

Anwendungshinweise der Kommission Bewertung wassergefährdender Stoffe, KBwS, zur Einstufung von Stoffen in Wassergefährdungsklassen

Stand 11. Oktober 2011

Die Kommission Bewertung wassergefährdender Stoffe, KBwS, ist ein Beirat beim Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, BMU. Sie berät das BMU. Insbesondere erarbeitet sie Vorschläge für die Fortschreibung der Bewertungsgrundlagen zur Einstufung wassergefährdender Stoffe.

Die KBwS hat eine Reihe grundsätzlicher Festlegungen getroffen, nach denen die Einstufung von Stoffen, Stoffgruppen und Gemischen in Wassergefährdungsklassen (WGK) erfolgt. Diese Festlegungen werden bei Bedarf fortgeschrieben und als Anwendungshinweise der Kommission Bewertung wassergefährdender Stoffe gesammelt. Die wichtigsten dieser Festlegungen sind hier zusammengefasst dargestellt.

1. Eindeutige Stoffidentität
2. Lebens- und Futtermittel
3. Öle und ölähnliche Stoffe (Floater)
4. Einschränkung zu nwg-Einstufungen
5. Schwer wasserlösliche Stoffe
6. Gase
7. Stoffgruppen
8. EU-Legaleinstufungen
9. R-Satz Einstufung
10. CMR-Eigenschaften
11. Analogieeinstufungen
12. Stoffgemische
13. Altöle
14. Polymerdispersionen
15. Datenblätter

1. Eindeutige Stoffidentität

1.1 Für die Dokumentation von Stoffen ist eine eindeutige Identitätsnummer erforderlich. Eine Einstufung nach Anhang 3 ohne spezifische bzw. hinreichend genaue CAS-, EINECS/ELINCS-Nr. oder Neustoffbearbeitungs-Nr. ist nach VwVwS nicht möglich. Ausnahmen hiervon gibt es nur für Polymere.

Kann vom Antragsteller für die Einstufung keine spezifische CAS- bzw. EINECS/ELINCS - Nr. vorgelegt werden, ist ein Einstufungsantrag an die KBwS zu richten. In diesem Antrag sind die Darlegung des Sachverhaltes, warum keine spezifische CAS- bzw. EINECS/ELINCS -Nr. vorgelegt werden kann, und die gesamte Datenlage zur Einstufung des Stoffes offen zu legen.

1.2 Auch für die Dokumentation von **Polymeren** muss eine eindeutige Identifikation gewährleistet sein. Dafür sind die folgenden Mindestangaben erforderlich:

- Die mittlere Molmasse und der Molekularbereich, für den die WGK-Einstufung Gültigkeit hat, ist anzugeben **und**
- der Restmonomeregehalt ist anzugeben, wenn dieser oberhalb von 0,2 Gew.-% liegt **und**
- der Gehalt und die Identität von Additiven und Verunreinigungen ist anzugeben, wenn dieser oberhalb von 0,2 Gew.-% liegt **und**

- der Gehalt und die Identität von kanzerogenen Stoffen ist anzugeben, wenn dieser oberhalb von 0,1 Gew.-% liegt.

2. Lebens- und Futtermittel

Es gibt keinen fachlichen Hintergrund für die generelle Einstufung von Lebens- und Futtermitteln als nicht wassergefährdend (nwg). Lebens- und Futtermittel werden aufgrund Nr. 1.2 d) und e) VwVwS als nicht wassergefährdend bestimmt, soweit sie nicht in Anhang 2 genannt sind.

Wird ein Lebensmittel als technisches Produkt verwendet, gilt Nr. 1.2 d) und e) VwVwS nicht und die Einstufung in eine WGK erfolgt regulär gemäß Anhang 3.

3. Öle und ölähnliche Stoffe (Floater)

Öle (auch biogene bzw. native Öle) und ölähnliche Stoffe können durch physikalische Effekte wie dem Aufschwimmen auf der Wasseroberfläche und dem Verkleben des Gefieders von Wasservögeln zu einer Schädigung des Gewässers und der aquatischen Biozönose führen.

Diese Stoffe können daher nicht als „nicht wassergefährdend“ bestimmt werden.

Zur Identifizierung dieser Stoffe werden die GESAMP¹-Kriterien für Floater (F) herangezogen. Demnach können organische Flüssigkeiten, die unter Normalbedingungen eine Dichte $\leq 1000 \text{ kg/m}^3$, einen Dampfdruck $\leq 0,3 \text{ kPa}$ und eine Wasserlöslichkeit $\leq 1 \text{ g/l}$ aufweisen, ein Gefährdungspotential aufgrund von physikalischen Effekten besitzen.

Bewertungspunkte werden für die Erfüllung der Floater-Kriterien nicht vergeben.

Aufschwimmende, flüssigen Stoffe (Floater), die ansonsten alle Kriterien für einen nwg-Stoff erfüllen, werden gesondert veröffentlicht. Damit wird auch erreicht, dass Gemische, die solche Stoffe enthalten, nicht inadäquat eingestuft werden, wenn die aufschwimmenden Eigenschaften des Stoffes im Gemisch nicht zum Tragen kommen.

