner	XXX	X	-	X	o
Personal Care Products	X	XXX	-	X?	o



Oberflächenwasser

Grundwasser



oberflächenwasserbeeinflusstes Grundwasser

6.2 Weitere Bewertungskriterien

Neben den chemisch-physikalischen Stoffeigenschaften tragen noch weitere Faktoren dazu bei, um aus einem Stoff mit einer hohen Mobilität und einer hohen Persistenz, also mit einer hohen Trinkwasserrelevanz, tatsächlich auch einen Trinkwasserkontaminanten zu machen. Umgekehrt lässt sich alleine aus den Stoffeigenschaften nicht immer ableiten, warum Stoffe, die dies auf Grund ihrer Eigenschaften nicht erwarten lassen, trotzdem ins Trinkwasser gelangen. Um hier weitere Hinweise zu finden wurden die Stoffe, die unter Anlegung der chemisch-physikalischen Bewertungskriterien nur eine mittlere Trinkwasserrelevanz aufwiesen, im Detail darauf hin betrachtet, welche weiteren Kriterien hier eine Rolle spielen könnten (vgl. Abschnitt 9.1).

Zentrale Punkte hierbei sind die Einsatzmenge und eine umweltoffene Anwendung. Bei einem Teil der Stoffe, die auf Grundlage ihrer Stoffeigenschaften als weniger relevant beschrieben wurde, ließen sich die in die Umwelt eingebrachten Mengen als wesentlicher Faktor für eine höhere Relevanz erkennen (Beispiele Simazin, Diclofenac).

In der Regel ist davon auszugehen, dass Stoffe, die auf Grund der eingesetzten Mengen und der Art ihrer Verwendung auf den oben beschriebenen Wegen in relevanten Konzentrationen in Oberflächengewässer oder Grundwässer gelangen, im Trinkwasser auftreten können. Welche Konzentrationen relevant sind, definiert sich dabei vor allem durch den Stand der analytischen Technikenⁱ.

Während Einsatzmenge und umweltoffene Anwendung als Kriterien auf jede Stoffgruppe zutreffen, weist die Einzelbetrachtung der Stoffe (vgl. Anhang, Abschnitt 9.1) mit mittleren Trinkwasserrelevanz noch auf weitere Punkte hin, die stoffspezifisch Gründe für das Auftreten im Trinkwasser liefern wie zum Beispiel:

Die Handelsprodukte weisen andere Eigenschaften als der Wirkstoff auf (anwendungsorientierte Konfektionierung der Wirkstoffe, Formulierungshilfsstoffe).

Die Ausgangssubstanz mit eigentlich unkritischen Eigenschaften wird schnell zu persistenten, wasserlöslicheren Metaboliten umgesetzt.

Der Stoff wird zwar aerob abgebaut, ist unter anaeroben/anoxischen Bedingungen aber persistent.

Der Stoff wird partikelgestützt transportiert.

ⁱ Selbst bei einer hocheffizienten Trinkwasseraufbereitung, die 99,99% eines Stoffes zurückhält, ist bei einer Rohwasserbelastung von nur 1 µg/l noch 1 ng des Stoffes vorhanden und bei entsprechend sensibler Analytik auch detektierbar

7 Vorgehen bei der Stoffbewertung

Grundlage für die Bewertung eines Stoffes im Hinblick auf sein Potential, das Trinkwasser zu belasten, ist das Vorhandensein von Daten zu den chemisch-physikalischen Eigenschaften sowie zur eingesetzten Menge und Anwendungsart.

Für Stoffe, die unter REACH reguliert werden, ist die umgesetzte Menge ein Kriterium für den Umfang von Stoffdatenbeschreibungen und Expositionsanalysen, nicht jedoch für Stoffe, die von einer systematischen Betrachtung gemäß REACH ausgeschlossen bleiben, wie Arzneimittel und PBSM. Für REACH-Stoffe liegen auch in der Regel ausreichend Stoffdaten vor.

Vorausgesetzt die Stoffeigenschaften lassen auch bei den Non-REACH-Stoffen eine Trinkwasserrelevanz vermuten, kann über Datenkompilationen zum Verbrauch eine Priorisierung im Hinblick auf den Trinkwasserschutz vorgenommen werden.

Für PBSM müssen die relevanten Stoffeigenschaften im Rahmen des Zulassungsverfahrens ermittelt werden (BVL 2009a), nicht jedoch für Transformationsprodukte, bei deren Entstehung oftmals die ökotoxischen Wirkeigenschaften vermindert werden. Gleichzeitig wird bei diesem Molekülumbau häufig die Wassergängigkeit erhöht. Bei relevanten Einsatzmengen der primären Wirksubstanz können diese Abbauprozesse in beträchtlichen Konzentrationen von Transformationsprodukten im Grundwasser resultieren (z. B. Chlordazon- und Metazachlormetabolite im Grundwasser in Baden-Württemberg, LUBW, 2009).

Bei der künftigen Zulassung von Arzneimitteln werden sicherlich auch umweltrelevante Stoffeigenschaften in einem größeren Umfang ermittelt, als dies in der Vergangenheit der Fall war (EMEA 2006, 2007). Dies wird für Neuzulassung und bei Zulassungsverlängerungen dann erfolgen, wenn Schätzungen erwarten lassen, dass die Oberflächenwasser-Konzentration $0,01 \mu\text{g/L}$ übersteigt. Wegen der beabsichtigten pharmakologischen Wirkungen im Menschen können vielfach eine relativ hohe Wasserlöslichkeit und eine eingeschränkte Sorptionsneigung angenommen werden. Ähnliches gilt für Veterinärpharmaka.

Für relevante Stoffe, die nicht unter die REACH-Regulierung fallen, werden jedoch auch die grundlegenden Stoffeigenschaften nur eingeschränkt vorliegen, so dass nach einer Priorisierung über Angaben zum Einsatz, eine Bewertung der Wasserrelevanz nur auf der Basis modellierter Stoffeigenschaften vorzunehmen ist. Hierunter werden auch viele Metabolite der vorgenannten Stoffgruppen fallen (vgl. Abschnitt 5.1.1).

Das Vorgehen bei der Bewertung der Trinkwasserrelevanz ist in der Abbildung 10 schematisch dargestellt.

Auf der Basis der zusammengestellten Daten zur Wasserlöslichkeit, dem $\log K_{ow}$ und Angaben zur Abbaubarkeit werden diese entsprechend der Beschreibung in Kapitel 5.2 klassiert, indiziert und eine Indexsumme errechnet.

In die weitere Bewertung gehen die Anwendung und die eingesetzten Mengen als entscheidende Größen ein. Stoffe mit Einsatzmengen über 1 Mg/a sind auf jeden Fall als relevant anzusehen.

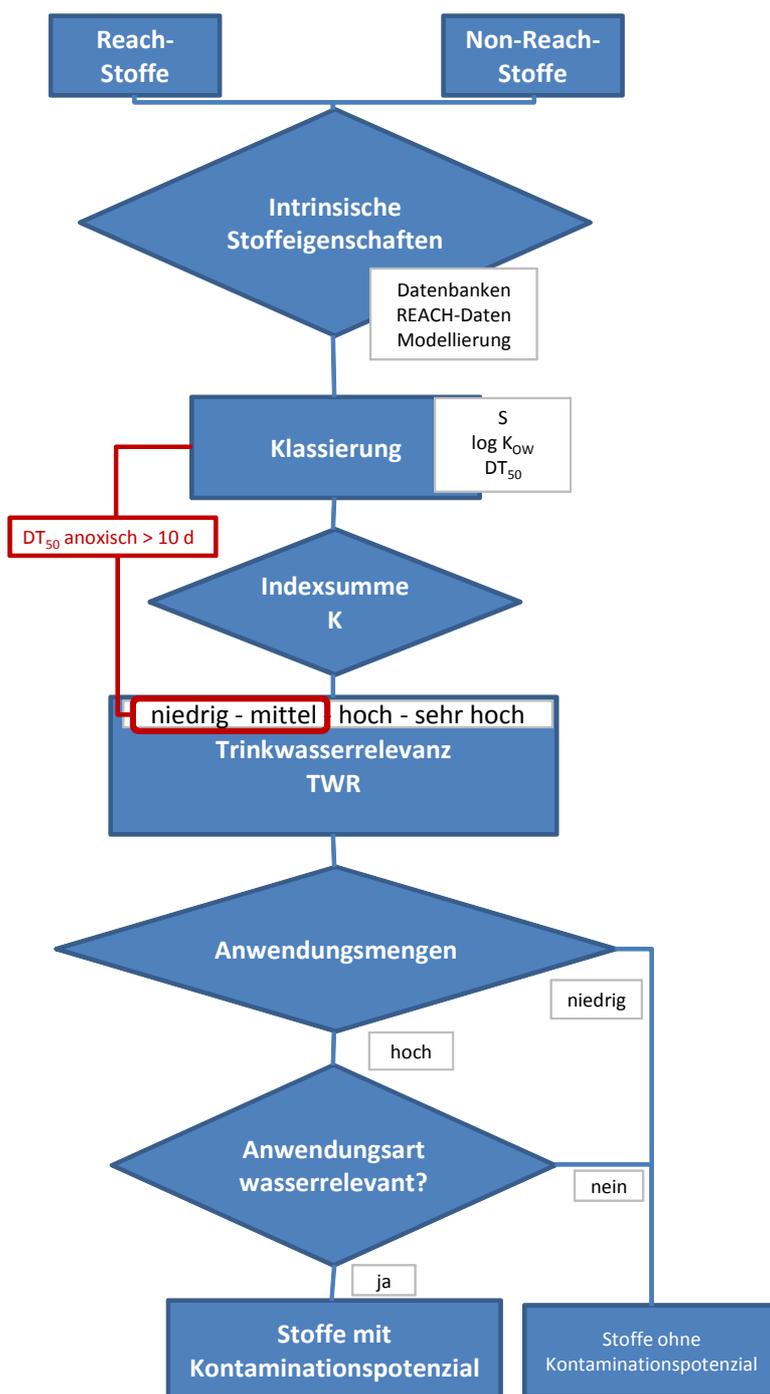


Abbildung 10: Charakterisierung von Stoffen mit Kontaminationspotential für das Trinkwasser

Wird aufgrund der Stoffeigenschaften ein bedeutsames Potential für Kontaminationen von Trinkwasser erkannt, gilt es, dies in weiteren Schritten zu verifizieren. Gezielte Modellierungen eines möglichen Übertritts aus dem Oberflächenwasser oder dem Boden in das Grundwasser können zu Abschätzungen möglicher Konzentrationen im Trinkwasser dienen (u.a. LITZ ET AL. 1998, ZIPPEL ET AL. 2010). Das reale Auftreten im Trinkwasser wird

dennoch erst in Screening-Untersuchungen für die als potentiell relevant erkannten Substanzen zu belegen sein und führt zu einer abschließenden Bewertung.

Einbeziehung weiterer Bewertungskriterien

Die bislang betrachteten Stoffeigenschaften stellen einen Basisansatz zur Charakterisierung dar. Weitere Differenzierungen sind durch die Einbeziehungen weiterer Stoffeigenschaften bzw. Milieubedingungen möglich. Hierzu sind zusätzliche Stoffdaten und Informationen erforderlich, die nicht immer vorliegen bzw. nur schwer beschaffbar sind. Eine höhere Trinkwasserrelevanz als die aus den Basisdaten ermittelte, liegt dann vor, wenn es Hinweise drauf gibt, dass der Stoff

- unter anaeroben Bedingungen schlechter abgebaut wird.
- in Formulierungen oder Handelsprodukten verwendet wird, die zu einer höheren Mobilität und/oder Persistenz führen.
- zu Metaboliten umgesetzt wird, die mobiler und/oder persistenter sind.
- ionar auftritt und sich dadurch seine Sorbierbarkeit verschlechtert.
- partikulär transportiert wird.

Im Anhang wird im Abschnitt 9.2 eine Möglichkeit dargestellt, wie diese Faktoren in die Indexsummenberechnung und damit in die Stoffbewertung mit einbezogen werden können. Zudem ist dort eine ergänzende Bewertung beschrieben, bei der eine erweiterte Klassenunterteilung zu einer stärkeren Differenzierung in der Bewertung des Kontaminationspotentials eines Stoffes führt.

8 Literatur

- ACHTEN, C., KOLB, A. AND PÜTTMANN, W. (2002): Occurrence of Methyl tert-Buthyl Ether (MTBE) in riverbank filtered water and drinking water produced by riverbank filtration.- *Environmental Science and Technology*, 36, (17), 3662-3670.
- AHEL, M.; GIGER, W. (1993A): Aqueous solubility of alkylphenols and alkylphenol polyethoxylates.- *Chemosphere*, 26, (8), 1461-1470.
- AHEL, M.; GIGER, W. (1993B): Partitioning of alkylphenols and alkylphenol polyethoxylates between water and organic solvents.- *Chemosphere*, 26, (8), 1471-1478.
- ALEXANDER, M. (1985): Biodegradation of organic chemicals. *Environmental Science and Technology*, 18, 106-111
- AL-MUDHAF, H. F., ALSHARIFI, F. A. AND ABU-SHADY, A.-S. I. (2009): A survey of organic contaminants in household and bottled drinking waters in Kuwait.- *The Science of the Total Environment*, 407, 1658-1668.
- AUSTRALIAN GOVERNMENT (2009): <http://www.nhmrc.gov.au/publications/synopses/eh19syn.htm>.syn
- BAFU (BUNDESAMT FÜR UMWELT) (2009): Projekt „Strategie MicroPoll“, Informationsblatt Nr. 6, Bern
- BAYERISCHES LANDESAMT FÜR UMWELT (2006): Öffentliche Wasserversorgung in Bayern: Erhebung von Trinkwasserbelastungen durch chemische Stoffe zur Pflanzenbehandlung und Schädlingsbekämpfung (PSM) zum Stand 1.10.2005 (PSM-Bericht 2005). München
- BAYERISCHES LANDESAMT FÜR UMWELT (2006): Öffentliche Wasserversorgung in Bayern; Erhebung von Trinkwasserbelastungen durch chemische Stoffe zur Pflanzenbehandlung und Schädlingsbekämpfung (PSM) zum Stand 1.10.2005.
- BENOTTI, M. J., TERNHOLM, N. A., VANDERFORD, B. J., HOLADY, J. C., STANFORD, B. D. AND SNYDER, S. A. (2009): Pharmaceuticals and endocrine disrupting compounds in U.S. drinking water.- *Environmental Science and Technology*, 43, (3), 597-603.
- BERRYMAN, D., HOUDE, F., DEBLOIS, C. AND O´SHEA, M. (2004): Nonylphenolic compounds in drinking and surface waters downstream of treated textile and pulp and paper effluents: a survey and preliminary assessment of their potential effects on public health and aquatic life.- *Chemosphere*, 56, (3), 247-255.
- BESTER, K., ANDRESEN, J. A., SCHLÜSENER, M. P. AND WEIGEL, S. (2007): Personal care compounds in the environment. pathways, fate, and methods for determination.- Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 244 S.
- BGW (BUNDESVERBAND DER DEUTSCHEN GAS- UND WASSERWIRTSCHAFT E.V., 2003): 113. BGW-Wasserstatistik. Bundesrepublik Deutschland. Berichtsjahr 2001.
- BRAUCHLI-THEOTOKIS, J. (2004): Bestimmung von Glyphosat und AMPA auf Bahnanlagen.- Bern, 58 S.
- BÜRGI, D., KNECHTENHOFER L., MEIER, I. (2007): Projekt BIOMIK Biozide als Mikroverunreinigungen in Abwässern und Gewässern: Teilprojekt 1: Priorisierung von bioziden Wirkstoffen. Studie im Auftrag des Bundesamtes für Umwelt, Bern, Schweiz
- BVL (BUNDESAMT FÜR VERBAUCHERSCHUTZ UND LEBENSMITTELSICHERHEIT, 2009a): PSM-Zulassungsberichte
- BVL (BUNDESAMT FÜR VERBAUCHERSCHUTZ UND LEBENSMITTELSICHERHEIT, 2009b): Absatz an Pflanzenschutzmitteln in Bundesrepublik Deutschland – Ergebnisse der Meldungen gemäß § 19 Pflanzenschutzgesetz für das Jahr 2008
- CADMUS GROUP (1992): Development of a Priority Pollutants List for Drinking Water. Prepared for EPA, Office of Ground Water and Drinking Water. Washington, D.C.

