

TEXTE

174/2024

Befundstoffe in Wasserres- ourcen: Priorisierung und Empfehlungen zur Durchfüh- rung eines „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309

von:

Karsten Nödler
TZW: DVGW-Technologiezentrum Wasser, Karlsruhe

Michael Neumann
Umweltbundesamt, Dessau

Herausgeber:
Umweltbundesamt

TEXTE 174/2024

Projektnummer 179154

FB001691

Befundstoffe in Wasserressourcen: Priorisierung und Empfehlungen zur Durchführung eines „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309

von

Karsten Nödler

TZW: DVGW-Technologiezentrum Wasser, Karlsruhe

Michael Neumann

Umweltbundesamt, Dessau

Im Auftrag des Umweltbundesamtes

Impressum

Herausgeber

Umweltbundesamt
Wörlitzer Platz 1
06844 Dessau-Roßlau
Tel: +49 340-2103-0
Fax: +49 340-2103-2285
buergerservice@uba.de
Internet: www.umweltbundesamt.de

Durchführung der Studie:

TZW: DVGW-Technologiezentrum Wasser
Karlsruher Straße 84
76139 Karlsruhe

Abschlussdatum:

Oktober 2024

Redaktion:

Fachgebiet IV 2.3 Chemikalien
Michael Neumann

DOI:

<https://doi.org/10.60810/openumwelt-7672>

ISSN 1862-4804

Dessau-Roßlau, Dezember 2024

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autorinnen*Autoren.

Kurzbeschreibung: Befundstoffe in Wasserressourcen: Priorisierung und Empfehlungen zur Durchführung eines „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309

Auf die Gefährdung der Trinkwasserressourcen durch persistente und mobile Stoffe wird seit Jahrzehnten hingewiesen. Für Wasserversorgungsunternehmen (WVU), Überwachungs- und Regelungsbehörden ist es essenziell zu wissen, ob die in den Wasserressourcen detektierten Chemikalien persistent sind und somit gegebenenfalls eine Bedrohung für die Trinkwassergewinnung darstellen. Durch den Verzicht auf eine ¹⁴C-Markierung der Testsubstanz (sog. „kalter“ Abbautest) kann für Befundstoffe in den eigenen Wasserressourcen ein valider Abbautest nach OECD TG 309 auch von WVU und Behörden mit entsprechender Laborinfrastruktur und etablierter Analytik einfach, kostengünstig und effizient durchgeführt werden.

Das erste Ziel des vorliegenden Sachverständigengutachtens war es Kriterien zu definieren, bei deren Erfüllung eine Testsubstanz geeignet für einen "kalten" Abbautest nach OECD TG 309 ist. Das zweite Ziel war die Beurteilung bekannter Befundstoffe in Wasserressourcen hinsichtlich ihrer intrinsischen Eignung für einen solchen Abbautest. In diesem Sachverständigengutachten wurde also beurteilt, ob ein Befundstoff vermutlich für einen „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309 geeignet ist, jedoch nicht, ob dieser Test wissenschaftlich oder regulatorisch für diesen Befundstoff notwendig ist.

Die Liste mit 832, für einen „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309 priorisierten, Befundstoffen wurde in zwei Prioritätsstufen unterteilt: Befundstoffe, die bereits in Trinkwasser, Grundwasser, Rohwasser oder Uferfiltrat nachgewiesen wurden (Kategorie A, 422 Befundstoffe) und Befundstoffe, die bislang ausschließlich in Kläranlagenablauf und/oder Oberflächenwasser nachgewiesen wurden (Kategorie B, 410 Befundstoffe).

Das dritte Ziel dieses Sachverständigengutachtens war es, Empfehlungen für eine einfache, kostengünstige und effiziente Durchführung eines testrichtlinienkonformen und validen „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309 zu erarbeiten. Die Empfehlungen gelten ausschließlich für solche Testsubstanzen, für die im Testverlauf keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase erwartet wird. Die Empfehlungen sollen einem breiten Anwenderkreis, z. B. den Laboratorien von WVU und Behörden mit etablierter Analytik, die Durchführung eines „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309 erleichtern und zielen darauf ab, die Testbedingungen (Temperatur, Konzentrationsbereich der Testsubstanz, Inokulum) so zu wählen, dass für die Testsubstanz standardisierte, allgemeingültige, vergleichbare und umweltrelevante Ergebnisse erzielt werden.

Abstract: Contaminants in water resources: Prioritization and recommendations for conducting a "cold" biodegradation simulation test according to OECD TG 309

Please note: This report is also available in English as TEXTE 175/2024.

The threat to drinking water resources from persistent and mobile substances has been recognized for decades. It is essential for water utilities and monitoring/regulatory authorities to know whether the chemicals detected in their own water resources are persistent and therefore pose a threat to drinking water production. By eliminating the need for ¹⁴C-labeling of the test substance, a valid "cold" degradation test according to OECD TG 309 can be easily, cost effectively and efficiently performed by water utilities and authorities with laboratory infrastructure and established analytical methods for chemicals detected in their water resources.

The first objective of this report was to define criteria which, if met, would make a test substance suitable for a "cold" degradation test according to OECD TG 309. The second objective was to evaluate substances detected in water resources with respect to their intrinsic suitability for conducting such a test. Therefore, this report assesses whether a substance is likely to be

suitable for a "cold" degradation test according to OECD TG 309, but not whether this test is scientifically or legally required for that substance.