4. Einschränkung zu nwg-Einstufungen

Ein die nwg-Kriterien erfüllender Stoff ist in die WGK 1 einzustufen, wenn aus dem Stoff durch leichte biologische oder abiotische Abbaubarkeit ein Stoff der WGK 2 oder 3 entsteht.

5. Schwer wasserlösliche Stoffe

Die Vorgehensweise bei der Bewertung von Untersuchungsergebnissen zur aquatischen Toxizität, die mit schwer wasserlöslichen Stoffen durchgeführt wurden, wird in dem Anhang „Bewertung schwer wasserlöslicher Stoffe für die Einstufung in Wassergefährdungsklassen“ ausführlich beschrieben.

6. Gase

Für Gase, zu denen keine Daten zur Toxikologie (oral, dermal) und Ökotoxikologie vorliegen, kann die Einstufung in eine WGK gemäß der VwVwS zu einem unverhältnismäßigen Ergebnis führen. Die Einstufung der Gase kann daher im Einzelfall nach der folgenden Verfahrensweise (siehe Fließschema) erfolgen.

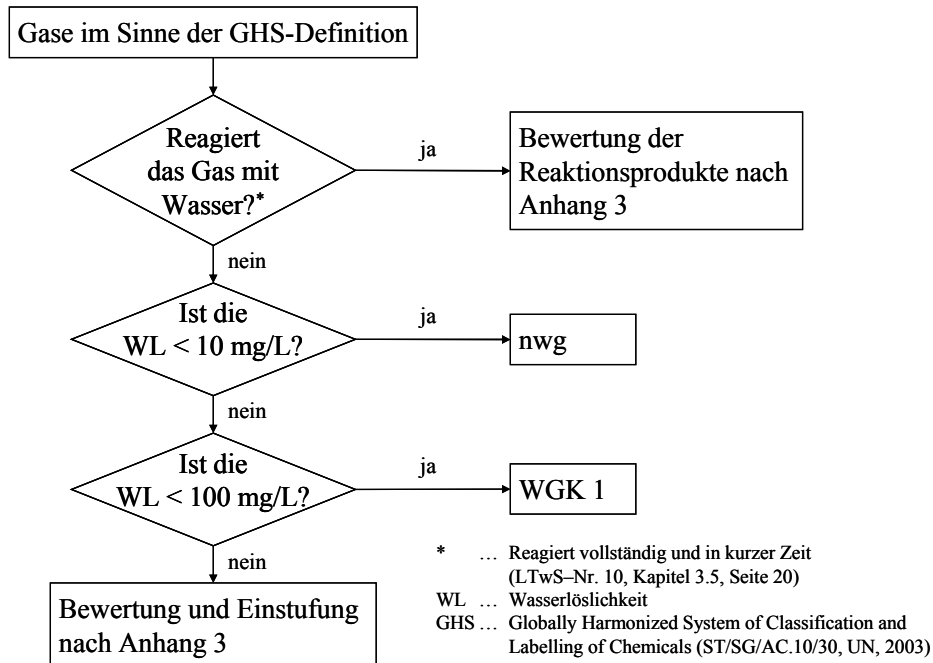
Grundvoraussetzungen für die Anwendung des Verfahrens sind:

- Wasserlöslichkeit $< 100 \text{ mg/l}$
- der Stoff reagiert nicht mit Wasser
- es sind keine toxikologischen/ökotoxikologischen Wirkungen über die Gasphase zu erwarten (gilt nur als Hinweis zur weiterführenden toxikologischen/ökotoxikologischen

¹ JOINT GROUP OF EXPERTS ON THE SCIENTIFIC ASPECTS OF MARINE ENVIRONMENTAL PROTECTION (GESAMP) Reports and Studies No. 64, IMO London, 2002

Betrachtung, z.B. Abschätzung von toxikologischen Eigenschaften aus der Struktur des Stoffes).

Bei Gasen mit einer **Wasserlöslichkeit ≥ 100 mg/l** ist davon auszugehen, dass der Antragsteller unter vertretbarem Aufwand Daten zur Ökotoxikologie ermitteln kann. Liegen die Daten nicht vor, können entsprechend der VwVwS Vorgabepunkte für die Einstufung herangezogen werden. Die Vergabe von Vorgabepunkten für die Säugertoxizität erfolgt im Einzelfall.



7. Stoffgruppen

Stoffe können aufgrund ihrer gemeinsamen Funktions-, Wirk- oder Strukturmerkmale in Stoffgruppen zusammengefasst und als solche eingestuft werden. Bei der Einstufung neuer Gruppen ist die verfügbare Datenbasis für alle Komponenten der Gruppe anzugeben. Einer bestehenden Gruppe können neue Komponenten zugeordnet werden.