- CHARROIS, J. W. A., AREND, M. W., FROESE, K. L. AND HRUDEY, S. E. (2004): Detecting N-Nitrosamines in Drinking Water at Nanogram per Liter Levels Using Ammonia Positive Chemical Ionization.- *Environmental Science and Technology*, 38, (18), 4835-4841.
- CHEVREUIL, M. AND GRANIER, L. (1991): Drinking water pollution by polychlorinated biphenyls in the Paris area (France).- *Chemosphere*, 23, (11-12), 1637-1642.
- CHUNG, Y., SHIN, D., PARK, S., LIM, Y., CHOI, Y., CHO, S., YANG, J., HWANG, M., PARK, Y. AND LEE, H. (1997): Risk assessment and management of drinking water pollutants in Korea.- *Water Science and Technology*, 36, (12), 309-323.
- COMMITTEE ON DRINKING WATER CONTAMINANTS ET AL. (EDS.) (1999): Setting Priorities for Drinking Water Contaminants. National Academy Press, Washington
- DAUGHTON, C.G.; TERNES, T.A. (1999): Pharmaceutical and personal care products in the environment: Agents of subtle change?.- *Environmental Health Perspectives*, 107, (Suppl. 6), 907-938.
- DEARDEN, J. AND WORTH, A.(2007): In silico prediction of physicochemical properties. JRC Scientific and technical Reports, Luxemburg.
- DELSCHEN, T.; BARKOWSKI, D.; HACHEN, J.; JUNGSMANN, A.; LEUCHS, W.; PAPE, R.; RAECKE, F.; SCHROERS, S.; SUSSET, B. (2007): Bodenbelastungen nach Aufbringung PFT-haltiger Abfälle in Nordrhein-Westfalen.- *Bodenschutz*, 12, (3), 65-70.
- DIMITROV, S.; DIMITROVA, N.; PARKERTON, T.; COMBER, M.; BONELL, M.; MEKENYAN, O. (2005): Baseline model for identifying the bioaccumulation potential of chemicals.- *SAR and QSAR in Environmental Research*, 16, (6), 531-554.
- DIMITROV, S.; PAVLOV, T.; NEDELICHEVA, D.; REUSCHENBACH, P.; SILVANI, M.; BIAS, R.; COMBER, M.; LOW, L.; LEE, C.; PARKERTON, T.; BONELL, M. & MEKENYAN, O. (2007): A kinetic model for predicting biodegradation.- *SAR and QSAR in Environmental Research*, 18, (5-6), 443-457.
- ECB (EUROPEAN CHEMICALS BUREAU, 2003): Technical Guidance Document on Risk Assessment. Part I - IV.- Ispra,
- ECHA (EUROPEAN CHEMICALS AGENCY, 2008a): 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.
- ECHA (EUROPEAN CHEMICALS AGENCY, 2008b): QSARs and grouping of chemicals.- in: ECHA (ed.): Guidance on information requirements and chemical safety assessment.- Chapter R.6, Helsinki, 134 p. Siehe auch http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/information_requirements_de.htm.
- ECHA (EUROPEAN CHEMICALS AGENCY, 2008c): 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, 2008d): 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.
- EMEA - THE EUROPEAN AGENCY FOR THE EVALUATION OF MEDICINAL PRODUCTS; CHMP - COMMITTEE FOR MEDICINAL PRODUCTS FOR HUMAN USE (2006): Guideline on the environmental risk assessment of medical products for human use.- EMEA/CHMP/SWP/44447/00, 12 S.
- EMEA - THE EUROPEAN AGENCY FOR THE EVALUATION OF MEDICINAL PRODUCTS & CVMP - COMMITTEE FOR MEDICINAL PRODUCTS FOR VETERINARY USE (2007): Guideline on environmental impact assessment for veterinary medical products.- EMEA/CVMP/ERA/418282/2005 - final, 65 S.

- EU (EUROPÄISCHES PARLAMENT, EUROPÄISCHER RAT, 2006): EU-REACH-Verordnung. Verordnung (EG) Nr.1907/2006 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 18. Dezember 2006 zur Registrierung, Bewertung und Zulassung chemischer Stoffe (REACH) zur Schaffung einer Europäischen Agentur für chemische Stoffe, zur Änderung der Richtlinie 1999/45/EG und zur Aufhebung der Verordnung (EWG) Nr. 793/93 des Rates, der Verordnung (EG) Nr. 1488/94 der Kommission, der Richtlinie 76/769/EWG des Rates sowie der Richtlinien 91/155/EWG, 93/67/EWG, 93/105/EG und 2000/21/EG der Kommission.- Amtsblatt der Europäischen Union, L 396, 1-851.
- EU-RAR (EUROPEAN UNION RISK ASSESSMENT REPORT, 2008a): 1-(5,6,7,8-Tetrahydro-3,5,5,6,8,8-Hexamethyl-2-Naphthyl)Ethan-1-one (AHTN) – Risk Assessment.-
http://ecb.jrc.ec.europa.eu/DOCUMENTS/Existing-Chemicals/RISK_ASSESSMENT/REPORT/ahtnreport418.pdf
- EU-RAR (EUROPEAN UNION RISK ASSESSMENT REPORT, 2008b): 1,3,4,6,7,8-Hexahydro-4,6,6,7,8,8-Hexamethylcyclopenta-g-2-Benzopyran (HHCB) – Risk Assessment.-
http://ecb.jrc.ec.europa.eu/DOCUMENTS/Existing-Chemicals/RISK_ASSESSMENT/REPORT/hhcbreport414.pdf
- FRAUNHOFER-INSTITUT (1999): Revised Proposal for a List of Priority Substances in the Context of the Water Framework Directive (COMMPS Procedure). Final Report, Schmallenberg
- FURTMANN, K. (1993): Phthalate in der aquatischen Umwelt.- Landesamt für Wasser und Abfall Nordrhein-Westfalen, LWA-Materialien Nr. 6/93, Düsseldorf, 177 S..
- GÄLLI, R. ORT, C. UND SCHÄRER, M. (2009): Mikroverunreinigungen in den Gewässern: Bewertung und Reduktion der Schadstoffbelastung aus der Siedlungsentwässerung. Umwelt-Wissen Nr. 0917, Bundesamt für Umwelt, Bern, Schweiz
- GIESY, J.P.; DOBSON, S.; SOLOMON, K. R. (2000): Ecotoxicological risk assessment for Roundup herbicide.- Reviews of Environmental Contamination and Toxicology, 167, 35-120.
- GRÜTZMACHER, G.; WIESE, B.; HEBERER, T.; MASSMANN, G.; JEKEL, M.; DÜNNBIER, U. (2010): Behaviour of trace organics during drinking water production via subsurface passage.- Symposium Hormonaktive Substanzen und Arzneimittel 10.02.2010 http://www.kompetenz-wasser.de/fileadmin/user_upload/pdf/veranstaltungen/EndoPharm2010/20100210_Endopharm_Gruetzmacher.pdf
- HEALTH CANADA (2009): <http://www.healthcanada.gc.ca/waterquality>
- HEBERER, T.; STAN, H.-J. (1997): Determination of clofibric acid and N-(phenylsulfonyl)-sarcosine in sewage river and drinking water.- International Journal of Environmental Analytical Chemistry, 47, 113-124.
- HELCOM (1998): http://www.helcom.fi/Recommendations/en_GB/rec19_5/
- HLADIK, M. L.; BOUWER, E. J.; ROBERTS, A. L. (2008): Neutral degradates of chloroacetamide herbicides. Occurrence in drinking water and removal during conventional water treatment.- Water Research, 42, 4905-4914.
- INERIS (2009) <http://chimie.ineris.fr> [12.02.2010]
- JAWORSKA, J.; DIMITROV, S.; NIKOLOVA, N.; MEKENYAN, O. (2002): Probabilistic assessment of biodegradability based on metabolic pathways: Catabol System.- SAR and QSAR in Environmental Research, 13, (2), 307-323.
- KALBERLAH, F. (2008): Toxikologische Bewertung von 2,4,8,10-Tetraoxaspiro(5.5)undecan.- Forschungs- und Beratungsinstitut Gefahrstoffe GmbH (FoBiG), Gutachten, 19 S..

- KIM, S. D., CHO, J., KIM, I. S., VANDERFORD, B. J. AND SNYDER, S. A. (2007): Occurrence and removal of pharmaceuticals and endocrine disruptors in South Korean surface, drinking, and waste waters.- *Water Research*, 41, 1013-1021.
- KOOPERATION LANDWIRTSCHAFT UND WASSERWIRTSCHAFT IM EINZUGSGEBIET DER STEVERTALSPERRE (2009): Bericht 2008. Acker- und Saatbauverein Münsterland e.V., Coesfeld
- KUHLMANN, B. (1997): Verhalten von organischen Spurenstoffen bei der Uferfiltration und der Untergrundpassage unter wechselnden Redoxbedingungen.- *Schriftenreihe des Instituts für Wasserforschung GmbH Dortmund und der Dortmunder Energie- Wasserversorgung GmbH*, Bd. 53, 142 S..
- KUNST, S.; FILIPOV, E., SCHWARZE-SCHARFENBERG, B.; PAKERT, M.; BERGER, M. (2007): Endokrin wirksame Substanzen, die über die Abwasserreinigung in den Klärschlamm gelangen.- in: DWA (Hg.): *Beeinflussung der Grundwasserqualität durch problematische Stoffe in Klärschlamm, Kompost und Gülle – Grundlagen*.- DWA-Themen, Hennef, 5-90.
- KUO, H.-W., CHIANG, T.-F., LO, I.-I., LAI, J.-S., CHAN, C.-C. AND WANG, J.-D. (1997): VOC concentration in Taiwan's household drinking water.- *The Science of the Total Environment*, 208, (1-2), 41-47.
- LANGE, F. T.; SCHMIDT, C. & BRAUCH, H.-J. (2006): Perfluoroalkylcarboxylates and -sulfonates - Emerging contaminants for drinking water supplies ?- *Rhine Water Works (Riwa, ed.)*, Nieuwegein (NL), 27 S.
- 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..
- LANUV (Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen, 2009): Sulfolan – Zweiter Folgebericht Zeitnahe Ruhrüberwachung.- www.lanuv.de, Stand: 11.06.2010.
- LERCH, R. N.; DONALD, W. W.; LI, Y.-X.; ALBERTS, E. E. (1996): Hydroxylated atrazine degradation products in a small Missouri stream.- in: MEYER, M. T. & THURMAN, E. M. (eds.): *Herbicide metabolites in surface water and groundwater*.- American Chemical Society, Washington, 254-270.
- LINDNER, K., KNEPPER, T. P., KARRENBROCK, F., RÖRDEN, O., BRAUCH, H.-J., LANGE, F. T., SACHER, F. (1996): Erfassung und Identifizierung von trinkwassergängigen Einzelsubstanzen in Abwässern und im Rhein - IAWR Rhein-Themen. Band 1
- LINDNER, K., KNEPPER, T. P., MÜLLER, J., KARRENBROCK, F., RÖRDEN, O., JUCHEM, H., BRAUCH, H.-J., SACHER, F. (2003): Bestimmung und Beurteilung der mikrobiellen Abbaubarkeit von organischen Einzelstoffen bei umweltrelevanten Konzentrationen in Gewässern. IAWR Rhein-Themen. Band 5
- LINDNER, K.; KNEPPER, T.P.; MÜLLER, J.; KARRENBROCK, F.; RÖRDEN, O.; BRAUCH, H.-J.; SACHER, F. (2000): Entwicklung von Verfahren zur Bestimmung und Beurteilung der Trinkwassergängigkeit von organischen Einzelstoffen.- IAWR Rhein-Themen. Band 3:
- LITZ, N.; STRUPPE, T.; MÜLLER-WEGENER, U. (1998): Modellhafte Abschätzung von Stoffgehalten im Sickerwasser am Ende der Sickerstrecke als Grundlage zur Prioritätensetzung hinsichtlich zu ergreifender Maßnahmen.- *Bodenschutz*, 2, (4), 144-148.
- LITZ, N. UND DIETER, H.H. (2009a): Physiko-chemische Kenngrößen zur Beurteilung der Trinkwasserrelevanz von Abbauprodukten von Pflanzenschutzmitteln. Pers. Mitteilung
- LITZ, N. UND DIETER, H.H. (2009b): Physiko-chemische Kenngrößen zur Beurteilung der Trinkwasserrelevanz von Chemikalien. Pers. Mitteilung
- LÖFFLER, D.; RÖMBKE, J.; MELLER, M. & TERNES, T. A. (2005): Environmental fate of pharmaceuticals in water/sediment systems.- *Environmental Science and Technology*, 39, (4), 5209-5218.

- LORAINÉ, G. A.; PETTIGROVE, M. E. (2006): Seasonal variations in concentrations of pharmaceuticals and personal care products in drinking water and reclaimed wastewater in Southern California.- *Environmental Science and Technology*, 40, (3), 687-695.
- LUBW (LANDESANSTALT FÜR UMWELT, MESSUNGEN UND NATURSCHUTZ BADEN-WÜRTTEMBERG, 2009): Grundwasserüberwachungsprogramm – Ergebnisse der Beprobung 2008.- *Grundwasserschutz*, Bd. 38, Karlsruhe
- LUKS-BETLEJA, K., POPP, P., JANOSZKA, B. AND PASCHKE, H. (2001): Solid-phase microextraction of phthalates from water .- *Journal of Chromatography A*, 938, 993-101.
- MADSEN, P.L.; THYME, J.B.; HENRIKSEN, K.; MOLDRUP, P.; ROSLEV, P. (1999): Kinetics of Di-(2-ethylhexyl)phthalate mineralization in sludge-amended soil.- *Environmental Science and Technology*, 33, (15), 2601-2606.
- MAK, Y. L., TANIYASU, S., YEUNG, L. W. Y., LU, G., JIN, L., YANG, Y., LAM, P. K. S., KANNAN, K.; YAMASHITA, N. (2009): Perfluorinated compounds in tap water from China and several other countries.- *Environmental Science and Technology*, 43, (13), 4824-4829.
- MONTEIRO, S. C.; BOXALL, A. B. A. (2010): Occurrence and fate of human pharmaceuticals in the environment.- *Reviews of Environmental Contamination and Toxicology*, 202, 53-154.
- MULISCH, H.-M., WINTER, W. UND DIETER, H.H. (2003): Modulares System zur Gesamtbewertung von Umweltkontaminanten in Boden, Gewässern und Trinkwasser. *Bundesgesundheitsblatt – Gesundheitsforschung - Gesundheitsschutz* 46, 668-676
- MUNLV (MINISTERIUM FÜR UMWELT UND NATURSCHUTZ, LANDWIRTSCHAFT UND VERBRAUCHERSCHUTZ DES LANDES NORDRHEIN-WESTFALEN, HRSG., 2002): Grundwasserbericht 2000 Nordrhein-Westfalen. Düsseldorf.
- MUNLV (MINISTERIUM FÜR UMWELT, NATURSCHUTZ, LANDWIRTSCHAFT UND VERBRAUCHERSCHUTZ DES LANDES NORDRHEIN-WESTFALEN, 2008): Trinkwasserbericht Nordrhein-Westfalen. Düsseldorf
- NAGY M., FÜRHACKER M., MÖBES-HANSEN B., RAUCHBÜCHL A. UND WIMMER M. (2002): Gefährliche Stoffe in Oberflächengewässern - Fachgrundlagen für österreichische Programme nach Artikel 7 der Richtlinie 76/464/EWG. Datenband.
- OECD (2009): Guidelines for the Testing of Chemicals. PDF Edition (ISSN 1607-310X), Stand September 2009
- OSPAR (2002): OSPAR list of chemicals for priority action (update 2002). Ref.No. 2002-18, OSPAR 02/21/1-E, Annex 5 (Ref. §7.5. a). 28 June 2002. OSPAR Commission Amsterdam
- PARSONS, J. R.; SÁEZ, M.; DOLFING, J.; DE VOOGT, P. (2010): Biodegradation of perfluorinated compounds.- *Reviews of Environmental Contamination and Toxicology*, 196, 53-71.
- POLKOWSKA, Z., KOZŁOWSKA, K., MAZERSKA, Z., GORECKI, T.; NAMIESNIK, J. (2003): Relationship between volatile organohalogen compounds in drinking water and human urine in Poland.- *Chemosphere*, 53, (8), 899-909.
- POST, G. B., LOUIS, J. B., COOPER, K. R., BOROS-RUSSO, B. J.; LIPPINCOTT, R. L. (2009): Occurrence and potential significance of perfluorooctanoic acid (PFOA) detected in New Jersey public drinking water systems.- *Environmental Science and Technology*, 43, (12), 4547-4554.
- PREUß, G.; SCHULTE-EBBERT, U. (2000): Artificial groundwater recharge and bank filtration. In: Rehm, H.-J.; Reed, G. (Ed.): *Biotechnology. Vol. 11c. Environmental Processes III*. Wiley-VCH Weinheim, 426-444
- PUBLIC WORKS AND GOVERNMENT SERVICES CANADA (2009) <http://www.hc-sc.gc.ca> [12.02.2010]
- QUAYLE, W.C., OLIVER, D.P., ZRNA, S. (2006): Field dissipation and environmental hazard assessment of Clomazone, Molinate, and Thiobencarb in Australian rice culture.- *J. Agric. Food Chem*, 54 (19), 7213–7220.

