

Band 1.1.3E2

Anlage 2

ECT Oekotoxikologie GmbH
Ökotoxikologische Bewertung der in salzhaltigen
Abwässern des Werkes Werra und Neuhof-Ellers
enthaltenen Aufbereitungshilfs- und Spurenstoffe, 2020

Antrag der Werke Werra und Neuhoof- Ellers auf eine wasserrechtliche Erlaubnis zur Einleitung von Salzabwasser aus der Kaliproduktion in die Werra

Band 3.4 der Antragsunterlage

**Ökotoxikologische Bewertung der in salzhaltigen Abwässern des
Werkes Werra und Neuhoof-Ellers enthaltenen Aufbereitungshilfs-
und Spurenstoffe (Ökotoxikologisches Gutachten)**

Vorhabenträger:

K+S Minerals and Agriculture GmbH

Werk Werra

Hattorfer Straße

36269 Philippsthal / Werra

Werk Neuhoof-Ellers

Am Kaliwerk 6

36119 Neuhoof



Gutachter:

ECT Ökotoxikologie GmbH

Böttgerstraße 2–14

65439 Flörsheim/Main


.....
Dr. A. van der Veen

Impressum

Fassung vom 31. Januar 2020

Ansprechpartner: Dr. A. van der Veen

Telefon: 06145 956440

Fax: 06145 956499

Web: <https://ect.de/>



Ergebnisse im Überblick:

In Zusammenhang mit der Beantragung der Erlaubnis für die Einleitung von Salzabwässern in die Werra durch die K+S Minerals and Agriculture GmbH wurde eine ökotoxikologische Bewertung der in den Werken Werra und Neuhoof-Ellers eingesetzten Aufbereitungshilfsstoffe (AHS) vorgenommen. Auf Basis des chemischen Monitorings der AHS in der Werra (Measured Environmental Concentration, MEC) sowie auf Grundlage der Konzentrationen in den Einleitströmen wurden Umweltkonzentrationen (Predicted Environmental Concentration, PEC) gemäß REACH Guidance Dokument R.16 für verschiedene Einleitszenarien ermittelt. Es handelt sich hierbei um einen Worst-Case-Ansatz bei Niedrigwasser (MNQ) ohne Berücksichtigung von Bioabbau und Verflüchtigung. Außerdem wurden Umweltkonzentrationen auf Basis von Frachtberechnungen der Firma SYDRO Consult verwendet. Als Bewertungsmaßstab wurden Predicted-No-Effect-Konzentrationen (PNEC) für die AHS abgeleitet und mit der Fachbehörde (HLNUG) abgestimmt. PNEC ist die vorausgesagte auswirkungslose Konzentration eines Stoffes in der Umwelt, unterhalb dieser schädliche Auswirkungen auf den aquatischen Bereich (u.a. Fische, Daphnien, Algen) nicht zu erwarten sind. Die AHS sind keine PBT/vPvB-Substanzen, da sie alle entweder leicht biologisch abbaubar sind und/oder einen niedrigen log K_{ow} bzw. kein signifikantes Bioakkumulationspotential aufweisen. Die Beurteilung der Exposition von aquatischen Organismen kann daher mit dem Vergleich von PECs bzw. MECs und PNECs erfolgen.

Der im Rahmen der Risikobewertung vorgenommene Vergleich zwischen PECs bzw. MECs und PNECs (RCR) zeigt folgende Ergebnisse:

- 1) **13 AHS mit RCR < 1 ohne Verfeinerung der Expositionsszenarien, d.h. einem akzeptablen Risiko für die aquatische Umwelt**
- 2) **3 AHS mit RCR > 1 bzw. nach Verfeinerung der Expositionsszenarien RCR < 1, d.h. im Ergebnis einem akzeptablen Risiko für die aquatische Umwelt:**
 - a. **Salicylsäure:** Der AHS wurde **in der Werra nicht nachgewiesen** (< Bestimmungsgrenze, BG), was auf die **leichte biologische Abbaubarkeit** zurückzuführen ist. Bei Berücksichtigung von einem leicht höheren Durchfluss (> MNQ) wird das Risiko durch die Einleitung des AHS in die Werra für die Umwelt akzeptabel (RCR < 1).
 - b. **Fettsäuren: Laurin-, Myristin- und Palmitinsäure ergaben ohne Verfeinerung der Einleitszenarien einen RCR < 1. Ölsäure zeigt nur in einem Szenario (2b) mit dem 90. Perzentil einen RCR, der geringfügig über 1 liegt (RCR = 1,38).** In der Werra wurde diese Substanz nicht nachgewiesen (< BG), was auf die leichte biologische Abbaubarkeit zurückzuführen ist. Bei Berücksichtigung von **biologischem Abbau und/oder einem leicht erhöhten Durchfluss** (> MNQ) der Werra ist auch für das Szenario 2b (90. Perzentil) ein RCR < 1 zu erwarten.
 - c. **Oxoöl 9N:** Reale Konzentrationen können **nicht analytisch bestimmt** werden, daher wurde dieser AHS anhand der Einsatzmengen bewertet. Konzentrationsabnahmen zwischen Anwendung und Einleitung in die Werra z. B. durch Abbauprozesse, Adsorption etc. sind daher nicht berücksichtigt (**Worst-Case**). Die RCRs sind nur minimal > 1, so dass durch die leichte biologische Abbaubarkeit oder einen höheren Durchfluss der Werra die realen RCRs < 1 sein sollten. Bei Verwendung der auf Basis der Frachtberechnungen ermittelten PECs ist der RCR ebenfalls < 1 bedingt durch einen höheren Durchfluss. Insgesamt ist daher das reale Risiko als akzeptabel einzustufen.

Insgesamt ist festzustellen, dass die Einleitung der derzeit bei K+S in den Werken Werra und Neuhoof-Ellers eingesetzten AHS ein akzeptables Risiko für die aquatische Umwelt darstellt.

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Bedeutung
90Perz	90. Perzentil
AHS	Aufbereitungshilfsstoff
AwSV	Verordnung über Anlagen zum Umgang mit wassergefährdenden Stoffen
BCF	Biokonzentrationsfaktor
ber.	berechnet
BG	Bestimmungsgrenze
BLAK	Bund-/Länder-Arbeitskreis
BM	Biomasse
CAS	Chemical Abstracts Services
CBS	Chlorbenzoesäure
CDSL	Canadian Domestic Substances List
ChV	Chronic Value: entspricht dem geometrischen Mittelwert aus NOEC und LOEC
Clocal _{water}	lokale Konzentration der Substanz während der Eintragsphase
CMR	C: kanzerogen, M: mutagen, R: reproduktionstoxisch
CLP	Classification, Labelling and Packaging of substances and mixtures (Verordnung über die Einstufung, Kennzeichnung und Verpackung von Stoffen und Gemischen), Verordnung (EG) Nr. 1272/2008
d	Tag (lateinisch: <i>dies</i>)
<i>D. magna</i>	<i>Daphnia magna</i>
ECHA	Europäische Chemikalienagentur
EEH	2-Ethylhexyl-2-Ethylhexanoat
ESTA	Elektro-Statistische Aufbereitung
EU RAR	European Union Risk Assessment Report
exp.	experimentell
GFS	Geringfügigkeitsschwelle
HA	Werk Werra, Standort Hattorf
HLNUG	Hessisches Landesamt für Naturschutz, Umwelt und Geologie
Imm.	Immobilisierung
k.A.	keine Angaben
Koc	Adsorptionskoeffizient (Verhältnis der Konzentration des Stoffes im Boden (C_{Boden}) zu der Konzentration des Stoffs in der wässrigen Phase (C_{Wasser}) im Adsorptionsgleichgewicht bezüglich des Anteils an organischem Kohlenstoff im Boden)
Kp _{susp}	Fest-Wasser-Verteilungskoeffizient in Bezug auf Schwebstoff
LOD	Limit of Detection (= Erfassungsgrenze)
log Kow	Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient (logarithmiert)
LOQ	Limit of Quantitation (= Bestimmungsgrenze)
Max	Maximum
MCI	Molecular Connectivity Index (Berechnungsmethode für den Adsorptionskoeffizienten Koc; KOCWIN v2.00 (EPI Suite v4.11)
MEC	measured environmental concentration (gemessenen Umweltkonzentration)
MNQ	mittlerer Niedrigwasserabfluss
Mol.-Gew.	Molekulargewicht
Mort.	Mortalität
MQ	mittlerer Abfluss

Abkürzung	Bedeutung
MW	Mittelwert
NE	Werk Neuhoof-Ellers
NH ₄ -N	Ammoniumstickstoff
NICNAS	National Industrial Chemicals Notification and Assessment Scheme (Australien)
NOEC	No Observed Effect Concentration (Konzentration, bei der kein Effekt beobachtbar ist)
NWG	Nachweisgrenze
nwg	nicht wassergefährdend
OECD	Organisation for Economic Co-operation and Development (Organisation für wirtschaftliche Zusammenarbeit und Entwicklung)
OGewV	Oberflächengewässerverordnung
<i>O. latipes</i>	<i>Oryzias latipes</i>
<i>O. mykiss</i>	<i>Oncorhynchus mykiss</i>
PEC	Predicted Environmental Concentration (berechnete Umweltkonzentration)
PEG/PPG alkylisiert	Polyethylen-/ Polypropylenglycol alkylisiert (Entschäumer; Drewplus 4009 G)
PNEC	Predicted No Effect Concentration (Nicht-Effekt-Konzentration)
RAC	Ausschuss für Risikobewertung
REACH	Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals 'Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung von Chemikalien'; Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (REACH-Verordnung)
RCR	Risk Characterisation Ratio
<i>R. subcapitata</i>	<i>Raphidocelis subcapitata</i> (syn. <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>)
Repro	Reproduktion
RL	Reliability / Validität; bewertet nach Klimisch et al. (1997)
SDB	Sicherheitsdatenblatt
SFA	Sulfatierte Fettsäuren
SIAR	SIDS Initial Assessment Report
SIDS	Screening Information Dataset
stat.	statisch
TGD	Technical Guidance Document (EU Water Directors, 2011/2018)
t.m.	Testmaterial
UVCB	Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials (Stoffe mit unbekannter oder variabler Zusammensetzung, komplexe Reaktionsprodukte und biologische Materialien)
UQN	Umweltqualitätsnorm
W	Wachstum
WAF	Water-Accommodated Fraction
WE	Werk Werra
WGK	Wassergefährdungsklasse
WI	Werk Werra, Standort Wintershall
WR	Wachstumsrate

Inhaltsverzeichnis

1	Veranlassung (Kurzfassung).....	15
2	Zielstellung und Vorgehensweise.....	16
3	Methodik	18
3.1	Datengrundlagen	18
3.2	Berechnung der zu erwartenden lokalen Expositionskonzentrationen (PEC-Herleitung)	19
3.3	Berechnete Konzentrationen in der Werra aus Frachtbetrachtungen.....	23
3.4	PNEC-Herleitung	25
3.5	Beurteilung des Risikos für das Umweltkompartiment Wasser anhand des RCR	25
4	Ergebnisse und Diskussion	26
4.1	Umweltverhalten.....	26
4.1.1	Bioabbaubarkeit und Persistenz	26
4.1.2	Bioakkumulationspotential	26
4.2	Monitoringdaten.....	28
4.2.1	Werra: Messstelle Unterrohn	28
4.2.2	Werra: Messstelle Gerstungen	30
4.2.3	Einleitung des Standorts Hattorf des Werkes Werra (Einleitstelle Hattorf)	31
4.2.4	Einleitung des Werkes Neuhoof-Ellers.....	33
4.2.5	Einleitung des Standorts Wintershall des Werkes Werra (Einleitstelle Wintershall)	34
4.3	PEC local _{water} für verschiedene Einleitszenarien und Vergleich mit MEC	35
4.3.1	Salicylsäure.....	37
4.3.2	4-Chlorbenzoesäure	37
4.3.3	Resorcyssäure	37
4.3.4	<i>trans</i> -Zimtsäure.....	38
4.3.5	Gluconsäure	38
4.3.6	Glykolsäure.....	38
4.3.7	Fettsäuren, C12-18 und C18-ungesättigt.....	38
4.3.8	Bor (Ulexit)	39
4.3.9	Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Handelsname: Oxoöl 9N)	39
4.3.10	C16-C18-Alkylamine	40
4.3.11	C12-C14-Fettalkohole	40
4.3.12	Alkylpolyglykolether (Handelsname: Flotanol F)	40
4.3.13	Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Handelsname: Montanol 800).....	40
4.3.14	Natriumsalze sulfatierter Fettsäuren (Handelsname: Amerfloc MI)	41
4.3.15	Entschäumer (Polyethylen-/ Polypropylenglycol alkyliert).....	41

4.3.16	Kaliumbenzoat.....	41
4.4	Beurteilung des Risikos anhand des Risikoquotienten (RCR)	42
4.4.1	Salicylsäure.....	45
4.4.2	Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen	45
4.4.3	Fettsäuren	46
5	Zusammenfassung.....	48
6	Referenzen.....	50
7	Annex 1: Adsorptionskoeffizienten	59
8	Annex 2: Herleitung der Nicht-Effekt-Konzentration (Predicted No-Effect Concentration, PNEC)	60
8.1	Vorgehen.....	60
8.2	Validität der Daten.....	61
8.3	Quellen.....	61
9	Annex 3: Charakterisierung und PNECs.....	63
9.1	Salicylsäure (CAS 69-72-7)	63
9.2	Fettsäuren, C12-18 und C18 ungesättigt (CAS 90990-15-1)	65
9.2.1	Komponenten: Laurinsäure (CAS 143-07-7).....	66
9.2.2	Komponenten: Myristinsäure (CAS 544-63-8)	69
9.2.3	Komponenten: Ölsäure (CAS 112-80-1)	72
9.2.4	Komponente: Palmitinsäure (CAS 57-10-3)	75
9.2.5	Beurteilung des Bioakkumulationspotentials von Palmitinsäure (CAS 57-10-3)	76
9.3	Resorcylsäure (CAS 89-86-1).....	78
9.4	C12-C14-Fettalkohol (CAS 80206-82-2)	79
9.4.1	Komponente: 1-Dodecanol (CAS 112-53-8).....	81
9.4.2	Komponente: 1-Tetradecanol (CAS 112-72-1)	83
9.5	Glykolsäure (CAS 79-14-1)	85
9.6	Gluconsäure (CAS 526-95-4)	88
9.7	<i>trans</i> -Zimtsäure (CAS 140-10-3).....	89
9.8	C16-C18-Alkylamine (Genamin SH 100; CAS 90640-32-7; CAS 61788-45-2; EINECS 292-550-5).....	92
9.9	Alkylpolyglykolether (Flotanol F; CAS 1426148-68-6; veraltet: CAS 31726-34-8)	93
9.10	Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N; CAS 68526-89-6).....	95
9.11	Natriumsalze sulfatierter Fettsäuren (Amerfloc MI)	97
9.11.1	Identifizierte Inhaltsstoffe laut Sicherheitsdatenblatt [82]: Fatty acids, vegetable-oil, sulfated, sodium salts (CAS 61788-67-8, EC 262-996-5)	98

9.11.2	Identifizierte Inhaltsstoffe laut Sicherheitsdatenblatt [82]: 3-Butoxy-2-propanol (CAS 5131-66-8)	99
9.12	Polyethylen-/ Polypropylenglycol alkyliert (Entschäumer; PEG/PPG alkyliert; Handelsname: Drewplus 4009 G; CAS 69227-21-0)	102
9.13	Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800; CAS 68609-68-7).....	103
9.14	4-Chlorbenzoesäure (CAS 74-11-3).....	105
9.15	Benzoesäure (CAS 65-85-0)	106
9.16	Polyacrylamide (Handelsname: WT-FLOC AF 701 TWG)	108
9.17	Modifizierte Polysaccharide	112

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: An den Werken Werra und NeuhoF-Ellers derzeit eingesetzte Aufbereitungshilfsstoffe	17
Tabelle 2: Durchflusswerte der Werra an den Pegeln Vacha und Gerstungen sowie der Ulster bei Unterbreizbach-Räsa (MQ: mittlerer jährlicher Durchfluss; MNQ: mittlerer niedrigster jährlicher Durchfluss; bezogen auf das Kalenderjahr; Quelle: [69])	20
Tabelle 3: Prognostizierte Einleitmengen an den Standorten Hattorf und Wintershall des Werkes Werra und des Werkes NeuhoF-Ellers für das Jahr 2021/Szenario 1 (Mittelwerte über den gesamten Simulationszeitraum 1979 – 2016; Quelle: Band 3.1[84])	20
Tabelle 4: Verdünnungsfaktoren für die Einleitszenarien (Abwassermengen siehe Tabelle 3, Durchflusswerte der Werra und der Ulster siehe Tabelle 2)	22
Tabelle 5: Ableitung der lokalen Konzentration der AHS in Wasser PEC_{local} (Formeln aus REACH Guidance Dokument R.16 [10])	23
Tabelle 6: Berechnete Konzentrationen der AHS am Pegel Gerstungen für das Jahr 2021 auf Basis von Frachtberechnungen (Quelle: SYDRO Consult [84], Szenario 1)	24
Tabelle 7: Analysedaten der AHS an der Messstelle Unterrohn: Januar 2015 bis Juni 2018 (n = 42)	29
Tabelle 8: Analysedaten am Pegel Gerstungen: Januar 2015 bis Juni 2018 (n = 42)	30
Tabelle 9: Konzentrationen der Aufbereitungshilfsstoffe in der Einleitung des Standorts Hattorf des Werkes Werra; Grundlage Analysedaten von Januar 2015 bis Juni 2018 (n = 42)	32
Tabelle 10: Konzentrationen der Aufbereitungshilfsstoffe in der Einleitung des Werkes NeuhoF-Ellers; Grundlage Analysedaten von Januar 2015 bis Juni 2018 (n = 42), ohne Ammoniumacetat (siehe Band 2.6)	33
Tabelle 11: Konzentrationen der Aufbereitungshilfsstoffe in der Einleitung des Standorts Wintershall des Werkes Werra; Grundlage Analysedaten von Januar 2015 bis Juni 2018 (n = 42; Glykolsäure: n = 41) ohne Ammoniumacetat (siehe Band 2.6)	34
Tabelle 12: PEC-Werte für verschiedene Einleitungsszenarien (PEC basierend auf Mittelwerten und 90. Perzentilen der Abwasserkonzentrationen sowie verschiedenen MNQs)	36
Tabelle 13: Predicted No-Effect Concentrations (PNECs) für die Aufbereitungshilfsstoffe bzw. deren Komponenten	42
Tabelle 14: RCR für verschiedene Einleitungsszenarien (PEC basierend auf Mittelwerten und 90. Perzentilen der Abwasserkonzentrationen; MEC: gemessene Konzentrationen am Pegel Gerstungen; PEC SYDRO: Konzentration der AHS basierend auf den Frachtberechnungen durch SYDRO Consult [84]; rot markiert: RCR > 1)	44
Tabelle 15: Adsorptionskoeffizienten (Koc, log Koc) für die Aufbereitungshilfsstoffe	59
Tabelle 16: Sicherheitsfaktoren gemäß REACH Guidance Document R. 10 [9] zur Herleitung einer $PNEC_{aqua}$	61
Tabelle 17: Beurteilung der Daten-Validität nach Klimisch et al. [62]	61
Tabelle 18: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken	62
Tabelle 19: Substanzcharakterisierung von Salicylsäure (CAS 69-72-7)	63
Tabelle 20: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Salicylsäure	64

Tabelle 21: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Salicylsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).....	64
Tabelle 22: Substanzcharakterisierung von Fettsäuren, C12-18 und C18 ungesättigt (CAS 90990-15-1)	66
Tabelle 23: Substanzcharakterisierung von Laurinsäure (CAS 143-07-7)	66
Tabelle 24: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Laurinsäure (CAS 143-07-7)	67
Tabelle 25: Aktualisierte Effektwerte für Laurinsäure (CAS 143-07-7)	67
Tabelle 26: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Laurinsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).....	68
Tabelle 27: Substanzcharakterisierung von Myristinsäure (CAS 544-63-8)	69
Tabelle 28: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Myristinsäure (CAS 544-63-8)	69
Tabelle 29: Aktualisierte Effektwerte für Myristinsäure (CAS 544-63-8).....	70
Tabelle 30: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Myristinsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).....	71
Tabelle 31: Substanzcharakterisierung von Ölsäure (CAS 112-80-1)	72
Tabelle 32: Rechercheergebnisse für Ölsäure (CAS 112-80-1)	72
Tabelle 33: Aktualisierte Effektwerte für Ölsäure (CAS 112-80-1).....	73
Tabelle 34: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Ölsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).....	74
Tabelle 35: Substanzcharakterisierung von Palmitinsäure (CAS 57-10-3)	75
Tabelle 36: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Palmitinsäure (CAS 57-10-3)	75
Tabelle 37: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Palmitinsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).....	76
Tabelle 38: Berechnete Biokonzentrationsfaktoren für Palmitinsäure mit verschiedenen QSAR-Modellen	76
Tabelle 39: Auszug aus Van Egmond et al. (1999, [106]): Biokonzentrationsfaktoren in Zebrabärbling	77
Tabelle 40: Substanzcharakterisierung von Resorcylsäure (CAS 89-86-1).....	78
Tabelle 41: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Resorcylsäure (CAS 89-86-1)	79
Tabelle 42: Substanzcharakterisierung von Fettalkohol C12-C14 (CAS 80206-8-2).....	79
Tabelle 43: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: C12-C14-Fettalkohol (CAS 80206-82-2).....	80
Tabelle 44: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für C12-C14-Fettalkohol (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).....	80

Tabelle 45: Substanzcharakterisierung von 1-Dodecanol (CAS 112-53-8)	81
Tabelle 46: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: 1-Dodecanol (CAS 112-53-8)	82
Tabelle 47: Aktualisierte Effektwerte für 1-Dodecanol (CAS 112-53-8): Alge.....	82
Tabelle 48: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für 1-Dodecanol (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).....	83
Tabelle 49: Substanzcharakterisierung von Tetradecanol (CAS 112-72-1)	83
Tabelle 50: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: 1-Tetradecanol (CAS 112-72-1)	84
Tabelle 51: Aktualisierte Effektwerte für 1-Tetradecanol (CAS 112-72-1): Alge.....	85
Tabelle 52: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für 1-Tetradecanol (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).....	85
Tabelle 53: Substanzcharakterisierung von Glykolsäure (CAS 79-14-1)	85
Tabelle 54: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Glykolsäure (CAS 79-14-1).....	86
Tabelle 55: Aktualisierte Effektwerte für Glykolsäure (CAS 79-14-1): Alge	87
Tabelle 56: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Glykolsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).	87
Tabelle 57: Substanzcharakterisierung von Gluconsäure (CAS 526-95-4)	88
Tabelle 58: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Gluconsäure (CAS 526-95-4)	89
Tabelle 59: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Gluconsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).....	89
Tabelle 60: Substanzcharakterisierung von trans-Zimtsäure (CAS 140-10-3).....	89
Tabelle 61: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: trans-Zimtsäure (CAS 140-10-3)	90
Tabelle 62: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Zimtsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).	91
Tabelle 63: Substanzcharakterisierung von Genamin SH 100 (CAS 90640-32-7).....	92
Tabelle 64: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: C16-C18-Alkylamine (CAS 90640-32-7)	93
Tabelle 65: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für C16-C18-Alkylamine (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).	93
Tabelle 66: Substanzcharakterisierung von Alkylpolyglykolether (CAS 1426148-68-6).....	93
Tabelle 67: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Alkylpolyglykolether (Flotanol F; CAS 1426148-68-6).....	94
Tabelle 68: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Alkylpolyglykolether (Flotanol F; grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).	95

Tabelle 69: Substanzcharakterisierung von Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (CAS 68526-89-6).....	95
Tabelle 70: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N; CAS 68526-89-6).....	96
Tabelle 71: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N; grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).....	96
Tabelle 72: Substanzcharakterisierung von Amerfloc MI	97
Tabelle 73: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Amerfloc MI (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).....	98
Tabelle 74: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Fatty acids, vegetable-oil, sulfated, sodium salts (CAS 61788-67-8, EC 262-996-5).....	100
Tabelle 75: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: 3-Butoxy-2-propanol (CAS 5131-66-8, EC 225-878-4).....	101
Tabelle 76: Substanzcharakterisierung von Polyethylen-/ Polypropylenglycol alkyliert (Entschäumer; PEG/PPG alkyliert; Drewplus 4009 G; CAS 69227-21-0).....	102
Tabelle 77: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für PEG/PPG alkyliert (Drewplus 4009 G; grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).....	103
Tabelle 78: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Drewplus bzw. Polyethylen-/ Polypropylenglycol alkyliert (CAS 69227-21-0, EC 500-242-1)).....	103
Tabelle 79: Substanzcharakterisierung von Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (CAS 68609-68-7).....	103
Tabelle 80: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800; CAS 68609-68-7).....	104
Tabelle 81: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für das Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800; grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).	105
Tabelle 82: Substanzcharakterisierung von 4-Chlorbenzoesäure (CAS 74-11-3).....	105
Tabelle 83: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für 4- Chlorbenzoesäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet). ...	106
Tabelle 84: Substanzcharakterisierung von Benzoesäure (CAS 65-85-0).....	106
Tabelle 85: Rechercheergebnisse für Benzoesäure (CAS 65-85-0)	107
Tabelle 86: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Benzoesäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).	107
Tabelle 87: Substanzcharakterisierung von Polyacrylamide (Handelsname: WT-FLOC AF 701 TWG)	108
Tabelle 88: Rechercheergebnisse für anionische Polyacrylamide (CAS 9003-05-8).....	108
Tabelle 89: Rechercheergebnisse für anionische Polyacrylamide (CAS 25085-02-3).....	109

Tabelle 90: Übersicht der vorhandenen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Polyacrylamide	111
Tabelle 91: Substanzcharakterisierung von modifizierte Polysaccharide (CAS 39346-76-4): Produktbeispiele: POLYGAL CT-496 und RAGUM CMG.....	112
Tabelle 92: Rechercheergebnisse für modifizierte Polysaccharide (CAS 39346-76-4)	112

1 Veranlassung (Kurzfassung)

Die Werke Werra (WE) und Neuhoof-Ellers (NE) der K+S Minerals and Agriculture GmbH (K+S) beabsichtigen den weiteren Abbau von Kalisalzen im Werra-Fulda-Revier. Die Lagerstätte reicht nach dem gegenwärtigen Erkundungsstand noch bis etwa in das Jahr 2060.

Bei der Produktion fallen Salzabwässer an, die entsorgt werden müssen. Dazu gehören Prozessabwässer und die auf den Rückstandshalden anfallenden Haldenwässer. Prozessabwässer fallen während der Betriebsphase an, Haldenwässer auch in der Nachbetriebsphase, die mit der Einstellung der Produktion und der endgültigen Abdeckung der Halden beginnt. Der wichtigste Entsorgungsweg für die Salzabwässer ist die Einleitung in die Werra.

Die derzeit gültigen Erlaubnisse¹ für die Einleitung der Salzabwässer der beiden Werke in die Werra sind bis zum 31.12.2020 befristet. Die Anschlusslaubnisse sind mithin für den Zeitraum ab dem 01.01.2021 zu beantragen. Entsprechend der Bewirtschaftungsperioden der Wasserrahmenrichtlinie wird eine Einleitung bis zum 31.12.2027 (Ende der dritten Bewirtschaftungsperiode) beantragt.

Eingeleitet werden soll auch künftig über die drei bestehenden Einleitstellen. Die Salzabwässer des Standorts Wintershall des Werkes Werra werden an der Einleitstelle Wintershall in Heringen in die Werra eingeleitet. Die Salzabwässer des Standorts Hattorf des Werkes Werra sowie des Werkes Neuhoof-Ellers werden über zwei nahe beieinander liegende Einleitstellen in Philippsthal in die Werra eingeleitet. Die Einleitung soll zudem wie bislang über den Pegel Gerstungen in der Werra gesteuert werden. Derzeit begrenzen vor allem die im Bewirtschaftungsplan Salz für den Pegel Gerstungen festgesetzten Werte für Chlorid, Kalium und Magnesium die Einleitmengen. Für die auslaufende zweite Bewirtschaftungsperiode (bis 31.12.2021) wird eine maximale Einleitmenge von 6,7 Mio. m³/a beantragt. Für den Zeitraum vom 01.01.2022 bis zum 31.12.2027 wird eine maximale Einleitmenge von 6,0 Mio. m³/a beantragt. Zusätzlich wird für die möglichen Wässer aus Sicherungs- und Kompensationsmaßnahmen der Haldenerweiterungen Hattorf bzw. Wintershall eine Einleitfracht von bis zu 8000 t/a Gesamtmineralisation im Zeitraum von 2021 bis 2025 und von bis zu 29.400 t/a Gesamtmineralisation im Zeitraum von 2026 bis 2027 beantragt.

¹ Werk Werra: Bescheid vom 30.11.2012 und vom 30.11.2015, Az.: 31.1/Hef 79 f 12-320/001 (Werra-Erlaubnis); Werk Neuhoof-Ellers: Bescheid vom 25.06.2012, geändert am 30.11.2012 und 30.11.2015, Az.: 31.1/Hef 79 f 12-220/001 (Neuhoof-Erlaubnis)“ (Band 1, Erläuterungsbericht [EB], Kap. 1)

2 Zielstellung und Vorgehensweise

Im Werk Werra und im Werk Neuhoﬀ-Ellers kommen bei der Elektrostatischen Aufbereitung (ESTA) und der Flotation sowie in weiteren Verfahrensschritten Aufbereitungshilfsstoffe (AHS) zum Einsatz, gröÙtenteils organische Verbindungen. Diese Stoffe können in den zu entsorgenden Prozessabwässern und Haldenwässern als Spurenbestandteile enthalten sein. Im Rahmen der vorhandenen analytischen Methoden und Bestimmungsgrenzen kann für die Mehrzahl dieser Stoffe ein Nachweis in den Abwasserströmen erbracht werden.

In diesem Zusammenhang stellt sich die Frage, welche ökotoxikologischen Auswirkungen diese Stoffe im Vergleich zu den Hauptbestandteilen der Salzabwässer, den gelösten Salzen aus der Rohsalzaufbereitung, im Gewässer und damit auf die aquatische Lebewelt als Schutzgut haben können. Unter ökotoxikologischen Wirkungen sind sowohl akute Effekte wie Mortalität oder Immobilisierung als auch chronische Effekte wie Reproduktion einer Spezies zu verstehen. Diese Effekte betreffen sowohl das Individuum, die Population als auch schließlich das gesamte Ökosystem. Im vorliegenden Gutachten werden mögliche Auswirkungen der derzeit an den Werken Werra und Neuhoﬀ-Ellers eingesetzten Aufbereitungshilfsstoffe auf die aquatische Umwelt mit Hilfe einer Risikobewertung beurteilt.

Da für die eingesetzten AHS keine Umweltqualitätsnormen für Oberflächengewässer gemäß Oberflächengewässerverordnung (OGewV [76]) vorliegen, erfolgt eine Bewertung der Auswirkung auf die aquatische Umwelt anhand von fachlich abgeleiteten Wirkungsschwellen (sog. Nicht-Effekt-Konzentrationen, Predicted No-Effect Concentrations, PNEC). Die PNEC ist die Konzentration, bei der keine negativen Auswirkungen auf die aquatischen Lebensgemeinschaften erwartet werden. Im Rahmen einer Risikobewertung werden die Nicht-Effekt-Konzentrationen nachfolgend mit den ermittelten Umweltkonzentrationen (sog. Predicted Environmental Concentrations, PEC) oder den im Gewässer gemessenen Konzentrationen (sog. Measured Environmental Concentration, MEC) verglichen. Das so ermittelte Verhältnis zwischen PEC bzw. MEC und PNEC wird als Risikoquotient (Risk Characterisation Ratio, RCR) beschrieben. Der RCR zeigt an, ob das mit einem Stoff verbundene Risiko akzeptiert werden kann. Dies ist der Fall, wenn die in der Umwelt erwartete Konzentration geringer ist als die Konzentration des Stoffes in der Umwelt, bei der keine nachteiligen Effekte zu erwarten sind. Dieses Vorgehen entspricht im Wesentlichen dem Verfahren nach REACH [12] bzw. nach Technical Guidance Document (TGD) No. 27 der Wasserrahmenrichtlinie [31].

Der RCR wird für jeden eingesetzten AHS errechnet. Ein akzeptables Risiko für die Umwelt liegt vor, wenn der RCR kleiner oder gleich 1 ist. Bei einem akzeptablen Risiko gilt, dass die Einleitung des Stoffes aller Voraussicht nach nicht zu Gefährdungen für die aquatische Umwelt führt. Ein nicht akzeptables Risiko für die Umwelt liegt vor, wenn der RCR oberhalb von 1 liegt. In diesem Fall werden weitergehende Betrachtungen zur Ermittlung des Umweltrisikos durchgeführt.

Die in der Werra zu erwartenden Umweltkonzentrationen werden in Anlehnung an das REACH Guidance Document R.16 [11] berechnet. Zusätzlich werden die am Pegel Gerstungen gemessenen Konzentrationen der Aufbereitungshilfsstoffe und die AHS-Konzentrationen, welche auf Basis von Frachtberechnungen der Firma SYDRO Consult [84] ermittelt wurden, für die Risikoabschätzung herangezogen.

In diesem Fachgutachten werden 17 AHS detailliert betrachtet (Tabelle 1). Für die AHS liegen bereits in den Jahren 2015 bis 2016 von der ECT Ökotoxikologie GmbH für K+S erarbeitete und mit der Fachbehörde (HLNUG) abgestimmte PNEC-Herleitungen vor [54]. Diese wurden im Zuge der

Erstellung dieses Gutachtens auf die Aktualität der Datenbasis überprüft und bei geänderter Datenlage angepasst. Die Herleitung der PNECs erfolgte in Anlehnung an REACH (REACH Guidance Document R.10; [9]) und dem Technical Guidance Document No. 27 der Wasserrahmenrichtlinie [31]. Die beiden Verfahren unterscheiden sich nur geringfügig in der Bewertung und Berücksichtigung der Daten, allerdings sind die auf die Effektdaten anzuwendenden Sicherheitsfaktoren harmonisiert bzw. identisch. Die Details zur Herleitung der PNEC der einzelnen AHS sind in Kapitel 8 (S. 60) beschrieben. Die aktuellen Herleitungen zu den einzelnen AHS sind im Anhang des Gutachtens zusammengestellt (Kapitel 9, S. 63).

Tabelle 1: An den Werken Werra und Neuhoof-Ellers derzeit eingesetzte Aufbereitungshilfsstoffe

Substanz	Standort / Werk		
	Hattorf	Neuhof-Ellers	Wintershall
Salicylsäure	x	x	x
4-Chlorbenzoesäure	-	-	x
Resorcylnsäure	-	x	x
trans-Zimtsäure	x ²	-	-
Gluconsäure	x	-	x ³
Glykolsäure	x ⁴	-	x ³
Fettsäuren	x	x	x
Ulexit (Natrium-Calcium-Bormineral)	x	-	-
Ammoniumacetat	-	x	x
Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N ⁵)	-	x	-
C16-C18-Alkylamine	-	x	-
C12-C14-Fettalkohole	-	x	-
Alkylpolyglykolether (Flotanol F ⁵)	-	x	-
Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800 ⁵)	x	-	-
Natriumsalze sulfatierter Fettsäuren (Amerfloc MI ⁵)	x	-	x
Polyethylen-/ Polypropylenglycol alkyliert (Entschäumer; PEG/PPG alkyliert; Drewplus 4009 G ⁵)	-	-	x
Kaliumbenzoat ⁶	x	-	-

Weiterhin werden Polyacrylamide und modifizierte Polysaccharide als Tondrucker bzw. Klärhilfsmittel eingesetzt. Eine Stoffbewertung (hier ergänzend aufgeführt in Kapitel 9 [Annex 3], s. Kapitel 9.16, S. 108 bzw. Kapitel 9.17, S. 112) ergab, dass keine Auswirkungen auf die aquatische Umwelt durch den Einsatz dieser Polymere zu erwarten sind. Insofern wurden diese nicht in die nachfolgende Betrachtung einbezogen.

² Einsatz nur im Sommer

³ nur zeitweiser Einsatz im Betrachtungszeitraum

⁴ Einsatz von Glykolsäure am Standort HA ab 09/2019 als Ersatz für Gluconsäure

⁵ Handelsname

⁶ Einsatz von Kaliumbenzoat am Standort HA ab 06/2019

3 Methodik

3.1 Datengrundlagen

Datengrundlage für AHS-Konzentrationen und die Konzentrationen von deren Komponenten im eingeleiteten Abwasser sowie im Gewässer sind die Messwerte der monatlichen Eigenkontrolle des Werkes Werra und Werkes Neuhoof-Ellers im Zeitraum von Januar 2015 bis Juni 2018. Es liegen in der Regel 42 Messwerte für die Zeitreihe basierend auf Stichproben vor. Gemessen wurden die AHS oder deren Komponenten in den Einleitströmen und in der Werra. Die Konzentrationen in der Werra wurden zum einen an der Messstelle Unterrohn (oberhalb der Einleitungen, zur Ermittlung von Hintergrundwerten) und dem Pegel Gerstungen (unterhalb aller drei Einleitungen, Fluss-km 137,1) ermittelt. Die am Pegel Gerstungen erhobenen Daten geben Einblick in mögliche Auswirkungen durch die Einleitungen der drei Abwasserströme (HA, NE, WI) auf die Konzentrationen der AHS bzw. deren Komponenten in der Werra.

Einige AHS bestehen aus mehreren Komponenten und sind in einigen Fällen sogenannte Stoffe mit unbekannter oder variabler Zusammensetzung, komplexe Reaktionsprodukte und biologische Materialien (UVCB). Dies bedeutet, dass sie eine komplexe und teilweise variable bis unklare Zusammensetzung besitzen, so dass sie nicht direkt analysiert werden können. Hierzu zählen:

- Fettsäuren C12-18 und C18, ungesättigt
- C16-C18-Alkylamine
- C12-C14-Fettalkohol
- Alkylpolyglykolether (Flotanol F)
- Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800)
- Natriumsalze sulfatierter Fettsäuren (Amerfloc MI)
- Polyethylen-/ Polypropylenglycol alkyliert (PEG/PPG alkyliert)
- Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N)

Als Näherung wurden bei einigen der AHS Markersubstanzen identifiziert und, basierend auf ihrem bekannten Anteil, die Konzentration des AHS abgeschätzt (z.B. bei Amerfloc MI, sulfatierte Fettsäuren mit einem Anteil von ca. > 77 %). Im Fall des Hydroformylierungsprodukts von C8-Alkenen wurden keine geeigneten Markersubstanzen für die Analytik identifiziert, so dass die Umweltkonzentration allein über die Einsatzmenge errechnet wird.

Von den vorliegenden Messwerten wurden die folgenden Kenngrößen berechnet: Mittelwert, Standardabweichung, 90. Perzentil, Maximum. Für die Risikobewertung werden entsprechend REACH Guidance R.16 [11] Mittelwert und 90. Perzentil berücksichtigt.

Zur Berechnung der Mittelwerte wurden die Vorgaben der Oberflächengewässerverordnung (OGewV, Anlage 9, Punkt 3.1.1 [76]) zur Berechnung des Jahresdurchschnitts herangezogen. Für die Berechnung der Durchschnittskonzentration der einzelnen AHS über den betrachteten Zeitraum wurden einzelne Messwerte unterhalb der Bestimmungsgrenze (BG) durch die Hälfte des Wertes der BG ersetzt. In Ergänzung hierzu wurden die Empfehlungen des BLAK [3] in Bezug auf eine einheitliche Berechnungsmethode bei Vorliegen von Messwerten unterhalb der BG berücksichtigt. Demnach gilt Folgendes: Wenn 10 % oder mehr der Messwerte einer Messstelle über der BG liegen, werden alle Messwerte kleiner BG mit der halben BG eingerechnet, ansonsten mit dem Wert „0“.

In den Datentabellen (siehe Kapitel 4.2) werden die Konzentrationen mit den errechneten Werten dargestellt, so dass diese unterhalb der BG liegen können. Zum Vergleich ist in den Datentabellen die BG zusätzlich angegeben.

3.2 Berechnung der zu erwartenden lokalen Expositionskonzentrationen (PEC-Herleitung)

Basierend auf den Durchschnittskonzentrationen in den Abwässern werden die lokalen Expositionskonzentrationen berechnet, also die Konzentration, denen die aquatischen Organismen in der Nähe der Einleitstelle ausgesetzt sind. Gemäß REACH Guidance R.16 [11] werden die Konzentrationen von Substanzen, die von einer Punktquelle (Industriestandort oder kommunale biologische Kläranlage) freigesetzt werden, nach ihrer Freisetzung in die Umwelt bewertet. Es wird angenommen, dass die zu betrachtenden Organismen bzw. Schutzgüter in der Nähe der Eintragsquelle liegen. Im Allgemeinen werden Konzentrationen auf der Grundlage einer realistischen Freisetzungsrates berechnet. Hierbei werden, sofern vorhanden oder verfügbar, die Anzahl der Tage, an denen Abwässer in ein Gewässer eingeleitet werden, bei der Berechnung der PEC berücksichtigt.