8. EU-Legaleinstufungen

Grundsätzlich werden die bewertungsrelevanten Gefahrenhinweise bzw. R-Sätze von EU-Legaleinstufungen für die Einstufung in WGK übernommen. Die KBwS kann hiervon abweichen, wenn die durch den Gefahrenhinweis bzw. R-Satz beschriebene Wirkung über den Wasserpfad nicht oder nur in geringem Maße zum Tragen kommt.

Bei der Einstufung als **umweltgefährdend** ist für **Einzelstoffe** generell keine abweichende WGK-Einstufung möglich, weil sich das Gefährdungspotenzial direkt auf den Wasserpfad bezieht. Für Stoffe, die einer **EU-Gruppeneinstufung** angehören, ist eine abweichende WGK-Einstufung unter Erfüllung bestimmter Bedingungen möglich:

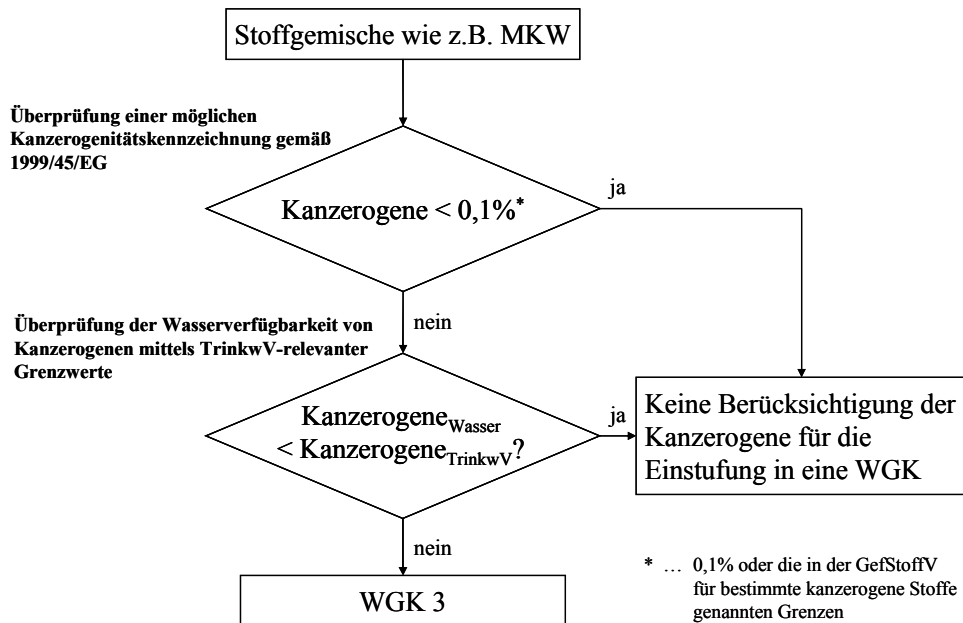
- es ist die aquatische Toxizität und die untersuchte Komponente der Gruppe bekannt, die zu der Klassifizierung durch das ECB geführt hat,
- die Wasserlöslichkeit des abweichend einzustufenden Stoffes liegt deutlich unterhalb des Wirkwerts, der zur Gruppeneinstufung geführt hat, oder es liegen alle akuten Toxizitätstests zu Fisch, Daphnia und Alge vor und diese weichen signifikant von den Daten ab, die das ECB als Einstufungsgrundlage für die Gruppe heranzog.
- der einzustufende Stoff ist nicht explizit im Anhang VI Teil 3 der Verordnung (EG) 1272/2008 (vormals Anhang 1 der Richtlinie 67/548/EWG) genannt.

9. R-Satz Einstufung

- 9.1 Die R-Sätze aus Sekundärliteratur (z.B. Aldrich- oder Merck-Katalog) bedürfen einer Überprüfung. Gibt es Unstimmigkeiten zwischen den Toxizitätsdaten und den R-Satz-Einstufungen (z.B. Überkennzeichnung), muss die Grundlage für die Einstufung dokumentiert werden.
- 9.2 Der R65 wird für die Ableitung einer WGK nur berücksichtigt, wenn es sich bei dem einzustufenden Stoff um einen Floater handelt. Zur Identifizierung dieser Stoffe werden die GESAMP¹-Kriterien für Floater (F) herangezogen. Es gelten damit folgende Kriterien:
- Dichte \leq Süßwasser (1000 kg/m^3 bei 20°C) **und**
 - Dampfdruck $\leq 0,3 \text{ kPa}$ (20°C) **und**
 - Wasserlöslichkeit $\leq 1 \text{ g/l}$ (für flüssige Stoffe bei 20°C)
- Eine zusätzliche Entlastung der Stoffe hinsichtlich der Flüchtigkeit ist nicht erforderlich.