- REDDERSEN, K., HEBERER, T., DÜNNBIER, U. (2002): Identification and significance of phenazone drugs and their metabolites in ground- and drinking water.- *Chemosphere*, 49, (6), 539-544.
- RIPPEN, G. (2009): Handbuch Umweltchemikalien: Datensammlung über Umweltchemikalien.- Ecomed, Landsberg
- RÖRDEN, O. UND KARRENBROCK, F. (2006): HET-Säure – eine neue Grundwasserkontamination.- in: Arbeitsgemeinschaft der Rhein-Wasserwerke e.V. (ARW, Hrsg.): Jahresbericht 2005, 62. Bericht, 85-94.
- RXLIST (2009): The Internet Drug List. www.rxlist.com
- SCHLEYER, R.; RAFFIUS, B. (2000): Grundwassergefährdung durch organische Luftschadstoffe.- DVWK Materialien 1/2000, Hennef, 385 S..
- SCHLUEP, M., THOMANN, M., HÄNER, A., GÄLLI, R. (2006): Organische Mikroverunreinigungen und Nährstoffhaushalt. Eine Standortbestimmung für die Siedlungswasserwirtschaft. Umwelt-Wissen Nr. 0614, Bundesamt für Umwelt, Bern, Schweiz
- SCHMIDT, C.K., FLIEG, M., SACHER, F., BRAUCH, H.-J. (2004): Occurrence of aminopolycarboxylates in the aquatic environment of Germany.- *Environmental Pollution*, 131, 107-124.
- SCHMIDT, C.K.; LANGE, F.T. (2005): Reinigungsleistung der Uferfiltration hinsichtlich der Eliminierung organischer Schadstoffe unter standortspezifischen Randbedingungen. Abschlussbericht zum Teilprojekt B6 im BMBF-Forschungsvorhaben Exportorientierte Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Wasserver- und -entsorgung Teil I: Trinkwasser. Technologie-Zentrum des DVGW, Karlsruhe.
- SCHRIKS, M., HERINGA, M. B., VAN DER KOOI, M. M. E., DE VOOGT, P., VAN WENZEL, A. P. (2010): Toxicological relevance of emerging contaminants for drinking water quality.- *Water Research*, 44 (2), 461-476
- SCHULTE-EBBERT, U. (2004): Künstliche Grundwasseranreicherung und Untergrundpassage. In: DVGW Deutsche Vereinigung des Gas- und Wasserfaches e. V. (Hrsg.): Wasseraufbereitung – Grundlagen und Verfahren. München, Wien, 403-439.
- SCHULTE-OEHLMANN, U., OEHLMANN, J., PÜTTMANN, W. (2007): Humanpharmakawirkstoffe in der Umwelt: Einträge, Vorkommen und Versuch einer Bestandsaufnahme.- *UWSF-Zeitschrift für Umweltchemie und Ökotoxikologie*, 19, 168-179
- SCHULZ, M.; LÖFFLER, D.; WAGNER, M.; TERNES, T. A. (2008): Transformation of the X-ray contrast medium iopromide in soil and biological wastewater treatment.- *Environmental Science and Technology*, 42, (19), 7207-7217.
- SCHULZ, W. (2010): Kontamination von Grund- und Trinkwasser durch PSM-Metabolite - Übersicht.- Tagungsband 19. Fachtagung Umweltverträgliches Wirtschaften: Wie rein ist rein ? - Metabolite von Pflanzenschutzmitteln in Grund- und Trinkwasser, Osnabrück, 17.03.2010, 12-15.
- SCHWABE, U. UND PAFFRATH, D. (2009): Arzneiverordnungsreport 2009. Springer Medizin Verlag, Heidelberg
- SENGL, M.; SCHÜSSLER, W.; WEHRLE-VON BORZYSKOWSKI, R. (2002): Untersuchung zur Verteilung von PSM, Nitrophenolen sowie synthetischen Moschusverbindungen durch den Niederschlag – Bericht 1995 – 2001.- Bayerisches Landesamt für Wasserwirtschaft (Hrsg.), Materialien Nr. 107, München, 71 S..
- SKARK, C. (2007): Organische Spurenstoffe in Klärschlämmen, Bioabfällen und Wirtschaftsdüngern.- *KA – Abwasser, Abfall*, 54 (10), 1041-1049.
- SKARK, C.; ZULLEI-SEIBERT, N. (2007): Perfluorierte Tenside (PFT) im Oberflächenwasser der Ruhr und im Trinkwasser von Ruhrwasserwerken – Ergebnisse des Monitorings der Arbeitsgemeinschaft der Wasserwerke an der Ruhr (AWWR).- in: Ruhrverband & AWWR (Hg.): Ruhrgütebericht 2006.- Gevelsberg, Essen, 127-135.

- STACKELBERG, P. E., FURLONG, E. T., MEYER, M. T., ZAUGG, S. D., HENDERSON, A. K., REISSMAN, D. B. (2004): Persistence of pharmaceutical compounds and other organic wastewater contaminants in a conventional drinking-water-treatment plant.- *The Science of the Total Environment*, 329, (1-3), 99-113.
- STACKELBERG, P. E., GIBS, J., FURLONG, E. T., MEYER, M. T., ZAUGG, S. D., LIPPINCOTT, R. L. (2007): Efficiency of conventional drinking-water-treatment processes in removal of pharmaceuticals and other organic compounds.- *The Science of the Total Environment*, 377, 255-272.
- STAPLES, C.A.; ADAMS, W.J.; PARKERTON, T.F.; PETERSON, D.R. (1997): The environmental fate of phthalate esters: a literature review.- *Chemosphere*, 35, (4), 667-749.
- STEGER-HARTMANN, T.; LÄNGE, R.; SCHWEINFURTH, H. (1998): Umweltverhalten und Ökotoxikologische Bewertung von iodhaltigen Röntgenkontrastmitteln.- *Vom Wasser*, 91, 185-194.
- STURM, S., KIEFER, J., EICHHORN, E. (2006): Befunde von Pflanzenschutzmitteln in Grund- und Oberflächenwässern und deren Eintragspfade. Abschlussbericht des DVGW-Forschungsvorhabens W/0 2/05, TZW, Karlsruhe
- STUYFZAND, P. J. (1997): Fate of pollutants during artificial recharge and bank filtration in the Netherlands. in: Deutsche Vereinigung des Gas- und Wasserfaches e.V. (Hrsg.): 2. Deutsch-Niederländischer Workshop Künstliche Grundwasseranreicherung, Schriftenreihe Wasser, 90, 131-146, Bonn.
- STUYFZAND, P. J., LÜERS, F. (1996): Gedrag van milieugevaarlijke stoffen bij oeverinfiltratie en kunstmatige infiltratie. Effecten van bodempassage gemeten langs stroombanen. Kiwa Research and Consultancy, KIWA Mededeling, 125, Nieuwegein, 271 S.
- US EPA (2008) Regulatory Determinations Support Document for Selected Contaminants from the Second Drinking Water Contaminant Candidate List (CCL 2) . Chapter 4. EPA Report 815-R-08-012
- US EPA (2009a): <http://www.epa.gov/ogwdw/ccl/ccl3.html>
- US EPA (2009b): <http://www.epa.gov/safewater/ucmr/ucmr2>
- US EPA (2009c): http://www.epa.gov/ogwdw/ccl/pdfs/ccl3_docs/CCL3_PCCLtoCCL_08-31-09_508.pdf
- US EPA (2009d): <http://www.epa.gov/hpv>
- US EPA (2009e) <http://www.epa.gov/safewater/databases>
- US EPA (2009E) <http://www.epa.gov/safewater/databases> [12.02.2010]
- US EPA (2009f): Estimation Program Interface (EPI) Suite.- <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>
- US NATIONAL LIBRARY OF MEDICINE (2009) <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus> [12.02.2010]
- VARTIAINEN, K., PUKKALA, E., RIENOJA, T., STRANDMAN, T., KAKSONEN, K. (1993): Population exposure to tri- and tetrachloroethene and cancer risk: Two cases of drinking water pollution.- *Chemosphere*, 27, (7), 1171-1181.
- VIENO, N. M., TUHKANEN, T., KRONBERG, L. (2005): Seasonal variation in the occurrence of pharmaceuticals in effluents from a sewage treatment plant and in the recipient water.- *Environmental Science and Technology*, 39, (21), 8220-8226
- WAUCHOPE, R. D.; BUTTLER, T. M.; HORNSBY, A. G.; AUGUSTIJN BECKERS, P. W. M.; BURT, J. P. (1992): The SCS/ARS/CES Pesticide Properties Database for Environmental Decision-Making.- *Reviews of Environmental Contamination and Toxicology*, 123, 1-156.



-
- WILLIAMS, P., BENTON, L., WARMERDAM, J., SHEEHAN, P. (2002): Comparative risk analysis of six volatile organic compounds in Californian drinking water.- *Environmental Science and Technology*, 36, (22), 4721-4728.
- 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.

9 Anhang

9.1 Ergänzende stoffbezogene Darstellungen

9.1.1 Arzneimittel und deren Metabolite

Humanarzneimittel und deren Metaboliten werden vor allem in aus Oberflächenwasser gewonnenem Trinkwasser nachgewiesen. Grundwasserkontaminationen treten in der Regel nur als Folge einer Beeinflussung durch belastetes Oberflächen- oder Abwasser auf. Bei Tierarzneimittel kann eine Verlagerung ins Grundwasser vor allem über den Auftrag von Gülle auf Böden erfolgen.

In der Abbildung 11 sind die wesentlichen Eintragspfade dargestellt.

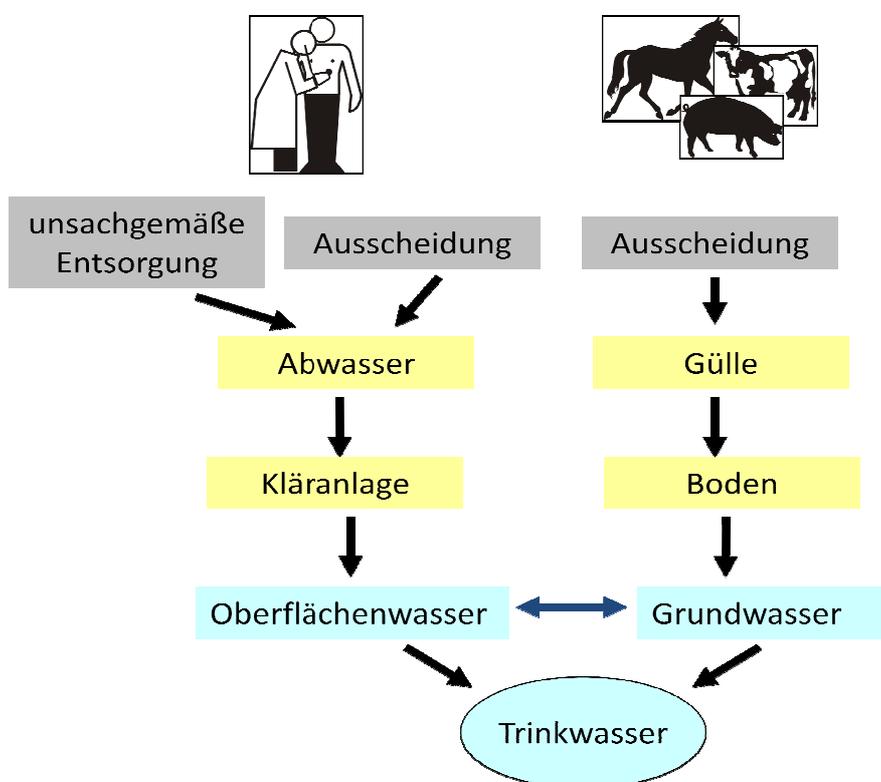


Abbildung 11: Haupteintragspfade von Human- und Tierarzneimitteln ins Trinkwasser

Bei den in der Tabelle 1 genannten Arzneimittelbefunden im Trinkwasser handelt es ausschließlich um Humanpharmaka, die in der Regel über Kläranlagenabläufe in Oberflächengewässer gelangen.

Unter den Stoffen, die auf Grund ihre chemisch-physikalischen Eigenschaften eine eher als geringer zu bewertende Relevanz für das Trinkwasser haben, und trotzdem im Trinkwasser detektiert wurden, sind auch einige Arzneistoffe. An Hand dieser Beispiele sollen im Folgenden weitere Kriterien aufgezeigt werden, die in eine Bewertung der Trinkwasserrelevanz von Chemikalien einbezogen werden sollten. Bei diesen Stoffen mit Indexsummen K von 4 und 5 handelt es sich um die beiden Lipidsenker Fenofibrat und Gemfibrozil,

das Analgetikum Diclofenac, ein Schmerzmitteltransformationsprodukt Ibuprofen-methylester, das Antidepressivum Fluoxetin, das Bakterizid Triclosan und das Hormon Estradiol.

Zwei der Stoffe, Gemfibrozil und Fluoxetin, wurden im Rahmen einer US-amerikanischen Studie (BENOTTI ET AL. 2009) in Trinkwässern detektiert. Generell gehören beide zu Arzneimittelgruppen, deren Verordnungszahlen in Deutschland zunehmen. Laut dem Arzneiverordnungsreport 2009 wird Gemfibrozil Deutschland nur wenig eingesetzt. Die verordnete Menge an Fluoxetin-haltigen Arzneimitteln ist in Deutschland im Jahr 2008 um fast 10% gegenüber dem Vorjahr gestiegen (SCHWABE UND PAFFRATH 2009).

Fluoxetin

Fluoxetin wurde in sehr geringen Konzentration von < 1 ng/L (0,71 und 0,82 ng/L, Nachweisgrenze 0,5 ng/L) in Trinkwasser detektiert (BENOTTI ET AL. 2009). Auf Literaturrecherchen basierend berichten die Autoren von einer über 95%igen Konzentrationsverminderung bei der Wasseraufbereitung durch Ozonung. Setzt man diese auf 99,9 % lagen im Rohwasser Konzentrationen von 710 resp. 820 ng/L vor. Konzentrationen in dieser Größenordnung und darüber wurden in Deutschland in Oberflächengewässern durchaus für Arzneimittel wie Paracetamol gefunden, von denen bekannt ist, dass sie in großen Mengen eingesetzt und gleichzeitig in Kläranlagen gut zurückgehalten werden.

Fluoxetin ist ein unter dem Namen Prozac in den USA in großen Mengen konsumiertes Psychopharmakon, das rezeptfrei erhältlich ist. Es gehört zu den 200 in den USA am häufigsten verschriebenen Medikamenten. Verbrauchsmengen in Frankreich, Spanien und Großbritannien werden für jedes dieser Länder mit ca. 4.000 bis 5.000 kg/a angegeben (MONTEIRO UND BOXALL 2010). In den USA wird Fluoxetin in Form seines Hydrochlorids eingesetzt, das eine wesentlich höhere Wasserlöslichkeit als das Fluoxetin selbst hat (14 g/L, RxList 2009) und würde damit anders als die Ursprungssubstanz klassifiziert werden. Auch für die Originalsubstanz liegen abweichend höhere Schätzungen zur Wasserlöslichkeit vor (60 mg/L, MONTEIRO UND BOXALL 2010).

Gemfibrozil

Über das Auftreten von Gemfibrozil in Roh- und Trinkwasser wird ebenfalls von BENOTTI ET AL. (2009) berichtet, wobei dieser Lipidsenker 3- bis 4-mal häufiger detektiert wurde als Fluoxetin. Die gemessenen Konzentrationen liegen im Trinkwasser zwischen 0,5 und 2 ng/L. Auch hier berichten die Autoren von Literaturangaben über eine mehr als 95%ige Konzentrationsverminderung bei der Ozonung, so dass sich in diesem Fall rein rechnerisch ähnliche Konzentrationen im Rohwasser ergeben wie für Fluoxetin (500 bis 2.000 ng/L). Über die auf den Markt gebrachten Mengen an Gemfibrozil ließ sich nichts ermitteln. Es gehört nicht zu den 200 in den USA am häufigsten verschriebenen Medikamenten. BENOTTI ET AL. (2009) weisen aber in diesem Zusammenhang darauf hin, dass die Zahl der Verschreibungen nicht immer mit den Verbrauchsmengen korreliert.

Fenofibrat

Die Fenofibrat-Befunde stammen aus Messungen der Baden-Württembergischen Umweltbehörde. Im Jahr 2008 wurden in Deutschland etwa 11.000 kg Fenofibrat verordnet (SCHWABE UND PAFFRATH 2009), wobei hier ein rückläufiger Trend zu verzeichnen ist. Im Jahr 2001, also etwa zu Zeit der Befunde, wurden noch 17.000 kg des Wirkstoffs verkauft (LANUV 2007). Die umfassende Studie des LANUV (2007), in der das Umweltverhalten insgesamt und im besonderen die Trinkwasserrelevanz von Arzneimitteln untersucht wird, kommt zu dem Schluss, dass die schlechte Datenlage zum Umweltverhalten von Fenofibrat eine abschließende Bewertung der Umweltrelevanz nicht zulässt und die Nachweise in Grund- und Trinkwasser eine nähere Untersuchung insbesondere des Abbau- und Verlagerungsverhaltens erfordern.

Diclofenac

Legt man nur die chemisch-physikalischen Bewertungskriterien an, so wird Diclofenac auf Grund des hohen Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten und der relativ guten Abbaubarkeit als weniger relevant eingeschätzt. In Oberflächengewässern wird die Substanz jedoch regelmäßig im mittleren bis oberen ng/L Bereich nachgewiesen.

Diclofenac ist eines des am häufigsten in Deutschland verkauften Schmerz- und Rheumamittel. Im Jahr 2008 wurden über 47.000 kg Diclofenac in Form von Tabletten verordnet. Darüber hinaus sind Diclofenac-haltige Präparate einschl. Salben und Cremes rezeptfrei erhältlich. Durch den kontinuierlicher Eintrag in Gewässer scheint Diclofenac eine größere Persistenz zu haben, als die Daten zur Abbaubarkeit nahe legen. So wird beispielsweise in einem derzeit durchgeführten Monitoring des Oberflächenwassers an der Ruhr längs des Flusslaufs eine nahezu konstante Konzentration des Arzneimittels Diclofenac gefunden, obwohl aufgrund des beständigen Eintrags mit dem geklärten Abwasser eine stetige Zunahme der Konzentrationen zu erwarten ist. Offensichtlich stellt sich zwischen Eintrag, teilweisem Abbau ($DT_{50} < 30$ d) und Verdünnung durch Abflusssteigerung ein Gleichgewicht ein, dass auch den Konzentrationsverlauf eines sehr persistenten Stoffes nach einem Eintrag über eine Punktquelle abbilden würde. In diesem Fall liegt es daher nahe, die hohen Einträge in Gewässer als ursächlich für das Auftreten im Trinkwasser zu sehen.

Ibuprofen-methylester

Die Klassifizierung dieses Ibuprofenmetaboliten erfolgte auf der Grundlage von modellierten Daten zu den chemisch-physikalischen Stoffeigenschaften. Würde man bei der Bewertung dieses Abbauproduktes so vorgehen wie oben als Alternative für die Modellierung beschrieben und bei Abbauprodukten grundsätzlich die gleiche Klassifizierung vornehmen wie bei den Muttersubstanzen, würde in diesem Falle eine Einordnung in eine höhere Klasse erfolgen.

Estradiol

Estradiol wird als natürliches Hormon vom Menschen beständig ausgeschieden (bei schwangeren Frauen bis zu $170 \mu\text{g}/(\text{Person} \cdot \text{d})$). Zusätzlich wirkt es auch als Antikonzep-

tivum und wird entsprechend eingesetzt. Im Jahr 2001 wurden in Deutschland 1.098 kg/a verkauft (LANUV 2007). Eine Abschätzung der menschlichen Ausscheidungsmengen ergibt für Deutschland im Jahr 1999 eine Menge von ca. 100 kg/a (KUNST ET AL. 2007). Es wird regelmäßig in Kläranlagenabläufen im ng/L-Bereich nachgewiesen, wobei die deutlich höheren Gehalte in Klärschlämmen auf die gute Sorbierbarkeit dieser Substanz hinweisen. Der $\log K_{OW}$ von 4,01 dieser Substanz liegt nur wenig über dem Diskriminierungskriterium. Es werden jedoch auch andere Angaben zum $\log K_{OW}$, 3,94, und der Wasserlöslichkeit, ca. 13 mg/L, gemacht, die in zu einer höheren Bewertung der Trinkwasserrelevanz führen (KUNST ET AL. 2007).