Grundsätzlich sollten der Abbau in der Umwelt und Verteilungsprozesse berücksichtigt werden. Aufgrund der relativ kurzen Zeit zwischen Eintrag und Exposition werden im lokalen Maßstab die Konzentrationen fast vollständig durch die initiale Durchmischung an der Einleitstelle bestimmt. Im regionalen Maßstab steht hingegen mehr Zeit zur Verfügung, so dass weiterer Transport und Transformationsprozesse berücksichtigt werden können. Bei der Berechnung lokaler Expositionskonzentrationen (Predicted Environmental Concentrations, PECs) im Bereich Süßwasser wird außer der Adsorption der AHS an Schwebstoffe kein anderer Eliminationsprozess entsprechend REACH Guidance R.16 [11] berücksichtigt. Die lokale Konzentration ($C_{local,water}$) wird vor allem durch die Verdünnung des Abwassers im Vorfluter beeinflusst (Tabelle 5: Formel 1, S. 23). Verflüchtigung, Abbau und Sedimentation können wegen der kurzen Entfernung zwischen dem Punkt der Abwassereinleitung und dem Expositionsort ignoriert werden.

Die Adsorption an Schwebstoffe wird durch den Verteilungskoeffizienten ($K_{p,susp}$) beschrieben. Da $K_{p,susp}$ nur in wenigen Ausnahmen als experimenteller Wert vorliegt, kann dieser vom Adsorptionskoeffizienten K_{oc} für Boden bzw. Sediment unter Berücksichtigung des organischen Kohlenstoffgehaltes in Schwebstoff abgeleitet werden (Tabelle 5: Formel 2, S. 23). Der Adsorptionskoeffizient K_{oc} wird aus dem jeweiligen Sicherheitsdatenblatt oder den registrierten Daten bei der ECHA entnommen. Sollte kein entsprechender Wert vorliegen, wird der K_{oc} mittels der MCI⁷-Methode des Moduls KOCWIN v.2.00 von EPI Suite v.4.11 berechnet (siehe Kapitel 7, Annex 1: Adsorptionskoeffizienten, Tabelle 15, S. 59).

Die Verdünnung wird über den Verdünnungsfaktor bemessen, der gemäß Formel 3 (Tabelle 5, S. 23) berechnet wird. Der Verdünnungsfaktor ist abhängig vom Durchfluss (Tabelle 2) und der Abwassereinleitungsmenge (Tabelle 3). Für K+S werden standortspezifische Faktoren berechnet (Tabelle 4, S. 22). Nach REACH Guidance R.16 [11] beträgt der maximale Verdünnungsfaktor 1000. Dieser Wert wird in der Werra nicht erreicht. Eine vollständige Durchmischung des Abwassers mit dem Oberflächenwasser wird als repräsentative Exposition für das aquatische Ökosystem angenommen. Der Durchfluss des Oberflächengewässers sollte die natürliche Fluktuation

⁷ MCI: Molecular Connectivity Index

berücksichtigen. Laut REACH Guidance R.16 [11] sollte die „low-flow rate“ oder das 10. Perzentil des Durchflusses angewendet werden. Das Deutsche Gewässerkundliche Jahrbuch [69] enthält statistisch abgesicherte Werte für den mittleren Niedrigwasserabfluss (MNQ) an den Pegeln Vacha und Gerstungen. Der Pegel Vacha liegt oberhalb der Einleitstellen. In unmittelbarer Nähe oberhalb der Einleitstelle Philippsthal fließt die Ulster in die Werra und erhöht somit den Durchfluss. Daher wurden die Durchflusswerte der Werra bei Vacha und der Ulster addiert, um einen möglichst realistischen Durchflusswert für Philippsthal zu erhalten (Tabelle 2). Es wurden Abflussdaten bis einschließlich 2015 verwendet, da es sich um die aktuellsten verfügbaren langjährigen Datenreihen handelt (Tabelle 2; [69]). Der jeweilige Messzeitraum ist Tabelle 2 zu entnehmen.

Tabelle 2: Durchflusswerte der Werra an den Pegeln Vacha und Gerstungen sowie der Ulster bei Unterbreizbach-Räsa (MQ: mittlerer jährlicher Durchfluss; MNQ: mittlerer niedrigster jährlicher Durchfluss; bezogen auf das Kalenderjahr; Quelle: [69])

Pegel	Parameter	Durchfluss	
Werra: Vacha (Fluss-km 164,80; Zeitraum: Kalenderjahr, 1922-2015)	MQ	23,5 m ³ /s	2.030.400 m ³ /d
	MNQ	5,79 m ³ /s	500.256 m ³ /d
Werra: Gerstungen (Fluss-km 137,80; Zeitraum: Kalenderjahr, 1932-2015)	MQ	30,6 m ³ /s	2.643.840 m ³ /d
	MNQ	8,11 m ³ /s	700.704 m ³ /d
Ulster: Unterbreizbach-Räsa (5 km oberhalb der Mündung in die Werra, diese ca. 3 km unterhalb Pegel Vacha) Zeitraum: Kalenderjahr, 1941-2015)	MQ	4,98 m ³ /s	430.272 m ³ /d
	MNQ	1,24 m ³ /s	107.136 m ³ /d
Durchfluss der Werra bei Philippsthal (Summe aus Werra bei Vacha + Ulster)	MQ	28,48 m ³ /s	2.460.672 m ³ /d
	MNQ	7,03 m ³ /s	607.392 m ³ /d

Die jährliche Abwassermenge, die der Berechnung zugrunde gelegt wurde, wurde den Ergebnissen der Flussgebietsmodellierung von SYDRO Consult [84] entnommen (Tabelle 3). Dies sind die jeweils für das Jahr 2021 prognostizierten Einleitmengen für die drei Standorte, da es sich hierbei um die maximale Einleitungsmenge des Antragszeitraums handelt. Da nach dem Jahr 2021 eine Reduktion der Abwassermenge geplant ist und nicht von einer Konzentrationsänderung in relevanten Größenordnungen der AHS in den Einleitungen ausgegangen wird, wird hiermit auch eine Reduzierung der Umweltkonzentrationen des AHS erwartet. Die berechneten PECs sind für das Jahr 2021 repräsentativ und stellen basierend auf den maximalen Einleitmengen für den Antragszeitraum mithin ein Worst-Case-Szenario dar. Insofern ist es nicht erforderlich, alle weiteren im Antrag dargestellten Szenarien ab dem Jahr 2022 im Hinblick auf die Risikobewertung der AHS zu betrachten.

Tabelle 3: Prognostizierte Einleitmengen an den Standorten Hattorf und Wintershall des Werkes Werra und des Werkes Neuhoof-Ellers für das Jahr 2021/Szenario 1 (Mittelwerte über den gesamten Simulationszeitraum 1979 – 2016; Quelle: Band 3.1, Kap. I.71 [84])

Standort	Einleitmenge	
	(m ³ /a)	(m ³ /d)
Hattorf (HA)	2.022.035	5.540
Neuhoof-Ellers (NE)	1.004.493	2.752
Wintershall (WI)	1.920.619	5.262
Teilmenge (HA+NE)	3.026.528	8.292
Gesamtmenge (HA+NE+WI)	4.947.147	13.554

Für die Berechnung eines Jahresdurchschnittswertes ($C_{local,water,ann}$) wird entsprechend Formel 4 (Tabelle 5, S. 23) die Anzahl der Emissionstage berücksichtigt und auf ein ganzes Jahr (365 Tage) umgerechnet. Emissionstage sind die Tage, an denen Salzabwässer und damit AHS in die Werra eingeleitet werden. Die Anzahl der Emissionstage wird von K+S mit 365 Tagen angegeben, die eine tägliche Einleitung abbildet. Im Betrieb wird die Einleitung der Abwässer in Abhängigkeit vom Durchfluss der Werra gesteuert, so dass bei Niedrigwasser weniger, bei Hochwasser mehr eingeleitet wird. Insofern ist der hier angewendete Ansatz eine Vereinfachung, indem nicht auf die tatsächliche Einleitmenge eines bestimmten Tages, sondern auf das Jahresmittel abgestellt wird.

Einige Stoffe, wie z.B. die *trans*-Zimtsäure am Standort Hattorf, werden nur zeitweise eingesetzt (im Sommer bei höheren Temperaturen, ca. 120 d/a). Allerdings zeigt sich dies bei den betreffenden Substanzen nicht am zeitlichen Konzentrationsverlauf. Die Spitzenwerte sind in unregelmäßigen Abständen über den Beobachtungszeitraum verteilt. Im Fall von 4-Chlorbenzoesäure erfolgt die Anwendung am Standort Wintershall nur bei niedrigen Außentemperaturen. In den Wintermonaten sind allerdings deutliche Konzentrationsschwankungen im Abwasser zu erkennen, daneben gehen die Konzentrationen auch in den Sommermonaten nicht auf „Null“ zurück. Möglicherweise spielt die Bildung von Reaktionsprodukten im Laufe des Aufbereitungsprozesses (elektrisches Feld, hohe Temperaturen etc.) eine Rolle. Folglich ist auch in diesen beiden Fällen eine Ableitung des Mittelwerts über den gesamten Beobachtungszeitraum gerechtfertigt basierend auf einer Einleitung von 365 d/a. Um erhöhte Konzentrationen im Abwasser beurteilen zu können, werden neben den Mittelwert-basierten PECs auch PECs bezogen auf das 90. Perzentil berechnet.

Um aus der lokalen Konzentration $C_{local,water}$ die PEC abzuleiten, wird die Hintergrundkonzentration ($PEC_{regional,water}$) des betrachteten AHS addiert (Tabelle 5: Formel 5 und 6, S. 23; REACH Guidance R.16 [10]). Mit Ausnahme von Bor und Fettsäuren ist von keiner nennenswerten Hintergrundbelastung auszugehen, da es sich bei den übrigen AHS um Industriechemikalien handelt, die in der Natur bzw. im Gewässer nicht in nachweisbaren bzw. quantifizierbaren ($< BG$) Konzentrationen vorkommen. Stromaufwärts gibt es keine weiteren Einleiter, so dass eine nennenswerte Hintergrundbelastung ausgeschlossen werden kann. Dies bestätigen auch die Analysedaten an der Messstelle Unterrohn (Tabelle 7, S. 29). Entsprechend wurde für alle AHS mit Ausnahme von Bor und Fettsäuren die Hintergrundbelastung mit 0 mg/L in die PEC-Berechnung aufgenommen. Für eine genauere Darstellung der Ergebnisse wird auf Kapitel 4.2.1 verwiesen.

Hinsichtlich des Einsatzstoffs Ammoniumacetat besteht die Besonderheit, dass die nachgewiesenen Gehalte von NH_4-N in den salzhaltigen Abwässern höchstwahrscheinlich nicht nur aus dem Einsatz von Ammoniumacetat, sondern auch aus dem Rohsalz selbst sowie aus dem Sprengstoffeinsatz unter Tage resultieren. Eine isolierte Bewertung des AHS Ammoniumacetat auf Basis der NH_4-N -Konzentrationen ist somit nicht durchführbar. Eine Analytik der Komponente Acetat ist nicht möglich. Daher wird an dieser Stelle die Bewertung des AHS Ammoniumacetat nicht weiter verfolgt. Die Einleitung von Ammoniumacetat bzw. Ammonium wird daher als Nährstoff an anderer Stelle des Antrags bewertet (siehe Band 2.6, Kap. 4.2.3).

Die Einleitung der Abwässer in die Werra erfolgt an drei Einleitstellen innerhalb von weniger als 15 km Fließstrecke. Insofern wurden die folgenden Einleitszenarien entwickelt:

1. PEC-Ableitung für die einzelnen Einleitungen
 - a. Einleitstrom von HA bei Durchfluss aus MNQ am Pegel Vacha/Werra und MNQ am Pegel Unterbreizbach-Räsa/Ulster
 - b. Einleitstrom von NE bei Durchfluss aus MNQ am Pegel Vacha/Werra und MNQ am Pegel Unterbreizbach-Räsa/Ulster
 - c. Einleitstrom von WI bei Durchfluss aus MNQ am Pegel Gerstungen/Werra
2. PEC-Ableitung für die Kombination von Einleitungen
 - a. Einleitstrom von HA + NE bei Durchfluss aus MNQ am Pegel Vacha/Werra und MNQ am Pegel Unterbreizbach-Räsa/Ulster
 - b. Einleitstrom von HA + NE + WI bei Durchfluss aus MNQ am Pegel Gerstungen/Werra

Insbesondere das Einleitszenario 2b stellt ein Worst-Case-Szenario dar, da alle drei Einleitungen (HA, NE, WI) an einem Punkt zusammengefasst werden. Bei der Risikobeurteilung sollte beachtet werden, dass Konzentrationsabnahmen im Verlauf der Werra z.B. durch Verdünnung und Abbau zwischen den Standorten HA und WI nicht berücksichtigt werden.

Tabelle 4: Verdünnungsfaktoren für die Einleitszenarien (Abwassermengen siehe Tabelle 3, Durchflusswerte der Werra und der Ulster siehe Tabelle 2)

Einleitströme	Einleitszenario	Werra Pegel Vacha + Ulster Pegel Unterbreizbach-Räsa		Werra Pegel Gerstungen	
		MNQ	MQ	MNQ	MQ
HA	1a	111	445	-	-
NE	1b	222	895	-	-
WI	1c	-	-	134	503
HA+NE	2a	74	298	-	-
HA+NE+WI	2b	-	-	53	196

Tabelle 5: Ableitung der lokalen Konzentration der AHS in Wasser PEC_{local} (Formeln aus REACH Guidance Dokument R.16 [10])

$C_{local,water} = \frac{C_{local,eff}}{(1 + K_{p_{susp}} \cdot SUSP_{water} \cdot 10^{-6}) \cdot Dilution}$		Formel 1	
$K_{p_{susp}} = F_{oc_{susp}} \cdot K_{oc}$		Formel 2	
$Dilution = \frac{Abwasser + FLOW}{Abwasser}$		Formel 3	
$C_{local,water,ann} = C_{local,water} \cdot \frac{T_{emission}}{365}$		Formel 4	
$PEC_{local,water} = C_{local,water} + PEC_{regional,water}$		Formel 5	
$PEC_{local,water,ann} = C_{local,water,ann} + PEC_{regional,water}$		Formel 6	
Parameter	Erläuterung	Einheit	Standard-werte
C _{local,eff}	Konzentration der Substanz im Abwasser	[mg/L]	
K _{p_{susp}}	Verteilungskoeffizient für Schwebstoff-Wasser	[L/kg]	
SUSP _{water}	Schwebstoffkonzentration in Wasser	[mg/L]	15
Dilution	Verdünnungsfaktor (komplette Durchmischung)	[-]	max. 1.000
C _{local,water}	lokale Konzentration der Substanz während der Eintragsphase	[mg/L]	
F _{oc_{susp}}	Gehalt an organischem Kohlenstoff in Schwebstoff	[kg _{oc} /kg _{solid}]	0,1
K _{oc}	Verteilungskoeffizient organischer Kohlenstoff-Wasser	[L/kg]	
Abwasser	Abwassermenge pro Tag	[L/d]	
FLOW	Durchfluss des Vorfluters (hier: Werra)	[L/d]	

3.3 Berechnete Konzentrationen in der Werra aus Frachtbetrachtungen

Die Firma SYDRO Consult hat auf Basis des für die Werra entwickelten Flussgebietsmodells [84] Frachtberechnungen auch für die AHS durchgeführt. Diese Frachtberechnungen basieren auf den aus dem Modell ermittelten Einleitungsmengen (siehe Tabelle 3) und Durchflussdaten über den Simulationszeitraum 1979 – 2016 sowie auf den aus der Eigenkontrolle ermittelten Abwasserkonzentrationen⁸ (siehe Kapitel 3.1). Die auf diese Weise errechneten Umweltkonzentrationen (Tabelle 6) werden in Ergänzung zu den gemessenen AHS-Konzentrationen in der Werra (MEC) und den aus den Abwasserkonzentrationen abgeleiteten PECs bei der Bestimmung der Risikoquotienten (RCR) zum Vergleich verwendet.

Zu beachten ist, dass das Flussgebietsmodell für die Berechnung der Salzlast (Cl, K, Mg) der Werra entwickelt wurde. Auch die Frachtberechnungen berücksichtigen Adsorption, Bioabbau und andere Prozesse, die bei den organischen AHS eine Konzentrationsabnahme bedingen können, nicht.

⁸ Hierbei wurden Werte < BG mit BG in Mittelwert- und 90.Perzentil-Berechnungen einbezogen (Worst-Case).

Tabelle 6: Berechnete Konzentrationen der AHS am Pegel Gerstungen für das Jahr 2021 auf Basis von Frachtberechnungen (Quelle: SYDRO Consult [84], Szenario 1)

Parameter	Konzentrationen - Immissionen am Pegel Gerstungen			
	MW	90Perz	Max	
Salicylsäure	0,083	0,15	0,23	mg/L
4-Chlorbenzoesäure	0,002	0,004	0,007	mg/L
Resorcyssäure	0,0001	0,0002	0,0014	mg/L
Zimtsäure	0,0003	0,0003	0,0075	mg/L
Gluconsäure	0,004	0,012	0,036	mg/L
Glykolsäure	0,002	0,002	0,002	mg/L
Fettsäuren	0,008	0,015	0,029	mg/L
Laurinsäure (C12:0)	0,0007	0,002	0,007	mg/L
Myristinsäure (C14:0)	0,0004	0,001	0,005	mg/L
Palmitinsäure (C16:0)	0,0003	0,001	0,003	mg/L
Ölsäure (C18:1n9c)	0,0002	0,001	0,002	mg/L
Bor (Ulexit)	0,0040	0,007	0,008	mg/L
Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N) ⁹	0,028	-	-	mg/L
Hexadecylamin ¹⁰	0,002	0,002	0,020	µg/L
Octadecylamin ¹⁰	0,004	0,008	0,036	µg/L
1-Dodecanol ^{11,12}	0,010	0,010	0,010	µg/L
1-Tetradecanol ^{11, 12}	0,010	0,010	0,010	µg/L
Diethylenglycolmonohexylether ¹³	3,8	4,8	7,2	µg/L
Triethylenglycolmonohexylether ¹³	3,2	3,8	7,1	µg/L
Alkylpolyglykolether ¹³	29	36	60	µg/L
2-Ethylhexyl-2-ethylhexanoat ¹⁴	0,020	0,020	0,020	µg/L
Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800) ¹¹	0,25	0,25	0,25	µg/L
Sulfatierte Fettsäuren ¹⁵	2,5	4,5	35	µg/L
Natriumsalze sulfatierter Fettsäuren (Amerfloc MI)	3,2	5,8	45	µg/L
PEG/PPG alkylisiert	0,013	0,025	0,12	µg/L

⁹ berechnet als Worst-Case

¹⁰ C16- bzw. C18-Alkylamin; Bestandteil von C16-C18-Alkylaminen

¹¹ Mittelwert, 90. Perzentil und Maximalwert der Immissionen sind identisch, da die Konzentrationen in den Einleitungen kontinuierlich unterhalb der BG von 10 µg/L lagen.

¹² C12- bzw. C14-Fettalkohol; Bestandteil von C12-C14-Fettalkohol (CAS 80206-82-2)

¹³ Diethylenglycolmonohexylether und Triethylenglycolmonohexylether sind Bestandteil von Alkylpolyglykolether (Flotanol F). Beide Substanzen haben zusammen einen Anteil von 24 % an Flotanol F.

¹⁴ Bestandteil von Montanol 800 (Handelsname), Anteil ca. 8 %

¹⁵ Sulfatierte Fettsäuren sind Bestandteil (ca. > 77 %) von Amerfloc MI (Handelsname).

3.4 PNEC-Herleitung

Die Methode zur Herleitung der PNECs, also der Nicht-Effekt-Konzentrationen, für die einzelnen AHS ist im Detail in Kapitel 8 beschrieben. Bei der Herleitung der PNECs werden die drei trophischen Ebenen der Primärproduzenten (z.B. Algen), Invertebraten (z.B. Daphnien) und Prädatoren (z.B. Fische) berücksichtigt. Die PNECs werden bevorzugt auf Basis von Langzeitdaten abgeleitet, alternativ werden Kurzzeiteffekte berücksichtigt. Hierzu wird der jeweils niedrigste Effektwert herangezogen.

Um Unsicherheiten, z.B. durch die Betrachtung von nur wenigen Spezies auszugleichen, werden konservative und somit protektive Sicherheitsfaktoren (Tabelle 16) entsprechend REACH Guidance Document (2008, Kapitel R.10.3.1.2 [9]) und TGD CIS No. 27 (2011/2018 [31]) angewendet. Diese Werte können je nach Datenlage und Besonderheiten bezüglich der Subanzeigenschaften angepasst werden. Somit sind jeweils alle betrachteten trophischen Ebenen abgedeckt und bei Einhaltung des Schwellenwertes geschützt. Die PNEC ist somit durch Ableitung von der sensitivsten trophischen Ebene und unter Anwendung von konservativen Sicherheitsfaktoren jeweils ausreichend protektiv.

3.5 Beurteilung des Risikos für das Umweltkompartiment Wasser anhand des RCR

Zur Charakterisierung des Risikos für das Umweltkompartiment Wasser wird der Risikoquotient (RCR) nach REACH Guidance R.16 [11] berechnet, der sich aus der lokalen berechneten bzw. gemessenen Umweltkonzentration (PEC bzw. MEC) und der PNEC ergibt.

$$\text{RCR local}_{\text{water}} = \frac{\text{PEC local}_{\text{water}}}{\text{PNEC}_{\text{water}}} \quad \text{Formel 7}$$

$$\text{RCR local}_{\text{water}} = \frac{\text{MEC local}_{\text{water}}}{\text{PNEC}_{\text{water}}} \quad \text{Formel 8}$$

Aus dem Ergebnis des RCR lässt sich ableiten, ob durch die Einleitung eines AHS ein Risiko für das aquatische Ökosystem der Werra besteht oder nicht. Überschreiten die abgeleiteten Konzentrationen eines AHS in der Werra (PEC bzw. MEC) die Nicht-Effekt-Konzentration ($\text{RCR} > 1$), ist von einem nicht akzeptablen Risiko für die aquatische Umwelt auszugehen. Bei einem $\text{RCR} < 1$ gilt das Risiko als akzeptabel bzw. ausreichend kontrolliert (REACH Guidance R.16, [11]).

Bei einem $\text{RCR} > 1$ sollte zunächst die Ableitung von PEC und/oder PNEC überprüft werden. Im Falle der PEC, welche im ersten Ansatz für einen Worst-Case berechnet wird (insbesondere Verdünnung bei MNQ), kann durch Verfeinerung der angewendeten Expositionsszenarien (Betrachtung einzelner Punktquellen, Durchfluss, Einleitmengen, Eliminationsprozesse etc.) eine genauere und damit realistischere Abbildung der Einleitsituation erreicht werden. Sofern der RCR weiterhin > 1 bleibt, ist das Risiko nicht akzeptabel, und es sollten Risikominimierungsmaßnahmen erörtert werden.

Da für die Werra neben den abzuleitenden Umweltkonzentrationen (PEC) auch Messdaten (MEC) sowie aus Frachtdaten abgeleitete Umweltkonzentrationen vorliegen (Tabelle 6), ist eine Berechnung des RCR auch auf Basis dieser Werte zur umfassenderen Ermittlung des Risikos für die aquatische Umwelt sinnvoll.

4 Ergebnisse und Diskussion

4.1 Umweltverhalten

In diesem Abschnitt werden Persistenz und Bioakkumulationspotential der AHS im aquatischen Bereich erläutert. Das Umweltverhalten der einzelnen AHS wird detaillierter in Kapitel 9 beschrieben. Bei persistenten und bioakkumulierenden Substanzen ist die Vorhersage langfristiger Wirkungen und die Beurteilung möglicher Schäden mit der üblichen Methodik der Risikobewertung (PEC/PNEC) nicht möglich, weil der langfristige Verbleib in der Umwelt (Persistenz) und die Anreicherung (Bioakkumulation) keine belastbare Vorhersage der Exposition von aquatischen Organismen, wie z. B. Fischen, erlauben.

4.1.1 Bioabbaubarkeit und Persistenz

Die Persistenz beschreibt die Lebensdauer einer Substanz, die durch verschiedene Prozesse abgebaut wird. Ein wichtiger Prozess ist der biologische Abbau, der auf organische Moleküle beschränkt ist. Unter REACH ist die leichte biologische Abbaubarkeit¹⁶ ein Screening-Kriterium zur Identifizierung von persistenten (P) oder sehr persistenten Substanzen (vP). Die AHS sind bis auf eine Ausnahme leicht biologisch abbaubar. Alleine Montanol 800 (Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether) ist nur mäßig biologisch abbaubar. Für Ulexit als anorganische Substanz ist die biologische Abbaubarkeit nicht relevant.

4.1.2 Bioakkumulationspotential

Durch Bioakkumulation können sich Stoffe, die in eigentlich unbedenklichen Umweltkonzentrationen vorliegen, in Organismen anreichern, so dass eine für den jeweiligen Organismus schädliche Konzentration erreicht wird. Das Bioakkumulationspotential der AHS wird auf Grundlage des log Kow als Screening-Kriterium abgeschätzt, um aufwendige Bioakkumulationsstudien mit Vertebraten aus Tierschutzgründen zu vermeiden. Zusätzlich können über verschiedene QSAR-Modelle Biokonzentrationsfaktoren berechnet werden. Entsprechend der REACH-Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 gilt ein Stoff mit einem log Kow > 3 als signifikant bioakkumulierend. Die CLP-Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 stuft Stoffe erst bei einem log Kow von > 4 als signifikant bioakkumulierend ein. Unter REACH gilt ein log Kow von > 4,5 als kritische Grenze für potentiell bioakkumulierende (B) oder sehr bioakkumulierende Substanzen (vB). Der Verdacht kann mittels Studien oder über Auswertung verschiedener Informationen zur Substanz (log Kow, berechnete BCF, Metabolismus, etc.) bestätigt oder widerlegt werden. Eine abschließende Beurteilung des Bioakkumulationspotentials kann aufgrund der komplexen und teilweise unklaren Zusammensetzung einiger AHS sowie der Vielzahl der Substanzen und der komplexen biochemischen Zusammenhänge nicht erfolgen.

Die folgenden, hier eingesetzten Substanzen haben einen log Kow < 3, so dass sie kein signifikantes Bioakkumulationspotential besitzen und sich mit hoher Wahrscheinlichkeit nicht in signifikantem Ausmaß in aquatischen Organismen anreichern werden: Salicylsäure, Resorcylsäure, Glykolsäure, Gluconsäure, *trans*-Zimtsäure, Alkylpolyglykoether, 3-Butoxy-2-propanol (Bestandteil von Amerfloc MI), Montanol 800, 4-Chlorbenzoesäure, Benzoesäure.

Zwei der hier eingesetzten Substanzen besitzen einen log Kow > 3, aber < 4,5, so dass von einem signifikanten, aber nicht kritischen Bioakkumulationspotential auszugehen ist: C16-C18-Alkylamine (Genamin SH 100) und Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N). Für C16-C18-Alkylamine wurde ein BCF mit einem QSAR-Modell berechnet. Dieser BCF liegt mit einem Wert von

¹⁶ Leichte biologische Abbaubarkeit wird u.a. nach OECD-Richtlinie 301A–E getestet.

173 L/kg deutlich unter dem kritischen Wert von 500 L/kg bei CLP (Verordnung (EG) Nr. 1272/2008) sowie auch deutlich niedriger als der kritische Wert für B/vB-Substanzen von 2000 L/kg (Verordnung (EG) Nr. 1907/2006, REACH). Somit kann bei dieser Substanz davon ausgegangen werden, dass sie sich wahrscheinlich nicht signifikant in aquatischen Organismen anreichern wird. Für den UVCB Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen liegen keine Daten zum BCF vor, so dass hier keine Abschätzung erfolgen kann. Es ist lediglich festzustellen, dass die Substanz die Kriterien für B/vB-Substanzen nicht erfüllt, da der $\log K_{ow} < 4,5$ liegt. Da dieser AHS jedoch leicht biologisch abbaubar ist (80–90% nach 28 d, OECD 301B), ist eine signifikante Bioakkumulation als unwahrscheinlich anzunehmen.

Eingesetzte Substanzen mit $\log K_{ow} > 4,5$ sind die Folgenden:

- Fettsäuren, C12-18 und C18 ungesättigt (Laurinsäure (exp. BCF = 255), Myristinsäure, Ölsäure, Palmitinsäure) – schnell abbaubar und metabolisierbar
- Natriumsalze sulfatierter Fettsäuren (Fatty acids, vegetable-oil, sulfated, sodium salts, Bestandteil von Amerfloc MI)
- 1-Dodecanol (BCF = 48)
- 1-Tetradecanol (BCF = 187)

Der $\log K_{ow}$ von Fettsäuren, C12-18 und C18 ungesättigt, sowie von dessen identifizierten Bestandteilen liegt deutlich oberhalb des kritischen Wertes für potentiell bioakkumulierende Stoffe ($\log K_{ow} > 4,5$), dennoch kann eine Bioakkumulation in aquatischen Organismen ausgeschlossen werden, da der AHS und seine Komponenten als Fettsäuren leicht biologisch abbaubar und schnell metabolisierbar sind. Zusätzlich liegt für die Komponente Laurinsäure ein experimenteller BCF vor (BCF = 255 L/kg), der eine signifikante Bioakkumulation widerlegt. Aufgrund der Strukturverwandtschaft mit den anderen Bestandteilen des AHS kann diese Schlussfolgerung auf diese ausgeweitet werden.

Das hier eingesetzte Natriumsalz sulfatierter Fettsäuren (Fatty acids, vegetable-oil, sulfated, sodium salts, CAS 61788-67-8) als Bestandteil von Amerfloc MI ist leicht biologisch abbaubar (OECD 301B: 82 % in 28 d; [27]) wie auch Amerfloc MI selbst (OECD 301D: 94 % in 21 d; [56]), so dass die Substanz sehr wahrscheinlich auch einem schnellen Metabolismus in Organismen unterliegt und eine signifikante Bioakkumulation daher unwahrscheinlich ist.

1-Dodecanol und 1-Tetradecanol zeichnen sich beide durch hohe $\log K_{ow}$ -Werte aus. Ein signifikantes Bioakkumulationspotential ist jedoch basierend auf den berechneten BCF-Werten (48 bzw. 187 L/kg) auszuschließen.

Eine unklare Datenlage besteht für den AHS PEG/PPG alkylisiert (Drewplus 4009 G). Es liegen keine Werte für $\log K_{ow}$ oder BCF vor, so dass eine Aussage zum Bioakkumulationspotential des UVCB nicht möglich ist. Allerdings ist der AHS leicht biologisch abbaubar (OECD 301F: 77% nach 28 d, [83]), so dass der AHS sehr wahrscheinlich auch einem schnellen Metabolismus in Organismen unterliegt und eine signifikante Bioakkumulation daher unwahrscheinlich ist.

Insgesamt ist festzustellen, dass die eingesetzten Substanzen keine PBT/vPvB-Substanzen sind, da sie alle – mit Ausnahme von Montanol 800 – leicht biologisch abbaubar sind oder wie im Falle von Montanol 800 einen niedrigen $\log K_{ow}$ aufweisen. Die Beurteilung der Exposition von aquatischen Organismen kann also mit dem Vergleich von Nicht-Effekt-Konzentration und erwarteter Umweltkonzentration (PEC/PNEC bzw. MEC/PNEC) erfolgen.

4.2 Monitoringdaten

4.2.1 Werra: Messstelle Unterrohn

Die Mittelwerte und weiteren Kenngrößen an der Messstelle Unterrohn sind in Tabelle 7 zusammengefasst. Die gemessenen Konzentrationen fast aller AHS bzw. deren Markersubstanzen liegen unterhalb der BG, insofern ist mit Ausnahme von drei Stoffen von keiner anthropogenen Vorbelastung auszugehen. Diese Ausnahmen sind Ammoniumstickstoff ($\text{NH}_4\text{-N}$), Bor und Fettsäuren (gesamt). Regelmäßig wurde an dieser Messstelle nur $\text{NH}_4\text{-N}$ oberhalb der BG nachgewiesen, während die Konzentrationen von Bor und Fettsäuren im Betrachtungszeitraum zumeist unterhalb der Bestimmungsgrenze lagen (2 bzw. 3 Werte > BG).

Die festgestellte mittlere Konzentration an $\text{NH}_4\text{-N}$ liegt bei 0,10 mg/L (max. 0,27 mg/L). Ammoniumstickstoff kann sowohl aus natürlichen als auch aus anthropogenen Quellen (z. B. ammoniumhaltige Düngemittel, Abwässer etc.) ins Gewässer gelangen. Aufgrund der Hintergrundbelastung und der verschiedenen Quellen von $\text{NH}_4\text{-N}$ in der Werra wurde eine Risikobewertung des AHS Ammoniumacetat nicht vorgenommen (siehe auch Kapitel 3.2).

Für Fettsäuren (gesamt) wurden nur bei zwei von 42 Messwerten Konzentrationen oberhalb der BG (0,01 mg/L) ermittelt. Nach der in Kapitel 3.1 beschriebenen Methode liegt der Mittelwert für den Beobachtungszeitraum (0,6 µg/L) folglich unterhalb der BG (10 µg/L). Der Maximalwert für Fettsäuren (gesamt) beträgt 200 µg/L. Die im AHS enthaltenen Fettsäuren (Laurin-, Myristin-, Palmitin- und Ölsäure) wurden hingegen in keiner Stichprobe als Einzelsubstanz oberhalb der BG nachgewiesen.

Ähnlich wie bei den Fettsäuren (gesamt) wurde auch Bor nur vereinzelt nachgewiesen. Nur in drei Stichproben lag die Konzentration von Bor oberhalb der BG von 100 µg/L (MW: 9 µg/L).

In Hinblick auf die Verwendung der Messwerte am Pegel Unterrohn als Hintergrundwerte für die PEC-Ableitung kann auf eine Berücksichtigung bei der PEC-Ableitung verzichtet werden. Lediglich Fettsäuren (gesamt), Bor und Ammoniumstickstoff wurden nachgewiesen. Bei Fettsäuren lag nur der Summenparameter oberhalb der Nachweisgrenze, so dass auch hier keine relevanten Werte vorliegen. Die Konzentrationen von Bor sind in Vergleich zu den Konzentrationen im Abwasser vernachlässigbar. Folglich wurde auch bei diesen AHS auf eine Berücksichtigung bei der PEC-Ableitung verzichtet, bzw. die Hintergrundkonzentration wurde mit 0 mg/L festgelegt.

Tabelle 7: Analysedaten der AHS an der Messstelle Unterrohn: Januar 2015 bis Juni 2018 (n = 42)

Substanz	Einheit	BG	Mittelwert	Standardabweichung	90-Perz.	Max.	Bemerkung
Salicylsäure	mg/L	0,04	0	-	-	-	alle Werte < BG
4-Chlorbenzoesäure	mg/L	0,02	0	-	-	-	alle Werte < BG
Resorcylsäure	mg/L	0,01	0	-	-	-	alle Werte < BG
Zimtsäure	mg/L	0,01	0	-	-	-	alle Werte < BG
Gluconsäure	mg/L	0,2	0	-	-	-	alle Werte < BG
Glykolsäure	mg/L	1	0	-	-	-	alle Werte < BG
Fettsäuren (gesamt)	mg/L	0,01	0,0060	0,032	0	0,20	2 Werte > BG
Laurinsäure (12:0)	mg/L	0,01	0	-	-	-	alle Werte < BG
Myristinsäure (C14:0)	mg/L	0,01	0	-	-	-	alle Werte < BG
Palmitinsäure (C16:0)	mg/L	0,01	0	-	-	-	alle Werte < BG
Ölsäure (C18:1n9c)	mg/L	0,01	0	-	-	-	alle Werte < BG
Bor (Ulexit)	mg/L	0,1	0,009	0,033	0	0,13	3 Werte > BG
Ammonium NH ₄ -N	mg/L	0,04	0,10	0,057	0,18	0,27	-
Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N)	mg/L	-	-	-	-	-	keine Analyse-methode
Hexadecylamin ¹⁰	µg/L	1	0	-	-	-	alle Werte < BG
Octadecylamin ¹⁰	µg/L	2	0	-	-	-	alle Werte < BG
1-Dodecanol ¹²	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
1-Tetradecanol ¹²	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
Alkylpolyglykolether ¹³ (beide Marker-substanzen ca. 24 %)	µg/L	-	0	-	-	-	-
Diethylenglycol-monohexylether	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
Triethylenglycol-monohexylether	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800; ca. 8 % EEH)	µg/L	-	0	-	-	-	-
2-Ethylhexyl-2-ethylhexanoat (EEH)	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
Amerfloc MI (ca. > 77% SFA)	µg/L	-	0	-	-	-	-
Sulfatierte Fettsäuren (SFA)	µg/L	6	0	-	-	-	alle Werte < BG
PEG/PPG alkyliert	µg/L	5	0	-	-	-	alle Werte < BG

4.2.2 Werra: Messstelle Gerstungen

Auch an dieser Messstelle liegt die überwiegende Anzahl der Messwerte unterhalb der BG (Tabelle 8). Nur Ammoniumstickstoff (NH₄-N) wurde regelmäßig nachgewiesen. Die Messwerte von Fettsäuren (gesamt), sulfatierten Fettsäuren (SFA) und Bor lagen nur in wenigen Proben oberhalb der jeweiligen Bestimmungsgrenze. So wurden im Fall von Laurinsäure in drei Fällen Konzentrationen oberhalb der BG ermittelt, während bei Myristin- und Palmitinsäure jeweils nur eine Probe Konzentrationen oberhalb der BG aufwies.

Tabelle 8: Analysedaten am Pegel Gerstungen: Januar 2015 bis Juni 2018 (n = 42)

Substanz	Einheit	BG	Mittelwert	Standardabweichung	90-Perz.	Max	Bemerkung
Salicylsäure	mg/L	0,04	0	-	-	-	alle Werte < BG
4-Chlorbenzoesäure	mg/L	0,02	0	-	-	-	alle Werte < BG
Resorcyllsäure	mg/L	0,01	0	-	-	-	alle Werte < BG
Zimtsäure	mg/L	0,01	0	-	-	-	alle Werte < BG
Gluconsäure	mg/L	0,2	0	-	-	-	alle Werte < BG
Glykolsäure	mg/L	1	0	-	-	-	alle Werte < BG
Fettsäuren (gesamt)	mg/L	0,01	0,017	0,040	0,002	0,23	9 Werte > BG
Laurinsäure (12:0)	mg/L	0,01	0,001	0,003	0,000	0,020	2 Werte > BG
Myristinsäure (C14:0)	mg/L	0,01	0,001	0,003	0,000	0,020	1 Wert > BG
Palmitinsäure (C16:0)	mg/L	0,01	0,001	0,005	0,000	0,030	1 Wert > BG
Ölsäure (C18:1n9c)	mg/L	0,01	0	-	-	-	alle Werte < BG
Bor (Ulexit)	mg/L	0,1	0,05	0,25	0,00	1,6	4 Werte > BG
Ammonium NH ₄ -N	mg/L	0,04	0,14	0,06	0,23	0,31	-
Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N)	mg/L	-	-	-	-	-	keine Analytikmethode
Hexadecylamin ¹⁰	µg/L	1	0	-	-	-	alle Werte < BG
Octadecylamin ¹⁰	µg/L	2	0	-	-	-	alle Werte < BG
1-Dodecanol ¹²	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
1-Tetradecanol ¹²	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
Alkylpolyglykoether ¹³ (beide Marker-substanzen ca. 24 %)	µg/L	-	0	-	-	-	
Diethylenglycol-monohexylether	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
Triethylenglycol-monohexylether	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800; ca. 8 % EEH)	µg/L	-	0	-	-	-	
2-Ethylhexyl-2-ethylhexanoat (EEH)	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
Amerfloc MI (ca. > 77 % SFA)	µg/L	-	0,28	1,8	0,00	12	berechnet
Sulfatierte Fettsäuren (SFA)	µg/L	6	0,21	1,4	0,00	9,0	1 Wert > BG
PEG/PPG alkylisiert	µg/L	5	0	-	-	-	alle Werte < LOD bzw. LOQ

4.2.3 Einleitung des Standorts Hattorf des Werkes Werra (Einleitstelle Hattorf)

Die an diesem Standort zur Zeit eingesetzten AHS und deren Konzentrationen in der Einleitung des Standorts HA stellt Tabelle 9 dar. Diese Stoffe bzw. deren Komponenten werden analytisch im Einleitungsstrom überwacht.