10. CMR-Eigenschaften

- 10.1 Die Einstufung eines Stoffes als krebserzeugend (Kennzeichnung mit H 350 bzw. R 45 oder Nennung in TRGS 905) bedingt in jedem Fall die Vergabe von 9 Punkten. Abweichend hiervon können Stoffe aufgrund der nicht gegebenen Verfügbarkeit über den Wasserpfad z.B. bei nachweislicher Ausgasung oder Abbau innerhalb von 1-2 Tagen durch die KBwS in eine niedrigere WGK eingestuft werden.
- 10.2 Falls der Trinkwassergrenzwert nicht geeignet ist, um die Verfügbarkeit eines cmr-Stoffes nach der S4-Elution (DIN 38414, Teil 4) zu beurteilen, kann alternativ der prozentuale Gehalt der gelösten Substanz in Bezug auf die Gesamtlöslichkeit im Eluat herangezogen werden. Der Anteil darf 0,1 % oder die in Anhang VI Teil 3 der Verordnung (EG) 1272/2008 genannte Grenze nicht übersteigen.
- 10.3 Bei bestimmten Stoffen (z.B. Mineralölprodukten) kann die kanzerogene Wirkung allein auf **polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe** (PAH) zurückgeführt werden. Wenn nachgewiesen wird, dass die PAH wenig verfügbar sind, muss der bewertungsrelevante H 350 bzw. R45 für die Einstufung in eine WGK nicht berücksichtigt werden.
- Zur Beurteilung der verringerten Verfügbarkeit im aquatischen Bereich sind Elutionsversuche durchzuführen (LTwS-Nr. 10). Liegen die PAH-Gehalte in den entsprechenden Eluaten unter den folgenden PAH-Grenzwerten der Trinkwasserverordnung (TrinkwV 2001):
- $0,1 \text{ }\mu\text{g/L}$ Summe der 4 PAH (Benzo-(b)-fluoranthen, Benzo-(k)-fluoranthen, Benzo-(ghi)-perylen, Indeno-(1,2,3-cd)-pyren)
 - $0,01 \text{ }\mu\text{g/L}$ Benzo-(a)-pyren,
- kann grundsätzlich von einer verringerten Verfügbarkeit der PAH ausgegangen werden.
- 10.4 Für die Ableitung einer WGK für Stoffgemische wie z.B. Mineralölkohlenwasserstoffe ist zuerst die Kennzeichnung gemäß der Zubereitungsrichtlinie 1999/45/EG hinsichtlich der Kanzerogenität maßgebend. Bei einer Überschreitung der kennzeichnungsrelevanten Grenzwerte für kanzerogene Stoffe in Gemischen ist es möglich, mittels der Grenzwerte der TrinkwV eine eventuell nicht gegebene Wasserverfügbarkeit dieser Kanzerogene nachzuweisen. Die Kanzerogenität dieser Bestandteile könnte damit für die WGK-Bewertung des Gemisches irrelevant werden (escape clause)



11. Analogieeinstufungen

Eine WGK-Einstufung auf der Grundlage von analogen Stoffbewertungen ist in der VwVwS nicht vorgesehen. Aus Tierschutzgründen ist es aber geboten, experimentelle Untersuchungen an Versuchstieren auf ein notwendiges Minimum zu beschränken. Daher lässt die KBwS im Einzelfall bei einer oder mehreren Stoffeigenschaften Analogieschlüsse für die Einstufung in eine WGK zu.

Bis auf die unten genannten Fälle sind alle Analogiebewertungen (z.B. für Isomere, auch Stereoisomere, oder für Homologe) Einzelfallentscheidungen, die die KBwS in Abhängigkeit von der Gesamtdatenlage, dem Wirkspektrum bzw. Wirkmechanismus des Stoffes und unter Berücksichtigung der REACH-Prinzipien zu Analogiebetrachtungen wie z.B. „QSAR“ und „read-across“ und der zugehörigen REACH/OECD-Background-Dokumente trifft.

11.1 Analogieeinstufungen nach Nr. 3 der VwVwS sind ohne KBwS-Beschluss nur zulässig für:

a) Ionische Verbindungen unter der Voraussetzung, dass Anion und Kation jeweils in anderen Verbindungen bereits eingestuft sind. Es gilt die höhere WGK der beiden Referenzsubstanzen. Die Wasserlöslichkeiten der Referenzsubstanzen dürfen nicht wesentlich unter der einzustufenden Verbindung liegen. Eine Extrapolation von Säure/ Base zum Salz ist unter Berücksichtigung der Wasserlöslichkeit statthaft, umgekehrt jedoch nicht (Bsp. Phenolat analog Phenol, aber nicht Phenol analog zu Phenolat)

b) Stoffe, die sich schnell und vollständig umwandeln (insbesondere durch Hydrolyse), unter der Voraussetzung, dass die Halbwertszeit bei Umweltbedingungen (ermittelt z.B. nach OECD 111) weniger als 4 Stunden beträgt und die Umwandlungsprodukte eingestuft sind. Auch hier gilt die höhere Wassergefährdungsklasse.

11.2 **Hydratisierte Salze** sind in der Regel in dieselbe Wassergefährdungsklasse wie die wasserfreien Salze einzustufen. Falls durch Daten oder stöchiometrische Rechnung nachgewiesen wird, dass eine andere Einstufung gerechtfertigt ist, kann diese angewendet werden. Unterschiedliche Wasserlöslichkeiten sind ggf. zu berücksichtigen.