9.1.2 PBSM und deren Metabolite

Je nach Anwendung finden sich PBSM als Kontaminanten von Grund- und Oberflächenwasser. Typische Eintragspfade sind in der Abbildung 12 dargestellt.

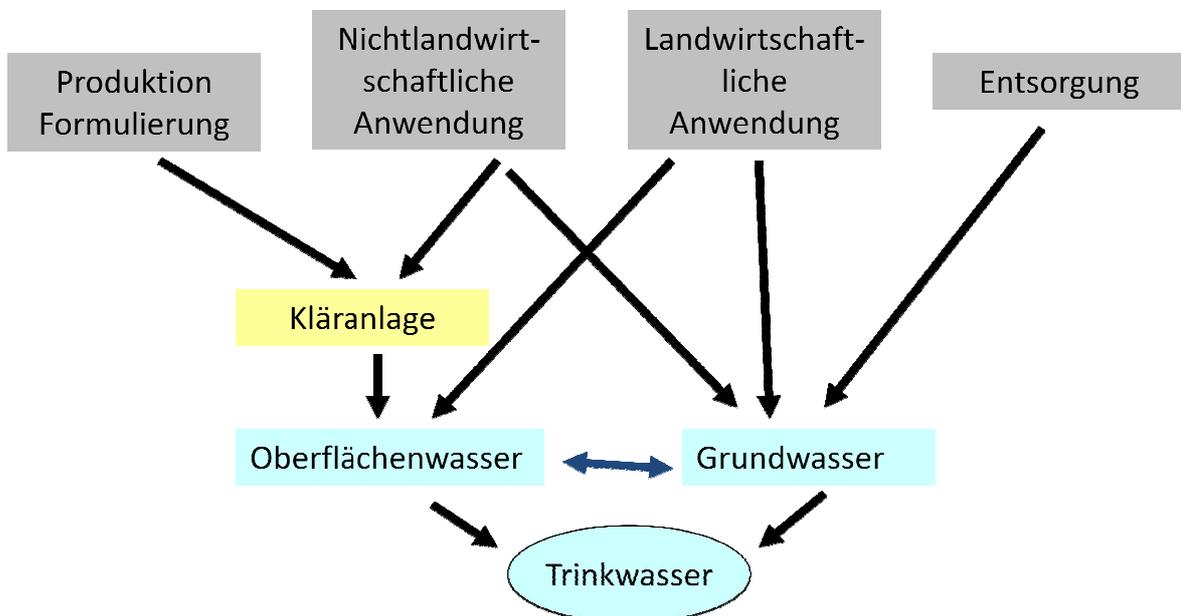


Abbildung 12: Haupteintragspfade von PBSM und deren Metaboliten

Mengenmäßig stehen hier vor allem die in der Land- und Forstwirtschaft eingesetzten Herbizide im Vordergrund, aber auch die Verwendung von Totalherbiziden im nichtlandwirtschaftlichen Bereich, also etwa zur Unkrautfreihaltung von Wegen, Flächen und Gleisanlagen haben eine Bedeutung als potentielle Kontaminationsquelle. Die Art der Anwendung ist dabei umweltoffen, so dass eine direkte Beeinträchtigung von Oberflächengewässern möglich ist. Nach einer Bodenpassage, die je nach Standort zu unterschiedlichen Abbau- und Umsetzungsprozessen beiträgt, gelangen PBSM auch ins Grundwasser. Entsprechend häufig sind Befunde in beiden Wassertypen und auch im Trinkwasser.

In Deutschland sind in den letzten Jahren mengenmäßig vor allem Herbizide wichtig, wobei besonders 2 Wirkstoffe, Isoproturon und Glyphosat in Deutschland mit mehr als 1.000 Mg/a eingesetzt werden (u. a. BVL 2009b). In Regionen mit erhöhten Anteilen von

Raps-, Rüben- oder Maisanbau werden vermehrt Metabolite einschlägiger Herbizide im Grundwasser gefunden (u. a. Chloridazon, Metolachlor, LUBW 2009).

Die Stoffe, die als Kontaminanten im Trinkwasser detektiert wurden (Anlage 1 und 2), umfassen einschließlich Metaboliten 44 PBSM, davon 17 Herbizide, 20 Herbizid-Metabolite, 1 Insektizid-Metabolit, 3 Nematizide und 1 Repellent.

Simazin

Bei der Bewertung ausschließlich nach chemisch-physikalischen Stoffkriterien weisen mit zwei Ausnahmen alle PBSM und deren Metabolite eine hohe Trinkwasserrelevanz auf. Eine der Ausnahmen stellt das Triazin-Herbizid Simazin dar, das auf Grund der im Vergleich zu anderen Triazinen besseren Abbaubarkeit als Stoff mit einer nur mittleren Trinkwasserrelevanz bewertet wurde.

Die Häufigkeit der Befunde, wie sie in der in Anlage 1 ausgewerteten Literatur dokumentiert wird, und die geographische Verbreitung der Befunde weisen allerdings darauf hin, diesem Stoff ein höheres Kontaminationspotential zuzusprechen. Auch wegen der hohen Zahl an Positivbefunden in Trinkwässern wurde die Zulassung von Simazin als PBSM zurückgezogen. Im Rahmen der Umsetzung der WRRL wurde dieser Stoff als prioritärer Stoff eingestuft. Ursächlich für das häufige Auftreten von Simazin in Wässern ist der großflächige Einsatz als Totalherbizid auch auf landwirtschaftlich nicht genutzten Flächen.

DCPA

Auch DCPA (Dacthal, Dimethyltetrachlorterephthalat) und seine Metabolite (Mono/Di-acid Degradate) werden trotz des hohen $\log K_{OW}$ – Wertes von DCPA in den USA relativ häufig in aus Oberflächenwasser und Grundwasser gewonnen Trinkwasser nachgewiesen (fast 700 Positivbefunde bei ca. 4000 Proben). Mit den eingesetzten Methoden werden die Muttersubstanz und die beiden wichtigsten Metaboliten gemeinsam bestimmt. Beide Metabolite, die durch Hydrolyse der beiden Ester-Bindungen entstehen, sind hoch mobil und sehr persistent (US EPA 2008). Die Positivbefunde gehen daher wahrscheinlich auf die Metabolit zurück. DCPA gehörte zu den in den USA am häufigsten verwendeten Herbiziden. Sein Einsatz ist aber auf Grund der häufigen Befunde in Trinkwasser mittlerweile strikt reguliert.

9.1.3 Lösemittel

Unter den 8 Lösemitteln, die in Trinkwässern detektiert wurden, sind vor allem chlorierte Verbindungen zu finden. Hierzu zählen auch solche, die auf Grund ihrer schon lange bekannten Relevanz für das Trinkwasser Eingang in die Trinkwasserverordnung gefunden haben.

Lösemittel werden in großem Umfang und bei einer Vielzahl von industriellen und gewerblichen Prozessen eingesetzt. Ein Eintrag in Oberflächengewässer erfolgt über belastete Abwässer, aber auch, auf Grund der meist hohen Flüchtigkeit der Verbindungen, über Niederschläge.

Im Grundwasser werden Lösemittel meist im Zuge von kontaminierten Standorten oder Leckagen detektiert.

Die in der Anlage 2 aufgeführten Lösemittel weisen mit einer Ausnahme (1,3,5-Trimethylbenzol) eine hohe Trinkwasserrelevanz auf.

9.1.4 Weichmacher

Auch bei den Weichmachern handelt es sich um vielfältig und in großem Umfang eingesetzte Hilfsstoffe, die in der Regel nur in Trinkwässern, die aus Oberflächengewässer oder oberflächenwasserbeeinflussten Grundwässern stammen, auftreten. Haupteintragspfade sind hier Abwässer und, auf Grund ihrer Flüchtigkeit, auch Niederschläge.

Bis auf Butylbenzylphthalat zeigen alle in Anlage 2 aufgelisteten Weichmacher eine mittlere bis hohe Trinkwasserrelevanz. Mögliche Gründe für das Auftreten dieses Stoffes in Trinkwasser (geringe Abbaubarkeit in anaeroben Bereichen) wurden bereits in Kapitel 5 diskutiert.

Auch bei den beiden Weichmachern (Dibutylphthalat, DEHP), die eine mittlere Trinkwasserrelevanz aufweisen, ist davon auszugehen, dass diese unter den Bedingungen einer anaeroben oder anoxischen Uferfiltrationsstrecke nicht ausreichend abgebaut werden und ihnen daher eine höhere Relevanz zukommt. (STAPLES ET AL. 1997; MADSEN ET AL. 1999)

9.2 Möglichkeiten weiterer Differenzierungen aufgrund der Stoffeigenschaften

9.2.1 Schlechter Abbau unter anaeroben Verhältnissen

Bei der Anwendung der Indexsumme ist zu berücksichtigen, dass ein niedriges K insbesondere dann eine zu geringe Trinkwasserrelevanz andeutet, wenn die betrachtete Substanz unter aeroben Bedingungen gut abbaubar und sich unter Bedingungen mit geringerer Sauerstoffverfügbarkeit persistenter verhält. Als Folge einer solchen Persistenz kann eine geringere Elimination während der Uferfiltration und der anschließenden Untergrundpassage in höheren Residualkonzentrationen im Trinkwasser resultieren. Deshalb ist bei Stoffen mit $K = 3$ und mithin $DT_{50} < 10$ d zusätzlich zu prüfen, ob eine abweichend längere Beständigkeit unter anaeroben Bedingungen eintritt.

Die entsprechende Berücksichtigung einer schlechten anaeroben Abbaubarkeit kann also zu Zuschlägen für die Indexzahlensumme K führen. Diese Zuschläge können auch pauschal vorgenommen werden, solange nur das mögliche Kontaminationspotential einer Verbindung identifiziert werden soll.

Bei Abschätzungen des Bioabbaus durch Modellierungen lassen sich unterschiedliche Milieubedingungen nur ungenügend berücksichtigen, so dass der Hinweis auf eine schlechte anaerobe Abbaubarkeit in der Regel experimentell oder aus Feldbeobachtungen vorliegen muss, um berücksichtigt zu werden. Allerdings lassen sich für spezifische Substanzgruppen entsprechende Tendenzen prognostizieren (z.B. Phthalate, Phenoxyalkankarbonsäuren).

9.2.2 Dissoziierbarkeit acider und basischer Molekülbestandteile

Aufgrund verschiedener funktionaler Gruppen (z.B. Carboxyl-, Hydroxi- oder Aminogruppen) sowie beeinflusst durch verschieden starke elektronegative Substituenten im Molekül können organische Spurenstoffe dissoziiert oder protoniert als Ionen vorliegen. Das ionare Auftreten kann zu einer veränderten Wechselwirkung mit sorptionsaktiven Strukturen im Untergrund führen (organische Substanz, Tonminerale), wobei eindeutig anionisch vorliegende Komponenten (z.B. starke organische Säuren) weniger zurückgehalten werden. Im hier betrachteten Zusammenhang führt diese Eigenschaft zur Erhöhung des Potentials als Trinkwasserkontaminante. Schwache Säuren, basische Substanzen sowie amphotere Verbindungen liegen bei den üblichen pH-Werten im Oberflächen- und Grundwasser zu meist undissoziiert oder kationisch vor, so dass ein möglicher Rückhalt im Untergrund insbesondere durch Wechselwirkungen mit Tonmineralen verbessert werden kann.

Auch für eine mögliche Dissoziierbarkeit lassen sich weitere Zuschläge bei der Indexsumme berücksichtigen. Obwohl dann die Summe durch insgesamt vier Stoffeigenschaften geprägt wird, kann dieses Instrument weiter seine Aufgabe erfüllen, Tendenzen einer gesteigerten Mobilität im Untergrund zu identifizieren, ohne dass der Gesamtrahmen der Indizierung erweitert werden muss.

Einen zusätzlichen Punkt im Bereich Mobilität kann eine Verbindung erhalten, sofern Hinweise darauf vorliegen, dass der negative dekadische Logarithmus der Dissoziationskonstante, pK_a den Wert von 7 unterschreitet. Dies zeigt an, dass dieser Stoff bei üblichen pH-Werten im Oberflächen- und Grundwasser dissoziiert vorliegt.

9.2.3 Weitere Abstufungen für die Ausprägung von Wasserlöslichkeit, Okta-nol-Wasser-Verteilungskoeffizient und Abbaubarkeit

Eine weitere Klassenunterteilung, die über die in Tabelle 6 angegebenen Grenzen hinaus geht, kann zu einer weiteren Differenzierung in der Bewertung des Kontaminationspotentials eines Stoffes führen. Diese zusätzliche, erweiterte Betrachtung der Ausprägung einzelner Stoffeigenschaften stellt nicht die grundsätzliche Bewertung einer niedrigen oder einer hohen Trinkwasserrelevanz in Frage, sondern dient einer weiteren Unterscheidung innerhalb der Bewertungsgruppe. So kann z.B. eine niedrige Trinkwasserrelevanz eines Stoffes mit einer Tendenz zu einem mittleren Kontaminationspotential ausgewiesen werden. Als Maß in der formalen, numerischen Umsetzung dient die Vergabe von zusätzlichen halben Indexpunkten, die ein entsprechendes Prädikat modifizieren.

Wasserlöslichkeit

So kann die Löslichkeit in Bereichen zwischen 1 und 10 mg/L anders bewertet werden als bei Werten unter 1 mg/L. Eine fragliche Verbindung, die zunächst mit der Indexsumme $K = 3$ und einer niedrigen Trinkwasserrelevanz bewertet wird, erhält dann für eine gegebene Löslichkeit zwischen 1 und 10 mg/L zusätzlich 0,5 Indexpunkte. Die resultierende Indexsumme K^* von 3,5 deutet an, dass diesem Stoff möglicherweise ein höheres Kontaminationspotential zugewiesen werden kann, als die primäre Bewertung anzeigt.

Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten

Ebenso zeigt ein Wert für $\log K_{OW}$ zwischen 2 und 3 eine geringere Sorptionsneigung an als ein $\log K_{OW}$ – Wert zwischen 3 und 4. Die Zusatzvergabe von einem halben Indexpunkt für diese Merkmalsausprägung führt ebenfalls zu einer Feineinstufung.

Persistenz

Neben diesen zusätzlichen Differenzierungen hinsichtlich der Mobilität lassen sich weitere Unterscheidungen hinsichtlich der Persistenz einfügen. Gemäß REACH (EU, 2006, Anhang XIII) werden Stoffe als persistent (P) eingestuft, wenn die DT_{50} im Süßwasser mehr als 40 d und im Boden mehr als 120 d beträgt. Ein Bewertung als sehr persistent (very persistent vP) erfolgt, wenn die DT_{50} im Süßwasser 60 d und im Boden 180 d übersteigt.

Eine unmittelbare Übertragung dieser Halbwertszeiten in Klassengrenzen für die Bewertung der Persistenz kann aus mehreren Gründen nicht als sinnvoll angesehen werden:

Unter dem Gesichtspunkt einer worst case Betrachtung eines Standorts mit Uferfiltration oder künstlicher Grundwasseranreicherung (vgl. Abbildung 2) kann die Verweilzeit in der Untergrundpassage weniger als 10 Tage betragen. Die wesentliche Unterscheidung hinsichtlich der Persistenz eines Stoffes in einem solchen System besteht in der Differenzierung zwischen schnell abbaubaren und wenig abbaubaren Substanzen, also einer DT_{50} unter 10 d oder über 10 d (vgl. Abschnitt 5.1.2).

Weder das Medium Süßwasser noch das Medium Boden und die hierfür ermittelten Halbwertszeiten können den zu erwartenden Abbauprozess während der Uferfiltration bzw. der künstlichen Grundwasseranreicherung und der nachfolgenden Untergrundpassage exakt widerspiegeln. Die DT_{50} -Werte geben lediglich eine Orientierung an. Entsprechend können zu eng gefasste Intervallgrenzen für die Klassierung der DT_{50} eine falsche Präzision in der Bewertung vorspielen.

Eine numerische Differenzierung der DT_{50} in Intervallen, die zwischen 40 und 60 d bzw. 120 und 180 d differenzieren, kann dann Probleme bereiten, wenn keine experimentell ermittelten Daten zur Halbwertszeit vorliegen, da bei Abschätzung der DT_{50} aus Modellen häufig nur qualitative Orientierungswerte erhalten werden, die erst in numerische Werte umgesetzt werden müssen. In der Regel gestattet die Streubreite der modellierten Orientierungswerte keine Differenzierung in kurzen Intervallen. Beispielweise lässt die Aussage „primärer Abbau in Wochen bis Monaten“ keine Unterscheidung zu, ob dieser Abbau mit einer Halbwertszeit von mehr als 40 oder 60 d erfolgt.

Liegen jedoch experimentell bestätigte Werte zur Halbwertszeit im Süßwasser oder im Boden vor, die gemäß Anhang XIII der REACH-Verordnung eine Charakterisierung als persistent oder sehr persistent herbei führen, so kann analog zu weiteren Differenzierung der Mobilitätsparameter eine weitere Unterscheidung bei der Persistenz getroffen werden. Wird ein Stoff als persistent eingestuft, bekommt er den Zuschlag eines halben Indexpunktes. Wird er als sehr persistent charakterisiert, wird die Bewertung der Persistenz um einen ganzen Indexpunkt heraufgesetzt.

9.2.4 Zusammenfassung und Test möglicher Feinabstufungen

Somit ergeben sich zusammenfassend folgende zusätzlichen Möglichkeiten die Grundbewertung der Trinkwasserrelevanz einer Substanz im Rahmen der Indexsummenbildung weiter zu differenzieren:

Ein abweichendes Abbauverhalten unter anaeroben Bedingungen wird in der Bewertung mit der abweichenden längeren DT_{50} mit den Klassengrenzen nach Tabelle 6 indiziert und bewertet.