Salicylsäure wurde in allen Stichproben mit einer mittleren Konzentration von 18 mg/L nachgewiesen. Der AHS *trans*-Zimtsäure wird nur im Sommer eingesetzt, jedoch ist bei den Analyse-Ergebnissen keine zeitliche Übereinstimmung zwischen Einsatz und Nachweis ersichtlich, auch weil über die Hälfte der Stichproben Konzentrationen unterhalb der BG aufwiesen. Gluconsäure wurde in weniger als der Hälfte der Stichproben nachgewiesen (MW: 1,1 mg/L). Fettsäuren (gesamt) wurden in fast allen (n=41) Proben nachgewiesen mit einem Mittelwert von 1,7 mg/L. Bei den einzelnen Fettsäuren hat Laurinsäure die höchste gemittelte Konzentration (0,22 mg/L). Die Konzentrationsabfolge ist Laurinsäure > Myristinsäure > Palmitinsäure > Ölsäure (0,066–0,22 mg/L). Bor als Bestandteil des AHS Ulexit lag in allen Proben oberhalb der BG (MW: 2,0 mg/L). Montanol 800 wird über die Markersubstanz 2-Ethylhexyl-2-ethylhexanoat (EEH) bestimmt. Ein Nachweis von EEH erfolgte bei der BG von 10 µg/L in keiner der Stichproben. Folglich beträgt die gemittelte Konzentration von Montanol 800: 0 µg/L. Der AHS Amerfloc MI besteht zu ca. > 77 % aus sulfatierten Fettsäuren (SFA) und wird hierüber analytisch bestimmt. In der Hälfte der Proben wurden SFA nicht nachgewiesen (BG = 6 µg/L). Die mittlere Konzentration von Amerfloc MI beträgt 97 µg/L.

Kaliumbenzoat wird erst seit Mitte 2019 dauerhaft am Standort HA eingesetzt. Basierend auf der Einsatzmenge des AHS von 120 t/a Kaliumbenzoat bzw. ca. 92 t/a Benzoesäure wurde eine Abwasserkonzentration von ca. 45 mg/L (Benzoesäure) berechnet.¹⁷ Dieser Wert stellt den Worst-Case dar, da bei diesem Rechenansatz keine Abbauprozesse im Abwasser berücksichtigt werden. Gemessene Konzentrationen von Benzoesäure im Abwasser des Standortes liegen aus dem Zeitraum eines Betriebsversuch vor, der in etwa die Bedingungen des aktuellen Einsatzes widerspiegelt. Die maximale gemessene Benzoesäure-Konzentration im Abwasser des Betriebsversuchs betrug 18,9 mg/L. Dieser Wert stellt einen realistischen Worst-Case im Gegensatz zum rein rechnerischen Ansatz dar und wird daher im Rahmen der vorliegenden Risikobewertung herangezogen. Im Vergleich hierzu wurden seit Juli 2019 Benzoesäure-Konzentrationen im Abwasser zwischen 0,41 und 0,9 mg/L gemessen.

Glykolsäure wird seit September 2019 am Standort HA an Stelle von Gluconsäure eingesetzt. Es lagen zur Zeit der Gutachtenerstellung hierzu noch keine Messwerte im Abwasser vor. Basierend auf den Erfahrungen des Einsatzes von Glykolsäure am Standort WI ist davon auszugehen, dass auch hier der AHS sowohl im Abwasser als auch in der Werra nicht nachweisbar sein wird.¹⁸

¹⁷ Berechnet als Quotient aus Einsatzmenge (92 t/a) und Abwassermenge prognostiziert für das Jahr 2021 (2.022.035 m³/a)

¹⁸ Erste Abschätzungen im Rahmen der Zulassung des Sonderbetriebsplans (Az. 34/Hef – 76 d 312 – 147/5) ergaben insofern, dass hinsichtlich des Einsatzes von Glykolsäure kein Risiko für die aquatischen Lebensgemeinschaften der Werra besteht.

Tabelle 9: Konzentrationen der Aufbereitungshilfsstoffe in der Einleitung des Standorts Hattorf des Werkes Werra; Grundlage Analysedaten von Januar 2015 bis Juni 2018 (n = 42)

Substanz	Einheit	BG	Mittelwert	Standardabweichung	90-Perz.	Max.	Bemerkung
Salicylsäure	mg/L	0,04	18	13	312	47	-
Zimtsäure	mg/L	0,01	0,16	0,61	0,14	3,8	23 Werte < BG; Einsatz nur im Sommer
Gluconsäure	mg/L	0,2	1,1	2,2	4,3	11	29 Werte < BG
Fettsäuren	mg/L	0,01	1,7	1,2	3,5	4,8	1 Wert < BG
Laurinsäure (12:0)	mg/L	0,01	0,22	0,44	0,54	2,3	13 Werte < BG
Myristinsäure (C14:0)	mg/L	0,01	0,14	0,35	0,23	2,0	17 Werte < BG
Palmitinsäure (C16:0)	mg/L	0,01	0,075	0,15	0,19	0,75	20 Werte < BG
Ölsäure (C18:1n9c)	mg/L	0,01	0,066	0,14	0,17	0,75	20 Werte < BG
Bor (Ulexit)	mg/L	0,1	2,0	0,9	3,4	4,2	-
Benzoessäure (Kaliumbenzoat)	mg/L	0,02	-	-	-	18,9	Maximalwert aus Betriebsversuch (14.–27.01.2019)
Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800) (ca. 8 % EEH)	µg/L	-	0	-	-	-	berechnet
2-Ethylhexyl-2-ethylhexanoat (EEH)	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
Amerfloc MI (ca. > 77 % SFA)	µg/L	-	97	220	190	1250	berechnet
Sulfatierte Fettsäuren (SFA)	µg/L	6	74	170	150	960	17 Werte < BG

4.2.4 Einleitung des Werkes Neuhof-Ellers

Tabelle 10 stellt die Konzentrationen der AHS bzw. deren Markersubstanzen (ohne Ammoniumacetat) sowie deren berechnete Kenngrößen im salzhaltigen Abwasser des Werkes Neuhof-Ellers im Betrachtungszeitraum dar. Für die Bestimmung des Hydroformylierungsprodukts von C8-Alkenen (Oxoöl 9N) gibt es kein Analyseverfahren, so dass die angegebene Konzentration über die eingesetzte Menge an Oxoöl 9N berechnet wurde (Worst-Case-Szenario). Die Konzentrationen einiger Stoffe lagen häufiger unterhalb der jeweiligen BG (s. Tabelle 10). Die in der ESTA eingesetzten Fettalkohole 1-Dodecanol und 1-Tetradecanol wurden in den salzhaltigen Abwässern durchgehend nicht nachgewiesen (< BG).

Tabelle 10: Konzentrationen der Aufbereitungshilfsstoffe in der Einleitung des Werkes Neuhof-Ellers; Grundlage Analysedaten von Januar 2015 bis Juni 2018 (n = 42), ohne Ammoniumacetat (siehe Band 2.6, Kap. 4.2.3)

Substanz	Einheit	BG	Mittelwert	Standardabweichung	90-Perz.	Max.	Bemerkung
Salicylsäure	mg/L	0,04	15	12	28	53	-
Resorcyssäure	mg/L	0,01	0,046	0,088	0,17	0,39	27 Werte < BG
Fettsäuren	mg/L	0,01	1,2	1,1	1,9	7,1	-
Laurinsäure (12:0)	mg/L	0,01	0,003	0,013	0,000	0,080	39 Werte < BG
Myristinsäure (C14:0)	mg/L	0,01	0,018	0,069	0,020	0,45	34 Werte < BG
Palmitinsäure (C16:0)	mg/L	0,01	0,085	0,26	0,16	1,2	31 Werte < BG
Ölsäure (C18:1n9c)	mg/L	0,01	0,013	0,034	0,005	0,20	38 Werte < BG
Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N)	mg/L	-	28	-	-	-	keine Analytik, berechnet als Worst-Case ¹⁹
C16-C18-Alkylamine	µg/L	-	5,6	10	9,9	51	berechnet
Hexadecylamin ¹⁰	µg/L	1	1,5	3,4	2,0	20	29 Werte < BG
Octadecylamin ¹⁰	µg/L	2	4,2	7,3	7,9	36	19 Werte < BG
1-Dodecanol ¹²	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
1-Tetradecanol ¹²	µg/L	10	0	-	-	-	alle Werte < BG
Alkylpolyglykoether ¹³	µg/L	-	29190	8250	36000	60410	berechnet
Diethylenglycol-monoheptylether	µg/L	10	3820	1020	4870	7300	-
Triethylenglycol-monoheptylether	µg/L	10	3190	990	3790	7200	-

¹⁹ Mittelwerte (2015-2017): Einsatzmenge: ca. 19 t/a; Abwassermenge: derzeit ca. 700.000 m³/a

4.2.5 Einleitung des Standorts Wintershall des Werkes Werra (Einleitstelle Wintershall)

Die Tabelle 11 stellt die Konzentrationen der am Standort Wintershall eingesetzten AHS bzw. deren Markersubstanzen (ohne Ammoniumacetat, siehe Band 2.6, Kap. 4.2.3) sowie deren berechneten Kenngrößen im salzhaltigen Abwasser des Standorts Wintershall im Betrachtungszeitraum dar. Bei Resorcy-, Glucon- und Glykolsäure lagen die Konzentrationen überwiegend unterhalb der BG. Die sulfatierten Fettsäuren lagen in 12 von 42 Stichproben unterhalb der BG. Daraus ergibt sich für Amerfloc MI (ca. > 77 % SFA) eine mittlere Konzentration von 1600 µg/L.

Tabelle 11: Konzentrationen der Aufbereitungshilfsstoffe in der Einleitung des Standorts Wintershall des Werkes Werra; Grundlage Analysedaten von Januar 2015 bis Juni 2018 (n = 42; Glykolsäure: n = 41) ohne Ammoniumacetat (siehe Band 2.6, Kap. 4.2.3)

Substanz	Einheit	BG	Mittelwert	Standardabweichung	90-Perz.	Max.	Bemerkung
Salicylsäure	mg/L	0,04	17	11	30	46	-
4-Chlorbenzoesäure	mg/L	0,02	0,85	0,94	2,3	3,6	Einsatzstoff im Winter
Resorcyssäure	mg/L	0,01	0,013	0,079	0,00	0,51	40 Werte < BG
Gluconsäure	mg/L	0,2	0,70	1,4	1,9	7,2	30 Werte < BG; in diesem Zeitraum nur zeitweiser Einsatz
Glykolsäure	mg/L	1	0	-	-	-	alle Werte < BG; 1 Wert > BG, dieser ist nicht plausibel, da AHS in diesem Zeitraum nicht eingesetzt
Fettsäuren	mg/L	0,01	1,7	1,4	3,4	6,7	-
Laurinsäure (12:0)	mg/L	0,01	0,15	0,22	0,45	1,1	14 Werte < BG
Myristinsäure (C14:0)	mg/L	0,01	0,068	0,096	0,17	0,49	11 Werte < BG
Palmitinsäure (C16:0)	mg/L	0,01	0,030	0,043	0,069	0,19	20 Werte < BG
Ölsäure (C18:1n9c)	mg/L	0,01	0,046	0,067	0,12	0,31	18 Werte < BG
Amerfloc MI (ca. > 77 % SFA)	µg/L	-	1600	4140	2880	22410	-
Sulfatierte Fettsäuren (SFA)	µg/L	6	1230	3190	2220	17250	12 Werte < BG
alkyliertes PEG/PPG (Drewplus 4009 G)	µg/L	5	6,7	12	13	64	-

4.3 PEC_{local_{water}} für verschiedene Einleitszenarien und Vergleich mit MEC

Die Umweltkonzentrationen (PEC) wurden für die in Kapitel 3.2 erläuterten Einleitszenarien berechnet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 12 (S. 36) zusammengefasst. Die PEC-Werte für die AHS wurden für die lokale Einleitsituation unter Einbeziehung des langjährigen mittleren niedrigsten Durchflusses der Werra bzw. der Ulster (MNQ) als Worst-Case-Szenario berechnet. Zur PEC-Berechnung wurden sowohl die arithmetischen Mittelwerte als auch das 90. Perzentil der gemessenen Konzentrationen in den Einleitströmen herangezogen.

Die überwiegende Zahl der AHS weist eine geringe Löslichkeit in Wasser aus. Um die Plausibilität der berechneten PECs zu prüfen, wurden die PEC_{local_{water}} mit den Wasserlöslichkeiten verglichen. Alle berechneten PECs (365 d Einleitung, MNQ; Tabelle 12, S. 36) liegen unterhalb der Wasserlöslichkeitsgrenze der jeweiligen AHS und sind somit plausibel.

Neben den nach REACH Guidance [11] berechneten PECs werden für einen Vergleich die AHS-Konzentration basierend auf den Frachtberechnungen der SYDRO Consult (Tabelle 6, S. 24) herangezogen. Wie bereits in Kapitel 3.3 erläutert, berücksichtigen die Frachtberechnungen keine Konzentrationsabnahmen durch z.B. Adsorption oder Bioabbau. Hingegen bildet das Modell bei höheren Durchflussraten der Werra realistische Einleitungsbedingungen ab.

Weiterhin sind die gemessenen Konzentrationen am Pegel Gerstungen (Tabelle 8, S. 30) für die Bewertung des Umweltrisikos relevant. An der Messstelle Gerstungen wurden nur bei einem geringen Teil der AHS Konzentrationen oberhalb der BG festgestellt, während bei der überwiegenden Zahl der AHS die gemessenen Konzentrationen durchgehend unterhalb der BG liegen (Tabelle 8). In quantifizierbaren Mengen wurden Fettsäuren, Bor, Ammonium NH₄-N und sulfatierte Fettsäuren (als Bestandteil von Amerfloc MI) gemessen. Die Konzentrationen aus der Frachtberechnung (Tabelle 6) bestätigen die wenigen analytischen Nachweise der AHS. Die Mittelwerte sind bei den meisten AHS eine Größenordnung niedriger als die Bestimmungsgrenze. Die gemessenen Fettsäuren (gesamt und Einzelsubstanzen) weisen höhere Konzentrationen (MW) auf als die Frachtberechnung. Dieser Unterschied ist wahrscheinlich auf weitere natürliche Quellen für Fettsäuren zurückzuführen.

In den folgenden Abschnitten werden für die eingesetzten AHS die abgeleiteten PECs aus den verschiedenen Szenarien mit den gemessenen Konzentrationen in der Werra sowie mit den berechneten Konzentrationen aus der Frachtbetrachtung der SYDRO Consult verglichen.

Tabelle 12: PEC-Werte für verschiedene Einleitungsszenarien (PEC basierend auf Mittelwerten und 90. Perzentilen der Abwasserkonzentrationen sowie verschiedenen MNQs)

Substanz	Standort	HA		NE		WI		HA+NE		HA+NE+WI		Wasserlöslichkeit bei Raumtemperatur
	Szenario	1a		1b		1c		2a		2b		
	Einheit	MW	90Perz	MW	90Perz	MW	90Perz	MW	90Perz	MW	90Perz	
Salicylsäure	µg/L	160	290	70	130	130	220	230	410	320	570	2 g/L
4-Chlorbenzoesäure	µg/L	-	-	-	-	6,3	17	-	-	6,3	17	80 mg/L
Resorcylsäure	µg/L	-	-	0,21	0,77	0,097	0	0,21	0,76	0,27	0,65	8 g/L
Zimtsäure	µg/L	1,4	1,3	-	-	-	-	1,4	1,3	1,2	1,1	400 mg/L
Gluconsäure	µg/L	9,9	39	-	-	5,2	14	9,9	39	14	47	> 615 g/L
Glykolsäure ^{20,23}	µg/L	-	-	-	-	0	0	-	-	0	0	vollkommen löslich
Fettsäuren ²¹	µg/L	21	32	11	8,5	18	26	27	40	36	60	praktisch unlöslich
Laurinsäure	µg/L	2,0	4,9	0,014	0	1,1	3,4	2,0	4,9	2,8	7,6	4,8 mg/L
Myristinsäure	µg/L	1,3	2,1	0,081	0,090	0,51	1,3	1,3	2,2	1,7	3,1	1,1 mg/L
Palmitinsäure	µg/L	0,67	1,7	0,38	0,72	0,22	0,51	1,0	2,4	1,1	2,6	< 0,05 mg/L
Ölsäure	µg/L	0,59	1,5	0,058	0,022	0,34	0,88	0,64	1,5	0,89	2,2	< 0,1 mg/L
Bor (Ulexit) ²¹	µg/L	27	31	-	-	-	-	27	31	25	26	ca. 1 g Bor/L
Hydrof.-Prod. von C8-Alkenen (Oxoöl 9N) ²²	µg/L	-		130		-		126		110		38-153 mg/L
C16-C18-Alkylamine	µg/L	-	-	0,025	0,044	-	-	0,025	0,044	0,021	0,038	< 1µg/L
1-Dodecanol ²³	µg/L	-	-	0	0	-	-	0	0	0	0	1-1,3 mg/L
1-Tetradecanol ²³	µg/L	-	-	0	0	-	-	0	0	0	0	1-1,3 mg/L
Alkylpolyglykolether (Flotanol F)	µg/L	-	-	130	160	-	-	130	160	110	140	3-5 g/L
Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800) ²³	µg/L	0	0	-	-	-	-	0	0	0	0	790 mg/L
Sulfatierte Fettsäuren (Amerfloc MI, ca. > 77% SFA)	µg/L	0,88	1,7	-	-	12	21	0,87	1,7	13	23	vollkommen löslich
PEG/PPG alkyliert	µg/L	-	-	-	-	0,050	0,098	-	-	0,049	0,097	vollkommen löslich
Benzoessäure (Kaliumbenzoat) ²⁴	µg/L	171		-		-		170		169		3500 mg/L

²⁰ Einsatz am Standort HA seit September 2019 bisher nicht berücksichtigt, jedoch werden auch hier Konzentrationen unterhalb der BG erwartet (PEC = 0 µg/L).²¹ Hintergrundwert Messstelle Unterrohn/Werra berücksichtigt²² Keine Daten für Mittelwert und 90. Perzentil, da Konzentrationen für PEC-Ableitung als Worst-Case aus Einsatz- und Abwassermenge abgeleitet.²³ Alle Messwerte < BG²⁴ Daten für PEC-Ableitung aus Betriebsversuch (HA, 14.–27.01.2019): max. Abwasserkonzentration = 18.9 mg/L

4.3.1 Salicylsäure

Salicylsäure wird an den Standorten Hattorf und Wintershall des Werks Werra sowie am Werk Neuhoof-Ellers großtechnisch im ESTA-Verfahren eingesetzt. Salicylsäure wurde in den Abwässern von HA, NE und WI analytisch in sehr ähnlichem Konzentrationsbereich nachgewiesen (MW: 15 bis 18 mg/L). Entsprechend der Verdünnung je nach Einleitszenario ergeben sich Konzentrationen in der Werra im Bereich von 0,070 bis 0,32 mg/L (MW). Wie Tabelle 12 (S. 36) darstellt, ergibt sich die höchste PEC für die kombinierte Betrachtung der drei Einleitströme am Pegel Gerstungen (Szenario 2b). Der Mittelwert für dieses Szenario beträgt 0,32 mg/L, das 90. Perzentil 0,57 mg/L. Die Berechnung der PEC für die separate Einleitung der Abwässer aus den Werken HA, NE und WI ergeben Werte zwischen 0,070 und 0,16 mg/L. Diese Werte liegen zumeist über der aus der Frachtberechnung abgeleiteten Umweltkonzentration am Pegel Gerstungen (MW: 0,083 mg/L).

Die Werte der berechneten PECs liegen oberhalb der BG von 0,04 mg/L und könnten somit analytisch erfasst werden. Im Beobachtungszeitraum (Jan. 2015 – Juni 2018) wurde Salicylsäure jedoch am Pegel Gerstungen nicht quantifiziert, da die Konzentrationen aller monatlichen Analysen unterhalb der BG von 0,04 mg/L lagen. Diese Beobachtung ist durch die leichte biologische Abbaubarkeit der Substanz, aus der ein rascher Abbau im Gewässer nach Einleitung resultiert, zu erklären. Es ist aufgrund der leichten biologischen Abbaubarkeit zu vermuten, dass ein großer Anteil an Salicylsäure, der am Standort Hattorf durch die Einleitungen HA und NE ins Gewässer gelangt, im Bereich der Einleitung WI bereits stofflich umgesetzt und biologisch abgebaut ist. Eine anhaltende Belastung der Werra durch die eingeleitete Salicylsäure findet also nicht statt.

4.3.2 4-Chlorbenzoesäure

4-Chlorbenzoesäure wird nur am Standort WI eingesetzt. Die PECs für die beiden relevanten Einleitungsszenarien 1c und 2b unterschieden sich daher nicht bei Betrachtung von zwei signifikanten Stellen der Konzentrationsangaben (MW: 1c, 2b: 6,3 µg/L; 90Perz.: 17 µg/L). Die Konzentrationen am Pegel Gerstungen aus der Frachtberechnung (Tabelle 6, S. 24) sind etwas niedriger (MW: 2 µg/L; 90Perz.: 4 µg/L), entsprechen aber größenordnungsmäßig den PECs.

PECs und Konzentrationen aus der Frachtberechnung liegen alle unterhalb der BG von 20 µg/L. Dies entspricht den MECs am Pegel Gerstungen, an dem alle Werte von 4-CBS unterhalb der BG lagen. Neben den geringen PECs ist auch die leichte biologische Abbaubarkeit von 4-CBS hervorzuheben, die zu einer weiteren Konzentrationsabnahme nach der Einleitung in die Werra führt.

4.3.3 Resorcylsäure

Resorcylsäure wird an den Standorten NE und WI eingesetzt. Die PECs aus den verschiedenen Einleitszenarien liegen zwischen 0,097 und 0,27 µg/L (MW). Diese Werte liegen unterhalb der BG von 10 µg/L. Damit wäre ein analytischer Nachweis nicht möglich. Dementsprechend wurde Resorcylsäure in allen 42 Stichproben an der Messstelle Gerstungen nicht nachgewiesen. Neben den geringen PECs ist auch die leichte biologische Abbaubarkeit von Resorcylsäure hervorzuheben, die zu einer weiteren Konzentrationsabnahme nach der Einleitung der Abwässer in die Werra führt.

4.3.4 *trans*-Zimtsäure

trans-Zimtsäure wird nur am Standort HA eingesetzt. Folglich unterscheiden sich die PECs für die relevanten Einleitungsszenarien 1a, 2a und 2b nur gering (MW: Szenario: 1a, 2a: 1,4 µg/L; 2b: 1,2 µg/L). Der abnehmende Trend von Szenario 1a bzw. 2a zu 2b ist durch die höheren Verdünnungsfaktoren bei den kombinierten Einleitungen bedingt. Die berechneten PECs und die Konzentration aus der Frachtberechnung der SYDRO Consult (MW: 0,3 µg/L) liegen unterhalb der BG von 10 µg/L. An der Messstelle Gerstungen lagen alle Werte von Zimtsäure unterhalb der BG von 10 µg/l. Neben den niedrigen PECs ist auch die leichte biologische Abbaubarkeit des AHS hervorzuheben, die eine weitere Konzentrationsabnahme nach der Einleitung in die Werra bedingt.

4.3.5 Gluconsäure

Gluconsäure wird an den Standorten HA und WI (hier im Betrachtungszeitraum nur zeitweise) eingesetzt. Die PECs für die einzelnen Einleitströme (MW: Szenario: 1a: 9,9 µg/L; 1c: 5,2 µg/L) liegen unter dem PEC für das kombinierte Szenario 2b (HA+NE+WI; MW: 14 µg/L). Der Unterschied ist durch die kombinierte Erfassung beider Einleitungen von HA und WI bedingt. Dennoch liegen diese Werte deutlich unterhalb der BG von 200 µg/L. Die berechneten Frachten bestätigen ebenfalls den fehlenden Nachweis von Gluconsäure am Pegel Gerstungen, da die Konzentration basierend auf den Frachtberechnungen bei 4 µg/L (MW) liegt. Dementsprechend wurde Gluconsäure an der Messstelle Gerstungen nicht nachgewiesen (< BG). Neben den geringen PECs ist auch die leichte biologische Abbaubarkeit von Gluconsäure hervorzuheben, die eine weitere Konzentrationsabnahme nach der Einleitung in die Werra bedingt.

4.3.6 Glykolsäure

Glykolsäure wurde am Standort WI in dem Betrachtungszeitraum nur zeitweise eingesetzt (vor 2015 und ab Anfang 2018). Die Messwerte im Einleitstrom am Standort WI liegen mit Ausnahme von einem Datenpunkt alle unterhalb der BG von 1 mg/L. Die PECs wurden daher mit 0 mg/L berechnet. Aufgrund dieser Werte wird der AHS nicht weiter betrachtet.

Seit September 2019 wird Glykolsäure auch am Standort HA eingesetzt. Hierzu liegen jedoch noch keine Messwerte für das Abwasser bzw. in der Werra vor. Aufgrund der leichten biologischen Abbaubarkeit der Substanz und der Erfahrungen am Standort WI ist davon auszugehen, dass auch hier die Konzentrationen unterhalb der BG liegen werden.¹⁸

4.3.7 Fettsäuren, C12-18 und C18-ungesättigt

Dieses Einsatzstoffgemisch wird großtechnisch an den Standorten HA und WI des Werks Werra sowie am Werk NE in den ESTA-Anlagen zur Aufbereitung des Rohsalzes verwendet. Analytisch wurden diverse einzelne Fettsäuren gemessen, unter anderem die Hauptbestandteile des AHS: Laurin-, Myristin-, Palmitin- und Ölsäure. Die Analytik der Fettsäuren (gesamt) beschreibt den Summenparameter von unterschiedlich langkettigen Molekülen, der neben den vier genannten Substanzen auch weitere Fettsäuren erfasst, unter anderem natürlich vorkommende Fettsäuren. Folglich ist eine Übereinstimmung von MEC und PEC aufgrund der unterschiedlichen Zusammensetzung unwahrscheinlich. Dies betrifft auch die Konzentrationen aus der Frachtberechnung (Tabelle 6), die nur auf die Fettsäuren aus dem AHS bezogen sind.

An der Messstelle Gerstungen wurde ein Mittelwert von 0,017 mg/L für Fettsäuren (gesamt) bestimmt. Dieser Wert basiert auf nur 9 von 42 Proben, die Konzentrationen oberhalb der BG aufwiesen. Im Gegensatz dazu liegt die lokale PEC, die basierend auf den drei Einleitströmen HA, NE und WI entsprechend Szenario 2b berechnet wurde, in etwa 2,5-fach höher (MW: 0,036 mg/L). Die geringere Konzentration der MEC gegenüber der PEC ist durch die leichte biologische Abbaubarkeit der Fettsäuren zu begründen. Die PECs aus den anderen Einleitszenarien liegen bei 0,011 bis 0,027 mg/L (MW).

Die PECs für die Komponenten Laurin-, Myristin-, Palmitin- und Ölsäure basieren auf relativ wenigen Analysewerten in den Abwässern oberhalb der BG (Tabelle 9 bis Tabelle 11). Ölsäure weist in Übereinstimmung mit den Konzentrationen aus der Frachtberechnung die niedrigste PEC in allen berechneten Einleitszenarien auf.

4.3.8 Bor (Ulexit)

Bei der Berechnung der PEC für Bor wurde die an der Messstelle Unterrohn/Werra gemessene Konzentration bei der PEC-Ableitung in allen Szenarien berücksichtigt. Der Bor-haltige AHS wird nur am Standort HA eingesetzt. Folglich sind die PECs für die drei gerechneten Einleitszenarien 1a, 2a und 2b sehr ähnlich (MW: 0,025 bis 0,027 mg/L). Diese Konzentration liegt deutlich unterhalb der BG von 0,1 mg/L.

Am Pegel Gerstungen wurden nur 4 von 42 Messwerten oberhalb der BG von 0,1 mg/L gemessen. Der Mittelwert an diesem Messpunkt beträgt 0,05 mg/L und liegt damit höher als die PEC und die aus der Frachtberechnung ermittelte Konzentration (MW: 0,004 mg/L). Die höheren Messwerte am Pegel Gerstungen beruhen sehr wahrscheinlich auf zusätzlichen Einträgen aus weiteren Quellen als der Einleitung der salzhaltigen Abwässer. Bor wird z.B. als Perborat in der Waschmittelindustrie als Bleichmittel verwendet. Außerdem sind Borate Bestandteil von landwirtschaftlichen Düngern und werden damit diffus in die Oberflächengewässer eingetragen. Diese Hintergrundbelastung wurde an der oberhalb der Einleitungen liegenden Messstelle Unterrohn nachgewiesen. Im Mittel beträgt hier die Bor-Konzentration 0,009 mg/L.

Für Bor wurde von der LAWA [4] ein Geringfügigkeitsschwellenwert von 0,18 mg/L abgeleitet. Dieser Wert dient zur bundeseinheitlichen Bewertung von Grundwasserverunreinigungen. In Abstimmung mit dem HLNUG [54] wird dieser Wert für die Bewertung der Bor-Konzentrationen in der Werra herangezogen. Die berechneten, gemessenen und aus der Frachtberechnung abgeleiteten Bor-Konzentrationen in der Werra liegen deutlich unterhalb des Geringfügigkeitsschwellenwerts (Grundwasser) der LAWA [4] für Bor von 0,18 mg/L.

4.3.9 Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Handelsname: Oxoöl 9N)

Die in Tabelle 12 dargestellten PECs für das Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N) basieren als Worst-Case auf der am Standort NE verwendeten Einsatzmenge und der anfallenden Abwassermenge, da kein Analyseverfahren für diesen AHS vorhanden ist. Die PECs der drei gerechneten Einleitszenarien 1b, 2a und 2b sind sehr ähnlich: 130, 126 bzw. 110 µg/L. Die aus der Frachtberechnung ermittelte AHS-Konzentration ist noch geringer (MW: 28 µg/L). Ein Vergleich mit Messdaten der Werra ist aufgrund eines fehlenden Analytikverfahrens nicht möglich. Aufgrund der leichten biologischen Abbaubarkeit sind jedoch geringere reale Konzentrationen in der Werra zu erwarten.

4.3.10 C16-C18-Alkylamine

Aufgrund seiner Zusammensetzung kann dieser AHS nicht direkt gemessen werden, sondern seine Konzentration wurde basierend auf den Konzentrationen der beiden Hauptkomponenten Hexadecyl- (C16) und Octadecylamin (C18) berechnet. Der AHS C16-C18-Alkylamine wird nur am Standort NE eingesetzt. Die PECs für die Hauptkomponenten liegen zwischen 0,021 und 0,025 µg/L (MW) und damit deutlich unter ihren BGs von 1 bzw. 2 µg/L. An der Messstelle Gerstungen konnten die beiden Komponenten nicht quantifiziert werden. Auch für die verwendeten C16-C18-Alkylamine gilt, dass diese leicht biologisch abbaubar sind und daher wenn überhaupt nur sehr geringe Konzentrationen zu erwarten wären.

4.3.11 C12-C14-Fettalkohole

Die beiden Hauptkomponenten 1-Dodecanol (C12) und 1-Tetradecanol (C14) des AHS C12-C14-Fettalkohole wurden im Einleitstrom am Standort NE und auch an der Messstelle Gerstungen nicht nachgewiesen. Die Analysen ergaben stets Werte unterhalb der BG (10 µg/L). Entsprechend wurden auch die PECs mit 0 µg/L berechnet. Die aus der Frachtberechnung ermittelten Konzentrationen für die beiden Hauptkomponenten (Tabelle 6) betragen 0,010 µg/L. Dieser Wert bestätigt den fehlenden Nachweis in den Stichproben. Eine weitere Betrachtung dieses AHS erübrigt sich daher.

4.3.12 Alkylpolyglykolether (Handelsname: Flotanol F)

Aufgrund seiner komplexen Zusammensetzung kann dieser AHS nicht direkt gemessen werden, sondern wurde basierend auf den Konzentrationen der beiden Komponenten Di- und Triethylenglycolmonohexylether berechnet. Alkylpolyglykolether wird nur am Standort NE eingesetzt. Die PECs für die verschiedenen Szenarien liegen zwischen 110 und 130 µg/L (MW). Die BG der beiden Komponenten liegt bei jeweils 10 µg/L. Bei einem Anteil der beiden Komponenten von ca. 24 % liegt die theoretische BG für Alkylpolyglykolether demnach bei 83 µg/L, also unterhalb der PECs, so dass der AHS an der Messstelle Gerstungen quantifizierbar wäre. An der Messstelle Gerstungen wurde der AHS bzw. seine Komponenten allerdings nicht nachgewiesen (< BG). Die Differenz zwischen PEC und MEC ist demnach unter anderem auf die leichte biologische Abbaubarkeit des AHS zurückzuführen. Der fehlende Nachweis wird durch die geringen, aus der Frachtberechnung ermittelten Konzentrationen (Tabelle 6) bestätigt. Demnach betragen die Konzentrationen von Diethylenglycolmonohexylether 3,8 µg/L und von Triethylenglycolmonohexylether 3,2 µg/L und liegen damit deutlich unter der jeweiligen BG.

4.3.13 Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Handelsname: Montanol 800)

Der AHS Montanol 800 besteht aus einem Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester und Ether. Die Konzentrationen des AHS wird anhand der Analyse der Markersubstanz 2-Ethylhexyl-2-ethylhexanoat (EEH) berechnet. EEH konnte im Betrachtungszeitraum im Einleitstrom am Standort HA und auch an der Messstelle Gerstungen nicht nachgewiesen werden. Die Analysen ergaben stets Werte unterhalb der BG von 10 µg/L. Entsprechend wurden auch die PECs mit 0 µg/L berechnet. Die aus der Frachtberechnung ermittelten Konzentrationen betragen 0,020 µg/L für EEH und 0,25 µg/L für den AHS (basierend auf der BG, Worst-Case). Diese niedrigen Konzentrationen

belegen, dass EEH nicht analytisch in den Proben nachweisbar ist. Eine weitere Betrachtung dieses AHS erübrigt sich daher.

4.3.14 Natriumsalze sulfatierter Fettsäuren (Handelsname: Amerfloc MI)

Analytisch wird der AHS Amerfloc MI über den Gehalt an sulfatierten Fettsäuren quantifiziert. Amerfloc MI enthält zu ca. > 77 % sulfatierte Fettsäuren. In Abhängigkeit von dem eingesetzten Einleitszenario liegen die PECs für den AHS zwischen 0,87 und 13 µg/L (MW). Die PECs aus Szenario 1c (nur Einleitung aus WI) und der kombinierten Einleitung von den drei Standorten (HA+NE+WI) liegen dicht beieinander (MW: Szenario 1c: 12 µg/L, Szenario 2b: 13 µg/L).

Die gemessene Konzentration am Pegel Gerstungen liegt bei 0,28 µg/L (MW). Hier ist darauf hinzuweisen, dass diese Angabe auf nur einem Messwert oberhalb der BG von sulfatierten Fettsäuren (BG: 6 µg/L) beruht. Aufgrund der leichten biologischen Abbaubarkeit von sulfatierten Fettsäuren ist diese deutliche Abnahme der Konzentration zwischen Einleit- und Messstelle zu erklären. Die aus der Frachtberechnung ermittelten Konzentrationen für Amerfloc MI am Pegel Gerstungen (MW: 3,2 µg/L) belegen ebenfalls, dass ein analytischer Nachweis kaum möglich ist.

4.3.15 Entschäumer (Polyethylen-/ Polypropylenglycol alkyliert)

Dieser AHS wird als Summenparameter von alkyliertem PEG/PPG bestimmt. PEG/PPG alkyliert wird nur am Standort WI eingesetzt. Bei Einleitszenario 1c, also nur der Einleitung aus WI, liegt die PEC bei 0,050 µg/L. Durch die etwas höhere Verdünnung bei kombinierter Einleitung von allen drei Standorten (HA+NE+WI) ist die PEC etwas niedriger (0,049 µg/L, MW). Diese PECs sowie auch die aus der Frachtberechnung ermittelten Konzentrationen (MW: 0,013 µg/L) liegen deutlich unterhalb der BG von 5 µg/L. Entsprechend lagen an der Messstelle Gerstungen alle Werte unterhalb der BG. Neben der niedrigen PEC ist auch PEG/PPG alkyliert leicht biologisch abbaubar, so dass die Konzentrationen durch die Abbauprozesse nach Einleitung in die Werra weiter abnehmen.

4.3.16 Kaliumbenzoat

Der AHS Kaliumbenzoat wird analytisch als Benzoesäure erfasst. Dementsprechend basiert die Bewertung auf den Daten für Benzoesäure. Der AHS wird nur am Standort HA eingesetzt und dies dauerhaft erst seit Mitte 2019. Messdaten zu den Konzentrationen im Einleitungsstrom liegen aus einem Betriebsversuch vor, der die Bedingungen im Dauerbetrieb widerspiegelt hat. Die PECs wurden auf Basis des Maximalwerts der Abwasseranalysedaten aus dem Betriebsversuch berechnet. Die PECs der relevanten Einleitungsszenarien 1a, 2a und 2b unterschieden sich nur gering (PEC = 0,169 bis 0,171 mg/L), da nur an einer Stelle eingeleitet wird. Die PECs nehmen von Szenario 1a bzw. 2a zu 2b aufgrund der zunehmenden Verdünnung bei den kombinierten Einleitungen ab. Es liegen keine Vergleichswerte am Pegel Gerstungen (MEC) oder basierend auf Frachtberechnungen vor.

4.4 Beurteilung des Risikos anhand des Risikoquotienten (RCR)

Zur Beurteilung des Risikos für den Bereich Süßwasser wurden die hergeleiteten und vom HLNUG bestätigten PNECs (Tabelle 13) mit den PECs aus den verschiedenen Einleitszenarien (Tabelle 12) verglichen. Hierzu wurden Risikocharakterisierungsquotienten (Risk Characterisation Ratio, RCR) für die PECs basierend auf den Mittelwerten und dem 90. Perzentil berechnet. Ausschlaggebend für eine Beurteilung des Umweltrisikos sollte jedoch der Mittelwert-basierte RCR sein. Dies ist bereits ein Worst-Case-Szenario, da die Einleitung bei Niedrigwasser (MNQ) und damit bei einem niedrigen Verdünnungsfaktor beurteilt wird. Da die abflussabhängige Einleitung hierbei nicht berücksichtigt wird, wird das Risiko für die aquatische Lebewelt durch die RCRs überbewertet.

Tabelle 13: Predicted No-Effect Concentrations (PNECs) für die Aufbereitungshilfsstoffe bzw. deren Komponenten

AHS	Komponente	PNEC [µg/L]	Bestätigt durch das HLNUG [Referenz]
Salicylsäure	-	112	ja [54]
4-Chlorbenzoesäure	-	45	ja [54]
Resorcyssäure	-	75	ja [54]
trans-Zimtsäure	-	15	vorläufig bestätigt [54]
Gluconsäure	-	100	ja [54]
Glykolsäure	-	88	ja [54]
Fettsäuren	Laurinsäure	20	ja [52]
	Myristinsäure	6,2	ja [53]
	Palmitinsäure	4,4	ja [52]
	Ölsäure	1,6	ja [52]
Ulexit	Bor	180	ja, GFS LAWA [54]
Hydroformylierungs- produkt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N)	-	100	ja [54]
C16-C18-Alkylamine	-	0,1	ja [51]; alternativ: 0,26 µg/L [51]
C12-C14-Fettalkohole	1-Dodecanol (C12)	0,26	ja [50]
	1-Tetradecanol (C14)	0,13	ja [50]
Alkylpolyglykolether (Flotanol F)	-	1000	ja [54]
Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800)	-	19	ja [54]
Natriumsalze sulfatierter Fettsäuren (Amerfloc MI)	-	127	ja [54]
PEG/PPG alkylisiert (Drewplus 4009 G)	-	1,3	ja [54]
Kaliumbenzoat	Benzoessäure	340	nicht abschließend bewertet

Die sich ergebenden Risikoquotienten sind in Tabelle 14 zusammengefasst.