11.3 **Polymere** können im Einzelfall auf Basis der Daten für die Monomere eingestuft werden. Hierfür muss der Antragsteller den kompletten Basisdatensatz und alle zusätzlichen WGK-relevanten Daten für jedes Monomer vorlegen, die Vergleichbarkeit der Monomere mit dem Polymer schlüssig darlegen und die Strukturformeln für das Polymer und die Monomere angeben.

12. Stoffgemische

- 12.1 Bei Stoffgemischen ist das negative Ergebnis eines **Abbautests** aussagekräftig. Ein positives Ergebnis muss verifiziert werden, um auszuschließen, dass nur die leichter abbaubaren Anteile des Stoffgemisches erfasst werden.
Multikomponentenstoffe, die aus einem signifikanten Teil von nicht leicht abbaubaren Substanzen bestehen, sind als nicht leicht abbaubar zu betrachten.
- 12.2 Zubereitungen aus Mineralölprodukten, bei denen es sich um **emulgierte Öle** handelt, können grundsätzlich nicht als nwg eingestuft werden.
- 12.3 Als **Dispergator** wird ein Stoff verstanden, der eine (unter Standardbedingungen) stabile Dispersion eines ansonsten unlöslichen Stoffes in Wasser bewirkt.
- 12.4 Die Einstufung von **ionischen Mischkristallen** erfolgt nach Anhang 3, VwVwS, wenn ein entsprechender CAS/EINECS-Eintrag existiert.
Liegt kein CAS/EINECS-Eintrag vor, werden Mischkristalle analog zum Anhang 4 VwVwS („worst case“) eingestuft.
Eine hiervon abweichende Einstufung durch die KBwS ist möglich, wenn ein Antragsteller entsprechende Löslichkeitsversuche (Vergleich der Ionenlöslichkeitskonzentration mit ökotoxikologischen Daten) und die dazugehörigen Transformation/Dissolution-Protokolle vorlegt.
- 12.5 Von der strikten Anwendung des Wasserlöslichkeitskriteriums (nach Buchstabe b, Nr. 5, Anhang 3, VwVwS) kann für feste Multikomponentenstoffe abgewichen werden, wenn
- a) der Stoff nach S4-Elution (DIN 38414, Teil 4) alle anderen Kriterien für einen nicht wassergefährdenden Stoff in Nr. 5, Anhang 3, VwVwS erfüllt **und**
 - b) für den Stoff nach 3 S4-Elutionen Wasserlöslichkeiten von kleiner 100 mg/L ermittelt werden (deutliches Abklingverhalten) **und**
 - c) die durch die mehrfache Elution herausgelösten Stoffe bei konservativer Betrachtung lediglich Gesamtgehalte im Wasser erreichen, die nach der Mischungsregel (Anhang 4, VwVwS) keine WGK 1 erfordern.

13. Altöle

In der Verwaltungsvorschrift wassergefährdende Stoffe (VwVwS) wird mit der Fußnote 9) zur **Kenn-Nr. 438** darauf hingewiesen, dass im Einzelfall Altöle, deren Zusammensetzung durch Herkunft und Gebrauch oder durch Analyse bekannt ist, einer WGK < 3 zugeordnet werden können.

Altöle aus Verbrennungsmotoren oder aus Anlagen, in denen hohe Temperaturen auftreten können, fallen nicht unter diese Ausnahmeregelung, da der Gehalt an PAH bei diesen Altölen in der Regel relativ hoch ist.

Für andere gebrauchte Öle wurden bisher folgende Voraussetzungen für die Einstufung in eine WGK < 3 definiert:

- Angabe der genauen chemischen Zusammensetzung des Frischöls (einschließlich Additivierung),
- Verfahrensbeschreibung (Betriebszeit, Betriebstemperatur, anlageninterne Aufarbeitung),
- Analyse von PAH oder Benzo(a)pyren, Bestimmung gemäß GefStoffV über DMSO-Extrakt mit der IP 346 Methode,
- ggfs. Analyse von PCB (z.B. nach Ballschmiter/Zell, falls chlorhaltige Komponenten enthalten sind),
- Gehalt an Metallen (durch Zusatz oder Abrieb).

Bei der Beurteilung der Angaben werden von der KBwS folgende Kriterien herangezogen:

1. Für die zugegebenen Additive und den Gehalt an Metallen, die z.B. durch Abrieb entstehen können, gelten die nach der Mischungsregel gemäß Anhang 4 zur VwVwS aufgestellten Grenzwerte.

2. Für PAH und Benzo(a)pyren gelten die in der GefStoffV festgelegten Grenzwerte ggf. unter Berücksichtigung des Gehaltes im DMSO-Extrakt.

3. Für PCB-haltige Zubereitungen werden in Anlehnung an die GefStoffV, die ein Verbot für Zubereitungen mit mehr als 50 ppm PCB vorsieht, unter Berücksichtigung der Übergangsregelungen folgende von der Mischungsregel abweichenden Einstufungsregeln aufgestellt:

- > 2000 ppm erfolgt die Einstufung in die WGK 3,
- >50 bis 2000 ppm kann die Zubereitung in die WGK 2 eingestuft werden, soweit sich nicht aufgrund anderer Komponenten die WGK 3 ergibt.