Die mögliche Dissoziation einer Substanz wird dann mit einem zusätzlichen Indexpunkt bewertet, wenn der pK_a – Wert < 7 beträgt.

Eine Löslichkeit zwischen 1 und 10 mg/L wird mit einem zusätzlichen halben Indexpunkt bewertet und differenziert so das Grundergebnis der Bewertung.

Ein $\log K_{OW}$ zwischen 2 und 3 ergibt ebenfalls einen zusätzlichen halben Indexpunkt zur weiteren Differenzierung des Grundergebnisses.

Liegen experimentell ermittelte Daten zur DT_{50} vor, ergeben Halbwertszeiten einer Substanz im Süßwasser > 40 d oder im Boden > 120 d einen zusätzlichen halben Indexpunkt (persistent, PBT). Liegen die Voraussetzungen des Prädikats „sehr persistent“ (vPvB, DT_{50} im Süßwasser > 60 d oder im Boden > 180 d) vor, wird dies mit einem zusätzlichen Indexpunkt bewertet.

Werden die 151 im Trinkwasser gefundenen Stoffe nach ihrer Einstufung gemäß der Indexsumme K (Abbildung 8) hinsichtlich ihrer Löslichkeit, $\log K_{OW}$ und DT_{50} weiter differenzierend betrachtet, verschieben sich die Schwerpunkte hin zu Eingruppierungen in die Gruppen mit hoher und sehr hoher Trinkwasserrelevanz. Nach einer modifizierten Indexzahlensumme K^* lassen sich 13 Substanzen in die Gruppe mit mittlerer Trinkwasserrelevanz ($3,5 \leq K^* < 5$) einstufen. Die übrigen 138 Stoffe werden in die Kategorien hohe und sehr hohe Trinkwasserrelevanz ($5,5 \leq K^* < 8$ bzw. $8,5 \leq K^* < 13$) eingruppiert. Somit zeigen mehr als 90 % der betrachteten Stoffe eine hohe oder sehr hohe Trinkwasserrelevanz. Während die höheren Bewertungen im Bereich mittlerer Trinkwasserrelevanz vor allem auf einer weiteren Differenzierung hinsichtlich der Wasserlöslichkeit und des $\log K_{OW}$ – Wertes beruhen, erlangt bei hoher und sehr hoher Trinkwasserrelevanz die differenzierende Betrachtung der Abbaubarkeit eine herausragende Bedeutung. Insgesamt treten bei 74 Stoffen, ca. die Hälfte der betrachteten Substanzen, eine Erhöhung der Indexzahlensumme auf.

Werden zusätzlich Daten über eine schlechtere Abbaubarkeit unter anaeroben Milieubedingungen sowie eine mögliche Dissoziation unter Bildung von Anionen für eine Bewertung herangezogen, so sinkt die Gruppe mit mittlerer Trinkwasserrelevanz auf 11 Vertreter ab. Unter den 140 Stoffen mit hoher und sehr hoher Trinkwasserrelevanz nimmt die sehr hoch bewertete Gruppe mit 65 Substanzen einen noch größeren Stellenwert ein.

Anlagen

Anlage 1

Gefundene Belastungen im Trinkwasser

Lfd.-Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Rohwasser [ng/L]		Trinkwasser [ng/L]	
			MW	Max	MW	Max
1	Acetochlor	Herbizid			60	370
2	Acetochlor	Herbizid	k.A.	1000	k.A.	500
3	Acetochlor	Herbizid	k.A.	300	k.A.	120
4	Acetochlor ESA	Herbizid-Metabolit			ND	850
5	Acetochlor ESA	Herbizid-Metabolit	k.A.	k.A.	1100	1100
6	Acetochlor OA	Herbizid-Metabolit			132	550
7	Acetophenon	Duftstoff	k.A.	k.A.	k.A.	490
8	Acetylhexamethyltetrahydronaphtalin (AHTN)	Duftstoff	k.A.	200	68	k.A.
9	Acetylsalicylsäure	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	120
10	Alachlor	Herbizid	k.A.	k.A.	1,60	17
11	Alachlor	Herbizid	k.A.	9	k.A.	ND
12	Alachlor	Herbizid	k.A.	6	k.A.	5
13	Alachlor ESA	Herbizid-Metabolit			ND	740
14	Alachlor ESA	Herbizid-Metabolit	k.A.	k.A.	1100	1200
15	Alachlor OA	Herbizid-Metabolit			50	140
16	AMDOPH (1-acetyl-1-methyl-2-dimethyloxamoyl-2-ph	Arzneimittel-Metabolit	1200	k.A.	400	k.A.
17	Amidotrizoesäure	RKM	k.A.	k.A.	k.A.	250
18	AMPA	Herbizid-Metabolit	k.A.	k.A.	k.A.	1100
19	Androstenedion	Hormon	< 1	k.A.	< 1	k.A.
20	Anthrachinon	Chemikalie	k.A.	k.A.	k.A.	72
21	Atenolol	Arzneimittel	2,3	36	1,2	18
22	Atrazin	Herbizid			425	1900
23	Atrazin	Herbizid	k.A.	3000	k.A.	1050
24	Atrazin	Herbizid	k.A.	2000	k.A.	180
25	Atrazine	Herbizid	32	870	49	870
26	Bentazon	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	100
27	Bentazon	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	280
28	Benzol	Grundstoff	k.A.	k.A.	780	910
29	Benzol	Grundstoff	2961	10520	2116	25770

Lfd.-Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Rohwasser [ng/L]		Trinkwasser [ng/L]	
			MW	Max	MW	Max
30	Benzol	Chemikalie	k.A.	k.A.	30	4090
31	Benzol	Chemikalie	k.A.	k.A.	k.A.	960
32	Benzol	Chemikalie	k.A.	k.A.	4870	
33	Benzophenon	Personal Care Products	511	790	260	260
34	Benzophenon	Personal Care Products	k.A.	k.A.	k.A.	130
35	Benzothiazol	Chemikalie	k.A.	k.A.	k.A.	10
36	Benzotriazol	Chemikalie	k.A.	k.A.	k.A.	200
37	Bezafibrat	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	27
38	Bisphenol A	Weichmacher	6,1	14	25	25
39	Bisphenol A	Weichmacher	k.A.	k.A.	k.A.	420
40	Bisphenol A	Weichmacher	k.A.	360	220	k.A.
41	Butylbenzylphthalat	Weichmacher	622	1190	550	911
42	Butylbenzylphthalat	Weichmacher	k.A.	k.A.	k.A.	50
43	Butylhydroxyanisole	Personal Care Products	3500	3520	3450	3450
44	Butylhydroxytoluol (BHT)	? Konservierungsmittel	49	49	26	26
45	Carbamazepin	Arzneimittel	4,1	51	6	18
46	Carbamazepin	Arzneimittel	4,8	k.A.	< 1	k.A.
47	Carbamazepin	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	30
48	Carbamazepin	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	30
49	Carbamazepin	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	258
50	Carbamazepin	Arzneimittel	k.A.	600	140	k.A.
51	Clofibrinsäure	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	270
52	Clofibrinsäure	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	140
53	Codein	Arzneimittel	k.A.	10	30	k.A.
54	Cotinine	Nikotin Metabolit	k.A.	10	20	k.A.
55	Cyanazin	Herbizid			ND	12
56	D, 2,4-	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	110
57	DCPA mono/di-acid degradate	Herbizid + Metabolite	k.A.	k.A.	3600	39000

Lfd.-Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Rohwasser [ng/L]		Trinkwasser [ng/L]	
			MW	Max	MW	Max
58	DCPA mono/di-acid degradate	Herbizid + Metabolite	k.A.	k.A.	3500	190000
59	DDE, 4,4-	Insektizid-Metabolit	k.A.	k.A.	3000	3000
60	Deschlordimethenamid	Herbizid-Metabolit			ND	25
61	Deschloroacetochlor	Herbizid-Metabolit			ND	31
62	Deschloroacetylmetolachlor	Herbizid-Metabolit			2,5	35
63	Deschloroacetylmetolachlorpropanol	Herbizid-Metabolit			ND	22
64	Deschloroalachlor	Herbizid-Metabolit			ND	0,7
65	Deschlorometolachlor	Herbizid-Metabolit			4	30
66	Desethylatrazin	Herbizid-Metabolit			80	320
67	Desethylterbutylazin	Herbizid-Metabolit	k.A.	k.A.	k.A.	<100
68	Desisopropylatrazin	Herbizid-Metabolit	k.A.	k.A.	k.A.	<100
69	Desisopropylatrazin	Herbizid-Metabolit			24	75
70	Diatrizoat	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	85
71	Diazepam	Arzneimittel	0,43	0,47	0,33	0,33
72	Dibrom-3-chlorpropan, 1,2-	Nematizid	k.A.	k.A.	140	140
73	Dibrommethan	VOC	k.A.	k.A.	400	740
74	Dibutylphthalat	Weichmacher	k.A.	k.A.	k.A.	640
75	Dibutylphthalat	Weichmacher	5000	8340	2730	2730
76	Dichlorbenzamid, 2,6-	Herbizid-Metabolit	k.A.	k.A.	k.A.	230
77	Dichlorbenzamid, 2,6-	Herbizid-Metabolit	k.A.	k.A.	k.A.	>100
78	Dichlorbenzol, 1,2-	Lösemittel	ND	ND	ND	10
79	Dichlorbenzol, 1,3-	Chemikalie	k.A.	k.A.	100	100
80	Dichlorethan, 1,2-	Lösemittel	k.A.	k.A.	6730	81900
81	Dichlorethan, 1,2-	Lösemittel	6	30	19	530
82	Dichlorethen, 1,1- (1,1-DCE)	Lösemittel	k.A.	k.A.	4340	6000
83	Dichlorethen, 1,1- (1,1-DCE)	Lösemittel	12	150	19	380
84	Dichlormethan	Lösemittel	k.A.	k.A.	k.A.	531
85	Dichlormethan	Lösemittel	48	580	8	230
86	Dichlorpropan, 1,2-	Lösemittel	k.A.	k.A.	460	1710

Lfd.-Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Rohwasser [ng/L]		Trinkwasser [ng/L]	
			MW	Max	MW	Max
87	Dichlorpropan, 1,2-	Lösemittel	k.A.	k.A.	260	400
88	Dichlorpropen, cis-1,3-	Nematizid	k.A.	k.A.	180	3910
89	Dichlorpropen, trans-1,3-	Nematizid	k.A.	k.A.	480	11140
90	Diclofenac	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	6
91	Diethoxyoctylphenol	Detergenzien-Metabolit	k.A.	260	120	k.A.
92	Diethylenglykoldimethylether	Lösemittel	k.A.	k.A.	k.A.	150
93	Diethylhexylphthalat (DEHP)	Weichmacher	k.A.	k.A.	k.A.	60
94	Diethylhexylphthalat (DEHP)	Weichmacher	4310	5940	2560	2680
95	Diethylphthalat	Weichmacher	k.A.	k.A.	k.A.	200
96	Diethylphthalat	Weichmacher	1200	1490	2470	2470
97	Diethyltoluamid (DEET)	Repellant	k.A.	200	97	k.A.
98	Diethyltoluamid (DEET)	Repellant	85	110	63	93
99	Diethyltoluamid (DEET)	Repellant	2	k.A.	< 1	k.A.
100	Diethyltoluamid (DEET)	Repellant	k.A.	k.A.	k.A.	30
101	Diethyltoluamid (DEET)	Repellant	k.A.	k.A.	k.A.	66
102	Diflufenican	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	<100
103	Dilantin	Arzneimittel	< 1	k.A.	< 1	k.A.
104	Dimethenamid	Herbizid			2	67
105	Dimethylphthalat	Weichmacher	386	784	540	540
106	Dinitrotoluol, 2,4-	Chemikalie	k.A.	k.A.	333000	333000
107	Dioxan, 1,4-	Lösemittel	k.A.	k.A.	k.A.	500
108	Diuron	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	<100
109	Diuron	Herbizid	k.A.	k.A.	2100	2100
110	Diuron	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	80
111	DTPA (Diethylentriaminpentaacetic acid)	Komplexbildner	k.A.	k.A.	k.A.	9000
112	EDTA	Komplexbildner	k.A.	k.A.	k.A.	13600
113	EDTA	Komplexbildner	3500	k.A.	1000	k.A.
114	EDTA	Komplexbildner	5500	k.A.	6000	k.A.
115	EDTA	Komplexbildner	11000	k.A.	7000	k.A.
116	Estradiol	Hormon	k.A.	k.A.	k.A.	1
117	Ethinylestradiol	Hormon	k.A.	k.A.	k.A.	23
118	Ethylbenzol	Lösemittel	k.A.	k.A.	1530	5170

Lfd.-Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Rohwasser [ng/L]		Trinkwasser [ng/L]	
			MW	Max	MW	Max
119	Ethylbenzol	Lösemittel	1881	10600	634	7790
120	Ethylbenzol	Lösemittel	k.A.	k.A.	710	11050
121	Fenofibrat	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	210
122	Fluoxetin	Arzneimittel	0,8	3	0,71	0,82
123	Galaxolid	Duftstoff	3 n	48	31	33
124	Galxolid	Duftstoff	k.A.	k.A.	k.A.	82
125	Gemfibrozil	Arzneimittel	2,2	24	0,48	2,1
126	Glyphosat	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	460
127	Glyphosat	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	<100
128	Hydroxyacetochlor	Herbizid-Metabolit			30	64
129	Hydroxyalachlor	Herbizid-Metabolit			25	44
130	Hydroxymetolachlor	Herbizid-Metabolit			22	61
131	Hydrozimtsäure	Personal Care Products	10120	20300	10000	20100
132	Ibuprofen	Arzneimittel	15	k.A.	< 1	k.A.
133	Ibuprofen	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	3
134	Ibuprofen	Arzneimittel	17,5	17,5	8,5	8,5
135	Ibuprofen	Arzneimittel	5850	5850	930	1350
136	Ibuprofen-methylester	Arzneimittel-Metabolit	9220	9220	4950	4950
137	Iohexol	RKM	k.A.	k.A.	k.A.	60
138	Iomeprol	RKM	k.A.	k.A.	k.A.	10
139	Iopamidol	RKM	k.A.	k.A.	k.A.	100
140	Iopamidol	RKM	k.A.	k.A.	k.A.	79
141	Iopromid	RKM	k.A.	k.A.	k.A.	40
142	Iopromid	RKM	143	k.A.	< 1	k.A.
143	Iopromid	RKM	k.A.	k.A.	k.A.	86
144	Isoproturon	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	<100
145	Isoproturon	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	20
146	Kampfer	Duftstoff	k.A.	14	10	k.A.
147	Ketoprofen	Arzneimittel	7,0	7	8,0	8,0
148	Koffein	Genussmittel	k.A.	190	60	k.A.
149	Koffein	Genussmittel	45	k.A.	< 10	k.A.
150	Koffein	Genussmittel	k.A.	k.A.	k.A.	119

Lfd.-Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Rohwasser [ng/L]		Trinkwasser [ng/L]	
			MW	Max	MW	Max
151	Linuron	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	<100
152	Linuron	Herbizid	4,1	9,3	6,1	6,2
153	Meprobamat	Arzneimittel	8,2	73	5,7	42
154	Metamitron	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	100
155	Methyltertiärbutylether (MTBE)	Benzinadditiv	178	310	72	110
156	Methyltertiärbutylether (MTBE)	Benzinadditiv	k.A.	k.A.	21300	33000
157	Methyltertiärbutylether (MTBE)	Benzinadditiv	39	116	32	71
158	Methyltertiärbutylether (MTBE)	Benzinadditiv	k.A.	k.A.	89,00	712
159	Methyltertiärbutylether (MTBE)	Benzinadditiv	k.A.	k.A.	k.A.	12500
160	Methyltertiärbutylether (MTBE)	Benzinadditiv	k.A.	k.A.	17930	57800
161	Methyltertiärbutylether (MTBE)	Benzinadditiv	k.A.	k.A.	15700	49000
162	Metolachlor	Herbizid	17	81	16	27
163	Metolachlor	Herbizid			85	310
164	Metolachlor	Herbizid	k.A.	600	k.A.	300
165	Metolachlor	Herbizid	k.A.	k.A.	1800	2700
166	Metolachlor	Herbizid	k.A.	1000	k.A.	100
167	Metolachlor ESA	Herbizid-Metabolit	k.A.	k.A.	1800	4000
168	Metolachlor ESA	Herbizid-Metabolit			365	1500
169	Metolachlor OA	Herbizid-Metabolit	k.A.	k.A.	3000	3500
170	Metolachlor OA	Herbizid-Metabolit			80	220
171	Metolachlormorpholinon	Herbizid-Metabolit			ND	37
172	Metolachlorpropanol	Herbizid-Metabolit			ND	73
173	Metoprolol	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	2100
174	Molinat	Herbizid	k.A.	k.A.	5700	5700
175	N-(phenylsulfonyl)-sarcosin	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	105
176	Naphtalin	Chemikalie	k.A.	k.A.	210	600
177	Naphtalin	Chemikalie	k.A.	k.A.	250	750
178	N-Butylbenzolsulfonamid	Weichmacher	k.A.	k.A.	k.A.	50
179	Nitrobenzol	Chemikalie	k.A.	k.A.	100000	100000
180	Nitrobenzol	Chemikalie	k.A.	k.A.	21600	21600
181	N-Nitrosodibutylamin (NDBA)	Nitrosamin	k.A.	k.A.	8	21
182	N-Nitrosodiethylamin (NDEA)	Nitrosamin	k.A.	k.A.	12	85