Es ist zu erkennen, dass bei fast allen AHS und betrachteten Einleitszenarien der RCR < 1 ist und somit das Risiko durch die Einleitung der AHS in die Werra für den aquatischen Bereich akzeptabel ist. Bei folgenden AHS bzw. Komponenten weist der berechnete RCR für keines der Szenarien ein unakzeptables Risiko für die aquatische Umwelt auf:

- 4-Chlorbenzoesäure
- Resorcyssäure
- *trans*-Zimtsäure
- Gluconsäure
- Glykolsäure (WI: nur teilweise Einsatz im betrachteten Zeitraum; HA: unter Annahme, dass Konzentrationen vergleichbar gering wie WI, also < BG)
- Ulexit (Bor)
- C16-C18-Alkylamine
- 1-Dodecanol und 1-Tetradecanol
- Alkylpolyglykolether (Flotanol F)
- Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800)
- Natriumsalze sulfatierter Fettsäuren (Amerfloc MI)
- Polyethylen-/ Polypropylenglycol alkyliert
- Benzoesäure (Kaliumbenzoat)

Hingegen weisen die folgenden AHS einen RCR > 1 auf, so dass ein Risiko für die Umwelt indiziert ist. Für diese AHS wird die Risikocharakterisierung daher in den folgenden Abschnitten (Kapitel 4.4.1 bis 4.4.3) verfeinert:

- Salicylsäure
- Fettsäuren: Ölsäure
- Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N)

Tabelle 14: RCR für verschiedene Einleitungsszenarien (PEC basierend auf Mittelwerten und 90. Perzentilen der Abwasserkonzentrationen; MEC: gemessene Konzentrationen am Pegel Gerstungen; PEC SYDRO: Konzentration der AHS basierend auf den Frachtberechnungen durch SYDRO Consult [84]; rot markiert: RCR > 1)

Substanz	PNEC [µg/L]	PEC/PNEC										MEC (Gerstungen) / PNEC		PEC SYDRO (Gerstungen) / PNEC	
		HA		NE		WI		HA+NE		HA+NE+WI					
		1a		1b		1c		2a		2b					
		MW	90Perz	MW	90Perz	MW	90Perz	MW	90Perz	MW	90Perz	MW	90Perz	MW	90Perz
Salicylsäure	112	1,43	2,59	0,63	1,16	1,16	1,96	2,05	3,66	2,86	5,09	0,00	-	0,74	1,34
4-Chlorbenzoesäure	45	-	-	-	-	0,14	0,38	-	-	0,14	0,38	0,00	-	0,04	0,09
Resorcylsäure	75	-	-	0,00	0,01	0,00	0,00	0,00	0,01	0,00	0,01	0,00	-	0,00	0,00
Zimtsäure	15	0,09	0,09	-	-	-	-	0,09	0,09	0,08	0,07	0,00	-	0,02	0,02
Gluconsäure	100	0,10	0,39	-	-	0,05	0,14	0,10	0,39	0,14	0,47	0,00	-	0,04	0,12
Glykolsäure	88	-	-	-	-	0,00	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	-	0,02	0,02
Fettsäuren, C12-18 u. C18-ungesättigt															
Laurinsäure	20	0,10	0,25	0,00	0,00	0,06	0,17	0,10	0,25	0,14	0,38	0,05	0,00	0,04	0,10
Myristinsäure	6,2	0,21	0,34	0,01	0,01	0,08	0,21	0,21	0,35	0,27	0,50	0,16	0,00	0,06	0,16
Palmitinsäure	4,4	0,15	0,39	0,09	0,16	0,05	0,12	0,23	0,55	0,25	0,59	0,23	0,00	0,07	0,23
Ölsäure	1,6	0,37	0,94	0,04	0,01	0,21	0,55	0,40	0,94	0,56	1,38	0,00	-	0,13	0,63
Bor (Ulexit)	180	0,15	0,17	-	-	-	-	0,15	0,17	0,14	0,14	0,28	0,00	0,02	0,04
Hydr.-Prod. v. C8-Alkenen (Oxoöl 9N)	100	-	-	1,30		-	-	1,30		1,10		-	-	0,28	-
C16-C18-Alkylamine	0,1	-	-	0,25	0,44	-	-	0,25	0,44	0,21	0,38	0,00	-	0,02	0,02
	0,26 ²⁵	-	-	0,09	0,17	-	-	0,09	0,17	0,07	0,15	0,00	-	0,02	0,03
C12-C14-Fettalkohol															
1-Dodecanol	0,26	-	-	0,00	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	0,04	0,04
1-Tetradecanol	0,13	-	-	0,00	0,00	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	0,08	0,08
Alkylpolyglykoether	1000	-	-	0,13	0,16	-	-	0,13	0,16	0,11	0,14	0,00	-	0,00	0,00
Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800)	19	0,00	0,00	-	-	-	-	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-	0,01	0,01
Natriumsalze sulfatierter Fettsäuren (Amerfloc MI)	127	0,01	0,01	-	-	0,09	0,17	0,01	0,01	0,10	0,18	0,00	-	0,03	0,05
PEG/PPG alkyliert	1,3	-	-	-	-	0,04	0,08	-	-	0,04	0,07	0,00	-	0,01	0,02
Benzoessäure (Kaliumbenzoat) ²⁴	340	0,50		-		-		0,50		0,50		-	-	-	-

²⁵ Alternativer PNEC durch das HLNUG vorläufig bestätigt [51]

4.4.1 Salicylsäure

Für Salicylsäure liegt der Risikoquotient PEC/PNEC bei fast allen Szenarien oberhalb von 1 (RCR bis zu 5,09 (90Perz) bei Szenario 2b). Einzige Ausnahme ist die separate Betrachtung der Einleitung des Werkes NE mit einem RCR von 0,63. Der RCR basierend auf den aus der Frachtberechnung ermittelten Konzentrationen am Pegel Gerstungen weist nur für das 90. Perzentil einen RCR von 1,34 auf und damit geringfügig > 1 . Der MW-basierte RCR ist mit 0,74 kleiner 1 und deutet somit auf ein akzeptables Umweltrisiko hin. Der RCR basierend auf den gemessenen Salicylsäure-Konzentrationen in der Werra am Pegel Gerstungen (alle Werte $< BG$) ergibt einen RCR von 0.

Am Pegel Gerstungen waren die realen Gehalte an Salicylsäure so niedrig, dass alle 42 Proben im Betrachtungszeitraum Werte unterhalb der BG von 0,04 mg/L aufwiesen. Entsprechend den PECs (MW: 0,070 bis 0,32 mg/L) und den aus der Frachtberechnung ermittelten Konzentrationen (MW: 0,083 mg/L) müssten die Werte für Salicylsäure oberhalb der BG liegen und somit an der Messstelle quantifizierbar sein. Die berechneten PECs für Salicylsäure liegen somit deutlich über den realen Werten.

Der Unterschied zwischen berechneten und gemessenen Umweltkonzentrationen ist darauf zurückzuführen, dass bei der PEC-Berechnung nur wenige Umweltfaktoren berücksichtigt werden. Wie in Kapitel 3.2 dargestellt, wird bei der Ableitung der lokalen Umweltkonzentration (PEC_{local}) nur die Adsorption betrachtet, wohingegen Verflüchtigung, Abbau und Sedimentation als relevante Eliminationsprozesse nicht berücksichtigt werden. Die leichte biologische Abbaubarkeit von Salicylsäure wird bei der PEC-Berechnung mithin nicht berücksichtigt.

Des Weiteren beruhen die PEC-Berechnungen auf dem Mittel der niedrigsten Durchflusswerte (MNQ, Pegel Gerstungen: 8,11 m³/s). Dieser Durchfluss wurde am Pegel Gerstungen laut DGJ [69] im Zeitraum von 1932 bis 2015 an weniger als 25 Tagen im Jahr unterschritten (bezogen auf mittlere Durchflusswerte). Durch die Berücksichtigung höherer Durchflusswerte (z.B. MQ statt MNQ, s. Tabelle 2, S. 20) unterschreiten alle RCRs für Salicylsäure den kritischen Wert ($RCR < 1$), wobei eine Ausnahme für das 90. Perzentil von Szenario 2b bestehen bleibt. Der Eintritt dieser Situation gilt aber als unwahrscheinlich.

Insofern kann aus dem Vergleich der gemessenen Umweltkonzentration von Salicylsäure mit der PNEC geschlossen werden, dass in der Werra kein Risiko für die aquatische Umwelt besteht. Risikominimierungsmaßnahmen bei der Einleitung von Salicylsäure sind also nicht erforderlich.

4.4.2 Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen

Das Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N) wird ausschließlich am Standort Neuhoof-Ellers eingesetzt. Oxoöl 9N kann nicht analytisch bestimmt werden, so dass die Konzentration im Abwasser von NE aus der Einsatzmenge und der anfallenden Abwassermenge berechnet wurde. Es handelt sich dabei um Maximalwerte bzw. um einen Worst-Case, da bei der angewendeten Methode zur PEC-Ableitung mögliche Konzentrationsabnahmen während des Einsatzes des AHS oder der Speicherung der Abwässer in Stapelbecken, z.B. durch Bioabbau oder Verflüchtigung, nicht berücksichtigt werden können.

Die PECs für die Einleitszenarien liegen zwischen 0,11 und 0,13 mg/L und damit im Bereich der PNEC von 0,10 mg/L. Der RCR, der sich aus dem Vergleich PEC/PNEC ergibt, liegt damit leicht oberhalb von 1 und zeigt daher für die drei Einleitszenarien ein Risiko an. Der RCR, der aus der Frachtberechnung ermittelten Konzentration und dem PNEC berechnet wurde, liegt deutlich

kleiner 1 ($RCR = 0,28$). Somit ergibt sich bei Beachtung der realen Einleitsituation (Abhängigkeit zwischen Durchfluss der Werra und der Abwassereinleitmenge) ein akzeptables Risiko für die Werra.

Eine Verfeinerung der Risikobeurteilung beschränkt sich vor allem aufgrund der fehlenden Messwerte in Abwasser und Werra auf die Verdünnung des Abwassers bei der Einleitung. Hier ist zu betonen, dass bei der PEC-Berechnung im Sinne eines Worst-Case-Ansatzes Niedrigwasserdaten eingesetzt werden. Die in Tabelle 2 dargestellten Durchflussdaten für die Werra zeigen die großen Unterschiede zwischen dem mittleren niedrigsten jährlichen Durchfluss (MNQ) und dem mittleren jährlichen Durchfluss (MQ). Im Bereich Gerstungen ist der MQ etwa um einen Faktor von etwa vier höher als der MNQ. Im Bereich Philippsthal beträgt dieser Faktor zwischen MQ und MNQ (berechnet) ebenfalls 4.

Bereits eine geringe Erhöhung des Durchflusses an den Einleitstellen bewirkt, dass der RCR den kritischen Wert von 1 unterschreitet. Im Fall von Szenario 2b, das die Einleitung aller drei Standorte am Pegel Gerstungen berücksichtigt, wird durch die Erhöhung des Durchflusses von $8,11 \text{ m}^3/\text{s}$ auf $9,0 \text{ m}^3/\text{s}$ ein $RCR < 1$ erreicht. Bei Szenario 1b und 2a wird ebenfalls ab einem Durchfluss von $9 \text{ m}^3/\text{s}$ der RCR kleiner 1. Dieser Durchfluss wurde am Pegel Gerstungen laut DGJ [69] im Zeitraum von 1932 bis 2015 an weniger als 40 Tagen im Jahr unterschritten (bezogen auf mittlere Durchflusswerte).

Unter Berücksichtigung von realistischen Minimierungsansätzen (Bioabbau, abflussabhängige Abwassereinleitung) für die Risikobetrachtung der Einleitung des Hydroformylierungsprodukts von C8-Alkenen (Oxoöl 9N) in die Werra, ist die Verwendung von Oxoöl 9N bzw. dessen Einleitung in die Werra mit einem akzeptablen Risiko verbunden.

4.4.3 Fettsäuren

Bei der Risikobeurteilung des AHS Fettsäure KPK 12-18 ist festzustellen, dass die Einleitung von Laurin-, Myristin- und Palmitinsäure in den gerechneten Szenarien und basierend auf den realen Konzentrationen am Pegel Gerstungen ein akzeptables Risiko für die aquatische Umwelt darstellt (Tabelle 14).

Dies gilt auch für die Komponente Ölsäure mit Ausnahme des Szenarios 2b für das 90. Perzentil der Abwasserkonzentrationen. In diesem Szenario, also der gemeinsamen Einleitung von Abwasser aus allen drei Standorten, ergibt sich für die PEC berechnet für das 90. Perzentil der Abwasserkonzentrationen ein $RCR > 1$ ($RCR = 1,38$). Der Vergleich mit den gemessenen Konzentrationen am Pegel Gerstungen (MEC) und den aus der Frachtberechnung ermittelten Konzentrationen zeigt (Tabelle 6, S. 24), dass der RCR deutlich kleiner als 1 ist ($MEC/PNEC = 0$; aus der Frachtberechnung ermittelte Konz./PNEC = $0,13$ (MW) bzw. $0,63$ (90Perz)). Unter Berücksichtigung der realistischen Einleitungssituation, also der abflussabhängigen Einleitung, ist die Einleitung von Ölsäure in die Werra mit einem akzeptablen Risiko verbunden.

Zusätzlich ist festzustellen, dass bei der PEC-Ableitung zwar Adsorption als Eliminationsprozess aus der Wasserphase berücksichtigt wird, jedoch keine anderen Prozesse, wie zum Beispiel die festgestellte leichte biologische Abbaubarkeit von Ölsäure bzw. des AHS Fettsäure KPK 12-18, die im Fall der Fettsäuren jedoch relevant ist. Am Pegel Gerstungen lagen alle Messwerte unterhalb der BG.

Weiterhin ist hervorzuheben, dass entsprechend REACH Guidance [11] mit einem sehr niedrigen Durchfluss (MNQ) gerechnet wird. Für das betroffene Einleitungsszenario 2b wird durch die Erhöhung des Durchflusses von 8,11 m³/s auf 11,2 m³/s ²⁶ ein RCR < 1 erreicht. Dieser Durchfluss wurde am Pegel Gerstungen laut DGJ [69] im Zeitraum von 1932 bis 2015 an weniger als 70 Tagen im Jahr unterschritten (bezogen auf mittlere Durchflusswerte). Der Verdünnungsfaktor steigt hierdurch von 52,7 auf 72,4 an.

Unter Berücksichtigung von realistischen Minimierungsansätzen (leichte biologische Abbaubarkeit, abflussabhängige Abwassereinleitung) für die Risikobetrachtung der Einleitung des AHS-Bestandteils Ölsäure in die Werra, ist die Verwendung des AHS und dessen Einleitung in die Werra mit einem akzeptablen Risiko verbunden.

²⁶ Der mittlere Durchfluss (MQ) beträgt 30,6 m³/s.

5 Zusammenfassung

In Zusammenhang mit der Beantragung der Erlaubnis für die Einleitung von Salzabwässern in die Werra durch K+S wurde eine ökotoxikologische Bewertung der derzeit in den Werken Werra und Neuhof-Ellers eingesetzten Aufbereitungshilfsstoffe (AHS) vorgenommen.

Als Bewertungsmaßstab dienten Nicht-Effekt-Konzentrationen (sog. Predicted-No-Effect-Konzentrationen, PNEC) für die aquatische Umwelt (Süßwasser), die gemäß REACH Guidance Document, R.10.3.1.2 [9] und Technical Guidance Document No. 27 [31] hergeleitet wurden. Die PNEC ist diejenige Konzentration in einem Umweltmedium, bei deren Unterschreitung keine ökotoxikologische Schädigung erwartet wird. Die zwischen 2014 und 2016 abgeleiteten PNECs wurden in den Jahren 2018 und 2019 überprüft, gegebenenfalls aktualisiert und mit der Fachbehörde (HLNUG) abgestimmt.

Auf Basis der monatlich gemessenen AHS-Konzentrationen in den Einleitströmen sowie an zwei Messstellen in der Werra (Unterrohn und Gerstungen) wurden Umweltkonzentrationen (Predicted Environmental Concentration, PEC bzw. Measured Environmental Concentration, MEC) gemäß REACH Guidance [11] ermittelt. Des Weiteren wurden von der SYDRO Consult [84] auf Basis von Frachtberechnungen prognostizierte Konzentrationen der AHS am Pegel Gerstungen bestimmt.

Es wurden verschiedene Einleitszenarien entwickelt, um eine differenzierte Betrachtung der Einleitsituationen zu ermöglichen und eventuelle Risiken für die aquatische Umwelt zu ermitteln. Neben der kombinierten Einleitung von allen drei Werken wurden die Einleitungen zudem einzeln betrachtet. Die PECs wurden unter Berücksichtigung von Adsorption der AHS an Schwebstoffe über die Verdünnung der Abwasserkonzentration mit dem Durchfluss der Werra ermittelt. Der Durchfluss der Werra wurde mit dem mittleren jährlichen Niedrigwasserabfluss (MNQ) angesetzt. Dieser ist an den betrachteten Flussabschnitten um etwa den Faktor vier niedriger als der jährliche mittlere Abfluss (MQ). Zur Risikobeurteilung wurden Quotienten aus PECs/MECs und PNECs gebildet (Risk Characterisation Ratio, RCR).

Das angewendete Verfahren berücksichtigt nur Adsorption als möglichen Eliminationsprozess bei der Einleitung von Abwässern. Hingegen werden biologische Abbaubarkeit, Hydrolyse oder Verflüchtigung nicht berücksichtigt. Je nach Stoffeigenschaften kann das Verfahren damit rechnerisch höhere Konzentrationen ergeben als tatsächlich im Gewässer vorhanden sind.

Für die Mehrzahl der eingesetzten AHS ist selbst bei diesem konservativen Ansatz entsprechend REACH Guidance [11] das Risiko für die aquatische Umwelt akzeptabel, da der $RCR < 1$ liegt. Dies hat auch der Vergleich der PNECs mit den MECs sowie mit den aus der Frachtberechnung ermittelten Umweltkonzentrationen gezeigt.

Bei drei AHS mit einem $RCR > 1$ wurde eine weitergehende Betrachtung des Risikos für die Umwelt vorgenommen. Hierbei handelt es sich um Salicylsäure, Fettsäuren (C12-18 u. C18-ungesättigt) und das Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N).

Im Fall von Salicylsäure konnte durch die vorliegenden Messdaten der Werra gezeigt werden, dass bei Berücksichtigung der gemessenen Konzentrationen (MEC) das Risiko für die Umwelt akzeptabel ist ($RCR < 1$). Ebenso führten die berechneten Umweltkonzentrationen unter Berücksichtigung von leichter biologischer Abbaubarkeit und/oder einem etwas höheren Durchfluss als MNQ ebenfalls zu einem akzeptablen Risikoquotienten ($RCR < 1$).

Die Risikobeurteilung des AHS Fettsäuren, C12-18 u. C18-ungesättigt, erfolgt über die Betrachtung von vier seiner Komponenten. Die drei Komponenten Laurin-, Myristin- und Palmitinsäure weisen sowohl basierend auf den berechneten als auch den gemessenen Umweltkonzentrationen einen $RCR < 1$ auf. Die vierte Komponente Ölsäure zeigt nur im Bereich des 90. Perzentils (PEC) ein Risiko in einem Szenario (2b, Betrachtung aller Einleitungen am Pegel Gerstungen) an. Bei Berücksichtigung der realen Umweltkonzentration (MEC) oder eines leicht erhöhten Durchflusses der Werra ist das Risiko für den aquatischen Bereich als akzeptabel einzustufen. Es kann damit für den AHS Fettsäuren, C12-18 u. C18-ungesättigt, gefolgert werden, dass das mit der Einleitung des AHS in die Werra verbundene Risiko für die aquatische Umwelt akzeptabel ist.

Für das Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N) existiert kein analytisches Messverfahren, so dass keine gemessenen Konzentrationen für die Werra und die Einleitströme vorliegen. Zur Berechnung der PECs wurden daher die Einsatzmengen herangezogen, so dass Konzentrationsabnahmen zwischen Anwendung und Einleitung in die Werra, z. B. durch Abbauprozesse, Adsorption etc., nicht berücksichtigt wurden. Die konservativ berechneten PECs lagen jedoch bereits für diesen Worst-Case im Bereich der PNEC, so dass die Risikoquotienten im Realfall unterhalb von 1 liegen würden. In diesem Fall werden Konzentrationsabnahmen durch die leichte biologische Abbaubarkeit oder durch einen höheren Durchfluss der Werra berücksichtigt. Insgesamt ist daher das reale Risiko als akzeptabel einzustufen.

Insgesamt ist festzustellen, dass die Einleitung der derzeit bei K+S in den Werken Werra und Neuhoof-Ellers eingesetzten AHS ein akzeptables Risiko für die aquatische Umwelt darstellt.

6 Referenzen

1. Annon. (2004a). Toxicity of benzoic acid to *Oncorhynchus mykiss* in a prolonged semi-static test over 28 days. Test facility: IBACON GmbH, Rossdorf, Germany. Report no. 22561221, 21 Dec. 2004.
2. Berg + Schmidt (2014). EG-Sicherheitsdatenblatt für Vegarol 1214. Revisionsnr. 1,02. Überarbeitungsdatum: 07.02.2014. 8 S.
3. BLAK (2016). Einheitliche Berechnungsmethode zur Frachtermittlung im Abwasser im Rahmen internationaler Berichtspflichten. BLAK-Arbeitskreises „Internationale Berichtspflichten zu punktförmigen Abwassereinleitungen“. Stand: Januar 2016. 8 S. URL: https://wiki.prtr.bund.de/images/8/8a/BLAK_Frachtermittlung_einheitlicheMethodik_Anlage1_20160119.pdf
4. Bund-/Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA, 2016). Ableitung von Geringfügigkeitsschwellenwerten für das Grundwasser, Aktualisierte und überarbeitete Fassung 2016.
5. Cremer Oleo Division (2012). Sicherheitsdatenblatt für CremerAC PK12-18 (CAS-Nr. 90990-15-1). Überarbeitungsdatum: 19.01.2012. 6 S.
6. De Rosemond SJC & K Liber (2004). Wastewater treatment polymers identified as the toxic component of a diamond mine effluent. *Environmental Toxicology and Chemistry* 23(9), 2234–2242.
7. Dedonder A & CF Van Sumere (1971). The effect of phenolics and related compounds on the growth and the respiration of *Chlorella vulgaris*. *Z. Pflanzenphysiol.* Bd. 76. S. 70–80.
8. EC (2008). EU RAR: European Union Risk Assessment Report: amines, tallow alkyl (CAS No: 61790-33-8, EINECS No: 263-125-1), (z)-octadec-9-enylamine (CAS No: 112-90-3, EINECS No: 204-015-5), octadecylamine (CAS No: 124-30-1, EINECS No: 204-695-3), amines, hydrogenated tallow alkyl (CAS No: 61788-45-2, EINECS No: 262-976-6), amines, coco alkyl (CAS No: 61788-46-3, EINECS No: 262-977-1). Rapporteur: Germany. Date: October 2008. DRAFT, Not finalised due to human health assessment. 237 S.
9. ECHA (2008). Guidance for the implementation of REACH: Guidance on information requirements and chemical safety assessment: Chapter R.10: Characterisation of dose [concentration]-response for environment. Mai 2008. 65 S.
10. ECHA (2014). Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment: Chapter R.7c: Endpoint specific guidance. V2.0, November 2014.
11. ECHA (2016). Guidance for the implementation of REACH: Guidance on information requirements and chemical safety assessment: Chapter R.16: Environmental exposure assessment. Version 3.0. Februar 2016. 178 S.
12. ECHA (2016). Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment Part E: Risk Characterisation. Version 3.0, Mai 2016. 49 S.
13. ECHA (2018). Registrierungsossier für 1-Dodecanol (CAS 112-53-8). Stand: 28.08.2018. URL: <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/15424>

14. ECHA (2018). Registrierungsdossier für 1-Tetradecanol (CAS 112-72-1). Stand: 28.08.2018. URL: <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/15422>
15. ECHA (2018). Registrierungsdossier für Amines, C16-18-alkyl (CAS 90640-32-7). Letzte Modifikation: 03.08.2018. Abgerufen am: 23.10.2018. URL: <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/14440>
16. ECHA (2018). Registrierungsdossier für Flotanol F (CAS 1426148-68-6). Stand: 30.08.2018. URL: <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/7576>
17. ECHA (2018). Registrierungsdossier für Genamin SH (Amines, C16-18-alkyl; CAS 90640-32-7). Stand: 30.08.2018. URL: <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/14440/>
18. ECHA (2018). Registrierungsdossier für Gluconsäure (CAS 526-95-4). Stand: 29.08.2018. URL: <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/1957>
19. ECHA (2018). Registrierungsdossier für Glykolsäure (CAS 79-14-1). Stand: 28.08.2018. URL: <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/14561>
20. ECHA (2018). Registrierungsdossier für Laurinsäure (CAS 143-07-7). Stand: 22.08.2018. URL: <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/15262>
21. ECHA (2018). Registrierungsdossier für Montanol 800 (CAS 68609-68-7; 1-Hexanol, 2-ethyl-, manuf. of, by-products from, distn. residues). Stand: 06.09.2018. URL: <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/13435>
22. ECHA (2018). Registrierungsdossier für Oxoöl 9N (Octene, hydroformylation products, high-boiling, CAS 86526-89-6). Stand: 31.08.2018. URL: <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/2092>
23. ECHA (2018). Registrierungsdossier für Resorcyllsäure (CAS 89-86-1). Stand: 29.08.2018. URL: <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/26724>
24. ECHA (2018). Registrierungsdossier für Salicylsäure (CAS 69-72-7). Stand: 28.08.2018. URL: <https://echa.europa.eu/registration-dossier/-/registered-dossier/14544>
25. ECHA (2019). Registrierungsdossier für 3-Butoxy-2-propanol (CAS 5131-66-8). Stand: 01.08.2019. URL: <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/14287>
26. ECHA (2019). Registrierungsdossier für Benzoessäure (CAS 65-85-0). Stand: 22.07.2019. URL: <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/13124>
27. ECHA (2019). Registrierungsdossier für Fatty acids, vegetable-oil,sulfated, sodium salts (CAS 61788-67-8). Stand: 01.08.2019. URL: <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/13789>
28. ECOSAR (2012). The ECOSAR (ECOLOGical Structure Activity Relationship) Class Program for Microsoft Windows. ECOSAR v1.11. US EPA, Office of Chemical Safety and Pollution Prevention, 24.07.2012.
29. Eichholtz M & Schlüter S (2013). Risikobewertung der im Werk Werra und Werk Neuhoof-Ellers eingesetzten Aufbereitungshilfsstoffe: Beurteilung der

- ökotoxikologischen Wirkung auf die aquatische Umwelt - Teil 1 -. K+S KALI GmbH, Kassel. Dezember 2013. 53 S. + Anhang.
30. EU (2013). Regulation (EU) n°528/2012 concerning the making available on the market and use of biocidal products - Evaluation of active substance Assessment Report: Benzoic acid – Product Type 03 (Veterinary hygiene). September 2013, Germany. Finalised in the Standing Committee on Biocidal Products at its meeting on 27 September 2013. 74 pp. + Annex with Study Summaries.
 31. EU Water Directors (2018). Technical Guidance for Deriving Environmental Quality Standards. Guidance No. 27, Updated version 2018. Document endorsed by EU Water Directors at their meeting in Sofia on 11-12 June 2018. 207 S.
TGD (2011). Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC), Guidance Document No. 27: Technical Guidance for Deriving Environmental Quality Standards. 203 S.
 32. Global Amines Germany GmbH (2013). Sicherheitsdatenblatt gemäß Verordnung (EU) Nr. 453/2010: Genamin SH 100. Stoffschlüssel: SXR024487; Version: 1 - 1 / D; Überarbeitet am: 20.11.2013; Druckdatum: 10.12.2013. Global Amines Germany GmbH, Brüningstraße 50, 65929 Frankfurt.
 33. GSBL (2019). Abfrage für CAS 9003-05-8. Datenbankabfrage: 08.09.2019. URL: <https://www.gsbl.de/gsblweb30/main.do;jsessionid=556A5A6B753C194493E736416A4A6DCA>
 34. Hall WS, Mirenda RJ (1991). Acute toxicity of wastewater treatment polymers to *Daphnia pulex* and the fathead minnow (*Pimephales promelas*) and the effects of humic acid on polymer toxicity. Research Journal WPCF 63(6), 895-899.
 35. Henderson RJ & DR Tocher (1987). The lipid composition and biochemistry of freshwater fish. Prog Lipid Res 26, 281-347.
 36. HLNUG (2015). Überprüfung der Ableitung einer „Predicted No-Effect Concentration“ (PNEC) für den Aufbereitungshilfsstoff Resorcylsäure auf Vollständigkeit und Richtigkeit mit Benennung von Lücken. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 11.12.2015. HLNUG, Wiesbaden, 13 S.
 37. HLNUG (2015). Überprüfung der Ableitung einer „Predicted No-Effect Concentration“ (PNEC) für den Aufbereitungshilfsstoff Drewplus 4009 G auf Vollständigkeit und Richtigkeit mit Benennung von Lücken. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 22.10.2015. HLNUG, Wiesbaden, 8 S.
 38. HLNUG (2015). Vermerk: Herleitung der PNEC für Süßwasser für Amerfloc MI. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 04.11.2015. HLNUG, 2 S.
 39. HLNUG (2015). Vermerk: Herleitung der PNEC für Süßwasser für Genamin SH 100. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 30.10.2015. HLNUG, 2 S.
 40. HLNUG (2015). Vermerk: Herleitung der PNEC für Süßwasser für Glykolsäure (57% bzw. 70%) und Gluconsäure (50%). Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 02.09.2015. HLNUG, 3 S.
 41. HLNUG (2016). Überprüfung der Ableitung einer „Predicted No-Effect Concentration“ (PNEC) für den Aufbereitungshilfsstoff Montanol 800 auf Vollständigkeit und Richtigkeit mit Benennung von Lücken: Abschließende Prüfung des überarbeiteten Berichts vom

- 27.06.2016. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 28.09.2016. HLNUG, Wiesbaden, 7 S.
42. HLNUG (2016). Überprüfung der Ableitung einer „Predicted No-Effect Concentration“ (PNEC) für den Aufbereitungshilfsstoff Salicylsäure auf Vollständigkeit und Richtigkeit mit Benennung von Lücken: Abschließende Prüfung des überarbeiteten Berichts vom 29.08.2016. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 28.09.2016. HLNUG, Wiesbaden, 13 S.
43. HLNUG (2016). Überprüfung der Ableitung einer „Predicted No-Effect Concentration“ (PNEC) für den Aufbereitungshilfsstoff Fettsäure KPK 12-18 auf Vollständigkeit und Richtigkeit mit Benennung von Lücken: Abschließende Prüfung des überarbeiteten Berichts vom 27.06.2016. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 10.08.2016. HLNUG, Wiesbaden, 9 S.
44. HLNUG (2016). Überprüfung der Ableitung einer „Predicted No-Effect Concentration“ (PNEC) für den Aufbereitungshilfsstoff Zimtsäure auf Vollständigkeit und Richtigkeit mit Benennung von Lücken: Abschließende Prüfung des überarbeiteten Berichts vom 01.09.2016. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 28.09.2016. HLNUG, Wiesbaden, 6 S.
45. HLNUG (2016). Überprüfung der Ableitung einer „Predicted No-Effect Concentration“ (PNEC) für den Aufbereitungshilfsstoff Oxoöl 9N auf Vollständigkeit und Richtigkeit mit Benennung von Lücken: Abschließende Prüfung des überarbeiteten Berichts vom 27.06.2016. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 28.09.2016. HLNUG, Wiesbaden, 5 S.
46. HLNUG (2016). Vermerk: Besprechung zum Thema „Aufbereitungshilfsstoffe (AHS)“ am 13.04.2016 beim Regierungspräsidium Kassel in Bad Hersfeld, Hubertusweg 19. Bearbeiter: Jennifer Busch. Datum: 19.04.2016. HLNUG, Dezernat 31.6, Bad Hersfeld, 7 S. + Anhang (19 S.).
47. HLNUG (2016). Vermerk: Gutachtergespräch zum Thema „Herleitung von PNEC für ausgewählte Aufbereitungshilfsstoffe (AHS)“ am 30.06.2016 beim Regierungspräsidium Kassel in Bad Hersfeld, Hubertusweg 19. Bearbeiter: Jennifer Busch. Datum: 08.08.2016. HLNUG, Dezernat 31.6, Bad Hersfeld, 3 S.
48. HLNUG (2016). Vermerk: Herleitung der PNEC für Süßwasser für Glykolsäure. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 05.08.2016. HLNUG, 2 S.
49. HLNUG (2016). Vermerk: Überarbeitung der Herleitung der PNEC für Süßwasser für 4-Chlorbenzoesäure. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 05.08.2016. HLNUG, 2 S.
50. HLNUG (2019). Überprüfung der Ableitung einer „Predicted No-Effect Concentration“ (PNEC) für den Aufbereitungshilfsstoff Vegarol 1214; Hier: Überprüfung des überarbeiteten Berichts vom 24.10.2018. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 17.05.2019. HLNUG, Wiesbaden, 6 S.
51. HLNUG (2019). Überprüfung der Ableitung einer „Predicted No-Effect Concentration“ (PNEC) für den Aufbereitungshilfsstoff Genamin SH 100; Hier: Überprüfung des überarbeiteten Berichts vom 24.10.2018. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 21.05.2019. HLNUG, Wiesbaden, 6 S.

52. HLNUG (2019). Überprüfung der Ableitung einer „Predicted No-Effect Concentration“ (PNEC) für den Aufbereitungshilfsstoff Fettsäure KPK12-18; Hier: Überprüfung des überarbeiteten Berichts vom 26.10.2018. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 06.02.2019. HLNUG, Wiesbaden, 8 S.
53. HLNUG (2019). Überprüfung der Ableitung einer „Predicted No-Effect Concentration“ (PNEC) für den Aufbereitungshilfsstoff Fettsäure KPK 12-18; Hier: Überprüfung des überarbeiteten Berichts vom 03.04.2019. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer. Datum: 20.08.2019. HLNUG, Wiesbaden, 6 S.
54. HLNUG (2019). Überprüfung der Ableitung von Predicted No-Effect Concentration (PNEC) und der Analysenverfahren zur Bestimmung von 16 Aufbereitungshilfsstoffen (AHS); Hier: Zusammenfassender Übersichtsbericht, Stand Februar 2017. Bearbeiter: Dr. Stefan Feisthauer, Dr. Jan Brodsky. Datum: 31.01.2019. HLNUG, Wiesbaden, 22 S.
55. Hygiene-Institut des Ruhrgebiets (2013). Ökotoxikologische Untersuchung von Stoffen und Zubereitungen: 4-Chlorbenzoesäure. Datum: 12.12.2013. Kassel, 6 S. + 2 S. Anlagen. Dieser Bericht ist eine Anlage von [29].
56. Hygiene-Institut des Ruhrgebiets (2013). Ökotoxikologische Untersuchung von Stoffen und Zubereitungen: Amerfloc MI. Datum: 12.12.2013. Kassel, 6 S. + 2 S. Anlagen. Dieser Bericht ist eine Anlage von [29].
57. J-CHECK (1998). Substance Data: CAS 79-14-1. Endpoints: Toxicity to aquatic algae and cyanobacteria. Zusammenfassung auf Englisch und Auszug des Studienberichts auf Japanisch. Studien durchgeführt von Ministry of the Environment in Japan (MOE). Jahr: 1998. Datenbankabfrage: 28.08.2018.
58. J-CHECK (2002). Substance Data: CAS 112-80-1. Endpoints: Toxicity to aquatic algae and cyanobacteria; Short-term toxicity to aquatic invertebrates; Long-term toxicity to aquatic invertebrates; Short-term toxicity to fish. Zusammenfassung auf Englisch und Auszug des Studienberichts auf Japanisch. Studien durchgeführt von Ministry of the Environment in Japan (MOE). Jahr: 2002. Datenbankabfrage: 23.08.2018.
59. J-CHECK (2002). Substance Data: CAS 112-80-1. Endpoints: Toxicity to aquatic algae and cyanobacteria; Short-term toxicity to aquatic invertebrates; Long-term toxicity to aquatic invertebrates; Short-term toxicity to fish. Zusammenfassung auf Englisch und Auszug des Studienberichts auf Japanisch. Studien durchgeführt von Ministry of the Environment in Japan (MOE). Jahr: 2002. Datenbankabfrage: 23.08.2018.
60. J-CHECK (2002). Substance Data: CAS 5131-66-8. Endpoints: Ready biodegradability test result. Englische Zusammenfassung. Studie durchgeführt von Ministry of the Environment in Japan (MOE). Datenbankabfrage: 01.08.2019.
61. J-CHECK (2002). Substance Data: CAS 544-63-8. Endpoints: Toxicity to aquatic algae and cyanobacteria; Short-term toxicity to aquatic invertebrates; Long-term toxicity to aquatic invertebrates; Short-term toxicity to fish. Zusammenfassung auf Englisch und Auszug des Studienberichts auf Japanisch. Studien durchgeführt von Ministry of the Environment in Japan (MOE). Jahr: 2002. Datenbankabfrage: 23.08.2018.
62. Klimisch H., Andreae M. and Tillmann U. (1997) - A systematic approach for evaluating the quality of experimental toxicological and ecotoxicological data. Regul Toxicol Pharm, 25, 1-5.

63. Marques, C.R, Abrantes N., Goncalves F. (2004): Life-History Traits of Standard and Autochthonous Cladocerans: II. Acute and Chronic Effects of Acetylsalicylic Acid Metabolites. in Wiley Periodicals, Inc.
64. Mattson, V.R., J.W. Arthur, and C.T. Walbridge (1976). Acute Toxicity of Selected Organic Compounds to Fathead Minnows. EPA-600/3-76-097, U.S.EPA, Duluth, MN:12 p. As cited in ECOTOX.
65. Merck KGaA (2018). Sicherheitsdatenblatt gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006. Überarbeitet am 29.06.2018. Version 8.10. Merck KGaA, 64271 Darmstadt.
66. Murray D, B Jefferson, P Jarvis & SA Parson (2010). Inhibition of three algae species using chemicals released from barley straw. *Environmental Technology* 31(4): 455–466.
67. NLWKN (2012). Untersuchungsbericht: Ökotoxikologische Untersuchung von drei Aufbereitungshilfsstoffen der K+S Kali GmbH. 19.11.2012. Bearbeiter: F. Schreiber. NLWKN, Hildesheim. 4 S.
68. NLWKN (2015). Untersuchungsbericht: Ökotoxikologische Untersuchung von 4 Metallsalzen im Auftrag der K+S Kali GmbH. 25.08.2015. Bearbeiter: F. Schreiber. NLWKN, Hildesheim. 2 S.
69. NLWKN (2018). Deutsches Gewässerkundliches Jahrbuch: Weser- und Emsgebiet: 2015, 1.11.2014 – 31.12.2015. Herausgeber: Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz, Norden. 301 S. (Digitale Version).
70. OECD (2006). SIDS Initial Assessment Report (SIAR) for SIAM 17 (Arona, Italy, 11-14 November 2003): Propylene Glycol Ethers: Category members: Propylene glycol n-butyl ether (PnB), CAS No. 29387-86-8 (5131-66-8); Dipropylene glycol n-butyl ether (DPnB), CAS No. 29911-28-2 (35884-42-5); Dipropylene glycol methyl ether acetate (DPMA), CAS No 88917-22-0; Tripropylene glycol methyl ether (TPM), CAS No. 25498-49-1 & 20324-33-8; Propylene glycol methyl ether (PM) CAS No. 107-98-2; Propylene glycol methyl ether acetate (PMA) CAS No. 108-65-6; Dipropylene glycol methyl ether (DPM) CAS No. 34590-94-8. 338 S. URL: <https://hvpchemicals.oecd.org/UI/handler.axd?id=039c70c4-cbb8-4820-b8be-c0f1754bc2e8>
71. OECD (2006). SIDS Initial Assessment Report (SIAR) for SIAM 18 (Paris, France, 20-23 April 2004): Gluconic acid and its derivatives: CAS N°: Gluconic Acid, 526-95-4; Glucono-Delta-Lactone, 90-80-2; Sodium Gluconate, 527-07-1; Calcium Gluconate, 299-28-5 /18016-24-5; Potassium Gluconate, 299-27-4. 231 S. URL: <https://hvpchemicals.oecd.org/UI/handler.axd?id=ee8b8440-6ce5-403e-89d8-7bb3366abe7e>
72. OECD (2007). SIDS Initial Assessment Report (SIAR) for SIAM 22 (Paris, France, 18-21 April 2006): Long Chain Alcohols (C6-C22 primary aliphatic alcohols). 295 S. URL: https://hvpchemicals.oecd.org/UI/SIDS_Details.aspx?key=8320d79e-fa20-4801-a19c-941011058c9c&idx=0
73. OECD (2014). SIDS Initial Assessment Profile (SIAP) for Aliphatic Acids Category. CoCam 6, 30. Sep. 2014. 41 S. [Kein abschließender Bericht verfügbar.]. URL:

- https://hpvchemicals.oecd.org/UI/SIDS_Details.aspx?key=f4f146ca-62be-4ba7-9386-afe3c719cfcb&idx=0
74. OECD (2019). Categorization results from the Canadian Domestic Substance List: CAS 9003-05-8. Datenbankabfrage: 08.09.2019. URL: <https://canadachemicals.oecd.org/ChemicalDetails.aspx?ChemicalID=11DE06AF-4E87-492F-AC0F-AC8F2C839660>
 75. OECD (2019). Categorization results from the Canadian Domestic Substance List: CAS 25085-02-3. Datenbankabfrage: 11.09.2019. URL: <https://canadachemicals.oecd.org/ChemicalDetails.aspx?Key=7e14a866-1695-45e4-bb1a-c1a8b7313050&Idx=0>
 76. OGewV (2016). Oberflächengewässerverordnung vom 20. Juni 2016 (BGBl. I S. 1373). URL: https://www.gesetze-im-internet.de/ogewv_2016/OGewV.pdf
 77. Pawlowski S. & Wydra V. (2004). Influence of benzoic acid to Daphnia magna in a reproduction test. Test facility: IBACON GmbH, Rossdorf, Germany. Report no. 22561221, 21 Dez. 2004.
 78. Polygal AG (2019). Sicherheitsdatenblatt für POLYGAL CT-496 gemäß Verordnung (EG) Nr. 453/2010 vom 20. Mai 2010. Freigegeben am 04.02.2019. 6 S. Polygal AG, Märstetten, Schweiz.
 79. RANIE CHEMIE (2019). Sicherheitsdatenblatt für RAGUM CMG gemäß Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 (geändert durch Verordnung (EU) Nr. 453/2010). Überarbeitet: 25.04.2019. 8 S. RANIE CHEMIE GmbH, Wiehl, Deutschland.
 80. Rippen G. (2015). Überprüfung der Ableitung einer „Predicted No-effect Concentration“ (PNEC) für den Aufbereitungshilfsstoff Fettsäure KPK 12-18 auf Vollständigkeit und Richtigkeit mit Benennung von Lücken. Göttingen, 03.11.2015, 33 S.
 81. Schlüter S. (2018). Frachtbilanzierung von Ammoniumstickstoff und Gesamt-Kohlenstoff in der Werra vor dem Hintergrund der Einträge durch die Einleitungen der Werke Werra und Neuhof-Ellers in die Werra am Beispiel des Jahres 2017. K+S, Principles Environment & Technology, Kassel, 10 S.
 82. Solenis (2019). Sicherheitsdatenblatt: Amerfloc MI. Überarbeitete Version: 25.10.2018, gedruckt: 05.08.2019.
 83. Solenis (2019). Sicherheitsdatenblatt: Drewplus 4009 G Entschäumer. Überarbeitete Version: 02.03.2018, gedruckt: 26.07.2019.
 84. SYDRO Consult (2020): Vorbereitung des Wasserrechtsantrags Werra - Flussgebietsmodellierung. Erläuterungsbericht zum Antrag auf Erteilung einer wasserrechtlichen Erlaubnis zur Einleitung von Salzabwasser aus der Kaliproduktion im hessisch-thüringischen Kalirevier in die Werra. Gutachten im Auftrag der K+S Minerals and Agriculture GmbH, Band 3.1
 85. UBA (2018). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 112-72-1. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 28.08.2018. Datenbankabfrage: 14.10.2018. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
 86. UBA (2018). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 112-80-1. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 10.10.2018. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>

87. UBA (2018). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 143-07-7. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 10.10.2018. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
88. UBA (2018). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 544-63-8. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 10.10.2018. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
89. UBA (2018). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 57-10-3. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 12.10.2018. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
90. UBA (2018). Rigoletto: WGK-Suche für EC-Nr. 292-550-5. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 15.10.2018. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
91. UBA (2018). Rigoletto: WGK-Suche für Fettsäuren KPK 12-18 bzw. Kennnummer 659. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 12.10.2018. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
92. UBA (2018). Rigoletto: WGK-Suche für Kennnummer 1482. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 12.10.2018. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
93. UBA (2018). Rigoletto: WGK-Suche für Salicylsäure. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 27.07.2018. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
94. UBA (2019). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 140-10-3. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 15.10.2019. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
95. UBA (2019). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 526-95-4. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 15.10.2019. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
96. UBA (2019). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 65-85-0. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 15.10.2019. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
97. UBA (2019). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 68526-89-6. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 15.10.2019. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
98. UBA (2019). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 68609-68-7. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 15.10.2019. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
99. UBA (2019). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 69-72-7. Datenbankabfrage: 14.10.2019. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
100. UBA (2019). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 74-11-3. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 15.10.2019. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>

101. UBA (2019). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 79-14-1. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 15.10.2019. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
102. UBA (2019). Rigoletto: WGK-Suche für CAS 89-86-1. Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 15.10.2019. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
103. UBA (2019). Rigoletto: WGK-Suche für Drewplus 4009 G Entschäumer (CAS 69227-21-0). Datenbankabfrage: 01.08.2019. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
104. UBA (2019). Rigoletto: WGK-Suche für Polyacrylamid (CAS 25085-02-3). Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 11.09.2019. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
105. UBA (2019). Rigoletto: WGK-Suche für Polyacrylamid (CAS 9003-05-8). Datum der Veröffentlichung im Bundesanzeiger: 10.08.2017. Datenbankabfrage: 08.09.2019. URL: <https://webriigoletto.uba.de/rigoletto/public/searchRequest.do?event=request>
106. Van Egmond R., S. Hambling & S. Marshall (1999). Bioconcentration, biotransformation, and chronic toxicity of sodium laurate to zebrafish (*Danio rerio*). Environmental Toxicology and Chemistry 18(3), 466-473.
107. W&T Waterline (2015). Sicherheitsdatenblatt gemäß 91/155/EWG für WT-FLOC AF 701 TWG. Überarbeitungsdatum: 11.11.2015. 7 S. W&T Waterline GmbH, Kettig, Deutschland.

