

# STOFF-IDENT: Sammlung gewässerrelevanter Stoffe

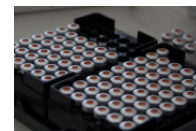
ANNE BAYER, MARCO LUTHARDT, WOLFGANG SCHULZ, THOMAS LETZEL, MANFRED SENGL, MARION LETZEL

Bayerisches Landesamt für Umwelt, Bürgermeister-Ulrich-Str. 160, 86179 Augsburg, anne.bayer@lfu.bayern.de



STOFF-IDENT ist eine Datenbank gewässerrelevanter Stoffe zur Unterstützung der Suspected- und Non-Target Analytik.

- Welche Stoffe sind in Wasserproben relevant (z.B. im Kläranlagenablauf, Uferfiltrat, Fließgewässer, See, Trinkwasser, ...)?
- Woher kommen die benötigten Daten?



## REACH

- Stoffe, die bis 1.12.2010 registriert werden mussten: >1000 t/Jahr, R50/53 >100 t/Jahr, CMR (Category 1+2) ≥1 t/a
- bis 1.06.2013: Stoffe >100 t/Jahr
- bis 1.06.2018: 1- 100 t/Jahr
- Dez 2010: 2992 Registrierungen, Dez. 2013: 11 766 Registrierungen
- bearbeitet, d.h. Anorganik und Stoffgemische manuell entfernt
- gesamt: ca. 4350 Stoffe



## Humane Arzneimittel

- 3008 Arzneimittel beim UBA registriert
- nur small molecules, ohne natürliche Stoffe, Hömöopathie, Vitamine, Antikörper, Pflanzen ect. (bearbeitet von S. Berkner, UBA): 1517
- Stoffe mit CAS-Nummern: 440
- manuelles Einfügen der restlichen CAS-Nummern
- gesamt: ca. 1500 humane Arzneimittelwirkstoffe (HAM)



## Pflanzenschutzmittel und -metabolite

- in Deutschland 2014 zugelassen (Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit)
- PSM und ihre nicht grundwasserrelevanten PSM-Metabolite: 50 Stoffe, teilweise mit CAS, SMILES-Code
- Reemtsma et al. 2013: Metabolite aus Grund- und Oberflächenwasser: 105 Stoffe, teilweise mit CAS, Summenformel



## Biozide

- zugelassene Biozide (EU), Altwirkstoffe: Commission Regulation (EC) Nr. 1451/2007 (Anhang I): 583 Stoffe mit CAS (bearbeitet: Gemische, Anorganik, Mikro-organismen, natürliche Öle & Extrakte entfernt)
- zu prüfende Wirkstoffe (Anhang II): 234 Stoffe mit CAS, Überschneidung mit Anhang I, bearbeitet
- Aufnahme in Anhang I der Biozid-Richtlinie 98/8/EG: 63 Stoffe mit CAS, bearbeitet



## Weitere Stoffe (Auswahl)

### Persistente und bioakkumulative Chemikalien, ihre Verunreinigungen und Transformationsprodukte (TP):

- Howard & Muir 2010: 610 Stoffe, CAS (teilweise), SMILES, kein Name
- Howard & Muir 2013: 320 Stoffe, CAS (teilweise), SMILES
- Field et al. 1994: secondary alkane sulfonates

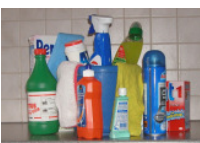
### TP von Arzneimitteln:

- TP der Sartane aus dem Projekt RISK-IDENT
- TP aus Batch-Versuchen: Li et al. 2014: 14 Stoffe mit SMILES
- TP aus Batch-Versuchen: Kern et al. 2010



### Abwasserbürtige Stoffe:

- Drewes et al. 2008: 61 Stoffe mit CAS, logP, logD (pH 7)



### Stoffsammlung aus Analytik-Laboren:

- Zweckverband Landeswasserversorgung Langenau: 2665 Stoffe aus GC- & LC-MS-Messungen mit Name und CAS
- Forensik Innsbruck (Oberacher 2011): 1207 Stoffe aus LC-MS-Messungen mit Name, CAS, Summenformel
- Zytostatika: Gómez-Canela et al. 2013

### Illegale Drogen und TP: 17 Stoffe mit SMILES, teilweise CAS

- Frost & Griffiths 2008 "EMCDDA INSIGHTS: Assessing illicit drugs in wastewater"
- EMFDDA Selected issue 2010 "Problem Amphetamine and Methamphetamine use in Europe"

## Zusammenfassung

Was	Woher	Anzahl	Von wann
REACH	ECHA	ca. 4350	bis Dez 2013
Arzneimittel	UBA	ca. 1500	2009
PSM & PSM-TP	Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit, Reemtsma et al. 2013	ca. 400	2014 in D zugelassen
Biozide	Commission Regulation (EC) Anhang I & II	ca. 300	2007
Weitere schon nachgewiesene Stoffe & TP	Zweckverband Landeswasserversorgung (LW) Fachpublikationen	2665	Feb 2014
	NORMAN: Candidates, List of Emerging Pollutants	ca. 1000	
	Forensik Innsbruck (Oberacher 2011)	ca. 870	2013
Gesamt (teilweise mit Überschneidungen)		1207	2011
		ca. 10 000	

## Was fehlt noch?

Wir sind über weitere Einzelstoffe, die Sie gemessen haben oder Stofflisten, die Ihnen zur Verfügung stehen, dankbar und würden uns sehr freuen, wenn Sie uns diese bereitstellen können. Wir werden die Daten in STOFF-IDENT einfügen und selbstverständlich die Quelle zitieren.