Lfd.-Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Rohwasser [ng/L]		Trinkwasser [ng/L]	
			MW	Max	MW	Max
183	N-Nitrosodimethylamin (NDMA)	Nitrosamin	ND	ND	180	180
184	N-Nitrosodimethylamin (NDMA)	Nitrosamin	k.A.	k.A.	k.A.	2
185	N-Nitrosodimethylamin (NDMA)	Nitrosamin	k.A.	k.A.	10	630
186	N-Nitrosomethylethylamin (NMEA)	Nitrosamin	k.A.	k.A.	4	5
187	N-Nitrosopyrrolidin (NPYR)	Nitrosamin	k.A.	k.A.	5	24
188	Nonylphenol	Detergenzien-Metabolit	100	130	93	100
189	Nonylphenol, 4- (NP)	Detergenzien-Metabolit	k.A.	1400	1100	k.A.
190	Nonylphenoethoxylate+ Nonylphenolcarboxylsäuren	Detergenzien-Metabolit	17800	55300	10400	43300
191	Nonylphenoethoxylate+ Nonylphenolcarboxylsäuren	Detergenzien-Metabolit	8150	28600	70	490
192	Nonylphenoethoxylate+ Nonylphenolcarboxylsäuren	Detergenzien-Metabolit	4310	8520	920	2410
193	Nonylphenoethoxylate+ Nonylphenolcarboxylsäuren	Detergenzien-Metabolit	3740	9560	2800	6690
194	Nonylphenoethoxylate+ Nonylphenolcarboxylsäuren	Detergenzien-Metabolit	2370	5130	330	2880
195	Nonylphenoethoxylate+ Nonylphenolcarboxylsäuren	Detergenzien-Metabolit	2170	6010	1930	4610
196	Nonylphenoethoxylate+ Nonylphenolcarboxylsäuren	Detergenzien-Metabolit	1660	3710	930	3640
197	Nonylphenoethoxylate+ Nonylphenolcarboxylsäuren	Detergenzien-Metabolit	1640	5220	110	470
198	Nonylphenoethoxylate+ Nonylphenolcarboxylsäuren	Detergenzien-Metabolit	1550	2660	310	1040
199	Nonylphenoethoxylate+ Nonylphenolcarboxylsäuren	Detergenzien-Metabolit	850	2130	600	2090
200	Nonylphenoethoxylate+ Nonylphenolcarboxylsäuren	Detergenzien-Metabolit	140	730	20	80
201	Octylmethoxyzimtsäure	Personal Care Products (UV-Filter)	3090	5610	450	450
202	Oxybezon	Personal Care Products	< 1	k.A.	< 1	k.A.
203	PCB	Hydraulikflüssigkeit	180	370	79	220
204	Perchlorat	Chemikalie	k.A.	k.A.	10100	420000
205	Perchlorat	Chemikalie	k.A.	k.A.	9800	200000
206	PFBS	PFC	k.A.	k.A.	2,8	18
207	PFOA	PFC	k.A.	k.A.	10	78
208	PFOA	PFC	35	35	39	39
209	PFOA	PFC	k.A.	k.A.	68	84
210	PFOA	PFC	k.A.	k.A.	k.A.	520
211	PFOS	PFC	k.A.	k.A.	k.A.	20
212	PFOS	PFC	k.A.	k.A.	3,9	11
213	Phenazon	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	30
214	Phenazon	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	50

Lfd.-Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Rohwasser [ng/L]		Trinkwasser [ng/L]	
			MW	Max	MW	Max
215	Phenazon	Arzneimittel	3950	k.A.	120	k.A.
216	Phenytoin	Arzneimittel	5,1	29	6,2	19
217	Progesteron	Hormon	2,2	3,1	0,57	0,57
218	Prometon	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	96
219	Propazin	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	<100
220	Propiphenazone	Arzneimittel	1230	k.A.	900	k.A.
221	Propylbenzol, iso-	Chemikalie	k.A.	k.A.	110	110
222	RDX (Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine)	Sprengstoff	k.A.	k.A.	1100	1100
223	Simazin	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	60
224	Simazin	Herbizid	k.A.	k.A.	k.A.	<100
225	Simazin	Herbizid			10,00	190
226	Styrol	Chemikalie	k.A.	k.A.	24100	46400
227	Sulfamethoxazol	Arzneimittel	12	110	0,39	3
228	Sulfamethoxazol	Arzneimittel	k.A.	k.A.	k.A.	30
229	Sulfathiazole	Antibiotikum	k.A.	80	10	k.A.
230	Surfynol	Tensid	515	818	160	240
231	Terbufos-sulfon	Insektizid-Metabolit	k.A.	k.A.	420	420
232	Tetrachlorethan, 1,1,2,2-	Lösemittel	ND	10	1	10
233	Tetrachlorethen	Lösemittel	k.A.	k.A.	k.A.	180000
234	Tetrachlorethen	Lösemittel	k.A.	72	30	k.A.
235	Tetrachlormethan	Lösemittel	641	1710	438	2240
236	Tetrachlormethan	Lösemittel	k.A.	k.A.	k.A.	18
237	Tetrachloroethen (PCE)	Lösemittel	k.A.	k.A.	21200	28000
238	Toluol	Chemikalie	k.A.	k.A.	460	1850
239	Toluol	Chemikalie	k.A.	k.A.	250	1180
240	Toluol	Chemikalie	9410	33350	5156	28220
241	Toluol	Chemikalie	k.A.	k.A.	15800	63120
242	Tributylphosphat	Flammschutzmittel	k.A.	k.A.	k.A.	100
243	Tributylphosphat (TBP)	Flammschutzmittel	k.A.	140	180	k.A.
244	Trichlorbenzol, 1,2,3-	Lösemittel	k.A.	k.A.	150	160

Lfd.-Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Rohwasser [ng/L]		Trinkwasser [ng/L]	
			MW	Max	MW	Max
245	Trichlorbenzol, 1,2,4-	Lösemittel	k.A.	k.A.	330	920
246	Trichlorethan, 1,1,2-	Lösemittel	10	60	11	100
247	Trichlorethen	Lösemittel	k.A.	k.A.	k.A.	212000
248	Trichlorethen	Lösemittel	k.A.	k.A.	k.A.	1750
249	Trichlorethen	Lösemittel	k.A.	k.A.	k.A.	100
250	Trichloroethen	Lösemittel	k.A.	k.A.	7570	48820
251	Trichloroethen	Lösemittel	k.A.	k.A.	130	130
252	Trichloroethen (TCE)	Lösemittel	k.A.	k.A.	18600	21600
253	Trichloroethen (TCE)	Lösemittel	15	180	9	160
254	Trichloroethen, 1,1,1-	Lösemittel	k.A.	k.A.	690	5290
255	Triclosan	Arzneimittel	3	6,4	1,2	1,2
256	Triclosan	Arzneimittel	734	734	730	734
257	Triethylcitrat	Personal Care Products	k.A.	120	82	k.A.
258	Triethylcitrat	Personal Care Products	k.A.	k.A.	k.A.	62
259	Trimethylbenzol, 1,2,4-	Lösemittel	k.A.	k.A.	120	130
260	Trimethylbenzol, 1,3,5-	Lösemittel	k.A.	k.A.	410	410
261	Triphenylphosphinoxid		k.A.	k.A.	k.A.	130
262	Tris(2-butoxyethyl)phosphat	Weichmacher	k.A.	k.A.	k.A.	350
263	Tris(2-chlorethyl) phosphat	Flammschutzmittel	120	530	120	470
264	Tris(2-chlorethyl)phosphat (TCEP)	Weichmacher	k.A.	120	50	k.A.
265	Tris(2-chlorethyl)phosphat (TCEP)	Flammschutzmittel	25	k.A.	< 10	k.A.
266	Tris(2-chloroethyl)phosphat	Flammschutzmittel	k.A.	k.A.	k.A.	99
267	Tris(dichlorisopropyl) phosphat	Flammschutzmittel	180	720	210	510
268	Tris(dichlorisopropyl) phosphat	Flammschutzmittel	k.A.	k.A.	k.A.	250
269	Tris(dichlorisopropyl)phosphate (TDIP)	Flammschutzmittel	k.A.	110	70	k.A.
270	Vinyl Chloride	Grundstoff	ND	ND	14	250
271	Xylol	Lösemittel	k.A.	k.A.	450	580
272	Xylol	Lösemittel	k.A.	k.A.	480	770
273	Xylol, m,p-	Lösemittel	4815	25380	1843	16470

Lfd.-Nr.	Rohwasserherkunft	Untersuchungs-		Quelle
		gebiet	zeitraum	
1	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
2	Oberflächenwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
3	Oberflächenwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
4	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
5	k.A.	USA	2005-2009	US EPA (2009e)
6	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
7	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
8	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
9	k. A.	Niederlande	2007	Schriks et al. 2009
10	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
11	Oberflächenwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
12	Oberflächenwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
13	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
14	k.A.	USA	2005-2009	US EPA (2009e)
15	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
16	Grundwasser	Berlin	k.A.	Reddersen et al. 2002
17	k. A.	Niederlande	2006	Schriks et al. 2009
18	k. A.	Niederlande	2001	Schriks et al. 2009
19	Oberflächenwasser (See)	Seoul / Südkorea	2004 - 2005	Kim et al. 2007
20	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
21	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
22	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
23	Oberflächenwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
24	Oberflächenwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
25	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
26	Grundwasser	Deutschland	2005	Bayerisches Landesamt für Umwelt 2006
27	k. A.	Niederlande	2006	Schriks et al. 2009
28	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
29	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997

Lfd.-Nr.	Rohwasserherkunft	Untersuchungs-		Quelle
		gebiet	zeitraum	
30	k. A.	Taiwan	k.A.	Kuo et al. 1997
31	k. A.	Niederlande	2005	Schriks et al. 2009
32	Oberflächenwasser+Grundwasser	Kalifornien	1995 - 2001	Williams et al. 2002
33	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
34	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
35	k. A.	Niederlande	2007	Schriks et al. 2009
36	k. A.	Niederlande	2007	Schriks et al. 2009
37	k. A.	Deutschland	1996	LANUV 2007
38	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
39	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
40	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
41	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
42	k. A.	Leipzig	k.A.	Luks-Betleja et al. 2001
43	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
44	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
45	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
46	Oberflächenwasser (See)	Seoul / Südkorea	2004 - 2005	Kim et al. 2007
47	k. A.	Deutschland	1999	LANUV 2007
48	k. A.	Niederlande	2007	Schriks et al. 2009
49	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
50	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
51	Angereichertes GW und Uferfiltrat	Berlin	1992 - 1995	Heberer & Stan 1997
52	k. A.	Niederlande	2007	Schriks et al. 2009
53	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
54	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
55	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
56	k. A.	Niederlande	2002	Schriks et al. 2009
57	Oberflächenwasser	USA	2000-2005	US EPA (2009e)

Lfd.-Nr.	Rohwasserherkunft	Untersuchungs-		Quelle
		gebiet	zeitraum	
58	Grundwasser	USA	2000-2005	US EPA (2009e)
59	Grundwasser	USA	2000-2005	US EPA (2009e)
60	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
61	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
62	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
63	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
64	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
65	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
66	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
67	Grundwasser	Deustchland	2005	Bayerisches Landesamt für Umwelt 2006
68	Grundwasser	Deustchland	2005	Bayerisches Landesamt für Umwelt 2006
69	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
70	k. A.	Deutschland	1999	LANUV 2007
71	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
72	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
73	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
74	k. A.	Leipzig	k.A.	Luks-Betleja et al. 2001
75	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
76	k. A.	USA	2002	Schriks et al. 2009
77	Grundwasser	Deustchland	2005	Bayerisches Landesamt für Umwelt 2006
78	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997
79	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
80	k. A.	Taiwan	k.A.	Kuo et al. 1997
81	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997
82	Oberflächenwasser+Grundwasser	Kalifornien	1995 - 2001	Williams et al. 2002
83	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997
84	Oberflächenwasser oder Gemischt	Polen	k.A.	Polkoska et al. 2003
85	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997
86	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009

Lfd.-Nr.	Rohwasserherkunft	Untersuchungs-		Quelle
		gebiet	zeitraum	
87	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
88	k. A.	Taiwan	k.A.	Kuo et al. 1997
89	k. A.	Taiwan	k.A.	Kuo et al. 1997
90	k. A.	Deutschland	1996	LANUV 2007
91	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
92	k. A.	Niederlande	2007	Schriks et al. 2009
93	k. A.	Leipzig	k.A.	Luks-Betleja et al. 2001
94	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
95	k. A.	Katowice	k.A.	Luks-Betleja et al. 2001
96	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
97	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
98	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
99	Oberflächenwasser (See)	Seoul / Südkorea	2004 - 2005	Kim et al. 2007
100	k. A.	Niederlande	2005	Schriks et al. 2009
101	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
102	Grundwasser	Deutschland	2005	Bayerisches Landesamt für Umwelt 2006
103	Oberflächenwasser (See)	Seoul / Südkorea	2004 - 2005	Kim et al. 2007
104	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
105	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
106	Oberflächenwasser	USA	2000-2005	US EPA (2009e)
107	k. A.	Niederlande	k.A.	Schriks et al. 2009
108	Grundwasser	Deutschland	2005	Bayerisches Landesamt für Umwelt 2006
109	Oberflächenwasser	USA	2000-2005	US EPA (2009e)
110	k. A.	Niederlande	2005	Schriks et al. 2009
111	k. A.	Niederlande	2001	Schriks et al. 2009
112	k. A.	Niederlande	2001	Schriks et al. 2009
113	Oberflächenwasser	Deutschland	2001-2002	Schmidt et. al. 2004
114	Oberflächenwasser	Deutschland	2001-2002	Schmidt et. al. 2004
115	Oberflächenwasser	Deutschland	2001-2002	Schmidt et. al. 2004
116	k. A.	Deutschland	2000	LANUV 2007
117	k. A.	Deutschland	2000	LANUV 2007
118	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009

Lfd.-Nr.	Rohwasserherkunft	Untersuchungs-		Quelle
		gebiet	zeitraum	
119	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997
120	k. A.	Taiwan	k.A.	Kuo et al. 1997
121	k. A.	Deutschland	2000	LANUV 2007
122	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
123	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
124	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
125	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
126	k. A.	Niederlande	2006	Schriks et al. 2009
127	Grundwasser	Deustchland	2005	Bayerisches Landesamt für Umwelt 2006
128	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
129	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
130	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
131	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
132	Oberflächenwasser (See)	Seoul / Südkorea	2004 - 2005	Kim et al. 2007
133	k. A.	Deutschland	1996	LANUV 2007
134	Oberflächenwasser	Turku (Finland)	2004	Vieno et al. 2005
135	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
136	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
137	k. A.	Niederlande	2007	Schriks et al. 2009
138	k. A.	Niederlande	2006	Schriks et al. 2009
139	k. A.	Niederlande	2006	Schriks et al. 2009
140	k. A.	Deutschland	1999	LANUV 2007
141	k. A.	Niederlande	2007	Schriks et al. 2009
142	Oberflächenwasser (See)	Seoul / Südkorea	2004 - 2005	Kim et al. 2007
143	k. A.	Deutschland	1999	LANUV 2007
144	Grundwasser	Deustchland	2005	Bayerisches Landesamt für Umwelt 2006
145	k. A.	Niederlande	2004	Schriks et al. 2009
146	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
147	Oberflächenwasser	Turku (Finland)	2004	Vieno et al. 2005
148	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
149	Oberflächenwasser (See)	Seoul / Südkorea	2004 - 2005	Kim et al. 2007
150	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004

Lfd.-Nr.	Rohwasserherkunft	Untersuchungs-		Quelle
		gebiet	zeitraum	
151	Grundwasser	Deutschland	2005	Bayerisches Landesamt für Umwelt 2006
152	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
153	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
154	Grundwasser	Deutschland	2005	Bayerisches Landesamt für Umwelt 2006
155	Uferfiltrat	Rhein	1999 - 2001	Achten et al. 2002
156	Oberflächenwasser	USA	2000-2005	US EPA (2009e)
157	Uferfiltrat	Frankfurt Main	1999 - 2001	Achten et al. 2002
158	Uferfiltrat, Grundwasser, kGW	Deutschland	200-2003	Kolb & Püttmann 2006
159	k. A.	Niederlande	2006	Schriks et al. 2009
160	Oberflächenwasser+Grundwasser	Kalifornien	1995 - 2001	Williams et al. 2002
161	Grundwasser	USA	2000-2005	US EPA (2009e)
162	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
163	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
164	Oberflächenwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
165	k.A.	USA	2005-2009	US EPA (2009e)
166	Oberflächenwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
167	k.A.	USA	2005-2009	US EPA (2009e)
168	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
169	k.A.	USA	2005-2009	US EPA (2009e)
170	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
171	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
172	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
173	k. A.	Niederlande	2005	Schriks et al. 2009
174	Oberflächenwasser	USA	2000-2005	US EPA (2009e)
175	Angereichertes GW und Uferfiltrat	Berlin	1993 - 1995	Heberer & Stan 1997
176	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
177	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
178	k. A.	Niederlande	2004	Schriks et al. 2009
179	Oberflächenwasser	USA	2000-2005	US EPA (2009e)
180	Grundwasser	USA	2000-2005	US EPA (2009e)
181	k.A.	USA	2005-2009	US EPA (2009e)
182	k.A.	USA	2005-2009	US EPA (2009e)