7 Annex 1: Adsorptionskoeffizienten

Tabelle 15: Adsorptionskoeffizienten (Koc, log Koc) für die Aufbereitungshilfsstoffe

Substanz	CAS-Nr.	Koc	log Koc	Gemessen/Berechnet (in AD/nicht in AD)	Referenz
Salicylsäure	69-72-7	35	1,54	gemessen (OECD 121), pH 3,34 (Molekül nicht ionisiert)	ECHA (CIT, 2002)
4-Chlorbenzoesäure	74-11-3	27	1,42	berechnet (MCI) ²⁷	KOCWIN v2.00
Resorcylsäure	89-86-1	28	1,45	berechnet (MCI) ²⁷	KOCWIN v2.00
Zimtsäure	140-10-3	54	1,73	berechnet (MCI) ²⁷	KOCWIN v2.00
Gluconsäure	526-95-4	10	1	berechnet (MCI) ²⁷	KOCWIN v2.00
Glykolsäure	79-14-1	< 25	< 1,4	gemessen (HPLC)	ECHA
		1	0	berechnet (MCI) ²⁷	KOCWIN v2.00
Fettsäuren	-	2291	3,36	berechnet (Median von C12-C18)	-
Laurinsäure	143-07-7	319	2,50	berechnet (MCI) ²⁷	KOCWIN v2.00
Myristinsäure	544-63-8	1060	3,03	berechnet (MCI) ²⁷	KOCWIN v2.00
Palmitinsäure	57-10-3	3522	3,55	berechnet (MCI) ²⁷	KOCWIN v2.00
Ölsäure	112-80-1	11700	4,07	berechnet (MCI) ²⁷	KOCWIN v2.00
Borsäure	10043-35-3	3,5	0,54	gemessen	ECHA
Hydrof.-Prod. von C8-Alkenen (Oxoöl 9N)	68526-89-6	2512 – 6310	3,4 – 3,8	gemessen	SDB
C16-C18-Alkylamine	90640-32-7 61788-45-2	-	-	gemessen (OECD 106): Kp_susp = 680 – 697 L/kg (log Kp_susp = 2,84)	ECHA
Hexadecylamin	143-27-1	-	-	Read-Across zu Octadecylamin: Kp_susp = 697 L/kg	ECHA: Slangen (2000), Danish EPA (2004)
Octadecylamin	143-27-1	-	-	Kp_susp = 697 L/kg	ECHA: Slangen (2000), Danish EPA (2004)
1-Dodecanol	112-53-8	5098	3,71	gemessen (OECD 121)	ECHA (Shell Global Solutions, 2013)
1-Tetradecanol	112-72-1	33983		gemessen (OECD 121)	ECHA (Shell Global Solutions, 2013)
Alkylpolyglykolether (Flotanol F)	1426148-68-6	32	1,5	gemessen (OECD 107)	SDB
Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800)	68609-68-7	-	-	keine Messdaten; kann aufgrund der Zusammensetzung nicht berechnet werden	
Benzoessäure	65-85-0	31,6	1,5	gemessen	EPI Suite v4.11: Experimental Database Structure Match: Schuurmann et al. (2006)

²⁷ Der berechnete Adsorptionskoeffizient (Koc) gilt für das ungeladene Molekül und kann sich in Abhängigkeit vom pH-Wert ändern.

8 Annex 2: Herleitung der Nicht-Effekt-Konzentration (Predicted No-Effect Concentration, PNEC)

8.1 Vorgehen

Für die meisten Substanzen wurden die $PNEC_{\text{aqua}}$ -Werte für den Süßwasserbereich zwischen 2014 und 2016 abgeleitet und mit dem HLNUG abgestimmt. Hinsichtlich Ammoniumacetat und Ulexit wurden keine PNECs hergeleitet aufgrund bestehender Orientierungswerte für NH_4 -N nach OGewV [76] bzw. Geringfügigkeitsschwellenwerte für Bor nach LAWA [4].

Für den vorliegenden Bericht wurde die Datenbasis auf Aktualität überprüft. Daten zur aquatischen Ökotoxikologie wurden in öffentlich zugänglichen Datenbanken recherchiert (Kapitel 8.3).

Für die Herleitung der PNEC werden grundsätzlich chronische Daten²⁸ verwendet, akute Daten²⁹ werden als zusätzliche Informationen mit in den Datenbestand aufgenommen. Diese akuten Daten können, falls für die jeweilige trophische Ebene des Basisdatensatzes (Primärproduzenten, Invertebraten, Fische) keine verwendbaren chronischen Daten vorliegen, ebenfalls für die Herleitung verwendet werden. Daten aus Tests, die mit Bakterien durchgeführt wurden, gelten grundsätzlich als akute Daten. NOECs und EC10-Werte aus Tests mit Algen und Cyanobakterien gelten als chronische Daten, die entsprechenden EC50-Werte als akute (REACH Guidance Document, 2008, Kapitel R.10.3.1.2 [9] und TGD CIS No. 27, 2011/2018 [31]).

Für Algentests sollen die Werte für Wachstumsrate gegenüber den Werten für Biomasse bevorzugt werden [8, 31]. Daher werden, falls für beide Endpunkte Werte vorliegen, vor allem die Effektwerte für Wachstumsrate in den Tabellen dargestellt.

Entsprechend REACH Guidance Document R.10 [9] und TGD CIS No. 27 [31] werden entsprechend der Datenlage auf den niedrigsten der ausgewählten Effektwerte Sicherheitsfaktoren angewendet. Hiermit sollen Unsicherheiten ausgeglichen werden bezüglich:

- Variationen der Toxizitätsdaten innerhalb von und zwischen Testeinrichtungen
- biologischer Varianzen (Intra- und Interspezies)
- der Extrapolation von Kurz- zu Langzeittoxizität
- der Übertragung von Labor- auf Felddaten

Die Sicherheitsfaktoren (Tabelle 16) sind keine festen Werte, sondern können je nach Datenlage angepasst werden. Weitere Details hierzu finden sich im REACH Guidance Document R.10 [9].

²⁸ In einer chronischen oder Langzeit-Toxizitätsstudie wird eine Spezies einer Substanz für einen kompletten Lebenszyklus oder einer oder mehrerer sensibler Lebensstadien exponiert. Bsp.: Reproduktionsstudie mit dem großen Wasserfloh *Daphnia magna* nach OECD 211; Bsp. für relevanten Endpunkt: Anzahl der Jungtiere pro überlebendem Weibchen nach 21 Tagen Exposition

²⁹ In akuten oder Kurzzeit-Toxizitätsstudien wird eine Spezies einer Substanz für einen kurzfristigen definierten Zeitraum exponiert und Effekte, wie z.B. Mortalität oder Immobilisierung, beobachtet. Bsp.: Überleben von Fischen nach 96 Stunden Exposition nach OECD 203; Bsp. für relevanten Endpunkt: Mortalität

Tabelle 16: Sicherheitsfaktoren gemäß REACH Guidance Document R. 10 [9] zur Herleitung einer $PNEC_{\text{aquaa}}$

Verfügbare Daten	Sicherheitsfaktor
Wenigstens ein akuter Effektwert (L(E)C50) von jeder trophischen Ebene: Fisch, Invertebraten (bevorzugt <i>Daphnia</i>) und Alge	1000
Ein chronischer Effektwert (EC10 oder NOEC) von Fisch oder <i>Daphnia</i>	100
Zwei chronische Effektwerte (EC10 oder NOEC) von Spezies, die zwei trophischen Ebenen repräsentieren (Fisch und/oder <i>Daphnia</i> und/oder Alge)	50
Chronische Effektwerte (EC10 oder NOEC) von wenigstens drei Spezies, die die drei trophischen Ebenen repräsentieren (normalerweise Fisch, <i>Daphnia</i> , Alge)	10
Spezies-Sensitivitäts-Verteilung (Species Sensitivity Distribution; SSD)	5-1
Felddaten oder Modellökosysteme	k.A.

8.2 Validität der Daten

Die Validität der Daten wurde anhand der Klimisch-Kriterien mit einer Note von 1 bis 4 (Klimisch et al. [62]) bewertet. Die Noten sind in Tabelle 17 beschrieben. Studien oder Daten mit einer Validität von 1 oder 2 nach Klimisch et al. [62] sind für die Herleitung der PNEC geeignet; Studien oder Daten, die mit 3 oder 4 bewertet wurden, werden dagegen bei der Herleitung nicht berücksichtigt.

Tabelle 17: Beurteilung der Daten-Validität nach Klimisch et al. [62]

Note	Beschreibung	Erläuterung
1	vertrauenswürdig ohne Einschränkung	Studien, die nach oder in Anlehnung an international anerkannte Richtlinien durchgeführt wurden (vorzugsweise nach GLP), oder Studien, deren dokumentierte Parameter internationalen Richtlinien (z.B. gemäß OECD) ganz oder annähernd entsprechen.
2	vertrauenswürdig mit Einschränkung(en)	Studien oder Daten aus der Literatur (meist nicht nach GLP durchgeführt), bei denen die Parameter zwar nicht internationalen Richtlinien entsprechen, deren Testdesign jedoch ausreicht, um die Daten zu akzeptieren oder Studien, deren Testdesign keinen international anerkannten Richtlinien entspricht, die jedoch ausreichend dokumentiert und wissenschaftlich akzeptabel sind.
3	nicht vertrauenswürdig	Studien oder Daten aus der Literatur, bei denen es zu Beeinträchtigungen zwischen Testsystem und Substanz gekommen ist, oder Studien, bei denen das Testsystem/die Testorganismen nicht relevant für die Art der Exposition sind oder Studien, die nach einer Methode durchgeführt wurden, die wissenschaftlich nicht akzeptabel ist oder deren Dokumentation ungenügend für die Beurteilung ist und einem Expertenurteil nicht standhalten.
4	Vertrauenswürdigkeit nicht bestimmbar	Studien oder Daten aus der Literatur, über die nur unzureichende experimentelle Details bekannt sind und die nur in Sekundärliteratur oder in Abstracts aufgeführt sind.

8.3 Quellen

Für die Aufbereitungshilfsstoffe wurden zuverlässige öffentlich zugängliche Datenbanken durchsucht. Ein Überblick ist in Tabelle 18 gegeben. Es wurden Effektdaten zu aquatischen

Organismen recherchiert, insbesondere für die Gruppen Alge, Daphnie und Fische. Daneben wurden auch Daten zu aquatischen Mikroorganismen, Invertebraten (z.B. Insekten) und Vertebraten aufgenommen. Die Auszüge der Datenbanken sind im Anhang zu den PNEC-Herleitungen zu finden.

Tabelle 18: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken

Datenbank	Beschreibung
ATSDR Toxic Substances Portal ³⁰	US Agency for Toxic Substances & Disease Registry; information about toxic substances (öffentliche Gesundheitsbehörde des U.S. Department of Health and Human Services)
ECHA ³¹	Datenbank der Europäischen Chemikalien-Agentur; enthält u.a. Daten zu Industriechemikalien (REACH) und Klassifizierung nach CLP (harmonisiert und/oder von der Industrie angemeldet)
eChemPortal ³²	Meta-Datenbank der OECD
ECOTOX ³³	Datenbank der US-Umweltschutzamt EPA zu Ökotoxizitätsdaten (Aquatik, Terrestrik)
ETOX ³⁴	Informationssystem zu Ökotoxikologie und Umweltqualitätszielen des Umweltbundesamts
GESTIS ³⁵	Gefahrstoffinformationssystem der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung
GSBLpublic ³⁶	Stoffinformationssystem entwickelt von elf Bundesländern und dem Bund; beteiligte Bundesbehörden: Umweltbundesamt, BAM, Bundesministerium des Inneren, Bundesministerium für Wirtschaft und Energie
IRIS ³⁷	Integrated Risk Information System der US-Umweltschutzamt EPA: Programm zur Identifizierung von Gesundheitsgefahren durch Substanzen, die in der Umwelt vorkommen
J-CHECK ³⁸	Japan CHEmicals Collaborative Knowledge Database; J-CHECK ist eine Datenbank mit Informationen in Hinblick auf den "Act on the Evaluation of Chemical Substances and Regulation of Their Manufacture, etc." (CSCL) der japanischen Behörden (Ministry of Health, Labour and Welfare, Ministry of Economy, Trade and Industry, and Ministry of the Environment). Die Datenbank enthält Testdaten zu Bioabbau, Bioakkumulation und aquatischer Ökotoxizität. Die Test werden unter GLP und nach OECD-Richtlinien von den Behörden durchgeführt.
SIDS ³⁹	Screening Information Data Set; Stoffberichte zur Risikobeurteilung von hochtonnagigen Stoffen (HPV) bearbeitet innerhalb des United Nations Environment Programme (UNEP)
TOXNET ⁴⁰	Metadatenbank der US National Library of Medicine zu Toxikologie, Gefahrstoffen, Umweltgesundheit und Schadstofffreisetzung; Zugriff u.a. auf HSDB (Hazardous Substances Data Bank) und TOXLINE (Literaturhinweisen u.a. toxikologischen Effekten)

³⁰ <http://www.atsdr.cdc.gov/substances/index.asp>

³¹ <http://echa.europa.eu/de/information-on-chemicals>

³² <http://www.echemportal.org/>

³³ <http://cfpub.epa.gov/ecotox/>

³⁴ <http://webetox.uba.de/webETOX>

³⁵ <https://www.dguv.de/ifa/gestis/gestis-stoffdatenbank/index.jsp>

³⁶ <http://www.gsbl.de/>

³⁷ <http://www.epa.gov/iris/>

³⁸ http://www.safe.nite.go.jp/jcheck/search.action?request_locale=en

³⁹ <http://www.inchem.org/pages/sids.html>

⁴⁰ <http://toxnet.nlm.nih.gov/>

9 Annex 3: Charakterisierung und PNECs

9.1 Salicylsäure (CAS 69-72-7)

Tabelle 19: Substanzcharakterisierung von Salicylsäure (CAS 69-72-7)

Name	Salicylsäure
Chemischer Name	2-Hydroxybenzoesäure
CAS-Nr.	69-72-7
EINECS-Nr.	200-712-3
Molare Masse	138,12 g/mol
Wasserlöslichkeit	2 g/L (20 °C, OECD 105)
Biologische Abbaubarkeit	100 % (14 d, OECD 301C), > 90 % (4 d, OECD 302B)
log Kow	2,2-2,3 (exp., [24])
Bioakkumulation	BCF = 3 L/kg (QSAR-Modell: EPI Suite v4.11, BCFBAF v3.01)
PBT/vPvB	nein [24]
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend) [99]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung, CLH-Vorschlag ⁴¹ : Repr. 2 (H361d); Acute Tox. 4 (H302); Eye Dam. 1 (H318); umweltrelevante Notifizierung der Industrie: - ⁴²
REACH-Status	registriert

Salicylsäure (2-Hydroxybenzoesäure) wird an den Standorten Hattorf und Wintershall des Werks Werra sowie am Werk Neuhoof-Ellers großtechnisch im ESTA-Verfahren eingesetzt. Salicylsäure ist nach der EU-REACH-VO registriert. Die Substanz ist eine leicht biologisch abbaubare organische Säure. Die Wasserlöslichkeit beträgt etwa 2 g/L bei 20 °C. Sie ist als schwach wassergefährdend (WGK 1) gemäß der Verordnung über Anlagen zum Umgang mit wassergefährdenden Stoffen (AwSV, 18.04.2017) eingestuft [93]. Eine harmonisierte Klassifizierung in der EU tritt am 01. Mai 2020 in Kraft. Ein CLH-Vorschlag wurde vom RAC angenommen (Repr. 2 (H361d); Acute Tox. 4 (H302); Eye Dam. 1 (H318); Verordnung (EU) 2018/1480 vom 04. Okt. 2018). Entsprechend den ökotoxikologischen Daten des REACH-Registrierungsdossiers und den Daten für die PNEC-Herleitung ist keine umweltrelevante Einstufung erforderlich. Basierend auf dem niedrigen log Kow und dem berechneten Biokonzentrationsfaktor besitzt die Substanz kein signifikantes Bioakkumulationspotential.

⁴¹ Der Vorschlag wurde vom RAC angenommen (Verordnung (EU) 2018/1480 vom 04. Okt. 2018); die Klassifizierung tritt am 01. Mai 2020 in Kraft.

⁴² Nur einer von mehr als 1000 Registrierenden hat Salicylsäure mit der Umweltkennzeichnung H412 angemeldet (mit Verweis „data lacking“). Diese Einstufung entspricht nicht den Informationen des REACH-Registrierungsdossiers und deckt sich auch nicht mit den Daten für die PNEC-Herleitung. Daher wird diese Einstufung nicht weiter beachtet.

Tabelle 20: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Salicylsäure

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	21.08.2018	nein; keine Daten vorhanden
ECHA	21.08.2018	nein; keine zusätzlichen Daten vorhanden
eChemPortal	21.08.2018	Verweis auf folgende Datenbanken: J-CHECK ⁴³ : keine neuen Daten IPCS INCHEM: keine umweltrelevanten Daten vorhanden EnviChem: Seite nicht erreichbar GHS-J: Umweltrelevante Klassifizierung nach GHS-UN: Acute 3 (Einstufung nicht für europäischen Bereich gültig) OECD HPV: keine umweltrelevanten Daten vorhanden HSNO CCID ⁴⁴ : Seite nicht erreichbar US EPA SRS ⁴⁵ : keine umweltrelevanten Daten vorhanden ACToR ⁴⁶ : keine umweltrelevanten Daten vorhanden
ECOTOX	27.07.2018	nein; keine neuen Ökotox-Daten
ETOX	21.08.2018	nein; keine neuen Ökotox-Daten
GESTIS	21.08.2018	nein; keine neuen Ökotox-Daten
GSBLpublic	27.07.2018	nein; keine neuen Ökotox-Daten
IRIS	21.08.2018	kein Eintrag vorhanden
SIDS	21.08.2018	kein Eintrag vorhanden
TOXNET	21.08.2018	nein; keine neuen Ökotox-Daten

Bei der Überprüfung der Aktualität der bereits vorliegenden Daten wurden keine neuen Informationen gefunden, daher bleibt die $PNEC_{\text{aqua}}$ für Salicylsäure unverändert seit dem Bericht vom 25.08.2016. Die für die PNEC-Ableitung relevanten Daten sind in Tabelle 21 zusammengefasst. Es liegen akute und chronische Effektdaten vor. Eine Neubewertung ist nicht erforderlich. Es wurde ein Sicherheitsfaktor von 50 auf den niedrigsten validen chronischen Wert angewendet [9, 31]. Das HLNUG hat den folgenden Wert bestätigt [24]:

$$PNEC_{\text{aqua}} = 5,6 : 50 = 0,112 \text{ mg/L} = 112 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Tabelle 21: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Salicylsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>Desmodesmus subspicatus</i>	EC50	> 1600	[68]
<i>Daphnia magna</i>	LC50	302	Geomittel
<i>Pimephales promelas</i>	LC50	1380	[24]
Chronischer Datensatz			
<i>Desmodesmus subspicatus</i>	EC10	1559	[68]
<i>Daphnia longispina</i>	NOEC	5,6	[63]
Fisch	keine validen Daten		

⁴³ Japan Chemicals Collaborative Knowledge database⁴⁴ Environmental Protection Authority of New Zealand⁴⁵ US EPA Substance Registry Services⁴⁶ EPA's Aggregated Computational Toxicology Online Resource (ACToR)

9.2 Fettsäuren, C12-18 und C18 ungesättigt (CAS 90990-15-1)

Fettsäuren, C12-18 und C18 ungesättigt, ist ein Gemisch aus gesättigten und ungesättigten Fettsäuren mit einer Kohlenstoffkettenlänge zwischen C12 und C18. Dieses Einsatzstoffgemisch wird großtechnisch an den Standorten Hattorf und Wintershall des Werks Werra sowie am Werk Neuhoof-Ellers in den ESTA-Anlagen zur Aufbereitung des Rohsalzes verwendet. Dieser AHS ist gemäß SDB des Lieferanten als ein aus natürlichen Rohstoffen gewonnener, chemisch nicht veränderter Stoff von der Registrierungspflicht nach der REACH-VO (Anhang V Nr. 9) ausgenommen. Das Stoffgemisch ist bei Raumtemperatur als cremefarbige, pastöse Masse praktisch wasserunlöslich. Die Komponenten haben eine maximale Wasserlöslichkeit von 4,8 mg/L (Laurinsäure). Des Weiteren sind alle im Produkt enthaltenen Stoffe nach Angaben des SDB leicht biologisch abbaubar (OECD 301). Fettsäuren, C12-18 und C18 ungesättigt, ist als schwach wassergefährdend (WGK 1) gemäß der Verordnung über Anlagen zum Umgang mit wassergefährdenden Stoffen (AwsV, 18.04.2017) eingestuft. Laurin- und Ölsäure sind ebenfalls schwach wassergefährdend, während Myristin- und Palmitinsäure nicht wassergefährdend sind (nwg). Für Palmitinsäure sieht das HLNUG aufgrund des hohen log Kow ein Bioakkumulationspotential als gegeben an. Berechnungen der Biokonzentrationsfaktoren für Palmitinsäure mit verschiedenen QSAR-Modellen haben einen maximalen BCF von 152 L/kg ergeben (Tabelle 38). Dieser Wert wird durch experimentelle Untersuchungen für Natrium-Laurat unterstützt, die einen BCF von 255 L/kg Feuchtgewicht ergeben haben (Van Egmond et al., 1999, [106]). Damit ist die Substanz nach GHS (BCF < 500) nicht signifikant bioakkumulierend und erfüllt nach REACH nicht die Kriterien für bioakkumulierende Substanzen (BCF ≤ 2000 L/kg, s. Kapitel 9.2.5). Darüber hinaus ist bei Fettsäuren nach einer möglichen Aufnahme in Organismen von einem schnellen Metabolismus auszugehen.

Die Bewertungen des HLNUG wurden am 2016, 2017 sowie am 2019 erstellt. Die letzte Aktualisierung der PNEC-Ableitung wurde am 03.04.2019 dem HLNUG zur Prüfung vorgelegt.

Aufgrund einer Überprüfung der Aktualität der Datenlage wurden bisher nicht berücksichtigte Daten ermittelt und in dem vorliegenden Bericht zusammengestellt. Hierdurch mussten die PNECs teilweise angepasst werden.

Seit der Berichtserstellung vom 27.06.2016 für die Ableitung eines $PNEC_{\text{aqua}}$ sind keine zusätzlichen Daten zur Ökotoxizität des AHS Fettsäuren, C12-18 und C18 ungesättigt, bestimmt worden. Folglich kann weiterhin keine valide PNEC basierend auf den vorhandenen Daten abgeleitet werden. Da die Zusammensetzung des AHS bekannt ist, wurden in Absprache mit dem HLNUG PNECs für die Einzelkomponenten abgeleitet, aber keine PNEC für das Gemisch [43].

Tabelle 22: Substanzcharakterisierung von Fettsäuren, C12-18 und C18 ungesättigt (CAS 90990-15-1)

Name	Fettsäure KPK 12-18
Chemischer Name	Gemisch aus gesättigten und ungesättigten Fettsäuren (C12-C18); Fettsäuren, C12-18 und C18 ungesättigt
CAS-Nr.	90990-15-1
EINECS-Nr.	292-776-4
Zusammensetzung	ca. 50 % Laurinsäure, ca. 20 % Myristinsäure, ca. 20 % Ölsäure, ca. 10 % Palmitinsäure
Molare Masse	Gemisch
Wasserlöslichkeit	bei Raumtemperatur praktisch unlöslich
Biologische Abbaubarkeit	leicht biologisch abbaubar (>70 bzw >60 % nach 10 d, OECD 301)
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend ⁴⁷) [91, 5]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Notifizierung der Industrie: keine
REACH-Status	nicht registriert bzw. von REACH-Registrierung ausgenommen

9.2.1 Komponenten: Laurinsäure (CAS 143-07-7)

Tabelle 23: Substanzcharakterisierung von Laurinsäure (CAS 143-07-7)

Name	Laurinsäure
Chemischer Name	Laurinsäure C12
CAS-Nr.	143-07-7
EINECS-Nr.	205-582-1
Molare Masse	200,3 g/mol
Wasserlöslichkeit	4,81 mg/L
Biologische Abbaubarkeit	leicht biologisch abbaubar (100 % TOC-Abbau in 100 h (CCID), 89 % nach 30 d, OECD 301D)
log Kow	4,6 (exp.), 5,0 (ber.) (EPI Suite v4.11)
Bioakkumulationspotential	BCF = 225 L/kg (exp. Na-Laurat)
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend) [87]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Notifizierung der Industrie: H412
REACH-Status	registriert

⁴⁷ Kein Eintrag unter der CAS-Nummer; laut Sicherheitsdatenblatt wurde die Einstufung unter der Kennnummer 659 vorgenommen.

Tabelle 24: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Laurinsäure (CAS 143-07-7)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	22.08.2018	keine Daten vorhanden
ECHA	22.08.2018	keine neuen Daten; Daphnien-Reproduktionsstudie korrigiert (NOEC $\geq 1,3$ mg/L)
eChemPortal	22.08.2018	J-CHECK: Daten bereits unter ECHA eingetragen EnviChem: keine neuen Daten INERIS-PSC: keine umweltrelevanten Daten OECD SIDS: s. u. NICNAS IMAP: Seite nicht erreichbar CCR: keine neuen Daten
ECOTOX	22.08.2018	keine neuen Daten
ETOX	22.08.2018	keine Daten
GESTIS	22.08.2018	keine neuen Daten
GSBL ^{public}	22.08.2018	Verweis auf ETOX
IRIS	22.08.2018	keine Daten
SIDS	22.08.2018	OECD SIAP (CoCAM 2014, Aliphatic Acids Category): keine neuen Daten; Werte bereits berücksichtigt Die Daten zu diesem Bericht werden durch Experten von OECD-Mitgliedsstaaten, der Industrie und NGOs zusammengestellt und bewertet. Italien ist für die finale Bewertung dieser Substanzkategorie verantwortlich. Auf dem CoCAM 6 2014 (Cooperative Chemical Assessment Meeting) haben sich die Teilnehmer auf die Schlussfolgerungen zu dieser Kategorie geeinigt und diese im SIAP veröffentlicht. Eine finale Fassung des SIDS Initial Assessment Report (SIAR) liegt noch nicht vor. Die Daten aus dem OECD SIAP können als „peer-reviewed“ angesehen werden und sind somit als zuverlässig einzustufen.
TOXNET	22.08.2018	HSDB: keine neuen Daten

Tabelle 25: Aktualisierte Effektwerte für Laurinsäure (CAS 143-07-7)

Organismus	Endpunkt	Dauer	Parameter	Wert (mg/L)	Chemische Analyse	Bemerkungen	Validität ⁴⁸	Referenz
<i>Daphnia magna</i>	Repro	21 d	NOELR	$\geq 1,294$ (m)	Ja	Read-Across: Decanoic acid C10, OECD 211, GLP, semi-statisch, Limit-Test; Bei Vorlage des Berichts vom 27.06.2016 wurden in ECHA unterschiedliche Einheiten beim Effektwert angegeben ($\mu\text{g/L}$, mg/L). Dieser Eintrag wurde durch den Registrierenden überarbeitet und die Einheit in mg/L korrigiert.	1	Studie von 2010 [20]

⁴⁸ Bewertung der Validität nach Klimisch et al. (1997)

Laurinsäure besitzt eine geringe Wasserlöslichkeit. Sie ist biologisch leicht abbaubar. Aufgrund von experimentellen Untersuchungen zum Bioakkumulationspotential mit dem Salz der Fettsäure (Natrium-Laurat) kann das Bioakkumulationspotential trotz des hohen log Kow als gering eingestuft werden.

Die vorhandenen Ökotoxizitätsdaten müssen nicht durch neue Informationen ergänzt werden. Ein in ECHA bislang fehlerhafter Eintrag wurde korrigiert (Tabelle 25), so dass nun ein valider chronischer Effektwert für aquatische Invertebraten zur Verfügung steht. Ein Überblick über die relevanten akuten und chronischen Daten zur Herleitung der PNEC ist in Tabelle 26 gegeben. Durch die Korrektur ist der chronische Datensatz somit vollständig und ein Sicherheitsfaktor von 10 kann angewendet werden nach TGD [31]. Da der NOELR für *D. magna* in einem Limit-Test bestimmt wurde, ist der Effektwert nur nach unten genau definiert. Somit handelt es sich um einen Worst-Case-Ansatz.

Bislang wurde eine PNEC von 20 µg/L vom HLNUG bestätigt, der auf dem NOEC für Fisch und einem Sicherheitsfaktor von 100 basiert [43].

Basierend auf dem vollständigen Datensatz (chronische Daten für drei trophische Ebenen; [9, 31]) ergibt sich folgende PNEC_{aqua}:

$$\text{PNEC}_{\text{aqua}} = 1,3 \text{ mg/L} : 10 = 0,13 \text{ mg/L} = \mathbf{130 \mu\text{g/L}}$$

Der chronische Wert für die aquatischen Invertebraten (*Daphnia magna*, 21-d NOEL 1,294 mg/L, Studie, 2010 in [20]; Read-across zu Decansäure) wird aufgrund der Empfehlung von Dr. Rippen [80] nicht für die PNEC-Ableitung berücksichtigt. Hintergrund ist die unterschiedliche Kettenlänge von Dekan- (C10) und Laurinsäure (C12). Dementsprechend stehen Daten für zwei trophische Ebenen bezüglich der chronischen Toxizität zur Verfügung. Basierend auf dem NOEC von 2 mg/L für Fisch und einem Sicherheitsfaktor von 100 für chronische Daten zu zwei trophischen Ebenen ergibt sich eine PNEC von 20 µg/L. Dieser Wert wurde vom HLNUG bestätigt [43].

$$\text{PNEC}_{\text{aqua}} = 2 \text{ mg/L} : 100 = 0,02 \text{ mg/L} = \mathbf{20 \mu\text{g/L}}$$

Tabelle 26: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Laurinsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	EC50	> 7,6	Studie in ECHA [20]
<i>Daphnia magna</i>	EC50	3,6	Studie in ECHA [20]
<i>Oryzias latipes</i>	LC50	5	Studie in ECHA [20]
Chronischer Datensatz			
<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	NOEC	≥ 7,6	Studie in ECHA [20]
<i>Daphnia magna</i>	NOELR	(≥ 1,3 mg/L)	Studie in ECHA [20]
<i>Danio rerio</i>	NOEC	2	Studie in ECHA [20]

9.2.2 Komponenten: Myristinsäure (CAS 544-63-8)

Tabelle 27: Substanzcharakterisierung von Myristinsäure (CAS 544-63-8)

Name	Myristinsäure
Chemischer Name	Myristinsäure C14
CAS-Nr.	544-63-8
EINECS-Nr.	208-875-2
Molare Masse	228,4 g/mol
Wasserlöslichkeit	1,07 mg/L bei 25 °C
Biologische Abbaubarkeit	keine Angabe
log Kow	6,1 (exp.), 6,0 (ber.) (EPI Suite v4.11)
Bioakkumulationspotential	BCF = 56 (ber., BCFBAF v3.01)
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	nwg (nicht wassergefährdend) [88]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Notifizierung der Industrie: H413
REACH-Status	nicht registriert

Tabelle 28: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Myristinsäure (CAS 544-63-8)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	23.08.2018	keine Daten vorhanden
ECHA	23.08.2018	nicht registriert
eChemPortal	23.08.2018	J-CHECK: Studien zu Alge, Daphnie (akut u. chron.), Fisch
ECOTOX	23.08.2018	keine Daten
ETOX	23.08.2018	keine Daten
GESTIS	23.08.2018	keine umweltrelevanten Daten
GSBL _{public}	23.08.2018	keine umweltrelevanten Daten
IRIS	23.08.2018	keine Daten
SIDS	23.08.2018	OECD SIAP (CoCAM 2014, Aliphatic Acids Category): Fisch: 96-h LC50 > 100 - < 300 mg/L (n; Effektwert > Wasserlöslichkeit; vergleichbar mit OECD 203, <i>L. idus</i> , semi-stat.) Aq. Inv.: 48-h EC50: keine Effekte bei Sättigung in Meerwasser (m, WAF, Wasserlöslichkeit; semi-stat., <i>Hyale plumosa</i>)
TOXNET	23.08.2018	HSDB: keine neuen Daten

Tabelle 29: Aktualisierte Effektwerte für Myristinsäure (CAS 544-63-8)

Organismus	Endpunkt	Dauer	Parameter	Wert (mg/L)	Chemische Analyse	Bemerkung	Validität	Referenz
Akute Daten								
Grünalge	Wachstum	96 h	EC50	1,1	-	berechnet; Substanz nicht wasserlöslich genug, um diesen Effekt zu messen.	-	[28]
<i>R. subcapitata</i>	W.-Rate / Biomasse	72 h	EC50	> 2,1	ja	OECD 201, stat., Limittest, Lösemittel	2	[61]
<i>Daphnia</i> sp.	Imm.	48 h	LC50	0,32	-	berechnet	-	[28]
<i>D. magna</i>	Imm.	48 h	EC50	> 1,7	ja	OECD 202, semistat., Limittest, Lösemittel	2	[61]
<i>Hyale plumosa</i>	Mort.	48 h	LC50	> 5,6	k.A.	Keine Richtlinie befolgt, stat., marin, keine Mortalität bis zur Sättigung in Meerwasser	2	[73]
Fische	Mort.	96 h	LC50	0,38	-	berechnet	-	[28]
<i>O. latipes</i>	Mort.	96 h	LC50	> 1,96	ja	OECD 203, semistat., Lösemittel	2	[61]
<i>L. idus</i>	Mort.	96 h	LC50	> 100 - < 300	nein	vergleichbar mit OECD 203, semistat.; Effektwert deutlich größer als Wasserlöslichkeit	3	[73]
<i>O. latipes</i>	Mort.	96 h	LC50	118	?	Read-Across zu Na-Salz der Myristinsäure (CAS 822-12-8): keine Richtlinie, semistat.	2	[73]
Chronische Daten								
Grünalge	Wachstum	96 h	ChV	0,69	-	berechnet	-	[28]
<i>R. subcapitata</i>	W.-Rate / Biomasse	72 h	NOEC	2,1	ja	OECD 201, stat., Limittest, Lösemittel	2	[61]
<i>Daphnia</i> sp.	Repro.	21 d	ChV	0,09	-	berechnet	-	[28]
<i>D. magna</i>	Repro.	21 d	NOEC	0,31	ja	OECD 211, semistat., Limittest, Lösemittel; 21-d NOEC = 0,31 mg/L (zeitgewichtetes Mittel); 21-d NOEC = 1,3 mg/L (nominal)	2	[61]
Fisch	Repro.	-	ChV	0,06	-	berechnet	-	[28]

Myristinsäure besitzt eine geringe Wasserlöslichkeit. Angaben zur biologischen Abbaubarkeit fehlen, jedoch ist aufgrund der Daten von strukturverwandten Substanzen, wie z.B. Laurin- und Ölsäure, ebenfalls von einem guten Abbauverhalten auszugehen. Der log Kow ist hoch (log Kow = 6), so dass zunächst von einem signifikanten Bioakkumulationspotential auszugehen ist, jedoch weist der berechnete BCF sowie die experimentellen Untersuchungen zu Natrium-Laurat auf ein nicht-signifikantes Bioakkumulationspotential hin.

Bisher lagen zur Myristinsäure (CAS 544-63-8) nur berechnete Effektwerte vor [28]. Durch die aktuelle Recherche (23.08.2018) ergaben sich experimentelle Daten, unter anderem aus einer zuverlässigen Quelle der J-CHECK-Datenbank der japanischen Umweltbehörden. Die Studien wurden wahrscheinlich aufgrund der geringen Wasserlöslichkeit der Myristinsäure (1,07 mg/L,

25 °C, OECD 105) als Limittest durchgeführt. Die Testlösungen wurden mit Hilfe von Lösemittel hergestellt. Die Testkonzentrationen wurden analytisch überprüft. In den Studien zur akuten Toxizität auf Alge, Daphnie und Fisch wurden keine Effekte beobachtet. Die verwendeten Testkonzentrationen liegen leicht oberhalb der Wasserlöslichkeitsgrenze. Laut TGD [31] ist die Verwendung von Ergebnissen, die um einen Faktor ≤ 2 über der Wasserlöslichkeitsgrenze liegen, zulässig.

Zusätzlich zur Untersuchung der akuten Toxizität wurden die chronischen Effekte von Myristinsäure auf Daphnien nach OECD 211 untersucht. Die Testlösungen wurden ebenfalls mit Lösemittel hergestellt. Dies ist entsprechend der aktuellen OECD 211 möglich, sollte jedoch vermieden werden. Die Effektwerte wurden vorrangig basierend auf den nominalen Konzentrationen abgeleitet und die gemessenen Konzentrationen (zeitgewichtete Mittelwerte) als Referenzwerte angegeben. In dem Studienbericht wird diese Methode mit teilweise fehlender Wiederfindung der Substanz in einigen gealterten Testmedien begründet. In einem Worst-Case-Ansatz werden in der Ableitung der PNEC für Myristinsäure die niedrigeren gemessenen Konzentrationen (Referenzwerte) verwendet. Es lässt sich aus diesen Daten schließen, dass bis zur Wasserlöslichkeitsgrenze keine akuten und chronischen Effekte zu erwarten sind.