Diese Bedingungen können unter anderem von Hydraulik- oder Isolierölen eingehalten werden.

Wenn sichergestellt werden kann, dass die gehandhabten Altöle die vorgenannten Bedingungen erfüllen, können diese in eigener Verantwortung einer WGK < 3 zugeordnet werden. Die eigenverantwortliche Einstufung geschieht in Übereinstimmung mit der Verwaltungsvorschrift wassergefährdende Stoffe in Anlehnung an das in Anhang 4 beschriebene Vorgehen für Gemische.

14. Polymerdispersionen

Sind in Polymerdispersionen Stoffe enthalten, die nicht unter der **Kenn-Nr. 662** aufgeführt sind, und/oder werden die dort genannten Gehalte überschritten, so ist die Mischungsregel anzuwenden. Dabei wird die Polymerdispersion mit WGK 1 angesetzt; bei Überschreitungen der festgelegten Gehalte, ist die tatsächliche Konzentration des Stoffes in der Mischungsregel anzusetzen (nicht der Unterschied zwischen tatsächlichem und in 662 genanntem Gehalt).

15. Datenblätter

Die Datenblattsammlung „Dokumentation wassergefährdender Stoffe“ wird seit in Kraft treten der VwVwS von 1999 nicht mehr fortgeschrieben.

ANHANG:

Bewertung schwer wasserlöslicher Stoffe für die Einstufung in Wassergefährdungsklassen

Bewertung schwer wasserlöslicher Stoffe⁽¹⁾

Basis für die ökotoxikologische Bewertung von schwer wasserlöslichen Stoffen

Basis für die ökotoxikologische Bewertung von schwer wasserlöslichen Stoffen sind experimentelle Prüfdaten gemäß WAF-Konzept (Water Accomodated Fraction), d.h. Untersuchungen mit der Substanz-gesättigten Wasserphase nach Abtrennung der eventuell vorhandenen organischen Phase. Die Substanzsättigung der Wasserphase wird dadurch erreicht, dass ein Überschuss der Testsubstanz (i.d.R. 100 mg/l) in das Testmedium eingebracht und mit diesem ausreichend lang (z.B. für 24 Stunden) unter langsamem Rühren äquilibriert wird. Anschließend wird die Wasserphase durch geeignete Verfahren von ungelösten organischen Anteilen befreit (z.B. durch dekantieren, filtrieren oder zentrifugieren). Die Einhaltung der Sättigungskonzentration während der folgenden biologischen Untersuchungen ist durch geeignete Analysemethoden zu kontrollieren. Ggf. ist der geometrische Mittelwert von Anfangs- und Endkonzentration als Bezugsgröße heranzuziehen.

Interpretation der Ergebnisse

Generell ist zwischen drei Fällen zu unterscheiden: WAF-Prüfungen in denen keine toxischen Wirkungen aufgetreten sind, WAF-Prüfungen in denen toxische Wirkungen aufgetreten sind, sowie Prüfungen oberhalb der Wasserlöslichkeit ohne Abtrennung der ungelösten Anteile.

Fall 1 (WAF-Untersuchungen bei denen keine Toxizität beobachtet wurde)

Wenn von der Substanz-gesättigten Lösung keine toxischen Effekte ausgehen, erfolgt die regulatorische Bewertung unter Bezug auf die eingebrachte Substanzmengen (Loading), i.d.R. 100 mg/l. Die entsprechende Angabe in den Prüfberichten ist $LL/EL_0 = 100 \text{ mg/l}$ bzw. $LL/EL_{50} > 100 \text{ mg/l}^{(2)}$. Parallel dazu wird in den Prüfberichten routinemäßig auch ein Bezug zu der analytisch bestimmten Stoffkonzentration in der betrachteten Testlösung angegeben. Da es sich hierbei um tatsächlich bestimmte Konzentrationen handelt, ist die entsprechende Angabe $LC/EC_0 \geq xy \text{ mg/l}^{(3)}$ bzw. keine Toxizität im Bereich der Wasserlöslichkeit. Für die Bewertung der akuten Giftigkeit der Testsubstanz sind die LC/EC_0 -Werte allerdings irrelevant, da ihre Größe nicht von der strukturbedingten Toxizität der Stoffe abhängt, sondern nur von der Wasserlöslichkeit der Stoffe. Regulatorische Bedeutung kommt den LC/EC_0 -Werten dagegen für die Abschätzung der Langzeittoxizität

⁽¹⁾ Stoffe gelten im Zusammenhang mit ihrer ökotoxikologischen Bewertung als schwer wasserlöslich, wenn ihre Löslichkeit bei 20°C weniger als 100 mg/l beträgt (100 mg/l ist der von der OECD definierte Grenzwert für schwer wasserlösliche Stoffe, eine Differenzierung zwischen festen und flüssigen Stoffen macht hier wenig Sinn).