Lfd.-Nr.	Rohwasserherkunft	Untersuchungs-		Quelle
		gebiet	zeitraum	
183	Oberflächenwasser	Alberta, Canada	2003	Charrois et al. 2004
184	k. A.	Niederlande	2007	Schriks et al. 2009
185	k.A.	USA	2005-2009	US EPA (2009e)
186	k.A.	USA	2005-2009	US EPA (2009e)
187	k.A.	USA	2005-2009	US EPA (2009e)
188	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
189	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
190	Oberflächenwasser	Kanada	2000 - 2001	Berryman et al. 2004
191	Oberflächenwasser	Kanada	2000 - 2001	Berryman et al. 2004
192	Oberflächenwasser	Kanada	2000 - 2001	Berryman et al. 2004
193	Oberflächenwasser	Kanada	2000 - 2001	Berryman et al. 2004
194	Oberflächenwasser	Kanada	2000 - 2001	Berryman et al. 2004
195	Oberflächenwasser	Kanada	2000 - 2001	Berryman et al. 2004
196	Oberflächenwasser	Kanada	2000 - 2001	Berryman et al. 2004
197	Oberflächenwasser	Kanada	2000 - 2001	Berryman et al. 2004
198	Oberflächenwasser	Kanada	2000 - 2001	Berryman et al. 2004
199	Oberflächenwasser	Kanada	2000 - 2001	Berryman et al. 2004
200	Oberflächenwasser	Kanada	2000 - 2001	Berryman et al. 2004
201	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
202	Oberflächenwasser (See)	Seoul / Südkorea	2004 - 2005	Kim et al. 2007
203	Oberflächenwasser	Orly (F)	1987	Chevreuil & Granier 1991
204	Oberflächenwasser	USA	2000-2005	US EPA (2009e)
205	Grundwasser	USA	2000-2005	US EPA (2009e)
206	k. A.	China	2006 - 2008	Mak et al. 2009
207	k. A.	China	2006 - 2008	Mak et al. 2009
208	Oberflächenwasser	New Jersey (21)	2006	Post et al. 2009
209	Grundwasser	New Jersey (8A)	2007 - 2008	Post et al. 2009
210	k. A.	Deutschland	2005-2006	Schriks et al. 2009
211	k. A.	Niederlande	2005-2006	Schriks et al. 2009
212	k. A.	China	2006 - 2008	Mak et al. 2009
213	k. A.	Niederlande	2005	Schriks et al. 2009
214	k. A.	Deutschland	1999	LANUV 2007

Lfd.-Nr.	Rohwasserherkunft	Untersuchungs-		Quelle
		gebiet	zeitraum	
215	Grundwasser	Berlin	k.A.	Reddersen et al. 2002
216	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
217	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
218	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
219	Grundwasser	Deustchland	2005	Bayerisches Landesamt für Umwelt 2006
220	Grundwasser	Berlin	k.A.	Reddersen et al. 2002
221	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
222	k.A.	USA	2005-2009	US EPA (2009e)
223	k. A.	Niederlande	2004	Schriks et al. 2009
224	Grundwasser	Deustchland	2005	Bayerisches Landesamt für Umwelt 2006
225	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2003-2004	Hladik et al. 2008
226	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
227	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
228	k. A.	Niederlande	2007	Schriks et al. 2009
229	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
230	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
231	k.A.	USA	2005-2009	US EPA (2009e)
232	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997
233	Grundwasser	Finnland	1992	Vartiainen et al. 1993
234	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
235	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997
236	Oberflächenwasser oder Gemischt	Polen	k.A.	Polkoska et al. 2003
237	Oberflächenwasser+Grundwasser	Kalifornien	1995 - 2001	Williams et al. 2002
238	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
239	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
240	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997
241	k. A.	Taiwan	k.A.	Kuo et al. 1997
242	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
243	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
244	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009

		Untersuchungs-		
Lfd.-Nr.	Rohwasserherkunft	gebiet	zeitraum	Quelle
245	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
246	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997
247	Grundwasser	Finnland	1992	Vartiainen et al. 1993
248	k. A.	Niederlande	2005	Schriks et al. 2009
249	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
250	k. A.	Taiwan	k.A.	Kuo et al. 1997
251	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
252	Oberflächenwasser+Grundwasser	Kalifornien	1995 - 2001	Williams et al. 2002
253	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997
254	k. A.	Taiwan	k.A.	Kuo et al. 1997
255	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
256	Oberflächenwasser	Südkalifornien	2001 - 2002	Loraine & Pettigrove 2006
257	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
258	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
259	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
260	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
261	k. A.	Niederlande	2007	Schriks et al. 2009
262	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
263	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
264	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
265	Oberflächenwasser (See)	Seoul / Südkorea	2004 - 2005	Kim et al. 2007
266	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
267	Oberflächenwasser+Grundwasser	USA	2006 - 2007	Benotti et al. 2009
268	Oberflächenwasser	USA	2001	Stackelberg et al. 2004
269	Oberflächenwasser	USA	2003	Stackelberg et al. 2007
270	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997
271	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
272	k. A.	Kuwait	2003 - 2005	Al-Mudhaf et al. 2009
273	Oberflächenwasser	Korea	1993 - 1995	Chung et al. 1997

Anlage 2

Stoffkenndaten von Substanzen, die im Trinkwasser nachgewiesen wurden

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Lit.-Stellen	CAS-Nr.
			Anzahl	
1	Acetochlor	Herbizid	1	34256-82-1
2	Acetochlor ESA	Herbizid-Metabolit	2	187022-11-3
3	Acetochlor OA	Herbizid-Metabolit	1	194992-44-4
4	Acetophenon	Duftstoff	1	98-86-2
5	Acetylhexamethyltetrahydronaphthalin (AHTN)	Duftstoff	1	1506-02-1
6	Acetylsalicylsäure	Arzneimittel	1	50-78-2
7	Alachlor	Herbizid	1	15972-60-8
8	Alachlor ESA	Herbizid-Metabolit	2	142363-53-9
9	Alachlor OA	Herbizid-Metabolit	1	171262-17-2
10	AMDOPH (1-acetyl-1-methyl-2-dimethyloxamoyl-2-phenylhydrazide)	Arzneimittel-Metabolit	1	
11	Amidotrizesäure	RKM	2	117-96-4
12	AMPA	Herbizid-Metabolit	1	77521-29-0
13	Androstenedion	Hormon	1	63-05-8
14	Anthrachinon	Chemikalie	1	84-65-1
15	Atenolol	Arzneimittel	1	29122-68-7
16	Atrazin	Herbizid	1	1912-24-9
17	Bentazon	Herbizid	2	25057-89-0
18	Benzol	Chemikalie	5	71-43-2
19	Benzophenon	Personal Care Products	2	119-61-9
20	Benzothiazol	Vulkanisation	1	95-16-9
21	Benzotriazol	Kompexbildner	1	95-14-7
22	Bezafibrat	Arzneimittel	1	41859-67-0
23	Bisphenol A	Weichmacher	2	80-05-7
24	Butylbenzylphthalat	Weichmacher	2	85-68-7
25	Butylhydroxyanisol	Personal Care Products	1	8003-24-5
26	Butylhydroxytoluol (BHT)	Konservierungsmittel	1	128-37-0
27	Carbamazepin	Arzneimittel	6	298-46-4
28	Clofibrinsäure	Arzneimittel	2	882-09-7
29	Codein	Arzneimittel	1	76-57-3

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Lit.-Stellen	CAS-Nr.
			Anzahl	
30	Cotinine	Nikotin Metabolit	1	486-56-6
31	Cyanazin	Herbizid	1	21725-46-2
32	D, 2,4-	Herbizid	1	94-75-7
33	DCPA (Dimethyltetrachlorterephthalat) mono/di-acid degradate	Herbizid + Metabolite	1	1861-32-1
34	DDE, 4,4-	Insektizid-Metabolit	1	72-55-9
35	Deschloracetochlor	Herbizid-Metabolit	1	
36	Deschloracetylmethylachlor	Herbizid-Metabolit	1	
37	Deschloracetylmethylachlorpropanol	Herbizid-Metabolit	1	
38	Deschlormalachlor	Herbizid-Metabolit	1	
39	Deschlormethylachlor	Herbizid-Metabolit	1	
40	Desethylatrazin	Herbizid-Metabolit	1	6190-65-4
41	Desethylterbutylazin	Herbizid-Metabolit	1	30125-63-4
42	Desisopropylatrazin	Herbizid-Metabolit	2	1007-28-9
43	Diazepam	Arzneimittel	1	439-14-5
44	Dibrom-3-chlorpropan, 1,2-	Nematizid	1	96-12-8
45	Dibrommethan	VOC	1	74-95-3
46	Dibutylphthalat	Weichmacher	2	84-74-2
47	Dichlorbenzamid, 2,6-	Herbizid-Metabolit	1	2008-58-4
48	Dichlorbenzol, 1,2-	Lösemittel	1	95-50-1
49	Dichlorbenzol, 1,3-	Chemikalie	1	541-73-1
50	Dichlorethan, 1,2-	Lösemittel	2	107-06-2
51	Dichlorethen, 1,1- (1,1-DCE)	Lösemittel	2	75-35-4
52	Dichlormethan	Lösemittel	2	75-09-2
53	Dichlorpropan, 1,2-	Lösemittel	1	78-87-5
54	Dichlorpropen, cis-1,3-	Nematizid	1	542-75-6
55	Dichlorpropen, trans-1,3-	Nematizid	1	542-75-6
56	Diclofenac	Arzneimittel	1	15307-86-5
57	Diethoxyoctylphenol (OP2EO)	Detergenzien-Metabolit	1	26636-32-8
58	Diethylenglykoldimethylether	Lösemittel	1	111-96-6
59	Diethylhexylphthalat (DEHP)	Weichmacher	2	117-81-7

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Lit.-Stellen	CAS-Nr.
			Anzahl	
60	Diethylphthalat	Weichmacher	2	84-66-2
61	Diethyltoluamid (DEET)	Repellent	5	134-62-3
62	Diflufenican	Herbizid	1	83164-33-4
63	Dimethenamid	Herbizid	1	87674-68-8
64	Dimethylphthalat	Weichmacher	1	131-11-3
65	Dinitrotoluol, 2,4-	Chemikalie	1	121-14-2
66	Dioxan, 1,4-	Lösemittel	1	123-91-1
67	Diuron	Herbizid	3	330-54-1
68	DTPA (Diethylentriaminpentaacetic acid)	Komplexbildner	1	67-43-6
69	EDTA	Komplexbildner	2	60-00-4
70	Estradiol	Hormon	1	50-28-2
71	Ethinylestradiol	Hormon	1	57-63-6
72	Ethylbenzol	Lösemittel	3	100-41-4
73	Fenofibrat	Arzneimittel	1	49562-28-9
74	Fluoxetin	Arzneimittel	1	59333-67-4
75	Galaxolid	Duftstoff	2	1222-05-5
76	Gemfibrozil	Arzneimittel	1	25812-30-0
77	Glyphosat	Herbizid	2	1071-83-6
78	Hydroxyacetochlor	Herbizid-Metabolit	1	
79	Hydroxyalachlor	Herbizid-Metabolit	1	56681-55-1
80	Hydroxymetolachlor	Herbizid-Metabolit	1	
81	Hydrozimsäure	Personal Care Products	1	501-52-0
82	Ibuprofen	Arzneimittel	1	15687-27-1
83	Ibuprofen-methylester	Arzneimittel-Metabolit	4	61566-34-5
84	Iohexol	RKM	1	66108-95-0
85	Iomeprol	RKM	1	78649-41-9
86	Iopamidol	RKM	1	60166-93-0
87	Iopromid	RKM	3	73334-07-3
88	Isoproturon	Herbizid	2	34123-59-6
89	Kampfer	Duftstoff	1	464-48-2

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Lit.-Stellen	CAS-Nr.
			Anzahl	
90	Ketoprofen	Arzneimittel	1	22071-15-4
91	Koffein	Genussmittel	3	58-08-2
92	Linuron	Herbizid	2	330-55-2
93	Meprobumat	Arzneimittel	1	57-53-4
94	Methyltertiärbutylether (MTBE)	Benzinadditiv	6	1634-04-4
95	Metolachlor	Herbizid	2	51218-45-2
96	Metolachlor ESA	Herbizid-Metabolit	2	171118-09-5
97	Metolachlor OA	Herbizid-Metabolit	2	152019-73-3
98	Metolachlormorpholinon	Herbizid-Metabolit	1	
99	Metolachlorpropanol	Herbizid-Metabolit	1	
100	Metoprolol	Arzneimittel	1	37350-58-6
101	Molinat	Herbizid	1	2212-67-1
102	N-(phenylsulfonyl)-sarcosin	Arzneimittel	1	
103	Naphtalin	Chemikalie	1	91-20-3
104	N-Butylbenzolsulfonamid	Weichmacher	1	3622-84-2
105	Nitrobenzol	Chemikalie	2	98-95-3
106	N-Nitrosodibutylamin (NDBA)	Nitrosamin	1	924-16-3
107	N-Nitrosodiethylamin (NDEA)	Nitrosamin	1	55-18-5
108	N-Nitrosodimethylamin (NDMA)	Nitrosamin	3	62-75-9
109	N-Nitrosomethylethylamin (NMEA)	Nitrosamin	1	10595-95-6
110	N-Nitrosopyrrolidin (NPYR)	Nitrosamin	1	930-55-2
111	Nonylphenol	Detergenzien-Metabolit	2	25154-52-3
112	Nonylphenoethoxylate (NP2EO)	Detergenzien-Metabolit	1	
113	Octylmethoxizimtsäure	Personal Care Products (UV-Filter)	1	5466-77-3
114	Oxybenzon	Personal Care Products	1	131-57-7
115	PCB	Hydraulikflüssigkeit	1	1336-36-3
116	PFBS	PFC	1	375-73-5
117	PFOA	PFC	3	335-67-1
118	PFOS	PFC	2	1763-23-1
119	Phenazon	Arzneimittel	3	60-80-0
120	Phenytoin	Arzneimittel	1	57-41-0
121	Progesteron	Hormon	1	1336-36-3

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Lit.-Stellen	CAS-Nr.
			Anzahl	
122	Prometon	Herbizid	1	14797-73-0
123	Propazin	Herbizid	1	375-73-5
124	Propiphenazon	Arzneimittel	1	335-67-1
125	Propylbenzol, iso-	Chemikalie	1	1763-23-1
126	RDX (Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazin)	Sprengstoff	1	121-82-4
127	Simazin	Herbizid	2	122-34-9
128	Styrol	Chemikalie	1	100-42-5
129	Sulfamethoxazol	Arzneimittel	2	723-46-6
130	Sulfathiazol	Antibiotikum	1	72-14-0
131	Surfynol	Tensid	1	8043-35-4
132	Terbufos-sulfon	Insektizid-Metabolit	1	56070-16-7
133	Tetrachlorethan, 1,1,2,2-	Lösemittel	1	79-34-5
134	Tetrachlorethen	Lösemittel	3	127-18-4
135	Tetrachlormethan	Lösemittel	2	56-23-5
136	Toluol	Chemikalie	3	108-88-3
137	Tributylphosphat	Flammschutzmittel	2	126-73-8
138	Trichlorbenzol, 1,2,3-	Lösemittel	1	87-61-6
139	Trichlorbenzol, 1,2,4-	Lösemittel	1	120-82-1
140	Trichlorethan, 1,1,2-	Lösemittel	1	79-00-5
141	Trichlorethen	Lösemittel	7	79-01-6
142	Triclosan	Arzneimittel	2	3380-34-5
143	Triethylcitrat	Personal Care Products	2	77-93-0
144	Trimethylbenzol, 1,2,4-	Lösemittel	1	120-82-1
145	Trimethylbenzol, 1,3,5-	Lösemittel	1	108-70-3
146	Triphenylphosphinoxid	Chemikalie	1	791-28-6
147	Tris(2-butoxyethyl)phosphat	Weichmacher	1	78-51-3
148	Tris(2-chlorethyl)phosphat	Flammschutzmittel	4	140-08-9
149	Tris(dichlorisopropyl) phosphat	Flammschutzmittel	2	13674-87-8
150	Vinyl Chloride	Chemikalie	1	75-01-4
151	Xylol, m, p-	Lösemittel	2	1330-20-7

Lfd. Nr.	Wasserlöslichkeit	Log K _{OW}	DT ₅₀	DT ₅₀	DT ₅₀	DT ₅₀	Indezzahlen			Index- summe K	
	[mg/L]			[d]	Matrix 1	[d]	Matrix 2	I _S	I _{Kow}		I _{DT50}
1	233	3,0	4	k.A.				3	2	1	6
2	47	3,37	30	k.A.				2	2	2	6
3	921	1,55	59	k.A.				3	3	2	8
4	6.130	1,6	< 10	k.A.				4	3	1	8
5	1,3	5,8	365	k.A.				1	1	3	5
6	4.600	1,19	< 6	k.A.				4	3	1	8
7	240	3,52	< 14	Boden				3	2	2	7
8	444	3,40	30	k.A.				3	2	2	7
9	921	1,55	30	k.A.				3	3	2	8
10	4.351	-0,76	30	k.A.				4	5	2	11
11	0,80	1,37	> 30	k.A.				1	3	2	6
12	5.800	-2,2	30	k.A.	145	Boden		4	5	2	11
13	58	2,75	151	k.A.				2	2	3	7
14	1,4	3,39	25	Boden				1	2	2	5
15	13.300	0,16	30	k.A.				4	4	2	10
16	35	2,50	< 134	W				2	2	3	7
17	500	2,34	< 50	k.A.				3	2	2	7
18	820	1,56	< 16	OW, aerob	< 720	OW, anaerob, GW		3	3	2	8
19	137	3,18	> 100	k.A.				3	2	3	8
20	4.300	2,01	< 10	OW, aerob				4	2	1	7
21	19.800	1,44	> 100	k.A.				4	3	3	10
22	> 100	4,25	30	k.A.				3	1	2	6
23	120	3,32	< 10	OW, aerob	> 120	Sediment, anaerob		3	2	1	6
24	2,7	4,73	< 2	OW, aerob	< 180	Sediment, anaerob		1	1	1	3
25	213	3,50	30	k.A.				3	2	2	7
26	0,60	5,10	38	k.A.	< 1	Boden		1	1	2	4
27	18	2,45	< 100	k.A.	328	k.A.		2	2	3	7
28	583	2,57	119	W/Sediment				3	2	3	8
29	9.000	1,19	30	k.A.				4	3	2	9