Tabelle 30: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Myristinsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>R. subcapitata</i>	EC50	> 2,1	[61]
<i>D. magna</i>	EC50	> 1,7	[61]
<i>O. latipes</i>	LC50	> 1,96	[61]
Chronischer Datensatz			
<i>R. subcapitata</i>	NOEC	2,1	[61]
<i>Daphnia magna</i>	NOEC	0,31	[61]
Fisch	-	-	-

Es liegt ein vollständiger akuter Basisdatensatz vor (Tabelle 30). Hier ist (scheinbar) die Daphnie die empfindlichste trophische Ebene, wobei aufgrund des Testdesigns (Limittest, Wasserlöslichkeit) keine abschließende Aussage zum empfindlichsten Organismus getroffen werden sollte. Chronische Daten sind für zwei trophische Ebenen vorhanden (Alge und Daphnie), die empfindlichste akute Spezies ist somit abgedeckt. Folglich kann auf die niedrigste NOEC ein Sicherheitsfaktor von 50 angewendet werden, um die PNEC abzuleiten:

$$\text{PNEC}_{\text{aqua}} = 0,31 \text{ mg/L} : 50 = 0,0062 \text{ mg/L} = \mathbf{6,2 \mu\text{g/L}}$$

Diese PNEC wurde vom HLNUG bestätigt [53].

9.2.3 Komponenten: Ölsäure (CAS 112-80-1)

Tabelle 31: Substanzcharakterisierung von Ölsäure (CAS 112-80-1)

Name	Ölsäure
Chemischer Name	Oleinsäure C18 (ungesättigt)
CAS-Nr.	112-80-1
EINECS-Nr.	204-007-1
Molare Masse	282,5 g/mol
Wasserlöslichkeit	< 0,1 mg/L
Biologische Abbaubarkeit	leicht biologisch abbaubar (78 % nach 28 d, OECD 301C) [59]
log Kow	7,7 (exp., ber.; EPI Suite v4.11)
Bioakkumulationspotential	BCF = 56 (ber., BCFBAF v3.01)
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend) [86]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Notifizierung der Industrie: H412
REACH-Status	nicht registriert

Ölsäure besitzt eine sehr geringe Wasserlöslichkeit. Sie ist leicht biologisch abbaubar. Der log Kow ist hoch (log Kow = 7,7), so dass zunächst von einem signifikanten Bioakkumulationspotential auszugehen ist, jedoch weist der berechnete BCF sowie die experimentellen Untersuchungen zu Natrium-Laurat auf ein nicht signifikantes Bioakkumulationspotential hin.

Tabelle 32: Rechercheergebnisse für Ölsäure (CAS 112-80-1)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	23.08.2018	keine Daten vorhanden
ECHA	23.08.2018	nicht registriert
eChemPortal	23.08.2018	J-CHECK: Studien zu Alge, Daphnie (akut u. chron.), Fisch
ECOTOX	23.08.2018	Fisch akut, Daphnie akut
ETOX	23.08.2018	keine Daten
GESTIS	23.08.2018	Fisch akut
GSBL ^{public}	23.08.2018	Verweis auf ETOX
IRIS	23.08.2018	keine Daten
SIDS	23.08.2018	OECD SIAP (CoCAM 2014, Aliphatic Acids Category): Fisch: <i>O. mykiss</i> : 96-h LC50 > 56 mg/L (n; LC50 >> Wasserlöslichkeit; Richtlinie nicht angegeben, semi-stat.) <i>D. magna</i> : 48-h EC50 ≥ 32 mg/L (EU-Methode C.2, stat., EC50 >> Wasserlöslichkeit, WAF, stat.)
TOXNET	23.08.2018	HSDB: Fisch akut: 96-h LC50 = 205 mg/L, Mattson et al. (1976) [64]

Tabelle 33: Aktualisierte Effektwerte für Ölsäure (CAS 112-80-1)

Organismus	Endpunkt	Dauer	Parameter	Wert (mg/L)	Chemische Analyse	Bemerkung	Validität	Referenz
Akute Daten								
Grünalge	Wachstum	96 h	EC50	1,1	-	berechnet; Substanz nicht wasserlöslich genug, um diesen Effekt zu messen.	-	[28]
<i>R. subcapitata</i>	W.-Rate / Biomasse	72 h	EC50	> 2,6	ja	OECD 201, stat., Limittest	2	[58]
<i>Daphnia</i> sp.	Imm.	48 h	LC50	0,32	-	berechnet	-	[28]
<i>D. magna</i>	Imm.	48 h	EC50	> 2,8	ja	OECD 202, semistat., Limittest; EC0 = 2,8 mg/L	2	[58]
<i>D. magna</i>	Imm.	48 h	EC50	≥ 32	-	EU-Methode C.2, stat., WAF, Effektwerte größer als Wasserlöslichkeit	3	[73]
Fische	Mort.	96 h	LC50	0,38	-	berechnet	-	[28]
<i>O. latipes</i>	Mort.	96 h	LC50	> 2,5	ja	OECD 203, semistat., Limittest	2	[58]
<i>O. mykiss</i>	Mort.	96 h	LC50	> 56	nein	keine Richtlinie angegeben, semistat.; Effektwert deutlich größer als Wasserlöslichkeit	3	[73]
<i>P. promelas</i>	Mort.	96 h	LC50	205	?	keine Richtlinie angegeben, gelöster Sauerstoffgehalt ≤ 4 mg/L, Effektwert deutlich größer als Wasserlöslichkeit	3	[64]
Chronische Daten								
Grünalge	Wachstum	96 h	ChV	0,69	-	berechnet	-	[28]
<i>R. subcapitata</i>	W.-Rate / Biomasse	72 h	NOEC	2,6	ja	OECD 201, stat., Limittest	2	[59]
<i>Daphnia</i> sp.	Repro.	21 d	ChV	0,09	-	berechnet	-	[28]
<i>D. magna</i>	Repro.	21 d	NOEC	0,08	ja	OECD 211, semistat., 21-d NOEC = 0,32 (nom.)	2	[73]
Fisch	Repro.	-	ChV	0,06	-	berechnet	-	[28]

Bisher lagen zur Ölsäure (CAS 112-80-1) nur berechnete Effektwerte vor [43]. Die aktuelle Recherche (23.08.2018) ergab experimentelle Daten, unter anderem aus einer zuverlässigen Quelle der J-CHECK-Datenbank der japanischen Umweltbehörden. Die Studien wurden wahrscheinlich aufgrund der geringen Wasserlöslichkeit der Ölsäure (< 0,1 mg/L, ber.) als Limittest durchgeführt. Lösemittel wurde zur Herstellung der Testlösungen nicht verwendet. Die Testkonzentrationen wurden analytisch überprüft und hatten ähnliche Werte in allen drei Testsystemen (Alge, akute Daphnie, Fisch). In den Studien zur akuten Toxizität auf Alge, Daphnie und Fisch wurden keine Effekte beobachtet. Die verwendeten Testkonzentrationen liegen oberhalb der berechneten Wasserlöslichkeitsgrenze. Laut TGD [31] ist die Verwendung von Ergebnissen, die um einen Faktor ≤ 2 über der Wasserlöslichkeitsgrenze liegen, zulässig. Verglichen mit der berechneten Wasserlöslichkeit sind diese Ergebnisse nicht zu verwenden, da es sich aber um gemessene Konzentrationen handelt, wird an dieser Stelle davon abgewichen.

Zusätzlich zur Untersuchung der akuten Toxizität wurden die chronischen Effekte von Ölsäure auf Daphnien nach OECD 211 untersucht [58]. Laut J-CHECK war es schwierig, die Testkonzentrationen stabil zu halten. Folglich weichen nominal und gemessene Konzentrationen deutlich voneinander ab mit Ausnahme von *D. magna*, bei der chronische Effekte unterhalb der Wasserlöslichkeitsgrenze beobachtet wurden (Tabelle 33).

Tabelle 34: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Ölsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>R. subcapitata</i>	EC50	> 2,6	[58]
<i>D. magna</i>	EC50	> 2,8	[58]
<i>O. latipes</i>	LC50	> 2,5	[58]
Chronischer Datensatz			
<i>R. subcapitata</i>	NOEC	2,6	[58]
<i>D. magna</i>	NOEC	0,08	[58]
Fisch	-	-	-

Es liegt ein vollständiger akuter Basisdatensatz vor, bei dem die angegebenen Konzentrationen sehr dicht beieinander liegen (> 2,5 bis > 2,8 mg/L; Tabelle 33). In allen drei Tests wurden keine Effekte beobachtet, folglich ist die sensitivste Spezies nicht eindeutig zu benennen. Formal wäre Fisch die empfindlichste trophische Ebene, jedoch liegen die Effektwerte sehr nah beieinander. Nach den berechneten akuten Effektwerten sind Daphnie und Fisch vergleichbar sensibel, während Alge deutlich weniger empfindlich auf Ölsäure reagiert.

Basierend auf den akuten Daten und einem Sicherheitsfaktor von 1000 laut TGD [31], ergibt sich folgender PNEC:

$$\text{PNEC}_{\text{aqua}} = 2,5 \text{ mg/L} : 1000 = 0,0025 \text{ mg/L} = \mathbf{2,5 \mu\text{g/L}}$$

Experimentelle chronische Daten sind für zwei trophische Ebenen vorhanden (Alge und Daphnie), eine der empfindlichen akuten Spezies ist somit abgedeckt. Ein Vergleich der berechneten chronischen Effektwerte bestätigt, dass auch Alge hier am wenigsten sensibel ist, während Fisch und Daphnie fast identische Effektwerte aufweisen. Demnach ist es gerechtfertigt einen Sicherheitsfaktor von 50 auf die niedrigste NOEC (Daphnie, NOEC = 0,08 mg/L) anzuwenden, um die PNEC abzuleiten:

$$\text{PNEC}_{\text{aqua}} = 0,08 \text{ mg/L} : 50 = 0,0016 \text{ mg/L} = \mathbf{1,6 \mu\text{g/L}}$$

Für Ölsäure wird die niedrigere PNEC von 1,6 µg/L ausgewählt.

Bislang wurde ein PNEC von 0,32 µg/L vom HLNUG bestätigt, der auf berechneten QSAR-Daten für den akuten Datensatz und einem Sicherheitsfaktor von 1000 basierte [43]. Mit der Neubewertung bestätigt das HLNUG die PNEC von 1,6 µg/L [52].

9.2.4 Komponente: Palmitinsäure (CAS 57-10-3)

Tabelle 35: Substanzcharakterisierung von Palmitinsäure (CAS 57-10-3)

Name	Palmitinsäure
Chemischer Name	Palmitinsäure C16
CAS-Nr.	57-10-3
EINECS-Nr.	200-312-9
Molare Masse	256,4 g/mol
Wasserlöslichkeit	< 0,05 mg/L
Biologische Abbaubarkeit	leicht biologisch abbaubar, 10-Tage-Fenster nicht eingehalten (65 % in 28 d, OECD 301D)
log Kow	7,17 (exp., Sangster, 1993)
Bioakkumulationspotential	nicht signifikant (s. Kapitel 9.2.5)
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	nwg (nicht wassergefährdend) [89]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Notifizierung der Industrie: H412
REACH-Status	nicht registriert

Tabelle 36: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Palmitinsäure (CAS 57-10-3)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	24.08.2018	keine Daten
ECHA	24.08.2018	registriert; Daten bereits aufgenommen
eChemPortal	24.08.2018	J-CHECK: Studien zu Alge, Daphnie (akut u. chron.), Fisch; Daten bereits über ECHA bekannt; zusätzlich zwei ältere Studien zu Daphnie akut und Daphnie chronisch; Konzentrationen allerdings deutlich höher: <i>D. magna</i> : OECD 202: 48-h EC50 = 4,8 mg/L (gemessen) OECD 211: 21-d NOEC > 5,8 mg/L (gemessen)
ECOTOX	24.08.2018	keine validen Daten: Krebstiere: <i>Artemia salina</i> (marin); Fisch: <i>O. mykiss</i> (LT50 nicht verwendbar)
ETOX	24.08.2018	keine Daten
GESTIS	24.08.2018	keine Ökotoxdaten
GSBLpublic	24.08.2018	keine Ökotoxdaten
IRIS	24.08.2018	keine Daten
SIDS	24.08.2018	OECD SIAP (CoCAM 2014, Aliphatic Acids Category): Fisch: <i>D. rerio</i> : > 1000 mg/L, Wert bereits aus ECHA bekannt
TOXNET	24.08.2018	HSDB: keine Ökotox-Daten

Es liegen keine neuen Daten vor, die eine Anpassung der PNEC erfordern.

Die PNEC wird basierend auf chronischen Daten für Alge und Krebstiere abgeleitet (Tabelle 37). Der niedrigste Werte ist ein NOELR von $\geq 0,22$ mg/L für *D. magna*. Basierend auf einem Sicherheitsfaktor von 50 schlägt das HLNUG einen **PNEC_{aqua} von 4,4 µg/L** vor [43, 52].

Tabelle 37: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Palmitinsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>R. subcapitata</i>	EC50	> 0,9	ECHA
<i>D. magna</i>	EC50	> 0,09 bis > 4,8	ECHA
<i>O. latipes</i>	LC50	> 1000	ECHA
Chronischer Datensatz			
<i>R. subcapitata</i>	NOEC	≥ 0,9	ECHA
<i>Daphnia magna</i>	NOELR	≥ 0,22	ECHA
Fisch	-	-	-

9.2.5 Beurteilung des Bioakkumulationspotentials von Palmitinsäure (CAS 57-10-3)⁴⁹

Im folgenden Abschnitt wird das Bioakkumulationspotential von Palmitinsäure beurteilt. Dies geschieht, um die Auswahl des zulässigen Sicherheitsfaktors bei der Ableitung der PNEC zu begründen.

Es gibt bisher keine experimentelle Studie mit Palmitinsäure, jedoch liegt eine wissenschaftliche Publikation mit der strukturell verwandten Laurinsäure bzw. deren Natriumsalz vor (Van Egmond et al., [106]), deren Ergebnisse weiter unten besprochen werden.

Zur Abschätzung des Bioakkumulationspotentials kann der Oktanol-Wasser-Partitionskoeffizient (log Kow) dienen. Dieser liegt für Palmitinsäure bei 7,17 (experimenteller Wert, Sangster, 1993; empfohlener Wert der Log-KOW-Datenbank). Eine Abschätzung des Bioakkumulationspotentials für Substanzen mit einem log Kow > 6 ist jedoch als problematisch anzusehen. Laut dem REACH Guidance Dokument Kapitel R.7c (ECHA, 2014) existiert nur für nicht-ionische, langsam metabolisierte Substanzen mit einem log Kow zwischen 1 und 6 eine lineare Korrelation zwischen log Kow und Bioakkumulationspotential. Bei hydrophoberen Substanzen (log Kow > 6) ist von einem niedrigeren Biokonzentrationsfaktors (BCF) auszugehen im Vergleich zu den mit entsprechenden Methoden abgeleiteten Werten.

Trotz der Einschränkungen durch das REACH-Guidance-Dokument wurden diverse frei-verfügbare Modelle zur Berechnungen des BCF verwendet unter Berücksichtigung der Anwendbarkeit (Applicability Domain).

Tabelle 38: Berechnete Biokonzentrationsfaktoren für Palmitinsäure mit verschiedenen QSAR-Modellen

Programm	Modell	BCF (L/kg)	Modell anwendbar? ⁵⁰
EPI Suite v4.11	BCFBAF v3.01: Regressions-basiert; ionisch, log-Kow-abhängig	56	ja
US EPA T.E.S.T. v4.2.1	Consensus-Methode ⁵¹	29 (9-152)	ja
VEGA v1.1.3	CAESAR v2.1.14	330	nein
VEGA v1.1.3	Meylan v1.0.3	10	nein
VEGA v1.1.3	KNN/Read-Across v1.1.0	115	nein

⁴⁹ Die Beurteilung des Bioakkumulationspotentials wurde dem HLNUG bereits vorgelegt in der Version vom 06.10.2016.

⁵⁰ Basierend auf der Beurteilung der Anwendbarkeitsdomäne (Applicability Domain)

⁵¹ Mittelwert aus fünf unabhängigen Methoden

Der maximale valide BCF-Wert beträgt 152 L/kg (Tabelle 38). Diese niedrigen berechneten BCF-Werte werden durch die Ergebnisse von Van Egmond et al. (1999, [106]) gestützt. Van Egmond et al. [106] untersuchten die chronische Toxizität von Natrium-Laurat bei Zebraabärblingen (*Danio rerio*). Als ein weiteres Ergebnis ermittelten sie auch die Bioakkumulation von Natrium-Laurat. Natrium-Laurat ist das Salz der Laurinsäure, die strukturell mit Palmitinsäure verwandt ist, jedoch durch eine kürzere Alkylkette (C12) gekennzeichnet ist. Aufgrund der strukturellen Vergleichbarkeit beider Fettsäuren sind Rückschlüsse auf die Bioakkumulation von Palmitinsäure in Fisch möglich. Der BCF wurde mit 255 ± 22 L/kg Feuchtgewicht bestimmt (basierend auf unmetabolisierter Laurinsäure).

Tabelle 39: Auszug aus Van Egmond et al. (1999, [106]): Biokonzentrationsfaktoren in Zebraabärbling
Table 2. Estimated lauric acid bioconcentration factors in zebrafish

Nominal laurate concn. in water (mg/L)	Mean measured water concn. (mg/L)	Lauric acid body burden (mg/kg) (no. fish)	Bioconcentration factor L/kg
2.0	2.21	538 (3), 517 (4), 551 (4)	243, 234, 249
3.6	3.69	1,040 (3), 996 (3), 871 (4)	282, 270, 236
6.4	6.60	1,570 (3), 1,900 (3)	238, 288 255 ± 22^a

^a Mean \pm SD.

Die Autoren haben in ihrer Studie die Konzentration der Testsubstanz analytisch überwacht. Dies geschah zum einen über radioaktiv markierte Substanz als auch über eine spezifische Methode, so dass der Anteil von „intaktem“ Natrium-Laurat festgestellt wurde. Die Exposition der Fische (juvenil, ca. 2 Monate alt) erfolgte im Durchfluss über einen Zeitraum von 28 d. Aufgrund von Literaturdaten nahmen die Autoren an, dass ein „Steady State“ in dieser Phase erreicht wurde. Es wurden fünf Konzentrationen zwischen 2 und 20 mg/L (nominal) sowie eine Kontrolle getestet. Die gemessenen Konzentrationen in den Testlösungen lagen bei 100 bis 115% des Nominalwertes. Die Löslichkeit im Testmedium lag zwischen 8 und 9 mg/L, so dass in den höheren Konzentrationen eine Trübung beobachtet werden konnte.

In den Testlösungen war die Substanz stabil, es wurde kein Abbau festgestellt. Hingegen war der Gehalt an intaktem, unmetabolisiertem Natrium-Laurat bzw. Laurinsäure in den Fischen gering. In den Testlösungen unterhalb der Löslichkeit wurden am Testende max. 4,3% Laurinsäure bezogen auf den ^{14}C -Gehalt gemessen. Es ist davon auszugehen, dass die Fische die Laurinsäure verstoffwechseln. In der Literatur wird hierzu angegeben, dass Fettsäuren mittels ω - und β -Oxidation metabolisiert werden. Hierbei wird die hydrophobe Alkylkette allmählich verkürzt und kurzkettige Derivate ausgeschieden. Wie der ermittelte BCF-Wert zeigt, kann ein geringer Teil auch in Lipiden eingebaut werden. Laurinsäure kann in niedrigen Konzentrationen in Leber und Fettgewebe eingelagert werden oder wird an Albumin im Blut gebunden (Henderson & Tocher, 1987, zitiert in Van Egmond et al. [106]).

Das von den Fischen aufgenommene Laurat (bzw. Laurinsäure) kann als zusätzliche Energiequelle von den Fischen genutzt werden. Dies ist aufgrund der leicht erhöhten Wachstumsrate in den exponierten Fischen im Vergleich zur Kontrolle zu vermuten.

Die OECD kommt in ihrem SIAR [73] zu dem Schluss, dass die aliphatischen Säuren über einen gemeinsamen Abbauweg in allen lebenden Systemen („in all living systems“) metabolisiert werden, bei dem Acetyl-Coenzym A oder andere Metabolite entstehen. Unterschiede im Metabolismus bei verschiedenen aliphatischen Säuren sind also unwahrscheinlich. Es ist laut OECD [73] nicht zu erwarten, dass aliphatische Säuren bioakkumulieren.

Es liegen keine experimentellen Daten zum Bioakkumulationspotential von Palmitinsäure vor. Die mittels QSAR-Modellen berechneten BCF-Werte weisen jedoch auf ein nur geringes Potential hin. Ein Vergleich mit der strukturell eng verwandten Substanz Laurinsäure bestätigt das geringe Bioakkumulationspotential. Van Egmond et al. [106] ermittelten einen BCF von 255 für Zebrafische nach einer Expositionsphase von 28 Tagen. Damit liegt dieser Wert deutlich unter dem Kriterium der REACH-Verordnung (EG Nr. 1907/2006) für bioakkumulierende Substanzen von 2000 und auch unter dem in der CLP-Verordnung (EG Nr. 1272/2008) genannten Wert von 500. Palmitinsäure wird damit als nicht signifikant bioakkumulierend beurteilt.

9.3 Resorcylsäure (CAS 89-86-1)

Tabelle 40: Substanzcharakterisierung von Resorcylsäure (CAS 89-86-1)

Name	Resorcylsäure
Chemischer Name	2,4-Dihydroxybenzoesäure
CAS-Nr.	89-86-1
EINECS-Nr.	201-946-9
Molare Masse	154,12
Wasserlöslichkeit	8 g/L (Gestis Stoffdatenbank)
Biologische Abbaubarkeit	leicht biologisch abbaubar (91,5%, 24 d, 301F, eigene Studie)
log Kow	1,6 (exp.), 1,8 (ber.; EPI Suite v4.11)
Bioakkumulationspotential	3 (ber., BCFBAF v3.01)
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend) [102]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifikation; keine umweltrelevante Einstufung von Anmeldern
REACH-Status	registriert

Resorcylsäure (2,4-Dihydroxybenzoesäure) ist eine leicht biologisch abbaubare organische Säure mit einer moderaten Wasserlöslichkeit (ca. 8 g/L). Es ist von keinem signifikantem Bioakkumulationspotential auszugehen basierend auf dem niedrigen log Kow und dem berechneten Biokonzentrationsfaktor. Der AHS wird am Standort Wintershall des Werks Werra sowie im Werk Neuhoof-Ellers im ESTA-Verfahren (Nachreinigungsstufe für Kieserit) eingesetzt. Resorcylsäure ist als schwach wassergefährdend (WGK 1) gemäß der Verordnung über Anlagen zum Umgang mit wassergefährdenden Stoffen (AwSV, 18.04.2017) eingestuft. Die Substanz trägt entsprechend den Meldungen der Industrie keine umweltrelevante Klassifizierung nach CLP.

Tabelle 41: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Resorcylsäure (CAS 89-86-1)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	24.08.2018	keine Daten vorhanden
ECHA	24.08.2018	registriert, aber nur Daten zu aquatischen Invertebraten: sekundäre Quelle ohne Nennung der Originalquelle und Studiendetails: 48-h EC50 = 120 mg/L, <i>D. magna</i>
eChemPortal	24.08.2018	keine umweltrelevanten Daten
ECOTOX	24.08.2018	keine neuen Daten
ETOX	24.08.2018	keine Daten
GESTIS	24.08.2018	keine neuen Daten
GSBLpublic	24.08.2018	keine Ökotoxikologie-Daten
IRIS	23.08.2018	keine Daten
SIDS	24.08.2018	keine Daten
TOXNET	24.08.2018	HSDB: keine Daten

Es wurden keine zusätzlichen Ökotoxikologie-Daten zu Resorcylsäure gefunden. Demnach bleibt der bisher abgeleitete und vom HLNUG bestätigte $PNEC_{\text{aqua}}$ unverändert [36]. Es liegt ein vollständiger akuter Basisdatensatz vor. Die empfindlichste trophische Ebene sind Algen (EC50 = 75 mg/L). Entsprechend wird laut TGD [31] ein Sicherheitsfaktor von 1000 angewendet:

$$PNEC_{\text{aqua}} = 75 \text{ mg/L} : 1000 = 0,075 \text{ mg/L} = 75 \text{ } \mu\text{g/L}$$

9.4 C12-C14-Fettalkohol (CAS 80206-82-2)

Tabelle 42: Substanzcharakterisierung von Fettalkohol C12-C14 (CAS 80206-8-2)

Name	Vegarol 1214
Chemischer Name	Fettalkohol C12-C14 bzw. Lauryl-Myristyl-Alkohol
CAS-Nr.	80206-82-2
EINECS-Nr.	279-420-3
Zusammensetzung	65-80% 1-Dodecanol, CAS-Nr. 112-53-8; 20-35% 1-Tetradecanol, CAS-Nr. 112-72-1
Molare Masse	Gemisch, durchschnittlich 190-197 g/mol
Wasserlöslichkeit	1-1,3 mg/L
Biologische Abbaubarkeit	leicht biologisch abbaubar (69 % nach 28 d, OECD 301B)
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	2 (wassergefährdend ⁵² , KBWS) [2, 92]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Notifizierung der Industrie: H400, H410
REACH-Status	registriert

Dieser AHS ist ein Gemisch von C12- und C14-Fettalkoholen. Der AHS wurde bisher unter der Handelsbezeichnung Vegarol 1214 bearbeitet. Es besteht zwischen ca. 65 und 80 % aus 1-Dodecanol (CAS 112-53-8) und ca. 20 bis 35 % 1-Tetradecanol (CAS 112-72-1). Die OECD hat ein SIDS über langkettige Alkohole erarbeitet [72], so dass Informationen zur Wirkung auf aquatische Testsysteme vorliegen. Für C12-C14-Fettalkohol liegt jedoch kein experimenteller Messwert vor.

⁵² kein Eintrag unter der CAS-Nummer; laut Sicherheitsdatenblatt wurde Einstufung unter der Kennnummer 1482 (=1-Dodecanol) vorgenommen

Daher werden PNECs für die einzelnen Komponenten abgeleitet. Eine Bewertung des Bioakkumulationspotentials wird für die beiden Komponenten durchgeführt.

Tabelle 43: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: C12-C14-Fettalkohol (CAS 80206-82-2)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	27.08.2018	keine Daten
ECHA	27.08.2018	keine Daten
eChemPortal	27.08.2018	OECD SIDS: s.u.
ECOTOX	27.08.2018	keine Daten
ETOX	27.08.2018	keine Daten
GESTIS	27.08.2018	keine Daten
GSBLpublic	27.08.2018	Link zu ETOX (= keine Daten)
IRIS	27.08.2018	keine Daten
SIDS	27.08.2018	OECD SIDS (SIAM 22, 18/04/2006; publiziert: Juli, 2007): Werte bereits berücksichtigt
TOXNET	27.08.2018	HSDB: keine Daten

Bei der Überprüfung der Aktualität der bereits vorliegenden Daten wurden keine neuen Informationen gefunden, daher bleibt der $PNEC_{\text{aqua}}$ für C12-C14-Fettalkohol unverändert seit dem Bericht vom 24.06.2016. Die vorliegenden Daten sind in Tabelle 44 zusammengefasst. Es liegen nur akute Effektdaten vor, wobei nur der Algenwert experimentell bestimmt wurde, während die anderen beiden Effektwerte mittels QSAR-Modellen berechnet wurden.

$$PNEC_{\text{aqua}} = 0,1 \text{ mg/L} : 1000 = 0,0001 \text{ mg/L} = \mathbf{0,1 \mu\text{g/L}}$$

Tabelle 44: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für C12-C14-Fettalkohol (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>R. subcapitata</i>	EL50	0,1	[72]
<i>D. magna</i>	EC50	0,28	[72]
<i>Fisch</i>	LC50	0,48	[72]

9.4.1 Komponente: 1-Dodecanol (CAS 112-53-8)

Tabelle 45: Substanzcharakterisierung von 1-Dodecanol (CAS 112-53-8)

Name	1-Dodecanol
Chemischer Name	1-Dodecanol, Laurylalkohol
CAS-Nr.	112-53-8
EINECS-Nr.	203-982-0
Molare Masse	186,3 g/mol
Wasserlöslichkeit	4,81 mg/L
Biologische Abbaubarkeit	leicht biologisch abbaubar (100 % TOC-Abbau in 100 h (CCID), 89 % nach 30 d, OECD 301D)
log Kow	5,1 (exp.), 4,8 (ber.; EPI Suite v4.11)
Bioakkumulationspotential	BCF = 48 L/kg (BCFBAF v3.01)
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend) [92]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Notifizierung der Industrie: H400, H411
REACH-Status	registriert

1-Dodecanol ist ein gering wasserlöslicher Fettalkohol. Er ist leicht biologisch abbaubar. Der log Kow ist relativ hoch, jedoch wurde ein niedriger Biokonzentrationsfaktor berechnet. Folglich ist von keinem signifikanten Bioakkumulationspotential auszugehen. Weiterhin wurde bei Fettalkoholen ein schneller Abbau in Kombination mit einem schnellen Metabolismus in Säugetier- und Fischstudien nachgewiesen, so dass eine Bioakkumulation von Fettalkoholen unwahrscheinlich ist.

Bei der Durchsicht der vorliegenden Daten auf Aktualität fiel auf, dass eine NOEC aus einer Algenstudie aus 1992 im REACH-Registrierungsdossier [13] bisher nicht berücksichtigt wurde. Es wurde daher eine Zusammenstellung der Effektdaten für Algen mit der zusätzlichen NOEC erstellt (Tabelle 47). Weitere relevante Daten für die PNEC-Ableitung wurden in den berücksichtigten Datenbanken nicht gefunden.

Für die Herleitung der PNEC sollen bevorzugt chronische Werte verwendet werden [9, 31]. Experimentelle chronische Daten sind für zwei trophische Ebenen vorhanden (Alge und Daphnie; Tabelle 48). Trotz einer deutlich reduzierten NOEC von 0,085 mg/L gegenüber dem ursprünglich verwendeten Wert von 0,3 mg/L bleibt die Daphnie die empfindlichste Spezies. Da die Alge den niedrigsten akuten Effektwert aufweist, ist das empfindlichste trophische Level abgedeckt. Folglich wird ein Sicherheitsfaktor von 50 auf den niedrigsten chronischen Wert (Tabelle 48) angewendet [9, 31].

$$PNEC_{\text{aqua}} = 0,013 \text{ mg/L} : 50 = 0,00026 \text{ mg/L} = \mathbf{0,26 \mu\text{g/L}}$$

Die PNEC bleibt somit unverändert gegenüber dem Bericht vom 24.06.2016. Dieser Wert wurde bereits vom HLNUG bestätigt [46].

Tabelle 46: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: 1-Dodecanol (CAS 112-53-8)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	27.08.2018	keine Daten vorhanden
ECHA	27.08.2018	keine neuen Daten: Alge: Studie aus 1997: NOEC (0,085 mg/L) bisher nicht berücksichtigt
eChemPortal	27.08.2018	OECD SIDS: s.u.
ECOTOX	27.08.2018	keine neuen Daten
ETOX	27.08.2018	keine neuen Daten
GESTIS	27.08.2018	keine neuen Daten
GSBLpublic	27.08.2018	Zusätzlicher Wert zu Insekten (<i>Culex quinquefasciatus</i>): 48-h LC100 = 2,9 mg/L
IRIS	27.08.2018	keine Daten
SIDS	27.08.2018	OECD SIDS (SIAM 3, 12/02/1995; publiziert: Aug. 2002) keine neuen Daten; Werte bereits berücksichtigt
TOXNET	27.08.2018	HSDB: keine neuen Daten

Tabelle 47: Aktualisierte Effektwerte für 1-Dodecanol (CAS 112-53-8): Alge

Organismus	Endpunkt	Dauer	Parameter	Wert (mg/L)	Chemische Analyse	Bemerkung	Validität	Referenz
Akute Daten								
<i>D. subspicatus</i>	W.-Rate	72 h	EC50	0,66 (n)	nein	EU C.3 Methode, angelehnt an OECD 201, GLP-Standard; Studie aus 1997	1	[13]
<i>D. subspicatus</i>	W.-Rate	96 h	EC50	0,97 (n)	nein	DIN 38412-9, angelehnt an OECD 201, GLP-Standard; Studie aus 1992; Lösemittel	2	[13]
<i>D. subspicatus</i>	W.-Rate	72 h	EC50	2,6 (n)	nein	DIN 38412-9, angelehnt an OECD 201, GLP-Standard; Studie aus 1994; Lösemittel;	2	[13]
<i>D. subspicatus</i>	W.-Rate	96 h	EC50	0,97	k.A.	DIN 38412; Quelle: ESIS: nicht mehr erreichbar	4	-
Chronische Daten								
<i>D. subspicatus</i>	Zellzahl	72 h	NOEC	0,085 (n)	nein	EU C.3 Methode (GLP Standard); angelehnt an OECD 201; Studie aus 1997	1	[13]
<i>D. subspicatus</i>	W.-Rate	72 h	EC0	0,4 (n)	nein	DIN 38412-9, angelehnt an OECD 201, GLP-Standard; Studie aus 1994; Lösemittel;	2	[13]
<i>D. subspicatus</i>	W.-Rate	96 h	EC10	0,73 (n)	nein	DIN 38412-9, angelehnt an OECD 201, GLP-Standard; Studie aus 1992; Lösemittel; bisheriger Wert: EC0 = 0,3 mg/L; NOEC = 0,3 mg/L	2	[13]
<i>D. subspicatus</i>	W.-Rate	96 h	EC10	0,73 (n)	k.A.	DIN 38412; Quelle: ESIS: nicht mehr erreichbar	4	-

Tabelle 48: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für 1-Dodecanol (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EC50	0,66	[13]
<i>D. magna</i>	EC50	0,77	[13]
<i>O. mykiss</i>	LC50	> 1	[13]
Chronischer Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	NOEC	0,085	[13]
<i>D. magna</i>	NOEC	0,013	[13]
Fisch	-	-	-

9.4.2 Komponente: 1-Tetradecanol (CAS 112-72-1)

Tabelle 49: Substanzcharakterisierung von Tetradecanol (CAS 112-72-1)

Name	Tetradecanol
Chemischer Name	1-Tetradecanol
CAS-Nr.	112-72-1
EINECS-Nr.	204-000-3
Molare Masse	214,4 g/mol
Wasserlöslichkeit	0,191 mg/L bei 25 °C
Biologische Abbaubarkeit	leicht biologisch abbaubar (77% nach 10 d, OECD 301B)
log Kow	6,0 (exp.), 5,8 (ber.; EPI Suite v4.11)
Bioakkumulationspotential	BCF = 187 L/kg (BCFBAF v3.01)
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	2 (deutlich wassergefährdend) [85]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Notifizierung der Industrie: H400, H410, H411, H412
REACH-Status	registriert

1-Tetradecanol ist ein sehr gering wasserlöslicher Fettalkohol. Er ist leicht biologisch abbaubar. Der log Kow ist relativ hoch, jedoch wurde ein niedriger Biokonzentrationsfaktor berechnet. Folglich ist von keinem signifikanten Bioakkumulationspotential auszugehen. Weiterhin wurde bei Fettalkoholen ein schneller Abbau in Kombination mit einem schnellen Metabolismus in Säugetier- und Fischstudien nachgewiesen, so dass eine Bioakkumulation von Fettalkoholen unwahrscheinlich ist.

Bei der Überprüfung der vorliegenden Daten auf Aktualität fiel auf, dass für eine Algenstudie nicht nur EL0-Werte, sondern auch EL10-Werte abgeleitet wurden, diese aber bisher bei der PNEC-Ableitung nicht berücksichtigt worden sind. Laut TGD [31] sollten NOEC bzw. EC10-Werte für die Bewertung der Chronischen Toxizität bevorzugt verwendet werden. Weiterhin ist in der REACH Guidance [9] festgelegt, dass ein EC10 der bevorzugte Effektwert gegenüber einer NOEC ist. Es wurde daher eine Zusammenstellung der Effektdaten für Algen mit der zusätzlichen EL10 erstellt (Tabelle 51). Weitere relevante Daten für die PNEC-Ableitung wurden in den berücksichtigten Datenbanken nicht gefunden (Tabelle 50).

Für die Herleitung der PNEC sollen bevorzugt chronische Werte verwendet werden [9, 31]. Experimentelle chronische Daten sind für zwei trophische Ebenen vorhanden (Alge und Daphnie; Tabelle 52). Es liegt ein vollständiger akuter Basisdatensatz vor (Tabelle 52 sowie Bericht vom 24.06.2016 zu C12-C14-Fettalkohol). Aufgrund der sehr geringen Wasserlöslichkeit von 1-

Tetradecanol liegen alle experimentellen akuten Effektwerte oberhalb der Wasserlöslichkeitsgrenze von 0,191 mg/L. Daraus kann geschlossen werden, dass bis zur Wasserlöslichkeitsgrenze keine akuten Effekte zu beobachten sind. Demnach kann auch nicht die empfindlichste akute Spezies mit Sicherheit bestimmt werden, da die bekannten Effektwerte vom Testdesign der jeweiligen Studie abhängen.

Aus den Daten zur strukturell verwandten Substanz 1-Dodecanol (Tabelle 48) und zum Gemisch C12-C14-Fettalkohol (Tabelle 44) lässt sich jedoch ableiten, dass Alge und Daphnie empfindlicher sind als Fisch. Somit ist das empfindlichste trophische Level durch chronische Daten abgedeckt. Folglich wird ein Sicherheitsfaktor von 50 auf den niedrigsten chronischen Wert (Tabelle 48) angewendet [9, 31]. Diese PNEC wurde vom HLNUG bestätigt [50].

$$\text{PNEC}_{\text{aqua}} = 0,0063 \text{ mg/L} : 50 = 0,000126 \text{ mg/L} = \mathbf{0,13 \mu\text{g/L}}$$

Tabelle 50: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: 1-Tetradecanol (CAS 112-72-1)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	27.08.2018	keine Daten vorhanden
ECHA	27.08.2018	keine neuen relevanten Daten: - Mikroorganismen: nur Angaben zu Pilzen: Effektdaten deutlich größer als Wasserlöslichkeit - Aq. Inv.: <i>Ostracoda</i> : spiked sediment: 6-d EC50 > 1000 mg/kg sed. dw - <i>D. subspicatus</i> : 96-h E _L L10 = 2,9 mg/L (n), 96-h E _b L10 = 0,27 mg/L (n), 96-h E _L L0 = 1 mg/L (n), 96-h E _b L0 = 0,1 mg/L (n), Studienbericht von 1992; Ergänzung der Daten
eChemPortal	27.08.2018	OECD SIDS: s.u.
ECOTOX	27.08.2018	keine neuen Daten
ETOX	27.08.2018	keine Daten
GESTIS	27.08.2018	keine umweltrelevanten Daten
GSBLpublic	27.08.2018	keine neuen Daten
IRIS	27.08.2018	keine Daten
SIDS	27.08.2018	OECD SIDS (SIAM 22, 18/04/2006; publiziert: July, 2007) aquat. Mikroorg.: <i>P. putida</i> : 30-min EC50 > 10000 mg/L, Henkel (unpub.), RL 4 aquat. Inv.: <i>D. magna</i> : EC50 = 4.0 mg/L, Unilever, 1995, RL4 (u.a. keine Angaben zu Dauer u. Richtlinie)
TOXNET	27.08.2018	HSDB: keine Ökotox-Daten

Tabelle 51: Aktualisierte Effektwerte für 1-Tetradecanol (CAS 112-72-1): Alge

Organismus	Endpunkt	Dauer	Parameter	Wert (mg/L)	Chemische Analyse	Bemerkung	Validität	Referenz
Akute Daten								
<i>D. subspicatus</i>	W.-Rate	96 h	EL50	> 10 (n)	nein	DIN 38412-9, angelehnt an OECD 201, GLP-Standard; Studie aus 1992; Effektwert oberhalb Wasserlöslichkeit	2	[14]
Chronische Daten								
<i>D. subspicatus</i>	W.-Rate	96 h	EL10	2,9 (n)	nein	DIN 38412-9, angelehnt an OECD 201, GLP-Standard; Studie aus 1992; 96-h EL0 = 1 mg/L; Effektwerte oberhalb Wasserlöslichkeit	2	[14]

Tabelle 52: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für 1-Tetradecanol (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EL50	> 10	[14]
<i>D. magna</i>	EC50	3,2	[14]
<i>O. mykiss</i>	LC50	> 1	[14]
Chronischer Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EL10	2,9	[14]
<i>D. magna</i>	NOEC	0,0063	[14]
Fisch	-	-	-

9.5 Glykolsäure (CAS 79-14-1)

Tabelle 53: Substanzcharakterisierung von Glykolsäure (CAS 79-14-1)

Name	Glykolsäure (57% bzw. 70%)
Chemischer Name	Hydroxyessigsäure
CAS-Nr.	79-14-1
EINECS-Nr.	201-180-5
Molare Masse	76,05 g/mol
Wasserlöslichkeit	vollkommen löslich
Biologische Abbaubarkeit	leicht biologisch abbaubar (>60% nach 10 d, 301B)
log Kow	-1,1 (exp., ber.; EPI Suite v4.11)
Bioakkumulationspotential	3 (ber., BCFBAF v3.01)
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend) [101]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Klassifizierung: Repr. 1B (2 Anmelder im Vergleich zu mehr als 1000 ohne entsprechende Einstufung)
REACH-Status	registriert

Glykolsäure wird als Aufbereitungshilfsstoff in einer Konzentration von 57 % bzw. 70 % verwendet. Die Substanz ist vollkommen in Wasser löslich. Der log Kow ist gering ($\log Kow < 3$), wie auch der BCF ($BCF < 500$), folglich ist das Bioakkumulationspotential von Glykolsäure nicht signifikant.