⁽²⁾ LL_{50} = Lethal Loading (Nominalkonzentration), bei der 50 % der Testorganismen sterben; EL_{50} = Effect Loading (Nominalkonzentration), bei der 50 % der Testorganismen toxische Wirkungen zeigen.

⁽³⁾ LC_0 = Lethal Concentration (analytisch verifizierte Stoffkonzentration), bei der 0 % der Testorganismen sterben; EC_0 = Effect Concentration (analytisch verifizierte Stoffkonzentration), bei der 0 % der Testorganismen toxische Wirkungen zeigen

zu, wie sie im Rahmen einer Umweltrisikobewertung benötigt wird (die LC/EC₀-Werte können in erster Näherung zur Ableitung der PNEC⁽⁴⁾ herangezogen werden).

Für die Ermittlung der Bewertungspunkte gemäß VwVwS 1999 gilt folgender Zusammenhang:

Effektschwelle	Bewertung	Bewertungspunkte
LL/EL ₀ ≥ 100 mg/l	nicht schädlich für Wasserorganismen	0 ⁽⁶⁾ oder 3
LL/EL ₀ ≥ 10 mg/l ⁽⁵⁾	nicht giftig für Wasserorganismen	0 ⁽⁷⁾ oder 4
LL/EL ₀ ≥ 1 mg/l ⁽⁵⁾	nicht sehr giftig für Wasserorganismen	0 ⁽⁸⁾ oder 6
LL/EL ₀ < 1 mg/l ⁽⁵⁾	möglicherweise nicht sehr giftig für Wasserorganismen	6 ⁽⁸⁾ oder 8

Fall 2 (WAF-Untersuchungen, bei denen Toxizität beobachtet wurde)

Wenn von der Substanz-gesättigten Lösung einer WAF von 100 mg/l signifikante toxische Wirkungen ausgehen (signifikant > 10 % Unterschied zu den Kontrollgruppen), sind weitere Untersuchungen erforderlich, um zu einer realistischen Einschätzung der Wirkwerte zu gelangen. Vorausgesetzt, dass eine substanzspezifische Analytik zur Verfügung steht, können für (ideale) Reinstoffe (s.u.) die LC/EC₅₀-Werte durch Prüfung von abgestuften Verdünnungen einer "WAF-Stammlösung" von 100 mg/l ermittelt werden⁽⁹⁾. Für die Ermittlung der Bewertungspunkte gemäß VwVwS 1999 gilt dann folgender Zusammenhang:

Effektwerte	Bewertung	Bewertungspunkte
LC/EC ₅₀ > 100 mg/l	nicht schädlich für Wasserorganismen	0 ⁽⁶⁾ oder 3
10 mg/l < LC/EC ₅₀ ≤ 100 mg/l	schädlich für Wasserorganismen	0 ⁽⁷⁾ oder 4
1 mg/l < LC/EC ₅₀ ≤ 10 mg/l	giftig für Wasserorganismen	0 ⁽⁸⁾ oder 6
LC/EC ₅₀ ≤ 1 mg/l	sehr giftig für Wasserorganismen	6 ⁽⁸⁾ oder 8

⁽⁴⁾ PNEC = Predicted No Effect Concentration

⁽⁵⁾ Die Bewertung und die entsprechende Zuordnung der Bewertungspunkte erfolgt aufgrund des im Wasserhaushaltsgesetz verankerten Besorgnisgrundsatzes auf der Basis der eingesetzten Substanzmenge und kann durch Untersuchungen mit einer höheren Substanzmenge (z.B. einem Loading von 10 oder 100 mg/l) verbessert werden. Im Einzelfall, insbesondere bei Fest- oder Reinstoffen, kann es gute fachliche Argumente geben, auf weitergehende Prüfungen zu verzichten.

⁽⁶⁾ Falls der Stoff biologisch leicht oder inhärent abbaubar ist oder kein Bioakkumulationspotential besitzt

⁽⁷⁾ Falls der Stoff biologisch leicht oder inhärent abbaubar ist

⁽⁸⁾ Falls der Stoff biologisch leicht abbaubar ist und kein Bioakkumulationspotential besitzt

⁽⁹⁾ Ist die analytisch bestimmte Stoffkonzentration in der LL/EL₅₀ größer als die per OECD 105 Methode experimentell bestimmte oder als die per QSAR berechnete Wasserlöslichkeit, ist dies ein Hinweis auf die Bildung von "nicht-physikalischen" Lösungen, z.B. von Mikroemulsionen. Obwohl wissenschaftlich betrachtet signifikante Unterschiede im Verhalten und ggf. der Toxizität von physikalisch gelösten Anteilen und ungelösten Anteilen der Testsubstanz bestehen (z. B. im Hinblick auf das Permeationsverhalten), ist es schwierig dies regulatorisch zu berücksichtigen. Ohne weitergehende Informationen zur unterschiedlichen toxikologischen Relevanz werden daher die experimentell ermittelten LC/EC₅₀-Werte zur Ableitung der Einstufung herangezogen.