Lfd. Nr.	Wasserlöslichkeit	Log K _{OW}	DT ₅₀	DT ₅₀		DT ₅₀	DT ₅₀			Indexzahlen			Index- summe K
	[mg/L]			[d]	Matrix 1		[d]	Matrix 2	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}		
30	999.000	0,07	30	k.A.					4	4	2	10	
31	170	2,22	< 200	W					3	2	3	8	
32	677	2,81	< 50	W					3	2	2	7	
33	0,50	4,28	30	k.A.					1	1	2	4	
34	0,04	6,51	11425	k.A.					1	1	4	6	
35	119	2,79	30	k.A.					3	2	2	7	
36	ca. 530	ca. 3,13	ca. 78	k.A.					3	2	2	7	
37	ca. 530	ca. 3,13	ca. 78	k.A.					3	2	2	7	
38	119	2,79	30	k.A.					3	2	2	7	
39	129	2,66	30	k.A.					3	2	2	7	
40	3.200	1,51	45	k.A.					4	3	2	9	
41	532	2,23	71	k.A.					3	2	2	7	
42	670	1,15	60	k.A.					3	3	2	8	
43	50	2,82	30	k.A.					2	2	2	6	
44	1.230	2,96	360	k.A.					4	2	3	9	
45	11.900	1,70	> 150	aerob, Boden					4	3	3	10	
46	10	4,31	< 14	OW					2	1	2	5	
47	2.730	0,77	138	k.A.					4	4	3	11	
48	118	3,40	< 300	GW	> 1000	GW, anoxisch			3	2	3	8	
49	111	3,53	< 7	W	> 1000	GW, anoxisch			3	2	1	6	
50	8.690	1,76	< 180	OW	schnell	UF			4	3	3	10	
51	2.420	2,13	4693	Boden	173	GW			4	2	4	10	
52	13.200	1,25	< 1	OW					4	3	1	8	
53	2.800	2,00	> 167	OW					4	3	3	10	
54	28.000	2,03	38	?	non biodegradable (MITI I)				4	2	2	8	
55	28.000	2,03	38	?					4	2	2	8	
56	2,4	4,51	< 30	OW	45	k.A.			1	1	2	4	
57	13	2,9	30	k.A.					2	2	2	6	
58	1.000.000	-0,36	> 100	k.A.					4	5	3	12	
59	0,27	2,95	< 30	W	< 389	W, anaerob			1	2	2	5	

Lfd. Nr.	Wasserlöslichkeit	Log K _{OW}	DT ₅₀	DT ₅₀		DT ₅₀	DT ₅₀		Indexzahlen			Index- summe K
	[mg/L]			[d]	Matrix 1		[d]	Matrix 2	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}	
60	1.080	2,42	<	56	OW	<	112	GW	4	2	2	8
61	912	2,18		100	k.A.				3	2	3	8
62	0,05	4,90		542	Boden				1	1	4	6
63	1.200	2,15	<	33	W				4	2	2	8
64	4.000	1,60	<	7	OW				4	3	1	8
65	270	1,98	<	180	OW	<	10	GW anaerob	3	3	3	9
66	1.000.000	-0,32	<	180	OW				4	5	3	12
67	36	2,68	>	240	W				2	2	3	7
68	4.800	-4,91		30	k.A.				4	5	2	11
69	400	-5,01	>	100	k.A.				3	5	3	11
70	3,6	4,01		38	?				1	1	2	4
71	11	3,67		60	?				2	2	2	6
72	160	3,13		15	W				3	2	2	7
73	0,80	5,19		30	k.A.				1	1	2	4
74	0,90	4,05		30	k.A.				1	1	2	4
75	1,8	5,9		150	k.A.				1	1	3	5
76	8,4	4,77		30	k.A.				1	1	2	4
77	10.500	-3,20	<	10	W				4	5	1	10
78	352	1,9		30	k.A.				3	3	2	8
79	1.112	1,41		30	k.A.				4	3	2	9
80	378	1,77		30	k.A.				3	3	2	8
81	5.900	1,84		30	k.A.				4	3	2	9
82	21	3,97	>	30	GW	>	30	OW	2	2	2	6
83	7	4,4		30	k.A.				1	1	2	4
84	107	-3,05		30	k.A.				3	5	2	10
85	7,4	-1,35		30	k.A.				1	5	2	8
86	140.000	-2,42		30	k.A.				4	5	2	11
87	24	-2,05	<	30	k.A.				2	5	2	9
88	70	3,50		61	W				2	2	2	6
89	706	3		30	k.A.				3	2	2	7

Lfd. Nr.	Wasserlöslichkeit	Log K _{OW}	DT ₅₀	DT ₅₀		DT ₅₀	DT ₅₀		Indexzahlen			Index- summe K
	[mg/L]				Matrix 1			[d]	Matrix 2	I _S	I _{Kow}	
90	51	3,12	30		k.A.				2	2	2	6
91	21.600	-0,07	< 15		k.A.				4	5	2	11
92	75	3,20	60		k.A.				2	2	2	6
93	4.700	0,70	30		k.A.				4	4	2	10
94	51.000	0,94	< 180		OW	< 720	GW anaerob		4	4	3	11
95	530	3,13	78		k.A.				3	2	2	7
96	0,26	1,69	30		k.A.				1	3	2	6
97	993	1,42	30		k.A.				3	3	2	8
98	2.762	1	30		k.A.				4	3	2	9
99	125	2,54	30		k.A.				3	2	2	7
100	16.900	1,88	30		k.A.				4	3	2	9
101	970	3,21	3		W				3	2	1	6
102	1.000.000	-1,54	30		k.A.				4	5	2	11
103	31	3,30	38			< 88	Sediment		2	2	2	6
104	1.020	2,3	> 100		k.A.				4	2	3	9
105	1.800	1,85	< 197		OW	< 394	GW		4	3	3	10
106	1.200	2,63	15		k.A.				4	2	2	8
107	106.000	0,48	38		k.A.				4	4	2	10
108	957.000	-0,57	38		k.A.				4	5	2	11
109	300.000	0,04	38		k.A.				4	4	2	10
110	1.000.000	-0,19	38		k.A.				4	5	2	11
111	6,0	4,48	150		OW				1	1	3	5
112	3,4	4,2	30		k.A.				1	1	2	4
113	0,14	5,80	30		k.A.				1	1	2	4
114	69	3,79	> 100		k.A.				2	2	3	7
115	0,70	7,1	> 400		k.A.				1	1	4	6
116	8.860	2,4	> 400		k.A.				4	2	4	10
117	3.400	6,3	> 400		k.A.				4	1	4	9
118	370	6,3	> 400		k.A.				3	1	4	8
119	51.900	0,38	9		Kläranlage				4	4	1	9
120	32	2,47	38		k.A.				2	2	2	6
121	8,8	3,87	30		k.A.				1	2	2	5

Lfd. Nr.	Wasserlöslichkeit [mg/L]	Log K _{OW}	DT ₅₀		DT ₅₀		DT ₅₀		Indexzahlen			Index- summe K
			[d]	Matrix 1	[d]	Matrix 2	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}			
122	750	2,99	30	k.A.				3	2	2	7	
123	8,6	2,93	131	k.A.				1	2	3	6	
124	3.000.000	1,94	30	k.A.	20		k.A.	4	3	2	9	
125	61	3,66	< 8	GW				2	2	1	5	
126	60	0,68	30	k.A.				2	4	2	8	
127	5,3	2,20	< 77	W				1	2	2	5	
128	310	2,95	< 5	W	< 30		Boden	3	2	1	6	
129	610	0,89	> 400	k.A.				3	4	4	11	
130	373	0,05	30	k.A.				3	4	2	9	
131	15.000	2,5	30	k.A.				4	2	2	8	
132	408	2,48	30	k.A.				3	2	2	7	
133	2.870	2,39	< 180	GW	< 28		GW anaerob	4	2	3	9	
134	0,15	3,00	< 360	OW	< 720		GW	1	2	3	6	
135	793	2,83	15	GW	5		Boden	3	2	2	7	
136	535	2,69	5	GW	< 5		Boden	3	2	1	6	
137	280	4,00	< 10	OW				3	2	1	6	
138	18	4,05	> 182	W				2	1	3	6	
139	36	4,05	> 182	W				2	1	3	6	
140	3.500	2,05	< 360	W	sehr lan		Boden	4	2	3	9	
141	1.100	2,29	< 360	W				4	2	3	9	
142	10	4,76	101	k.A.				2	1	3	6	
143	65.000	0,33	30	k.A.				4	4	2	10	
144	40	3,85	< 15	GW				2	2	2	6	
145	4,0	3,85	< 70	GW				1	2	2	5	
146	63	2,83	30	k.A.				2	2	2	6	
147	1.100	3,75	> 100	k.A.				4	2	3	9	
148	2,8	2,6	60	k.A.				1	2	2	5	
149	7,0	3,65	> 100	k.A.				1	2	3	6	
150	8.800	1,62	< 10	GW	> 1000		GW anaerob	4	3	1	8	
151	160	3,15	< 28	W	< 360		W anaerob	3	2	2	7	

Lfd. Nr.	Quellen			
1	http://www.epa.gov/safewater/databases			
2	http://www.epa.gov/safewater/databases	http://www.eu-footprint.org/		
3	http://www.epa.gov/safewater/databases	http://www.eu-footprint.org/		
4	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.safe.nite.go.jp/data/		
5	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Ternes et al. 2006	Rippen, 2009	EU-RAR 2008a
6	http://www.epa.gov/safewater/databases			
7	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	IUCLID Dataset		
8	http://www.epa.gov/safewater/databases			
9	http://www.epa.gov/safewater/databases			
10				
11	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Ternes et al. 2006		
12	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Brauchli-Theotokis 2004	Giesy et al. 2000	
13	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.eu-footprint.org/		
14	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Rippen 2009		
15	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
16	http://chimie.ineris.fr			
17	http://www.epa.gov/safewater/databases			
18	http://www.hc-sc.gc.ca			
19	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.safe.nite.go.jp/data/		
20	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Rippen 2009		
21	http://www.epa.gov/safewater/databases	http://www.safe.nite.go.jp/data/		
22	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
23	http://www.epa.gov/safewater/databases	Rippen 2009	http://www.hc-sc.gc.ca	
24	http://www.epa.gov/safewater/databases	http://www.hc-sc.gc.ca		
25	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
26	http://www.epa.gov/safewater/databases	IUCLID Dataset		
27	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	LANUV 2007	Löffler et al. 2005	
28	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	LANUV 2007		
29	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			

Lfd. Nr.	Quellen			
30	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
31	http://www.epa.gov/safewater/databases	Nagy et al. 2002		
32	http://chimie.ineris.fr	Nagy et al. 2002		
33	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
34	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.ymparisto.fi		
35				
36				
37				
38				
39				
40	http://www.epa.gov/safewater/databases	http://www.eu-footprint.org/		
41	http://www.eu-footprint.org/			
42	http://www.epa.gov/safewater/databases			
43	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
44	http://www.eu-footprint.org/			
45	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Rippen 2009		
46	http://www.hc-sc.gc.ca			
47	http://www.eu-footprint.org/			
48	http://www.hc-sc.gc.ca	Rippen 2009	http://www.ymparisto.fi	
49	http://chimie.ineris.fr	http://www.ymparisto.fi		
50	http://www.hc-sc.gc.ca	Rippen 2009	http://www.ymparisto.fi	
51	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Rippen 2009		
52	http://www.hc-sc.gc.ca	http://www.ymparisto.fi		
53	http://chimie.ineris.fr	http://www.ymparisto.fi		
54	http://www.epa.gov/safewater/databases	http://www.safe.nite.go.jp/data/		
55	http://www.epa.gov/safewater/databases			
56	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Rippen 2009	Zippel et al. 2009	
57	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Ahel et al. 1993 a, b		
58	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.safe.nite.go.jp/data/		
59	http://www.hc-sc.gc.ca			

Lfd. Nr.	Quellen			
60	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.ymparisto.fi		
61	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
62	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
63	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Nagy et al. 2002		
64	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.ymparisto.fi		
65	http://www.epa.gov/safewater/databases	http://www.ymparisto.fi		
66	http://chimie.ineris.fr	http://www.ymparisto.fi		
67	http://www.epa.gov/safewater/databases	Nagy et al. 2002		
68	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
69	http://chimie.ineris.fr	http://www.safe.nite.go.jp/data/		
70	http://www.epa.gov/safewater/databases			
71	http://www.epa.gov/safewater/databases			
72	http://chimie.ineris.fr			
73	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
74	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Ternes et al. 2006		
75	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Ternes et al. 2006	EU-RAR 2008b	
76	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
77	http://chimie.ineris.fr	Nagy et al. 2002		
78				
79	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
80				
81	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
82	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Rippen 2009		
83	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
84	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
85	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
86	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
87	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
88	http://chimie.ineris.fr			
89	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			

Lfd. Nr.	Quellen			
90	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
91	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.ymparisto.fi		
92	http://www.epa.gov/safewater/databases			
93	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
94	http://www.epa.gov/safewater/databases	http://www.hc-sc.gc.ca		
95	http://www.epa.gov/safewater/databases			
96	http://www.epa.gov/safewater/databases			
97	http://www.epa.gov/safewater/databases			
98				
99				
100	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
101	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Quayle et al. 2002		
102				
103	http://www.epa.gov/safewater/databases	http://www.hc-sc.gc.ca		
104	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.safe.nite.go.jp/data/	IUCLID Dataset	
105	http://www.epa.gov/safewater/databases	http://www.ymparisto.fi		
106	http://www.epa.gov/safewater/databases			
107	http://www.epa.gov/safewater/databases			
108	http://www.epa.gov/safewater/databases			
109	http://www.epa.gov/safewater/databases			
110	http://www.epa.gov/safewater/databases			
111	http://chimie.ineris.fr			
112	Ahel et al. 1993 a, b			
113	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
114	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.safe.nite.go.jp/data/		
115	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.ymparisto.fi		
116	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			
117	http://www.epa.gov/safewater/databases	Rippen 2009	http://www.safe.nite.go.jp/data/	
118	http://www.epa.gov/safewater/databases			
119	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Rippen 2009		
120	http://www.epa.gov/safewater/databases			
121	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/			

Lfd. Nr.	Quellen		
122	http://www.epa.gov/safewater/databases		
123	http://www.eu-footprint.org/		
124	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Zippel et al. 2010	
125	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.ymparisto.fi	
126	http://www.epa.gov/safewater/databases		
127	http://chimie.ineris.fr		
128	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Rippen 2009	http://www.hc-sc.gc.ca
129	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	LANUV 2007	
130	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/		
131	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/		
132	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/		
133	http://www.epa.gov/safewater/databases	http://www.ymparisto.fi	
134	http://www.hc-sc.gc.ca	http://www.ymparisto.fi	
135	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Rippen 2009	
136	http://www.hc-sc.gc.ca	Rippen 2009	
137	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Rippen 2009	
138	http://www.epa.gov/safewater/databases	http://www.hc-sc.gc.ca	
139	http://chimie.ineris.fr	http://www.hc-sc.gc.ca	
140	http://chimie.ineris.fr	Rippen 2009	http://www.ymparisto.fi
141	http://www.hc-sc.gc.ca	http://www.ymparisto.fi	
142	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	http://www.safe.nite.go.jp/data/	
143	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/		
144	http://www.hc-sc.gc.ca	Rippen 2009	
145	http://www.hc-sc.gc.ca	Rippen 2009	
146	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/		
147	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/		
148	http://www.epa.gov/safewater/databases	Bester et al. 2007	
149	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/		
150	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Rippen 2009	
151	http://www.hc-sc.gc.ca		

Legende:

W = Wasser
GW = Grundwasser
OW = Oberflächenwasser
k.A. = keine Angaben

-  Modellierung von einem oder mehreren Stoffkriterien
-  Stoffkenndaten entsprechen in etwa der Muttersubstanz (stetige Ergänzung)
-  Abschätzung nach Literaturangaben

Die Modellierung von Stoffkenndaten erfolgte mit EPI Suite (US EPA 2009).

Folgende Module wurden verwendet:

log KOW	KOWIN
Wasserlöslichkeit	WATERNT
Bioabbau	BIOWIN

Im Modul BIOWIN wurden auf BIOWIN 4 (= Primärabbau) und BIOWIN 6 (= nicht-lineares MITI Abbau Modell) zurückgegriffen.

Die 151 Stoffe ergeben sich nach der Entfernung von anorganischen Verbindungen und identischen Stoffen unter verschiedenen Namen.

Anlage 3

Stoffkenndaten von Substanzen mit Nachweis im Trinkwasser
und Test

Lfd. Nr.	Gemessener Stoff	Stoffgruppe	Lit.-Stellen	CAS-Nr.	Wasserlöslichkeit	Log K _{OW}
			Anzahl		[mg/L]	
1	Hexachlorendomethylen-tetrahydrophthalsäure	Flammschutzmittel	1	115-28-6	3.500	3,1
2	Naphthalin-2-sulfonat	Monomer (Betonzusatzmittel)	1	120-18-3	60.000	0,63
3	Naphthalin-1,5-disulfonat	Metabolit (Betonzusatzmittel)	1	81-04-9	1.000.000	-0,94
4	Naphthalin-1,6-disulfonat	Metabolit (Betonzusatzmittel)	1	525-37-1	1.000.000	-0,94
5	Sulfolan	Lösemittel	1	126-33-0	290.000	-0,77
6	Tetraoxaspiro(5.5)undecan (TOSU)	Chemikalie	1	126-54-5	1.000.000	-0,58

Lfd. Nr.	[d]	DT ₅₀	Indexzahlen			Index- summe K	Quellen	
		Matrix 1	I _S	I _{Kow}	I _{DT50}			
1	50	k.A.	4	2	2	8	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Rörden & Karrenbrock 2006
2	15	k.A.	4	4	2	10	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Schmidt & Lange 2005
3	15	k.A.	4	5	2	11	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Schmidt & Lange 2005
4	15	k.A.	4	5	2	11	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Schmidt & Lange 2005
5	15	k.A.	4	5	2	11	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	LANUV NRW 2009
6	15	k.A.	4	5	2	11	http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/	Kalberlah 2008

Legende:

 Modellierung von einem oder mehreren Stoffkriterien

k.A. = keine Angaben