Bei der Überprüfung der in Tabelle 54 gelisteten Datenbanken wurde in HSDB ein weiterer akuter Effektwert gefunden (J-CHECK: Alge: 72-h ErC50 > 32 mg/L). Dieser liegt jedoch oberhalb der bereits bekannten Effektwerte, so dass eine Korrektur der PNEC nicht erforderlich ist.

Für die Herleitung der PNEC sollen bevorzugt chronische Werte verwendet werden [9, 31]. Es liegen Daten für Vertreter zweier trophischen Ebenen vor (Alge und Daphnie; Tabelle 56). Da Alge den niedrigsten akuten Effektwert aufweist, ist das empfindlichste trophische Level abgedeckt. Folglich wird ein Sicherheitsfaktor von 50 auf den niedrigsten chronischen Wert (Tabelle 56) angewendet [9, 31].

$$PNEC_{\text{aqua}} = 4,38 \text{ mg/L} : 50 = 0,0876 \text{ mg/L} = 88 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Dieser Wert wurde vom HLNUG bestätigt [40].

Tabelle 54: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Glykolsäure (CAS 79-14-1)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	28.08.2018	keine Daten
ECHA	28.08.2018	keine neuen Daten, jedoch einige Werte auf den Anteil der aktiven Substanz im Testmaterial korrigiert (70% wässrige Lösung) <i>D. magna</i> : 48-h EC50 = 99,6 mg a.s./L (141 mg t.m./L) <i>A. tonsa</i> : 48-h EC50 = 158,2 mg a.s./L (226 mg t.m./L) <i>P. promelas</i> : 96-h EC50 = 114,8 mg a.s./L (164 mg t.m./L)
eChemPortal	28.08.2018	NICNAS PEC (2000): Assessment Report no. 12: keine Ökotox-Daten J-CHECK: Algenstudie (1998): <i>R. subcapitata</i> : 72-h ErC50 > 32 mg/L (m); 72-h NOEC = 10 mg/L (m) US EPA – HPVIS ⁵³ : relevante Daten bereits eingetragen <i>R. subcapitata</i> : 72-h ErC50 = 30,8 mg a.s./L (berichtet: 44 mg t.m./L); getestet als 70%ige Lösung in Wasser <i>Haematococcus pluvialis</i> : keine Hemmung, aber Stimulation, keine Testkonzentrationen angegeben, keine Effektwerte <i>D. magna</i> : 48-h EC50 = 141 mg t.m./L; getestet als 70%ige Lösung <i>P. promelas</i> : 96-h LC50 = 168 mg t.m./L; Reinheit 70-90% (LC50 falsch, da alle Angaben identisch mit zweiter Zusammenfassung von 164 ppm inkl. Konfidenzintervall) <i>P. promelas</i> : 96-h LC50 = 164 mg t.m./L; Reinheit 70-90%
ECOTOX	28.08.2018	keine neuen Daten
ETOX	28.08.2018	keine Daten
GESTIS	28.08.2018	keine Daten
GSBLpublic	28.08.2018	Link zu ETOX (= keine Daten)
IRIS	28.08.2018	keine Daten
SIDS	28.08.2018	keine Daten
TOXNET	28.08.2018	HSDB: bereits eingetragen: Alge: <i>R. subcapitata</i> (berichtet als: <i>Selenastrum capricornutum</i>); stat., 24,8-25,0 °C, pH 4,03-7,63; 72-h ErC50 = 44 mg/L (95 % CI: 41,4-46,7 mg/L); > 98% purity [EPA/Office of Pollution Prevention and Toxics; High Production Volume Information System (HPVIS)]

⁵³ http://iaspub.epa.gov/opphpv/public_search.publiclist?wChemicalName=79-14-1&programFlags=

Tabelle 55: Aktualisierte Effektwerte für Glykolsäure (CAS 79-14-1): Alge

Organismus	Endpunkt	Dauer	Parameter	Wert (mg/L)	Chemische Analyse	Bemerkung	Validität	Referenz
Akute Daten								
<i>R. subcapitata</i>	W.-Rate	72 h	EC50	30,8	ja	OECD 201, GLP-Standard; 72-h ErC50 = 44 mg Produkt/L (getestet wurde eine 70%ige wässrige Lösung); Studie von 2002	2	[19]
<i>R. subcapitata</i>	W.-Rate	72 h	EC50	> 32	ja	OECD 201, GLP-Standard; Studie von 1998	2	[57]
<i>Skeletonema costatum</i>	W.-Rate	72 h	EC50	133	nein	ISO 10253, GLP-Standard; marine Spezies; 72-h ErC50 = 190 mg Produkt/L (getestet wurde eine 70%ige wässrige Lösung); Studie von 1998	2	[19]
Chronische Daten								
<i>R. subcapitata</i>	W.-Rate	72 h	NOEC	10	ja	OECD 201, GLP-Standard; Studie von 1998	2	[57]
<i>R. subcapitata</i>	W.-Rate	72 h	NOEC	14	ja	OECD 201, GLP-Standard, 72-h NOEC = 20 mg Produkt/L (getestet wurde eine 70%ige wässrige Lösung); Studie von 2002	2	[19]
<i>Skeletonema costatum</i>	W.-Rate	72 h	NOEC	69,9	nein	ISO 10253, GLP-Standard; marine Spezies, 72-h NOEC = 99,8 mg Produkt/L (getestet wurde eine 70%ige wässrige Lösung); Studie von 1998	2	[19]

Tabelle 56: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Glykolsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>R. subcapitata</i>	EC50	30,8	[19]
<i>D. magna</i>	EC50	44	[57]
<i>O. mykiss</i>	LC50	78	[57]
Chronischer Datensatz			
<i>R. subcapitata</i>	NOEC	10	[57]
<i>D. magna</i>	NOEC	4,38	[57]
Fisch	-	-	-

9.6 Gluconsäure (CAS 526-95-4)

Tabelle 57: Substanzcharakterisierung von Gluconsäure (CAS 526-95-4)

Name	Gluconsäure 50%
Chemischer Name	D(-)-Pentahydroxy-Capronsäure
CAS-Nr.	526-95-4
EINECS-Nr.	208-401-4
Molare Masse	196,16 mg/L
Wasserlöslichkeit	>615 g/L bei 20 °C (OECD 105)
Biologische Abbaubarkeit	89% nach 28 d (OECD 301D)
log Kow	-1,9 (ber.; EPI Suite v4.11)
Bioakkumulationspotential	3 (BCFBAF v3.01)
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend) [95]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung, keine umweltrelevante Einstufung
REACH-Status	registriert

Gluconsäure wird als Aufbereitungshilfsstoff in einer Konzentration von 50 % verwendet. Gluconsäure ist gut wasserlöslich. Der log Kow ist sehr gering, somit ist von keinem signifikanten Bioakkumulationspotential auszugehen. Die Substanz ist leicht biologisch abbaubar. Aufgrund der vorliegenden Daten ist die Substanz weder PBT noch vPvB.

Bei der Überprüfung der in Tabelle 58 gelisteten Datenbanken wurden im OECD SIDS Dossier [71] zwei weitere Werte zu Effekten auf Mikroorganismen gefunden. Bis zu den getesteten Höchstkonzentrationen wurde ein Effekt von zwei strukturverwandten Substanzen (Na-Gluconat und Glucono-delta-Lacton) auf die Zellvermehrung von *Pseudomonas putida* nicht festgestellt (EC₅₀ > 5000 mg/L bzw. > 500 mg/L). Anzumerken ist, dass Tests mit Mikroorganismen als Kurzzeittests angesehen werden [9]. Daher ist die abgeleitete EC₅₀ für die PNEC-Herleitung nicht relevant. Eine Korrektur der PNEC ist nicht erforderlich.

Für die Herleitung der PNEC sollen bevorzugt chronische Werte verwendet werden [9, 31]. Für Gluconsäure liegen valide chronische Werte für zwei Algenarten vor. Für den Fall, dass Algen am sensitivsten in akuten Tests reagieren, erlauben das TGD [31] und das REACH Guidance Document [9] die PNEC anhand der chronischen Algenwerte herzuleiten. Im Falle von Gluconsäure ist jedoch nicht auszuschließen, dass Fische möglicherweise sensibler sind als Algen, da die akuten Effektwerte identisch sind (L(E)C₅₀ > 100 mg/L). Daher wird die PNEC anhand der validen Kurzzeit-Daten hergeleitet. Folglich wird ein Sicherheitsfaktor von 1000 auf den niedrigsten akuten Wert (Tabelle 59) angewendet [9, 31].

$$\text{PNEC}_{\text{aqua}} = 100 \text{ mg/L} : 1000 = 0,1 \text{ mg/L} = \mathbf{100 \mu\text{g/L}}$$

Dieser Wert wurde bereits vom HLNUG bestätigt [40].

Tabelle 58: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Gluconsäure (CAS 526-95-4)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	29.08.2018	keine Daten
ECHA	29.08.2018	keine neuen Daten
eChemPortal	29.08.2018	OECD SIDS: s.u.
ECOTOX	29.08.2018	keine Daten
ETOX	29.08.2018	keine Daten
GESTIS	29.08.2018	keine Ökotox-Daten
GSBLpublic	29.08.2018	keine Ökotox-Daten (Link zu ETOX)
IRIS	28.08.2018	keine Daten
SIDS	29.08.2018	OECD SIDS (2006): <i>D. magna</i> : eine weitere Studie nach OECD 202 mit identischem Ergebnis wie eine bereits eingetragene Studie: 48-h EC50 > 1000 mg/L (nom., analytisch verifiziert, GLP; Mitsubishi Chemical Safety Institute, 2002) Mikroorganismen: Ergebnisse aus zwei <i>P. putida</i> -Tests (DIN 38412-8), jedoch ohne Einfluss auf PNEC: Na-Gluconat: 16-h EC0 > 5000 mg/L Glucono-delta-lacton: 16-h EC0 > 500 mg/L
TOXNET	29.08.2018	HSDB: keine Ökotox-Daten

Tabelle 59: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Gluconsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EC50	> 100	[71]
<i>R. subcapitata</i>			[18]
<i>D. magna</i>	EC50	> 1000	[18, 71]
<i>O. latipes</i>	LC50	>100	[71]
Chronischer Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	NOEC	100	[71]
<i>D. magna</i>	-	-	-
Fisch	-	-	-

9.7 trans-Zimtsäure (CAS 140-10-3)

Tabelle 60: Substanzcharakterisierung von trans-Zimtsäure (CAS 140-10-3)

Name	trans-Zimtsäure
Chemischer Name	trans-3-Phenylpropensäure
CAS-Nr.	140-10-3
EINECS-Nr.	205-398-1
Molare Masse	148,16 g/mol
Wasserlöslichkeit	400 mg/L (bei 20 °C)
Biologische Abbaubarkeit	leicht abbaubar (94 %, 24 d, OECD 301F, Studie K+S)
log Kow	2,1 (ber.; EPI Suite v4.11)
Bioakkumulationspotential	3 (BCFBAF v3.01)
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend) [94]
GefahrstoffEinstufung (EU)	kein Gefahrstoff
REACH-Status	vorregistriert, in 5/2018

Der AHS *trans*-Zimtsäure ist gut wasserlöslich. Der log Kow von 2,1 wurde mittels QSAR-Modell KOWWIN v1.68 (EPI Suite v4.11) berechnet. Der Biokonzentrationsfaktor beträgt 3 laut QSAR-Modell BCFBAF v3.01 (EPI Suite v4.11). Basierend auf log Kow und BCF ist von keinem signifikanten Bioakkumulationspotential auszugehen. Die Substanz ist leicht biologisch abbaubar. Entsprechend diesen Eigenschaften ist die Substanz weder PBT noch vPvB.

Bei der Überprüfung der in Tabelle 61 gelisteten Datenbanken wurden keine weiteren Daten zur Beurteilung der Ökotoxizität gefunden. Eine Korrektur der PNEC ist nicht erforderlich.

Für die Herleitung der PNEC sollen bevorzugt chronische Werte verwendet werden [9, 31]. Für *trans*-Zimtsäure liegen jedoch keine belastbaren chronischen Werte vor. Daher wird die PNEC basierend auf dem akuten Basisdatensatz (Tabelle 62) hergeleitet unter Anwendung eines Sicherheitsfaktors von 1000.

$$\text{PNEC}_{\text{aqua}} = 45,8 \text{ mg/L} : 1000 = 0,0458 \text{ mg/L} = \mathbf{45,8 \text{ } \mu\text{g/L}}$$

Dieser Wert wurde bisher nicht vom HLNUG bestätigt [44], da die Quelle zur Algentoxizität (SDB der Firma Merck) als nicht verlässlich angesehen wird. Als Alternative wird ein Toxizitätswert aus einer Publikation von Dedonder und van Sumere aus dem Jahr 1971 genannt: 80-h EC50 = 14,8 mg/L (Wachstumshemmung) [7]. Diese Publikation wurde bisher nicht berücksichtigt, da die Testsubstanz nicht zweifelsfrei zu identifizieren ist. In der Publikation wird diese nur als „cinnamic acid“ bezeichnet. Aufgrund von Unterschieden in den ökotoxischen Effekten zwischen *cis*- und *trans*-Zimtsäure sollte diese Publikation nicht zur Ableitung einer PNEC verwendet werden.

Das HLNUG hat eine **PNEC_{aquat} von 15 µg/L** vorgeschlagen [44], die auf dem EC50 von 14,8 mg/L und einem Sicherheitsfaktor von 1000 beruht. Falls die Konzentrationen von Zimtsäure in den untersuchten Gewässerproben diese PNEC überschreiten sollten, soll die PNEC erneut überprüft werden. Für diesen Fall wurde eine experimentelle Untersuchung des Effektes von Zimtsäure auf Algen vorgeschlagen [44]. Diese PNEC wurde für die Risikobeurteilung angewendet.

Tabelle 61: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: trans-Zimtsäure (CAS 140-10-3)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	29.08.2018	keine Daten
ECHA	29.08.2018	Registriert (1-10 t/a): keine experimentellen Daten zu Umweltverhalten und Ökotoxizität
eChemPortal	29.08.2018	keine neuen Daten
ECOTOX	29.08.2018	keine neuen Daten
ETOX	29.08.2018	keine Daten
GESTIS	29.08.2018	keine Ökotox-Daten
GSBLpublic	29.08.2018	keine Ökotox-Daten (Link zu ETOX)
IRIS	28.08.2018	keine Daten
SIDS	29.08.2018	keine Daten
TOXNET	29.08.2018	HSDB: keine Ökotox-Daten

Zusätzlich zu den bereits bekannten Daten wurde eine Publikation von Murray et al. [66] recherchiert, die Effektwerte zu zwei Algenspezies enthält (*Chlorella vulgaris*, *Microcystis aeruginosa*). Die Testsubstanz ist eindeutig identifiziert (*trans*-cinnamic acid). Die Tests wurden nach OECD 201 durchgeführt und sind detailliert beschrieben. Getestet wurden fünf Konzentrationen zwischen 10 und 1000 µg/L. Abweichend von der Richtlinie wurden die Testkonzentrationen nicht analytisch überprüft und der Abstandsfaktor zwischen den

Konzentrationsstufen ist nicht gleich. Die folgenden Effektwerte bezogen auf Biomasse (area under the growth curve) wurden bestimmt:

- *Chlorella vulgaris*: 72-h EC50 = 0,270 mg/L
- *Microcystis aeruginosa*: 72-h EC50 > 1 mg/L (höchste getestete Konzentration)

Der Effektwert für *Chlorella vulgaris* ist um einige Größenordnungen niedriger als der EC50 aus der Publikation von Dedonder und van Sumere [7]. Eine Überprüfung der Wachstumskurven in Murray et al. [66] zeigt, dass der Test die Validitätskriterien nicht einhält. Laut den Validitätskriterien der OECD 201 muss sich die Biomasse in den 72 Stunden Exposition exponentiell mindestens um den Faktor 16 vergrößert haben. Die Zellzahl beträgt bei Testanfang 10.000 Zellen/mL. Nach 72 h erreicht die Kontrolle zwischen 30.000 und 40.000 Zellen/mL. Somit beträgt der Biomassefaktor nur max. 4. Der Test ist daher nicht valide. Weiterhin ist auffällig, dass während der ersten 48 h keine Vermehrung der Zellen festzustellen ist. Aus beiden Beobachtungen lässt sich schließen, dass bereits das Wachstum in den Kontrollreplikaten gestört war. Dieser Effektwert wird somit nicht für die PNEC-Ableitung berücksichtigt.

Die Daten zu *Microcystis aeruginosa* sollten ebenfalls nicht in die PNEC-Ableitung einfließen, da bis zu der höchsten getesteten Konzentration keine Wachstumshemmung beobachtet wurde. Der Biomassefaktor in der Kontrolle erreicht den Minimalwert von 16. Die anderen Validitätskriterien lassen sich aus dem Diagramm nicht ableiten. Jedoch ist festzustellen, dass die Zellzahl in der Kontrolle nach 24 h den Maximalwert erreichte, nach 48 h abnahm um wieder leicht zuzunehmen. Die Validität dieses Tests ist somit nicht klar gegeben.

Da beide Werte für eine PNEC-Ableitung nicht herangezogen werden, muss die PNEC nicht neu berechnet werden.

Tabelle 62: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Zimtsäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>Chlorella vulgaris</i>	IC50	150	[65]
	EC50	14,8 ⁵⁴	[7]
<i>D. magna</i>	EC50	120	K+S
<i>D. rerio</i>	LC50	45,8	K+S
Chronischer Datensatz			
Alge	-	-	-
<i>D. magna</i>	-	-	-
Fisch	-	-	-

⁵⁴ Von HLNUG [44] verwendeter Effektwert zur Ableitung der PNEC.

9.8 C16-C18-Alkylamine (Genamin SH 100; CAS 90640-32-7; CAS 61788-45-2; EINECS 292-550-5)

Tabelle 63: Substanzcharakterisierung von Genamin SH 100 (CAS 90640-32-7)

Name	Genamin SH 100
Chemischer Name	Hydriertes Talgfettamin (C16-C18 Alkylamine)
CAS-Nr.	90640-32-7, syn. 61788-45-2
EINECS-Nr.	292-550-5
Molare Masse	Gemisch (UVCB ⁵⁵)
Wasserlöslichkeit	< 1 µg/L (SDB Global Amines [32]) 38 mg/L ([15]: "Key value": (Z)-Octadec-9-enylamine)
Biologische Abbaubarkeit	leicht biologisch abbaubar (>70%, 28 d; OECD 301D)
log Kow	4,3 (exp., [17])
Bioakkumulationspotential	173 (ber., [17])
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	3 (stark wassergefährdend) [90]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Notifizierung der Industrie: H400, H410
REACH-Status	registriert

Der AHS C16-C18-Alkylamine wurde bisher unter dem Handelsnamen Genamin SH 100 bearbeitet. Der AHS ist mäßig bis schwach wasserlöslich. Die Substanz ist leicht biologisch abbaubar. Der log Kow ist relativ hoch (log Kow = 4,3) und wurde aus Oktanol und Wasserlöslichkeit berechnet. Der BCF wurde aufgrund von experimentellen Schwierigkeiten mit einem geeigneten Modell berechnet (ADME-Modell, Arnot-Gobas, 2003) und beträgt 173 L/kg. Folglich ist von keinem signifikantem Bioakkumulationspotential auszugehen.

Bei der Überprüfung der in Tabelle 64 gelisteten Datenbanken wurden keine zusätzlichen Daten zu ökotoxischen Effekten von C16-C18-Alkylaminen in der Aquatik gefunden, so dass eine Anpassung der PNEC nicht erforderlich ist. Die PNEC-Ableitung wurde überprüft in Bezug auf die Verwendung von Read-Across-Daten und einem Sicherheitsfaktor von 100.

Für die Herleitung der PNEC sollen bevorzugt chronische Werte verwendet werden [9, 31]. Für C16-C18-Alkylamine liegen valide chronische Daten für Vertreter zweier trophischer Ebenen vor. Ein Sicherheitsfaktor von 50 kann auf den niedrigeren von zwei Werten angewendet werden (Tabelle 65), wenn ein Wert von einer Organismengruppe stammt, die in akuten Tests am empfindlichsten reagiert hat [9]. Für C16-C18-Alkylamine liegen die akuten Effektwerte für Algen und Daphnien in einem Bereich von etwa 0,1 mg/L, die Werte für Fische betragen etwa das vier- bis sechsfache. Die PNEC kann also anhand des chronischen Wertes für *D. magna* hergeleitet werden:

$$PNEC_{\text{aqua}} = 0,013 \text{ mg/L} : 50 = 0,00026 \text{ mg/L} = \mathbf{0,26 \mu\text{g/L}}$$

Das HLNUG akzeptiert Daten zu strukturell verwandten Substanzen (Read-Across; Daphnie, chronische Effektdaten, drei verschiedene Testsubstanzen) nicht als kritische Daten und leitet daher eine PNEC von 0,1 µg/L ab. Dieser Wert basiert auf dem niedrigsten akuten Effektwert von 0,12 µg/L und einem Sicherheitsfaktor von 1000. Mit Verweis auf die im EU RAR [8] abgeleitete PNEC von 0,26 µg/L, hat das HLNUG diesen Wert vorläufig bis zur Veröffentlichung einer finalen

⁵⁵ UVCB: Substances of Unknown or Variable composition, Complex reaction products or Biological materials. UVCB-Stoffe sind Stoffe, deren qualitative und/oder quantitative Zusammensetzung mehr oder weniger unbekannt ist.

Version des EU RAR bestätigt. Zum Zeitpunkt der Erstellung des Berichts (Oktober 2019) lag eine finale Fassung des EU RAR nicht vor.

Tabelle 64: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: C16-C18-Alkylamine (CAS 90640-32-7)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	30.08.2018	keine Daten
ECHA	30.08.2018	keine neuen Daten
eChemPortal	30.08.2018	keine Ökotox-Daten
ECOTOX	30.08.2018	keine Daten
ETOX	30.08.2018	keine Daten
GESTIS	30.08.2018	keine Ökotox-Daten
GSBL _{public}	30.08.2018	keine Ökotox-Daten (Link zu ETOX)
IRIS	30.08.2018	keine Daten
SIDS	30.08.2018	keine Daten
TOXNET	30.08.2018	HSDB: keine Daten

Tabelle 65: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für C16-C18-Alkylamine (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EC50	0,12	[17]/[8]
<i>D. magna</i>	EC50	0,14	Geomittel ([17]/[8])
<i>D. rerio</i>	LC50	0,88	[17]/[8]
Chronischer Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EC10	0,029	[17]/[8]
<i>D. magna</i>	EC10	0,013	Geomittel, Read-Across [17]
Fisch	-	-	-

9.9 Alkylpolyglykolether (Flotanol F; CAS 1426148-68-6; veraltet: CAS 31726-34-8)

Tabelle 66: Substanzcharakterisierung von Alkylpolyglykolether (CAS 1426148-68-6)

Name	Flotanol F
Chemischer Name	Alkylpolyglykolether: Fettalkohol, C6-C8-(geradzahlig, linear)-ethoxyliert (<2.5 EO)
CAS-Nr.	1426148-68-6 (veraltet: 31726-34-8)
EINECS-Nr.	800-182-9 (veraltet: 500-077-5)
Molare Masse	200 g/mol (Mittelwert, Gemisch)
Wasserlöslichkeit	3-5 g/L (bei 20 °C)
Biologische Abbaubarkeit	leicht biologisch abbaubar (63% in 28 d, OECD 301B; SDB Clariant, 2013)
log Kow	1,5 (exp., [16])
Bioakkumulationspotential	k.A. [16]
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend; SDB Clariant, 2013)
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung, keine umweltrelevante Einstufung
REACH-Status	registriert

Der AHS Alkylpolyglykolether besitzt eine gute Wasserlöslichkeit. Der log Kow ist niedrig. Angaben zum Biokonzentrationsfaktor (BCF) wurden im REACH-Registrierungsdossier nicht gemacht, jedoch ist aufgrund des niedrigen log Kow von keinem signifikanten Bioakkumulationspotential auszugehen. Basierend auf diesen Daten und der leichten biologischen Abbaubarkeit ist die Substanz nicht PBT/vPvB.

Bei der Überprüfung der in Tabelle 67 gelisteten Datenbanken wurden keine weiteren Daten zur Beurteilung der Ökotoxizität gefunden. Eine Korrektur der PNEC ist nicht erforderlich.

Für die Herleitung der PNEC sollen bevorzugt chronische Werte verwendet werden [9, 31]. Für Alkylpolyglykolether liegen chronische Daten für Vertreter zweier trophischen Ebenen (Algen, Krebstiere) vor (Tabelle 68). Entsprechend dem REACH Guidance Document [9] soll ein Sicherheitsfaktor von 50 auf den niedrigsten chronischen Wert angewendet werden, wenn Langzeit-Werte für zwei trophische Ebenen vorliegen und in akuten Tests der niedrigste valide Wert von einem Vertreter dieser Ebenen stammt ([9]: Tab. R.10-4, Fußnote c).

Ein Sicherheitsfaktor von 10 kann angewendet werden, wenn die Voraussetzungen für den Sicherheitsfaktor 50 erfüllt sind und zusätzlich keine Hinweise auf Bioakkumulation vorhanden sind sowie mit hoher Wahrscheinlichkeit davon ausgegangen werden kann, dass ein Vertreter der empfindlichsten trophischen Ebene im chronischen Datensatz enthalten ist ([9]: Tab. R.10-4, Fußnote d).

Für Alkylpolyglykolether ist mit einem log Kow = 1,5 (OECD 107, ECHA [16]) keine signifikante Bioakkumulation zu erwarten. Experimentelle Untersuchungen zur Bioakkumulation sind nicht verfügbar. Außerdem ist Alkylpolyglykolether leicht biologisch abbaubar (OECD 310B; ECHA [16]). Der akute Effektwert für Fische übersteigt um mindestens Faktor zwei die akuten Werte für Algen und Krebstiere, da der LC50 für Fisch oberhalb von der maximal zu testenden Konzentration von 100 mg/L liegt und keine Mortalität festgestellt wurde (Tabelle 68). Es kann folglich davon ausgegangen werden, dass Fische auch in chronischen Tests weniger empfindlich sind. Deshalb wird ein Sicherheitsfaktor von 10 gewählt und auf den niedrigsten chronischen Wert angewendet:

$$PNEC_{\text{aqua}} = 10 \text{ mg/L} : 10 = 1 \text{ mg/L} = \mathbf{1000 \mu\text{g/L}}$$

Dieser Wert wurde vom HLNUG bestätigt [46].

Tabelle 67: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Alkylpolyglykolether (Flotanol F; CAS 1426148-68-6)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	30.08.2018	keine Daten
ECHA	30.08.2018	keine neuen Daten
eChemPortal	30.08.2018	keine Ökotox-Daten, abgesehen von Verweis auf ECHA
ECOTOX	30.08.2018	keine Daten
ETOX	30.08.2018	keine Daten
GESTIS	30.08.2018	keine Daten
GSBL _{public}	30.08.2018	keine Daten
IRIS	30.08.2018	keine Daten
SIDS	30.08.2018	keine Daten
TOXNET	30.08.2018	HSDB: keine Daten

Tabelle 68: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Alkylpolyglykolether (Flotanol F; grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EC50	44,6	[16]
<i>D. magna</i>	EC50	59,2	[16]
<i>D. rerio</i>	LC50	> 100	[16]
Chronischer Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EC10	30,8	[16]
<i>D. magna</i>	NOEC	10	[16]
Fisch	-	-	-

9.10 Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N; CAS 68526-89-6)

Tabelle 69: Substanzcharakterisierung von Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (CAS 68526-89-6)

Name	Oxoöl 9N
Chemischer Name	Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen, hochsiedend
CAS-Nr.	68526-89-6
EINECS-Nr.	271-237-7
Molare Masse	Gemisch (UVCB)
Wasserlöslichkeit	38-153 mg/l (20°C, OECD 105)
Biologische Abbaubarkeit	leicht abbaubar (80-90% nach 28 d, OECD 301B, SDB BASF)
log Kow	3,8 (exp., [22])
Bioakkumulationspotential	k.A.
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend) [97]
GefahrstoffEinstufung (EU)	kein Gefahrstoff
REACH-Status	registriert

Es handelt sich bei diesem AHS um einen UVCB bestehend aus einer Vielzahl von Strukturen ohne eine charakteristische Markersubstanz. Basierend auf der leichten biologischen Abbaubarkeit ist die Substanz nicht PBT/vPvB. Dieser AHS ist mäßig wasserlöslich. Der log Kow wurde mit 3,8 experimentell bestimmt, so dass ein signifikantes Bioakkumulationspotential indiziert ist (log Kow > 3), jedoch liegt dieser Wert noch unterhalb des kritischen Levels für B/vB-Substanzen (log Kow > 4,5). Eine experimentelle Bestimmung des BCF ist aufgrund der komplexen Zusammensetzung des UVCBs nicht möglich.

Bei der Überprüfung der in Tabelle 70 gelisteten Datenbanken wurden keine zusätzlichen Daten zur Beurteilung der Ökotoxizität gefunden. Eine Korrektur der bisher abgeleiteten PNEC ist nicht erforderlich.

Für die Herleitung der PNEC sollen bevorzugt chronische Werte verwendet werden [9, 31]. Für das Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N) liegen nur chronische Daten für Algen vor (Tabelle 71). Auf dieser Basis kann kein verlässlicher PNEC abgeleitet werden, so dass die akuten Effektwerte berücksichtigt werden müssen. Entsprechend dem REACH Guidance Document [9] wurde ein Sicherheitsfaktor von 1000 auf den niedrigsten akuten Wert angewendet, da Daten zu drei trophischen Ebenen vorliegen.

$$PNEC_{\text{aqua}} = 100 \text{ mg/L} : 1000 = 0,1 \text{ mg/L} = 100 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Dieser Wert wurde vom HLNUG vorläufig bestätigt [45], da die vorliegenden Studienergebnisse aus [22] nach Ansicht des HLNUG wegen der unspezifischen Analytik (TOC mit hohen Hintergrundwerten) nicht akzeptabel sind (RL 3). Neuere, valide Studienergebnisse liegen nicht vor.

Tabelle 70: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N; CAS 68526-89-6)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	31.08.2018	keine Daten
ECHA	31.08.2018	keine neuen Daten
eChemPortal	31.08.2018	keine Ökotox-Daten, abgesehen von Verweis auf ECHA; US EPA HPVIS: Daten zu verschiedenen Substanzen der "Olefin Hydroformylation Products Category" (36 CAS-Nr.), keine Ökotoxdaten zu CAS 86526-89-6, kein abschließender Bericht zu Umweltverhalten und Ökotoxizität vorliegend, Read-Across-Ansatz aufgrund der nicht klar definierten Zusammensetzung des Hydroformylierungsprodukts von C8-Alkenen (Oxoöl 9N) nicht zu überprüfen. Die Ökotox-Daten zu anderen Substanzen aus der Kategorie werden daher hier nicht weiter berücksichtigt. https://iaspub.epa.gov/opptppv/public_search.publiclist?wChemicalName=68526-89-6&programFlags=
ECOTOX	31.08.2018	keine Daten
ETOX	31.08.2018	keine Daten
GESTIS	31.08.2018	keine Daten
GSBLpublic	31.08.2018	keine Daten
IRIS	31.08.2018	keine Daten
SIDS	31.08.2018	keine Daten
TOXNET	31.08.2018	HSDB: keine Daten

Tabelle 71: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Hydroformylierungsprodukt von C8-Alkenen (Oxoöl 9N; grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EL50	> 100	[22]
<i>D. magna</i>	EL50	> 100	[22]
<i>O. mykiss</i>	LC50	> 100	[22]
Chronischer Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EL10	> 100	[22]
<i>D. magna</i>	-	-	-
Fisch	-	-	-

9.11 Natriumsalze sulfatierter Fettsäuren (Amerfloc MI)

Tabelle 72: Substanzcharakterisierung von Amerfloc MI

Name	Amerfloc MI
Chemischer Name	Gemisch sulfatierter Fettsäuren
CAS-Nr.	keine
EINECS-Nr.	keine
Molare Masse	Gemisch
Wasserlöslichkeit	vollkommen löslich (SDB Solenis [82])
Biologische Abbaubarkeit	leicht abbaubar (93,6 % nach 21 d, Studie K+S)
log Kow	k.A. [82], kann nicht berechnet werden
Bioakkumulationspotential	k.A. [82], kann nicht berechnet werden
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend, SDB Solenis [82])
GefahrstoffEinstufung (EU)	kein Gefahrstoff
REACH-Status	nicht registriert

Es handelt sich bei Amerfloc MI um den Produktnamen für ein nicht näher definiertes Gemisch von Natriumsalzen sulfatierter Fettsäuren. Der Anteil der sulfatierten Fettsäuren beträgt nach Analysen im Auftrag von K+S ca. 77 %. Eine CAS-Nummer besitzt dieses Produkt nicht, so dass eine Recherche über die CAS-Nummer in den Datenbanken (Tabelle 18) nicht möglich ist. Daten zur Ökotoxizität des AHS Amerfloc MI wurden durch K+S in Studien erhoben. Das aktuelle Sicherheitsdatenblatt [82] enthält keine neuen Daten zum AHS, jedoch sind zwei Inhaltsstoffe genannt, diese sind unter REACH registriert. Für Amerfloc MI sind keine Daten zu log Kow bzw. BCF vorhanden. Für den UVCB Amerfloc MI kann nur eine Abschätzung zu den beiden Komponenten erfolgen. Aus den hierzu bekannten Daten kann geschlossen werden, dass Amerfloc MI kein signifikantes Bioakkumulationspotential besitzt. Details zu den bekannten Inhaltsstoffen werden in Kapitel 9.11.1 und Kapitel 9.11.2 diskutiert (Tabelle 74 und Tabelle 75). Amerfloc MI ist keine PBT/vPvB-Substanz, da der AHS leicht biologisch abbaubar ist.

Seit der Erstellung des ersten Berichts (24.08.2015) wurden keine neuen Daten produziert, somit ist eine Korrektur der PNEC nicht erforderlich.

Für die Herleitung der PNEC sollen bevorzugt chronische Werte verwendet werden [9, 31]. Für Amerfloc MI liegen nur chronische Daten für Algen vor (Tabelle 73). Auf dieser Basis kann kein PNEC abgeleitet werden, so dass die akuten Effektwerte für die drei trophischen Ebenen berücksichtigt werden müssen. Entsprechend dem REACH Guidance Document [9] wurde ein Sicherheitsfaktor von 1000 auf den niedrigsten akuten Wert angewendet, da Daten zu drei trophischen Ebenen vorliegen.

$$\text{PNEC}_{\text{aqua}} = 127 \text{ mg/L} : 1000 = 0,127 \text{ mg/L} = 127 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Dieser Wert wurde vom HLNUG bestätigt [38].

Tabelle 73: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Amerfloc MI (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EC50	163	[67]
<i>D. magna</i>	EC50	141	[67]
<i>Danio rerio</i>	LC50	127	[67]
Chronischer Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EC10	100	[67]
<i>D. magna</i>	-	-	-
Fisch	-	-	-

9.11.1 Identifizierte Inhaltsstoffe laut Sicherheitsdatenblatt [82]: Fatty acids, vegetable-oil, sulfated, sodium salts (CAS 61788-67-8, EC 262-996-5)

Die aktuelle Version des Sicherheitsdatenblattes zu dem AHS Amerfloc MI listet zwei Inhaltsstoffe:

- Fatty acids, vegetable-oil, sulfated, sodium salts (CAS 61788-67-8, EC 262-996-5)
- 3-Butoxy-2-propanol (CAS 5131-66-8, EC 225-878-4)

Das Natriumsalz der sulfatierten Fettsäure (CAS 61788-67-8) hat einen Anteil von ≥ 40 bis ≤ 50 % an dem AHS Amerfloc MI laut Sicherheitsdatenblatt [82]. Diese Substanz ist unter REACH registriert. Es handelt sich hierbei um eine UVCB. Laut Registrierungsdossier [27] erfüllt die Substanz nicht die PBT/vPvB-Kriterien, da sie leicht biologisch abbaubar ist. Weiterhin weisen die vorhandenen ökotoxischen Effektdaten darauf hin, dass die Substanz nicht gefährlich für die Umwelt ist („no hazard“). Dementsprechend haben die Registrierenden keine PNECs abgeleitet. Nach CLP ist keine Einstufung notwendig. Die akuten Effektwerte (Tabelle 74) liegen für alle drei trophischen Ebenen deutlich oberhalb der Einstufungsgrenzen (akut: 100 mg/L) und der Wasserlöslichkeitsgrenze (Wasserlöslichkeit: $< 0,6$ bzw. $< 0,1$ mg/L). Der log Kow wurde mit 4,66 für eine repräsentative Struktur berechnet. Der log Kow wäre damit oberhalb des kritischen Wertes von 4,5 für B/vB-Substanzen. Berechnete Bioakkumulationsfaktoren (BCF) weisen jedoch auf Werte deutlich unterhalb der kritischen Werte von 2000 L/kg bzw. 5000 L/kg für B bzw. vB hin (BCF: max. 1000 L/kg). Da es sich bei dieser Substanz um eine Fettsäure handelt, ist auch hier davon auszugehen, dass sie schnell metabolisierbar ist und sie somit nicht signifikant bioakkumulierbar ist. Die Substanz ist nicht toxisch basierend auf den Ökotoxdaten. Weiterhin besteht keine relevante CLP-Einstufung.

In Ergänzung zu den vorhandenen Studienergebnissen zu Amerfloc MI erscheint die Ableitung einer PNEC für diese Substanz aufgrund des relativ hohen Anteils von ≥ 40 bis ≤ 50 % sinnvoll. Entsprechend dem TGD zur Wasserrahmenrichtlinie [31] sollen jedoch Studien, die oberhalb der Wasserlöslichkeitsgrenze durchgeführt wurden, nicht zur Ableitung von Umweltstandards verwendet werden. In Ausnahmefällen sind Ergebnisse bis zum zweifachen Wert der Wasserlöslichkeit akzeptabel. Im Fall der vorliegenden Ergebnisse trifft diese Einschränkung nicht zu, folglich kann keine valide PNEC abgeleitet werden.

9.11.2 Identifizierte Inhaltsstoffe laut Sicherheitsdatenblatt [82]: 3-Butoxy-2-propanol (CAS 5131-66-8)

Der zweite gelistete Inhaltsstoff 3-Butoxy-2-propanol (CAS 5131-66-8) ist ebenfalls unter REACH registriert [25]. Eine Datenrecherche wurde durchgeführt und die relevanten Daten zusammengetragen (Tabelle 75). Eine Bewertung der Substanz wurde 2006 durch die OECD vorgenommen. Ein OECD SIAR liegt vor [70]. Auf Basis der vorliegenden Daten ist die Substanz gut wasserlöslich, leicht biologisch abbaubar, besitzt kein signifikantes Bioakkumulationspotential und ist nicht umweltgefährlich nach CLP. Im REACH-Registrierungsdossier wird eine PNEC von 0,525 mg/L abgeleitet. Diese basiert als Worst-Case-Ansatz auf einem berechneten akuten Effektwert von 525 mg/L, obwohl valide experimentelle Daten zur akuten Toxizität für alle drei trophischen Ebenen vorhanden sind. Basierend auf den Key-Studien ist der LC50 für Fisch (*P. reticulata*) mit > 560 bis < 1000 mg/L der niedrigste Effektwert. Mit einem Sicherheitsfaktor von 1000 ergibt sich eine PNEC_{aqua} von 0,56 mg/L. Diese PNEC ist deutlich höher als die für Amerfloc MI. Demnach ist die PNEC für den AHS bereits ausreichend protektiv und eine separate Betrachtung für 3-Butoxy-2-propanol ist nicht notwendig.