Steht keine substanz-spezifische Analytik zur Verfügung, verbietet sich die Verdünnungsmethode. Stattdessen müssen separat hergestellte WAFs verschiedener Einwaagen auf toxische Effekte untersucht werden, wie es im folgenden für "Nicht-Reinstoffe" beschrieben ist.

Gibt es Hinweise darauf, dass es sich bei dem untersuchten Stoff nicht um einen Reinstoff handelt, sondern dass der Stoff neben der Hauptkomponente noch Nebenkomponenten und/oder Verunreinigungen enthält oder es sich um ein Gemisch handelt, ist daran zu denken, dass die beobachtete Toxizität nicht von dem Stoff selbst, sondern von toxischen Nebenkomponenten/Verunreinigungen hervorgerufen wird.

In diesem Fall müssen entsprechende Untersuchungen mit WAFs aus stufenweise verringerter Beladungsmenge (Loadings) durchgeführt werden (z. B. 30 mg/l, 10 mg/l, 3 mg/l, 1 mg/l), um den LL/EL₅₀-Wert zu ermitteln.

Die regulatorische Bewertung erfolgt unter Bezug auf die eingebrachte Substanzmenge, die 50 % Effekt bewirkt. Als Beispiel ist im Prüfbericht als Ergebnis eine LL/EL₅₀ = 3 mg/l ausgewiesen. Für die Ableitung der Umweltkennzeichnung ist in diesem Beispiel 3 mg/l als Toxizitätsgrenzwert heranzuziehen. Der Stoff ist demnach als toxisch für Wasserorganismen bzw. unter GHS als Klasse Akut 2 zu bewerten (streng genommen betrifft diese Bewertung nicht den Stoff als solchen, sondern den Stoff in der geprüften Qualität, d.h. mit den vorhandenen Nebenkomponenten/Verunreinigungen). Daraus ergibt sich das folgende Bewertungsschema für schwer wasserlösliche Stoffe, die anhand differenziert hergestellter WAFs geprüft worden sind:

Effektwerte	Bewertung	Bewertungspunkte
LL/EL ₅₀ > 100 mg/l	nicht schädlich für Wasserorganismen	0 ⁽⁶⁾ oder 3
10 mg/l < LL/EL ₅₀ ≤ 100 mg/l	schädlich für Wasserorganismen	0 ⁽⁷⁾ oder 4
1 mg/l < LL/EL ₅₀ ≤ 10 mg/l	giftig für Wasserorganismen	0 ⁽⁸⁾ oder 6
LL/EL ₅₀ ≤ 1 mg/l	sehr giftig für Wasserorganismen	6 ⁽⁸⁾ oder 8

Fall 3 (Prüfungen oberhalb der Wasserlöslichkeit ohne Abtrennung der ungelösten Anteile)

Dieser Fall betrifft i.d.R. ältere Prüfungen, die bereits vor Etablierung des WAF-Konzepts Mitte der 1990er Jahre durchgeführt wurden. Die regulatorische Bewertung solcher Prüfergebnisse erfolgt unter Bezug auf die höchste eingebrachte Substanzmenge (Loading), von der keine toxischen Effekte im Vergleich zur Kontrolle ausgehen (LL/EL₀-Wert), unabhängig von der Frage, ob die Substanz gelöst vorlag oder nicht. Die Bewertung der Ergebnisse erfolgt nach folgendem Schema:

Effektwerte	Bewertung	Bewertungspunkte
LL/EL ₀ > 100 mg/l	nicht schädlich für Wasserorganismen	0 ⁽⁶⁾ oder 3
10 mg/l < LL/EL ₀ ≤ 100 mg/l	schädlich für Wasserorganismen	0 ⁽⁷⁾ oder 4
1 mg/l < LL/EL ₀ ≤ 10 mg/l	giftig für Wasserorganismen	0 ⁽⁸⁾ oder 6
LL/EL ₀ ≤ 1 mg/l	sehr giftig für Wasserorganismen	6 ⁽⁸⁾ oder 8

Wurden bei allen getesteten Konzentrationen toxische Effekte beobachtet, ist die Untersuchung für eine regulatorische Bewertung ungeeignet. In diesem Fall muss die

Prüfung mit niedrigeren Testsubstanzkonzentrationen wiederholt werden bzw. es ist so zu verfahren, als wenn für den entsprechenden Endpunkt kein Datum vorliegt.

Referenzen:

1. OECD SERIES ON TESTING AND ASSESSMENT Number 23: GUIDANCE DOCUMENT ON AQUATIC TOXICITY TESTING OF DIFFICULT SUBSTANCES AND MIXTURES (ENV/JM/MONO(2000)6)
2. Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin: Leitfaden für Meldungen neuer Stoffe nach dem Chemikaliengesetz, Sechste überarbeitete Auflage
3. ECETOC Monograph No. 26: Aquatic Toxicity Testing of Sparingly Soluble, Volatile and Unstable Substances, September 1996 (ISSN-0773-6047-26)