Tabelle 74: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Fatty acids, vegetable-oil, sulfated, sodium salts (CAS 61788-67-8, EC 262-996-5)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	01.08.2019	keine Daten
ECHA	01.08.2019	registriert [27] <ul style="list-style-type: none"> • nicht PBT/vPvB • keine umweltrelevante Klassifizierung nach GHS (allgemein: harmonisierte Klassifizierung: H319) • Wasserlöslichkeit: < 0,6 mg/L, wahrscheinlich < 0,1 mg/L = unlöslich nach OECD Testrichtliniendefinition • log Kow: 4,66 (berechnet, EPI Suite v4.1) • leicht biologisch abbaubar (OECD 301B: 82 % in 28 d, GLP) • nicht B/vB: mit verschiedenen Modellen berechnete BCF- und BAF-Werte: BCF ≤ 2000 L/kg • keine PNECs abgeleitet: „no hazard identified“ • Fisch, akut: <ul style="list-style-type: none"> ○ <i>O. mykiss</i>: 96-h LL50 > 100 mg/L (WAF, OECD 203, Read-across, GLP) ○ <i>D. rerio</i>: 96-h LC50 = 269 mg/L (nicht gemessen, LC50 >> Wasserlöslichkeit; ISO 7346-1, GLP, Read-across) • Aquatische Invertebraten: Read-across: EC 307-037-4 and EC 281-975-1, both sulfited fat liquors <ul style="list-style-type: none"> ○ <i>D. magna</i>: 48-h EL > 100 mg/L (nom., WAF, OECD 202, GLP, Read-across) ○ <i>D. magna</i>: 48-h EL > 100 mg/L (nom., WAF, OECD 202, Read-across) • Algen: Read-across: EC 307-037-4 and EC 281-975-1, both sulfited fat liquors <ul style="list-style-type: none"> ○ <i>D. subspicatus</i>: 72-h ErL50 = 140 mg/L, 72-h NOErL = 10 mg/L (nom., WAF, OECD 201, GLP, Read-across) ○ <i>D. subspicatus</i>: 72-h NOErL > 100 mg/L (nom., WAF, OECD 201, GLP, Read-across) • Aquatische Mikroorganismen: Read across from a similar substance (rape oil, sulphonated, sodium salt, EC 293-618-7) <ul style="list-style-type: none"> ○ <i>P. putida</i>: 30-min ELO > 4900 mg/L (nom., DIN 38412-27, WAF, Read-across)
eChemPortal	01.08.2019	Categorization Results from the Canadian Domestic Substance List: keine experimentellen Daten
ECOTOX	01.08.2019	keine Daten
ETOX	01.08.2019	keine Daten
GESTIS	01.08.2019	keine Daten
GSBLpublic	01.08.2019	keine Daten
IRIS	01.08.2019	keine Daten
SIDS	01.08.2019	keine Daten
TOXNET	01.08.2019	keine Daten

Tabelle 75: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: 3-Butoxy-2-propanol (CAS 5131-66-8, EC 225-878-4)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	01.08.2019	keine Daten
ECHA	01.08.2019	registriert [25] <ul style="list-style-type: none"> • nicht PBT/vPvB • keine umweltrelevante harmonisierte Klassifizierung (allgemein: H315, H319); notifizierte Klassifizierung: 1 Registrierender hat die Substanz u.a. als Aquatic Acute 1 (H400) und Aquatic Chronic 3 (H412) eingestuft; diese Einstufung steht aber im Gegensatz zu den vorhandenen Ökotox-Daten und wird daher nicht weiter beachtet. • Wasserlöslichkeit: 55 g/L (20 °C, experimentell) • log Kow: 1,2 (20 °C, experimentell) • leicht biologisch abbaubar (OECD 301E: 90 % in 28 d) • nicht B/vB: log Kow < 3; BCF = 3.2 L/kg (berechnet, EPI Suite) • PNEC_{aqua}: 0,525 mg/L (Sicherheitsfaktor = 1000; 96-h EC50 = 525 mg/L, berechnet ECOSAR v0.99) • Fisch, akut: <ul style="list-style-type: none"> ○ <i>P. reticulata</i>: 96-h LC50 > 560 und < 1000 mg/L (nom., keine Analytik; GLP; OECD 203; Key-Studie) ○ <i>P. promelas</i>: 96-h LC50 = 1060 mg/L (nom., keine Analytik; keine Richtlinie; Key-Studie) • Aquatische Invertebraten: <ul style="list-style-type: none"> ○ <i>D. magna</i>: 48-h EC50 > 1000 mg/L (nom., keine Analytik, OECD 202, GLP; Key-Studie) ○ <i>D. magna</i>: 48-h EC50 und EC100 > 100 mg/L (nom., keine Analytik, OECD 202, GLP; Supporting-Studie) ○ <i>D. magna</i>: 48-h EC50 = 1436 mg/L (nom., keine Analytik, EPA; ; Supporting-Studie) • Algen: <ul style="list-style-type: none"> ○ <i>R. subcapitata</i>: 96-h EC50 > 1000 mg/L, 96-h NOEC = 560 mg/L (Wachstum, nom., keine Analytik, OECD 201, GLP; Key-Studie) • Aquatische Mikroorganismen: <ul style="list-style-type: none"> ○ Belebtschlamm, kommunal: 3-h EC50 > 1000 mg/L (nom., OECD 209)
eChemPortal	01.08.2019	J-CHECK: Bioabbau: OECD 301C: 89 % in 28 d
ECOTOX	01.08.2019	<i>Petromyzon marinus</i> (Meerneunauge), Larve: 24-h ECx = 5 mg/L, kein Effektniveau angegeben, Exposition zu kurz, nicht verwendbar
ETOX	01.08.2019	keine Daten
GESTIS	01.08.2019	keine umweltrelevanten Daten
GSBLpublic	01.08.2019	keine umweltrelevanten Daten
IRIS	01.08.2019	keine Daten
SIDS	01.08.2019	OECD (2006; [70]). Category Report for Propylene Glycol Ethers: leicht biologisch abbaubar, akute Effektkonzentrationen > 500 mg/L, geringes Potential zur Bioakkumulation (log Kow = 1,2, exp; BCF = 1,53 L/kg, berechnet)
TOXNET	01.08.2019	keine Daten

9.12 Polyethylen-/ Polypropylenglycol alkyliert (Entschäumer; PEG/PPG alkyliert; Handelsname: Drewplus 4009 G; CAS 69227-21-0)

Tabelle 76: Substanzcharakterisierung von Polyethylen-/ Polypropylenglycol alkyliert (Entschäumer; PEG/PPG alkyliert; Drewplus 4009 G; CAS 69227-21-0)

Name	Drewplus 4009 G
Chemischer Name	alkyliertes Polyethylen- und Polypropylenglycol
CAS-Nr.	69227-21-0
EINECS-Nr.	keine
Molare Masse	Gemisch
Wasserlöslichkeit	vollkommen mischbar [83]
Biologische Abbaubarkeit	leicht abbaubar (77% nach 28 d, OECD 301F, Studie K+S); leicht biologisch abbaubar [83]
log Kow	k.A. [83]
Bioakkumulationspotential	k.A. [83]
PBT/vPvB	Dieser Stoff/diese Mischung enthält keine Komponenten in Konzentrationen von 0,1 % oder höher, die entweder als persistent, bioakkumulierbar und toxisch (PBT) oder sehr persistent und sehr bioakkumulierbar (vPvB) eingestuft sind. [83]
Wassergefährdungsklasse	1 (leicht wassergefährdend) [83]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine Einstufung laut SDB [83]; laut ECHA: keine umweltrelevant Einstufung der überwiegenden Anzahl der Anmelder. ⁵⁶
REACH-Status	nicht registriert

Es handelt sich bei Drewplus 4009 G um den Produktnamen für ein nicht näher definiertes Gemisch (Polyethylen-/Polypropylenglycol alkyliert). Der AHS ist vollkommen mischbar mit Wasser. Es liegen keine Angaben zu log Kow bzw. Bioakkumulationspotential vor, so dass eine Beurteilung nicht möglich ist. Eine Abschätzung von log Kow oder BCF per Berechnung über QSAR-Modelle ist nicht möglich, da keine Informationen zu einzelnen Inhaltsstoffen vorliegen. Da die Substanz leicht biologisch abbaubar ist, ist sie weder PBT, noch vPvB.

Eine Recherche (06.09.2018) in den geläufigen Datenbanken ergab keine zusätzlichen oder neuen Daten (Tabelle 18). In einem aktuellen SDB [83] zu dem AHS wird die CAS-Nummer zu der Substanz gelistet: CAS 69227-21-0. Eine Datenrecherche unter Verwendung der CAS-Nummer ergab keine neuen umweltrelevanten Informationen. Daten zur Ökotoxizität von PEG/PPG alkyliert wurden durch K+S in Studien erhoben. Seit der Erstellung des ersten Berichts (01.12.2014) wurden keine neuen Daten produziert, somit ist eine Korrektur der PNEC nicht erforderlich.

Für die Herleitung der PNEC sollen bevorzugt chronische Werte verwendet werden [9, 31]. Für PEG/PPG alkyliert liegen keine chronischen Daten vor (Tabelle 77), so dass für die PNEC die akuten Effektwerte berücksichtigt werden müssen. Entsprechend dem REACH Guidance Document [9] wurde ein Sicherheitsfaktor von 1000 auf den niedrigsten akuten Wert angewendet, da Daten zu drei trophischen Ebenen vorliegen.

$$\text{PNEC}_{\text{aqua}} = 1,3 \text{ mg/L} : 1000 = 0,0013 \text{ mg/L} = \mathbf{1,3 \mu\text{g/L}}$$

Dieser Wert wurde vom HLNUG bestätigt [37].

⁵⁶ Wenige Anmelder haben den AHS als Aquatic Acute 1 (H400) und teilweise als Aquatic Chronic 3 (H412) eingestuft. Aufgrund der vorliegenden Daten ist eine derartige Einstufung nicht zu unterstützen (L(E)C50 > 1 mg/L, leicht biologisch abbaubar) und wird hier außer Betracht gelassen.

Tabelle 77: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für PEG/PPG alkyliert (Drewplus 4009 G; grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet)

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EC50	11	[67]
<i>D. magna</i>	EC50	1,3	[67]
<i>Danio rerio</i>	LC50	1630	[67]
Chronischer Datensatz			
Alge	-	-	-
<i>D. magna</i>	-	-	-
Fisch	-	-	-

Tabelle 78: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Drewplus bzw. Polyethylen-/Polypropylenglycol alkyliert (CAS 69227-21-0, EC 500-242-1)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	01.08.2019	keine Daten
ECHA	01.08.2019	nicht unter REACH registriert; CLP: keine harmonisierte Klassifizierung, notifizierte Klassifizierung: umweltrelevant: Aquatic Acute 1 (H400) und Aquatic Chronic 3 (H412), weitere Klassifizierung: H302, H315, H318, H319
eChemPortal	01.08.2019	keine experimentellen umweltrelevanten Daten
ECOTOX	01.08.2019	keine Daten
ETOX	01.08.2019	keine Daten
GESTIS	01.08.2019	keine Daten
GSLpublic	01.08.2019	WGK 2 (im Gegensatz zum Sicherheitsdatenblatt: WGK 1, schwach wassergefährdend). [103]
IRIS	01.08.2019	keine Daten
SIDS	01.08.2019	keine Daten
TOXNET	01.08.2019	keine umweltrelevanten Daten

9.13 Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800; CAS 68609-68-7)

Tabelle 79: Substanzcharakterisierung von Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (CAS 68609-68-7)

Name	Montanol 800
Chemischer Name	Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether
CAS-Nr.	68609-68-7
EINECS-Nr.	271-832-1
Molare Masse	Gemisch
Wasserlöslichkeit	790 mg/L bei 20 °C (ECHA OECD 105)
Biologische Abbaubarkeit	30-35% nach 28 d (OECD 301 B, nicht leicht abbaubar)
log Kow	ca. 1,6 [SDB]
Bioakkumulationspotential	nicht zu erwarten (log Kow < 3) [SDB]
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend) [98]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Einstufung der Anmelder: Aquatic Chronic 3 (H412)
REACH-Status	registriert

Es handelt sich bei Montanol 800 um den Produktnamen für ein Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester und Ether (CAS 68609-68-7). Die Substanz ist gut wasserlöslich. Sie besitzt nur eine mäßige biologische Abbaubarkeit. Aufgrund des niedrigen log Kow ist von keinem signifikanten Bioakkumulationspotential auszugehen. Montanol 800 ist keine PBT/vPvB-Substanz aufgrund des geringen log Kow und der geringen toxischen Wirkung (chronische Effektwert > 0,01 mg/L, keine relevante Klassifizierung). Die Recherche (06.09.2018) in den geläufigen Datenbanken ergab keine zusätzlichen oder neuen Daten (Tabelle 80). Es wurde eine weitere Studie zur akuten Toxizität von *D. magna* gegenüber dem Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800) gefunden, allerdings ist die Zuverlässigkeit der Studie aufgrund der Anwesenheit von ungelöster Testsubstanz in Kombination mit der nicht eindeutigen Analytik nicht ausreichend (RL 3). Der ermittelte EC50 erscheint dennoch plausibel im Vergleich mit dem bereits vorhandenen Wert. Allerdings liegt der Effektwert oberhalb der Wasserlöslichkeit des Gemisches aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800), die in der bereits vorliegenden Daphnienstudie bestimmt wurde (ca. 40 mg/L). Eine Korrektur der PNEC ist nicht erforderlich.

Tabelle 80: Übersicht und Beschreibung der verwendeten Datenbanken: Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800; CAS 68609-68-7)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	06.09.2018	keine Daten
ECHA	06.09.2018	keine neuen Daten
eChemPortal	06.09.2018	keine Ökotox-Daten, abgesehen von Verweis auf ECHA und HPVIS; US EPA HPVIS: experimentelle Studie zu <i>D. magna</i> : Testsubstanz Oxo oil 800 (CAS-Nr. identisch 68609-68-7). Studie von 1989; Methode: Directive 79/831/EEC, Annex V, Part C, Update of Nov 1989; GLP; statisch; geschlossene Gefäße; Testlösung hergestellt durch Rühren, ungelöstes Material abgetrennt durch Zentrifugieren; ungelöstes Testmaterial sichtbar; Testkonzentrationen überprüft (allerdings unterscheidet Methode nicht gelöst/ungelöst), Wiederfindung zwischen 95,9 und 105%; 48-h EC50 = 52 mg/L (n); RL 3 https://ofmpub.epa.gov/oppthpv/Public_Search.PublicTabs?section=1&SubmissionID=24949123&epcount=32&epname=null&epdiscp=null&selchemid=112373&CategorySingle=Single
ECOTOX	06.09.2018	keine Daten
ETOX	06.09.2018	keine Daten
GESTIS	06.09.2018	keine Daten
GSBLpublic	06.09.2018	keine Daten
IRIS	06.09.2018	keine Daten
SIDS	06.09.2018	keine Daten
TOXNET	06.09.2018	HSDB: keine Daten

Für die Herleitung der PNEC sollen bevorzugt chronische Werte verwendet werden [9, 31]. Für das Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800) liegen nur chronische Daten für Algen vor (Tabelle 81). Auf dieser Basis kann kein PNEC abgeleitet werden, so dass die akuten Effektwerte für die drei trophischen Ebenen berücksichtigt werden müssen. Entsprechend dem REACH Guidance Document [9] wurde ein Sicherheitsfaktor von 1000 auf den niedrigsten akuten Wert angewendet, da Daten zu drei trophischen Ebenen vorliegen.

$$\text{PNEC}_{\text{aqua}} = 19 \text{ mg/L} : 1000 = 0,019 \text{ mg/L} = 19 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Dieser Wert wurde vom HLNUG vorläufig bestätigt [41].

Tabelle 81: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für das Gemisch aliphatischer Alkohole, Ester, Ether (Montanol 800; grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	EC50	35	[21]
<i>D. magna</i>	EC50	> 38	[21]
<i>Danio rerio</i>	LC50	19	[21]
Chronischer Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	NOEC	19,4	[21]
<i>D. magna</i>	-	-	-
Fisch	-	-	-

9.14 4-Chlorbenzoesäure (CAS 74-11-3)

Tabelle 82: Substanzcharakterisierung von 4-Chlorbenzoesäure (CAS 74-11-3)

Name	4-Chlorbenzoesäure
Chemischer Name	4-Chlorbenzoesäure
CAS-Nr.	74-11-3
EINECS-Nr.	200-805-9
Molare Masse	156,57 g/mol
Wasserlöslichkeit	80 mg/L bei 20 °C (OECD 105)
Biologische Abbaubarkeit	95,5% nach 25 d (OECD 301F)
log Kow	2,7 (exp.), 2,5 (ber., EPI Suite v4.11)
Bioakkumulationspotential	BCF = 3 L/kg (BCFBAF v3.01)
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	2 (deutlich wassergefährdend) [100]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung, keine umweltrelevante Einstufung
REACH-Status	vorregistriert; laut ECHA ist es wahrscheinlich, dass die Substanz die Kriterien für CMR erfüllt.

4-Chlorbenzoesäure ist mäßig wasserlöslich. Der log Kow ist gering, wie auch die berechneten Biokonzentrationsfaktoren, so dass von keinem signifikantem Bioakkumulationspotential auszugehen ist. Die Substanz ist keine PBT/vPvB-Substanz. Allerdings ist es laut ECHA basierend auf QSAR-Daten wahrscheinlich, dass die Substanz die Kriterien für CMR erfüllt.

Die Recherche (07.09.2018) in den geläufigen Datenbanken ergab keine zusätzlichen oder neuen Daten. Eine Korrektur der PNEC ist nicht erforderlich. Für die Herleitung der PNEC sollen bevorzugt chronische Werte verwendet werden [9]. Für 4-Chlorbenzoesäure liegen nur chronische Daten für Algen vor (Tabelle 83). Auf dieser Basis kann keine PNEC abgeleitet werden, so dass die akuten Effektwerte berücksichtigt werden müssen. Entsprechend dem REACH Guidance Document [9] wurde ein Sicherheitsfaktor von 1000 auf den niedrigsten akuten Wert angewendet, da Daten zu drei trophischen Ebenen vorliegen.

$$PNEC_{\text{aqua}} = 45 \text{ mg/L} : 1000 = 0,045 \text{ mg/L} = 45 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Dieser Wert wurde vom HLNUG bestätigt [49].

Tabelle 83: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für 4-Chlorbenzoesäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Akuter Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	IC50	48	[55]
<i>D. magna</i>	EC50	45	[55]
<i>Danio rerio</i>	LC50	> 80	[55]
Chronischer Datensatz			
<i>D. subspicatus</i>	IC10	28	[55]
<i>D. magna</i>	-	-	-
Fisch	-	-	-

9.15 Benzoesäure (CAS 65-85-0)

Tabelle 84: Substanzcharakterisierung von Benzoesäure (CAS 65-85-0)

Name	Benzoessäure
Chemischer Name	Benzoessäure, benzoic acid
CAS-Nr.	65-85-0
EINECS-Nr.	200-618-2
Zusammensetzung	Benzoessäure
Molare Masse	122,12 g/mol
Wasserlöslichkeit	3500 mg/L (bei 25 °C) [ECHA]
Biologische Abbaubarkeit	leicht biologisch abbaubar (≥ 89 % nach 21-34 d, OECD 311)
log Kow	1,9 (exp., ber., EPI Suite v4.11)
Bioakkumulationspotential	BCF = 3 L/kg (BCFBAF v3.01)
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend) [96]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine umweltrelevante harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Notifizierung der Industrie: -
REACH-Status	registriert

Für die Ableitung der $PNEC_{\text{aqua}}$ wurden Daten für Benzoessäure zusammengestellt. Allerdings setzt K+S nicht Benzoessäure selbst als AHS ein, sondern Kaliumbenzoat (CAS 58-25-2, EC 209-481-3). Kaliumbenzoat ist gut wasserlöslich (ca. 492 g/L) und liegt im Gewässer in ionischer Form (Benzoat-Ion und Kalium-Ion) vor. Analytisch wird in den Abwässern und im Gewässer Benzoessäure bestimmt. In einem Abgleich mit dem REACH-Registrierungsdossier wurden keine auffälligen Abweichungen in der Sensitivität der aquatischen Organismen festgestellt. Weiterhin ist festzustellen, dass Kalium aus dem AHS Kaliumbenzoat einen vernachlässigbaren Einfluss auf den Gesamtkaliumgehalt der Abwässer bzw. der Werra hat.

Tabelle 85: Rechercheergebnisse für Benzoesäure (CAS 65-85-0)

Datenbank	Zugriff	Aktualisierung der vorhandenen Daten erforderlich
ATSDR	11.-22.07.2019	nein; keine Daten vorhanden
ECHA	11.-22.07.2019	nein; keine zusätzlichen Daten vorhanden
eChemPortal	11.-22.07.2019	Verweis auf folgende Datenbanken: J-CHECK ⁵⁷ : keine neuen Daten IPCS INCHEM: keine umweltrelevanten Daten vorhanden EnviChem: Seite nicht erreichbar GHS-J: Umweltrelevante Klassifizierung nach GHS-UN: Acute 3 (Einstufung nicht für europäischen Bereich gültig) OECD HPV: keine umweltrelevanten Daten vorhanden HSNO CCID ⁵⁸ : Seite nicht erreichbar US EPA SRS ⁵⁹ : keine umweltrelevanten Daten vorhanden ACToR ⁶⁰ : keine umweltrelevanten Daten vorhanden
ECOTOX	11.-22.07.2019	nein; keine neuen Ökotox-Daten
ETOX	11.-22.07.2019	nein; keine neuen Ökotox-Daten
GESTIS	11.-22.07.2019	nein; keine neuen Ökotox-Daten
GSBL _{public}	11.-22.07.2019	nein; keine neuen Ökotox-Daten
IRIS	11.-22.07.2019	kein Eintrag vorhanden
SIDS	11.-22.07.2019	kein Eintrag vorhanden
TOXNET	11.-22.07.2019	nein; keine neuen Ökotox-Daten

Es liegen valide chronische Werte für alle drei trophischen Ebenen vor. Die Werte für Krebstiere (z.B. Daphnien) und Fische sind keine definitiven Werte (>'), da bis zur höchsten getesteten Konzentration keine Effekte festgestellt wurden. Die Grünalge *R. subcapitata* ist jedoch deutlich sensibler, so dass das Basisdatenset dennoch als vollständig angesehen werden kann. Die PNEC wird daher entsprechend den Vorgaben des REACH Guidance Documents [9] bzw. TGD CIS No. 27 [31] anhand dieser Daten hergeleitet.

Chronische Daten für Vertreter aller drei trophischen Ebenen liegen vor, daher wird ein Sicherheitsfaktor von 10 auf den niedrigsten Wert (Tabelle 86) angewendet (REACH Guidance Document, 2008, Kapitel R.10.3.1.2, Tab. R.10-4).

$$\text{PNEC}_{\text{aqua}} = 3,4 \text{ mg/L} : 10 = 0,34 \text{ mg/L} = 340 \text{ } \mu\text{g/L}$$

Tabelle 86: Übersicht der niedrigsten validen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Benzoesäure (grau hinterlegt: niedrigster Effektwert, für PNEC-Herleitung verwendet).

Organismus	Parameter	Konz. in mg/L	Referenz
Chronischer Datensatz			
<i>R. subcapitata</i>	EC10	3,4	Annon. (16. Juni 2010) in ECHA [26]
<i>D. magna</i>	NOEC	≥ 25	Pawlowski & Wydra (2004, [77]) in ECHA (REACH [26] u. Biozid [30])
<i>O. mykiss</i>	NOEC	> 120	Annon. (2004, [1]) in ECHA (REACH [26] u. Biozid [30])

⁵⁷ Japan Chemicals Collaborative Knowledge database⁵⁸ Environmental Protection Authority of New Zealand⁵⁹ US EPA Substance Registry Services⁶⁰ EPA's Aggregated Computational Toxicology Online Resource (ACToR)

9.16 Polyacrylamide (Handelsname: WT-FLOC AF 701 TWG)

Tabelle 87: Substanzcharakterisierung von Polyacrylamide (Handelsname: WT-FLOC AF 701 TWG)

Name	WT-FLOC AF 701 TWG
Chemischer Name	wasserlösliches anionisches Polymer (laut SDB [107])
CAS-Nr.	k.A. (laut SDB [107])
EINECS-Nr.	k.A. (laut SDB [107])
Zusammensetzung	wasserlösliches anionisches Polymer; < 0,1 % (w/w) Acrylamid (CAS 79-06-1)
Molare Masse	k.A.
Wasserlöslichkeit	wasserlöslich
Biologische Abbaubarkeit	Elimination aus dem Wasser durch Ausfällung oder Ausflockung möglich.
log K _{ow}	k.A.
Bioakkumulationspotential	k.A.
PBT/vPvB	k.A.
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend; laut SDB [107]: Anhang 4 der VwVwS (Deutschland) vom 17. Mai 1999); 2 (deutlich wassergefährdend; laut Rigoletto [105, 104])
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine umweltrelevante harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Notifizierung der Industrie: -
REACH-Status	als Polymer von der Registrierung ausgenommen

Tabelle 88: Rechercheergebnisse für anionische Polyacrylamide (CAS 9003-05-8⁶¹)

Datenbank	Zugriff	Daten
ATSDR	08.09.2019	keine Daten
ECHA	08.09.2019	nicht registriert, da Polymer
eChemPortal	08.09.2019	Verweis auf folgende Datenbanken: NICNAS (Australien): gelistet als "low concern polymer" Canadian Domestic Substance List [74]: Nicht PBT nach CEPA (1999), da nicht bioakkumulierend; allerdings eingestuft als persistent und inherently toxic to aquatic organisms <i>Daphnia pulex</i> : 48-h LC50 = 0.08 mg/L (Hall & Mirenda, 1991) ACToR ⁶⁰ : keine umweltrelevanten Daten vorhanden
ECOTOX	08.09.2019	kein Eintrag
ETOX	08.09.2019	kein Eintrag
GESTIS	08.09.2019	kein Eintrag
GSBL _{public}	08.09.2019	Verweis auf ETOX; Grenzwert für Trinkwasseraufbereitung: 0,5 mg/L [33]
IRIS	08.09.2019	kein Eintrag vorhanden
SIDS	08.09.2019	kein Eintrag vorhanden
TOXNET	08.09.2019	keine Ökotox-Daten

⁶¹ Die CAS-Nummer wurde für Polyacrylamide recherchiert, das SDB [107] enthält hierzu keine Informationen.

Tabelle 89: Rechercheergebnisse für anionische Polyacrylamide (CAS 25085-02-3⁶²)

Datenbank	Zugriff	Daten
ATSDR	11.09.2019	keine Daten
ECHA	11.09.2019	nicht registriert, da Polymer; keine CLP-Klassifikation (nicht harmonisiert oder notifiziert klassifiziert)
eChemPortal	11.09.2019	Verweis auf folgende Datenbanken: Canadian Domestic Substance List [75]: Nicht PBT nach CEPA (1999), da nicht bioakkumulierend; allerdings eingestuft als persistent und inherently toxic to aquatic organisms
ECOTOX	11.09.2019	C. dubia: 48-h LC50 = 218 mg/L und 93 mg/L (De Rosemond & Liber, 2004)
ETOX	11.09.2019	kein Eintrag
GESTIS	11.09.2019	kein Eintrag
GSBL ^{public}	11.09.2019	Verweis auf ETOX
IRIS	11.09.2019	kein Eintrag vorhanden
SIDS	11.09.2019	kein Eintrag vorhanden
TOXNET	11.09.2019	keine Ökotox-Daten

Dieser AHS wird an den Standorten des Werkes Werra in verschiedenen Klärprozessen als Flockungsmittel eingesetzt. Bei diesem AHS handelt es sich um ein wasserlösliches anionisches Polymer. Der Restmonomergehalt (Acrylamid, CAS 79-06-1) beträgt weniger als 0,1 % (w/w). Das Sicherheitsdatenblatt enthält keine Angaben zu CAS-Nummer bzw. zu einer eindeutigen chemischen Bezeichnung.

Basierend auf den Effektdaten aus dem Sicherheitsdatenblatt [107] ist der AHS nicht gefährlich für aquatische Organismen. Die Effektdaten für die drei trophischen Ebenen Alge, Daphnie und Fisch liegen alle oberhalb von 100 mg/L (Tabelle 83). Laut SDB [107] wurde das Produkt nicht geprüft, sondern die Aussagen zur Ökotoxikologie wurden von Produkten ähnlicher Struktur oder Zusammensetzung abgeleitet. Diese wurden jedoch nicht spezifiziert. Nach Informationen anderer Prozenten⁶³ wurde reines anionisches Polyacrylamid unter GLP getestet („pure anionic PAM“, CAS 25085-02-3) und ebenfalls bestätigt, dass akute Effektwerte der drei trophischen Ebenen > 100 mg/l liegen.

Die Recherche in den frei-zugänglichen Datenbanken wurde zum einen mittels der CAS-Nummer für ionische Polyacrylamide (CAS 9003-05-8) zum anderen mittels der CAS-Nummer 25085-02-3 durchgeführt.

NICNAS (Australien) stuft in einem Screening-Programm, Polyacrylamide mit der CAS-Nummer 9003-05-8 als „low concern polymer“ ein. Polyacrylamid (CAS 9003-05-8 und CAS 25085-02-3) ist nicht nach CLP eingestuft. Die Wassergefährdungsklasse ist laut Sicherheitsdatenblatt [107] 1 (schwach wassergefährdend). Die Recherche in der Rigoletto-Datenbank ergab jedoch für anionische Polyacrylamide eine Einstufung als deutlich wassergefährdend (WGK 2). Die unterschiedliche Einstufung ist auf die komplexe Struktur der Polymere zurückzuführen.

Nur ein Effektwert für aquatische Invertebraten wurde über das eChem-Portal gefunden (Hall & Mirenda, 1991; [34]), die in der CDSL [74] gelistet ist. Demnach wirkt die Substanz toxisch auf

⁶² ECHA: 2-Propenoic acid, sodium salt (1:1), polymer with 2-propenamide, EC-Nr. 607-529-1

⁶³ E-Mail der Firma Solenis vom 21.05.2019, Daten der PPG (Polyelectrolyte Producers Group)

aquatische Invertebraten (48-h LC50 = 0,08 mg/L). Laut CDSL ist die Publikation mit Einschränkungen verlässlich (RL 2).

In der Arbeit von Hall & Mirenda (1991; [34]) wurde die toxische Wirkung auf *Daphnia pulex* und *Pimephales promelas* nach Standardmethoden der US EPA in statischen Tests untersucht. Demnach sind Fische weniger sensibel als aquatische Invertebraten (Tabelle 90). Allerdings ist festzustellen, dass die Testsubstanz nicht identisch ist mit der Beschreibung aus dem Sicherheitsdatenblatt. Getestet wurden Polyacrylamide mit einem Molekulargewicht von 8.0E06 g/mol in einer nicht-ionischen Emulsion untersucht. Die Ladungsdichte betrug 0 % und 4 % in den beiden Testreihen. Weitere Informationen zu den Testsubstanzen wurden nicht gegeben. Laut den Autoren wird die toxische Wirkung auf *Daphnia pulex* unter anderem durch die Polymerchemie kontrolliert. So wurde festgestellt, dass ein Teil der toxischen Wirkung auf physikalischen Effekten beruht („physical entrapment or clumping“).

Die Daten aus der Publikation von Hall & Mirenda (1991; [34]) sollten nicht zur Beurteilung der ökotoxischen Wirkung auf aquatische Invertebraten und Fische verwendet werden, da einige Schwachstellen identifiziert wurden. Zum einen wurden physikalische Effekte auf die Daphnien beobachtet, die jedoch bei der Ableitung von Effektwerten nicht berücksichtigt werden sollten, da die inhärente Toxizität beurteilt werden soll. Weiterhin betonen die Autoren, dass die Polymerchemie die Toxizität kontrolliert. Die Testsubstanzen wurden jedoch nicht eindeutig identifiziert. Die vorhandenen Angaben zu den getesteten Polyacrylamiden weisen auf eine abweichende Zusammensetzung hin. Der AHS wird als anionisch beschrieben, in der Publikation wurde eine nicht-ionische Emulsion getestet. Weiterhin weichen die Effektwerte deutlich von den Angaben aus dem Sicherheitsdatenblatt ab. Aufgrund der Defizite und der Schwierigkeit bei der Identifikation der Testsubstanz ist die Publikation als nicht vertrauenswürdig (RL 3) einzustufen.

Für die CAS-Nummer 25085-02-3 wurde eine Publikation gelistet, die Daten zur akuten Toxizität von *Ceriodaphnia dubia* enthält: De Rosemond & Liber (2004; [6]). Die Testsubstanz ist anionisches Polyacrylamid mit dem Handelsnamen MagnaFloc 156 (Ciba Specialty Chemicals, Suffock, VA, USA). Die Autoren zitieren einen Wert von 212 mg/L für eine 48-h EC50 für *Daphnia magna*, der in dem Sicherheitsdatenblatt von Ciba Specialty Chemicals gelistet ist. Die Autoren testeten entsprechend den Vorschriften von Environment Canada. In einem Versuch mit pH-Anpassung (pH 3) resultierte ein 48-h LC50 von 93.0 mg/L (95% C.I.: 75.5–114.6 mg/L). Ohne pH-Anpassung der Testlösungen ergab sich ein LC50 von 218.1 mg/L (95% C.I.: 181.2–262.4 mg/L). Es ist daraus zu folgern, dass bei realen Umweltbedingungen (pH 4–9) der AHS nicht gefährlich für aquatische Invertebraten ist (LC50 > 100 mg/L). Das Ergebnis ist als verlässlich einzustufen. Die Autoren nennen Testmethode, Testspezies und Testsubstanz.

Der AHS wird in der Aufbereitung bei K+S nur in relativ geringen Mengen eingesetzt. Es ist davon auszugehen, dass aufgrund der Polymereigenschaften der Stoff ausschließlich am Feststoff verbleiben wird. Die vorliegenden Daten weisen mehrheitlich daraufhin, dass eine Gefährdung für aquatische Organismen nicht zu erwarten ist. Demnach wird auf eine Ableitung von PEC und PNEC verzichtet.

Tabelle 90: Übersicht der vorhandenen Toxizitätswerte für Wasserorganismen für Polyacrylamide

Organismus	Endpunkt	Dauer	Parameter	Wert (mg/L)	Chemische Analyse	Bemerkung	Validität	Referenz
Akute Daten								
<i>Danio rerio</i>	Mort.	96 h	LC50	> 100	k.A.	OECD 203 ⁶⁴	4	[107]
<i>Pimephales promelas</i>	Mort.	96 h	LC50	63,63	nein	EPA-Methode; Testsubstanz: non-ionic emulsion of polyacrylamide (Mol.-Gew.: 8.0*E06 g/mol), Ladungsdichte: 0%	3	Hall & Mirenda (1991, [34])
<i>Pimephales promelas</i>	Mort.	96 h	LC50	63,63	nein	EPA-Methode; Testsubstanz: non-ionic emulsion of polyacrylamide (Mol.-Gew.: 8.0*E06 g/mol), Ladungsdichte: 0%	3	Hall & Mirenda (1991, [34])
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Mort.	48 h	LC50	218,1	nein	Environment Canada (1992)	2	De Rosemond & Liber (2004, [6])
<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Mort.	48 h	LC50	93,0	nein	Environment Canada (1992), pH 3 (außerhalb des umweltrelevanten Bereichs: pH 4.0–9.0)	3	De Rosemond & Liber (2004, [6])
<i>Daphnia pulex</i>	Mort.	48 h	LC50	0,08	nein	EPA-Methode; Testsubstanz: CAS 9003-05-8; 2-Propenamide, homopolymer	-	Hall & Mirenda (1991, [34]) in [74]
<i>Daphnia pulex</i>	Mort.	48 h	LC50	0,08	nein	EPA-Methode; Testsubstanz: non-ionic emulsion of polyacrylamide (Mol.-Gew.: 8.0*E06 g/mol), Ladungsdichte: 0%	3	Hall & Mirenda (1991, [34])
<i>Daphnia pulex</i>	Mort.	48 h	LC50	0,15	nein	EPA-Methode; Testsubstanz: non-ionic emulsion of polyacrylamide (Mol.-Gew.: 8.0*E06 g/mol), Ladungsdichte: 4%	3	Hall & Mirenda (1991, [34])
<i>Daphnia magna</i>	Imm.	48 h	EC50	> 100	k.A.	OECD 202 ⁶⁴	4	[107]
<i>Desmodesmus subspicatus</i> (berichtet als <i>Scenedesmus subspicatus</i>)	k.A.	72 h	EC50	> 100	k.A.	OECD 201 ⁶⁴	4	[107]

⁶⁴ Das Produkt wurde nicht geprüft. Die Aussagen zur Ökotoxikologie wurden von Produkten ähnlicher Struktur oder Zusammensetzung abgeleitet.

9.17 Modifizierte Polysaccharide

Tabelle 91: Substanzcharakterisierung von modifizierte Polysaccharide (CAS 39346-76-4): Produktbeispiele: POLYGAL CT-496 und RAGUM CMG

Name	Modifizierte Polysaccharide, carboxymethyliert
Chemischer Name	Guar gum, carboxymethyl ether, sodium salt
CAS-Nr.	39346-76-4
EINECS-Nr.	609-654-7
Zusammensetzung	Modifizierte Polysaccharide, carboxymethyliert
Molare Masse	k.A.
Wasserlöslichkeit	POLYGAL: k.A. [78]; RAGUM: kolloidal löslich [79]
Biologische Abbaubarkeit	POLYGAL: k.A. [78]; RAGUM: leicht biologisch abbaubar [79]
log K _{ow}	k.A.
Bioakkumulationspotential	POLYGAL: k.A. [78]; RAGUM: kein Bioakkumulationspotential [79]
PBT/vPvB	nein
Wassergefährdungsklasse	1 (schwach wassergefährdend) [78; 79]
GefahrstoffEinstufung (EU)	keine harmonisierte Klassifizierung; umweltrelevante Notifizierung der Industrie: -
REACH-Status	als Polymer von der Registrierung ausgenommen

Modifizierte Polysaccharide (z.B. carboxymethyliert, Handelsname Polygal CT-496, CAS 39346-76-4, WGK 1; oder Galactomannan, modifiziert, Handelsname Ragum CMG) werden als AHS in der Kalisalzauflösung des Werkes Neuhoof-Ellers verwendet. Diese Stoffe werden als Zusatzstoff in der Flotation verwendet, um das Aufschwimmen von tonhaltigen Bestandteilen des Rohsalzes zu verhindern (Tondrucker).

Die Substanz besitzt keine harmonisierte Klassifizierung und auch keine umweltrelevante Notifizierung gemäß Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 (CLP). Als Polymer ist der AHS von der Registrierung unter REACH ausgeschlossen.

Tabelle 92: Rechercheergebnisse für modifizierte Polysaccharide (CAS 39346-76-4)

Datenbank	Zugriff	Daten
ATSDR	27.08.2019	keine Daten
ECHA	27.08.2019	nicht registriert, da Polymer
eChemPortal	27.08.2019	Verweis auf folgende Datenbanken: GSBL: siehe unten Canadian Domestic Substances List: keine experimentellen Daten, Einstufung anhand von Kategorien Nicht PBT nach CEPA (1999), da nicht toxisch zu aquatischen Organismen („low ecotoxicological concern“) ACToR ⁶⁰ : keine umweltrelevanten Daten vorhanden
ECOTOX	27.08.2019	keine Ökotox-Daten
ETOX	27.08.2019	keine Ökotox-Daten
GESTIS	27.08.2019	keine Ökotox-Daten
GSBL ^{public}	27.08.2019	Verweis auf ETOX
IRIS	27.08.2019	kein Eintrag vorhanden
SIDS	27.08.2019	kein Eintrag vorhanden
TOXNET	27.08.2019	keine Ökotox-Daten

Die Sicherheitsdatenblätter der beiden Beispielprodukte (modifizierte Polysaccharide, carboxymethyliert, Handelsname Polygal CT-496, CAS 39346-76-4; Galactomannan, modifiziert, Handelsname Ragum CMG) sowie die Recherche in den frei-zugänglichen Datenbanken ergab keine konkreten Daten zum Umweltverhalten oder zur Ökotoxizität. In der kanadischen Substanz-Liste (CDSL, Canadian Domestic Substances List) werden dem AHS keine ökotoxischen Eigenschaften zugesprochen. Dies stimmt mit den Angaben aus dem SDB für RAGUM CMG [79] überein. Letzteres stuft die Substanz als leicht biologisch abbaubar ein. Insgesamt kann also gefolgert werden, dass die Substanz nicht PBT/vPvB ist.

Aufgrund der fehlenden Effektdaten für aquatische (und andere) Organismengruppen können keine PNECs abgeleitet werden. Eine Berechnung mittels des QSAR-Modells ECOSAR v1.11 (EPI Suite v4.11) ist nicht möglich, da Polymere außerhalb der Anwendbarkeitsdomäne liegen.

Basierend auf den vorhandenen Angaben (CDSL, SDB für RAGUM CMG [79]) zu den modifizierten Polysacchariden lässt sich schließen, dass keine ökotoxischen Effekte auf aquatische Organismen zu erwarten sind. Darüber hinaus sind die eingesetzten Stoffe nicht persistent und nicht bioakkumulierend. Weiterhin ist hervorzuheben, dass der AHS aufgrund des Einsatzes als Flockungsmittel bzw. Tondrucker nahezu vollständig im Feststoffrückstand der Aufbereitung verbleiben wird. Eine Einleitung mit dem zu entsorgenden Salzabwasser der Aufbereitung ist nicht zu erwarten, so dass von keiner nennenswerten Exposition der aquatischen Lebewelt in der Werra auszugehen ist.