The list of 832 substances prioritized for "cold" biodegradation testing according to OECD TG 309 has been divided into two priority levels: Substances that have already been detected in drinking water, groundwater, raw water or bank filtrate (Category A, 422 substances) and substances that have only been detected in wastewater treatment plant effluent and/or surface water (Category B, 410 substances).

The third objective of this report was to develop recommendations for a simple, cost-effective, and efficient implementation of a valid "cold" biodegradation test in accordance with OECD TG 309. The recommendations apply only to those test substances for which no pronounced and significant decrease in concentration in the aqueous phase is expected during the test. It is intended to assist a wide range of users, such as water utility laboratories and government agencies with established analytical facilities, in performing a "cold" degradation test according to OECD TG 309. The recommendations aim at selecting the test conditions (temperature, concentration range of the test substance, inoculum) in such a way that standardized, generally valid, comparable and environmentally relevant results are obtained for the test substance.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis.....	9
Tabellenverzeichnis.....	9
Abkürzungsverzeichnis.....	10
Zusammenfassung.....	11
Summary.....	13
1 Hintergrund.....	15
2 Der Test auf aerobe biologische Abbaubarkeit im Oberflächenwasser nach OECD TG 309.....	16
3 Ziele.....	18
4 Empfehlungen für die Durchführung eines „kalten“ Abbautests auf aerobe biologische Abbaubarkeit im Oberflächenwasser nach OECD TG 309.....	19
4.1 Allgemeines Testprinzip (Absätze 5 und 6).....	19
4.1.1 Empfehlung: Testsubstanz nicht radioaktiv markieren.....	19
4.1.2 Empfehlung: Testsubstanzen in Mischung testen.....	20
4.1.3 Empfehlung: Mischung der Testsubstanzen und Analytik aufeinander abstimmen.....	20
4.1.4 Empfehlung: Zwei Testkonzentrationen pro Testsubstanz; Summe der Testkonzentrationen in einer Mischung maximal 10 µg/L und 50 µg/L.....	20
4.1.5 Empfehlung: Variante „pelagic test“ durchführen.....	20
4.2 Wahl der Referenzsubstanz (Absätze 12 und 31) sowie Herstellung von Stamm- und Dotierlösungen (Absätze 17 und 23).....	21
4.2.1 Empfehlung: Referenzsubstanz direkt in die Testgefäße applizieren und nach analytischer Kompatibilität auswählen.....	21
4.2.2 Empfehlung: Die dotierte Konzentration der Referenzsubstanz entspricht dem Hundertfachen der analytischen Bestimmungsgrenze.....	22
4.2.3 Empfehlung: Stamm- und Dotierlösungen in deionisiertem Wasser herstellen und die wasserlöslichen Salze der Testsubstanzen verwenden.....	22
4.3 Entnahme von Wasser und Sediment für den Abbautest (Absatz 18) und Testbedingungen (Absätze 24, 25 und 26).....	23
4.3.1 Empfehlung: Entnahmeort von Oberflächenwasser und Sediment ist für die testdurchführende Institution relevant.....	23
4.3.2 Empfehlung: Den Abbautest bei 12 °C durchführen.....	24
4.3.3 Empfehlung: Test im Dunkeln durchführen.....	24
4.3.4 Empfehlung: Testdauer von 60 Tagen.....	24
4.3.5 Empfehlung: Testgefäße schütteln, nicht rühren.....	24
4.4 Herstellung der Testansätze (Absätze 28, 30 und 31) und spezifische chemische Analyse (Absatz 41).....	25

4.4.1	Empfehlung: Dimensionierung der Testansätze und die Probenahmestrategie an die Variante des Abbautests und die Anforderungen an die Analytik anpassen	25
4.4.2	Empfehlung: Bei einzelner Testsubstanz vier und bei Mischungen sechs technische Replikate	26
4.4.3	Empfehlung: Verzicht auf eine sterile Kontrolle	26
4.4.4	Empfehlung: Probenahme für die Analyse nach 0, 3, 7, 14, 28, 42 und 60 Tagen	27
4.4.5	Empfehlung: Proben einfrieren und in einer gemeinsamen Sequenz analysieren	27
4.5	Testdaten und Berichterstattung (Absätze 43 bis 53)	28
5	Vorgehensweise bei der Priorisierung und De-Priorisierung von Befundstoffen für einen „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309	29
5.1	Stoffliste mit 1250 Befundstoffen.....	29
5.2	De-Priorisierung und Priorisierung	29
6	Stoffliste mit den für einen „kalten“ Abbautest nach OECD TG 309 priorisierten Befundstoffen	32
7	Danksagung	77
8	Quellenverzeichnis	78
A	Anhang	81
A.1	Statistischer Vergleich der Ergebnisse mit dem vPvM-Score der Befundstoffe	81
A.2	Stoffliste mit den für einen „kalten“ Abbautest nach OECD TG 309 de-priorisierten Befundstoffen	82

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	De-Priorisierung und Priorisierung der bekannten Befundstoffe	30
Abbildung 2:	Verteilung der vPvM-Scores de-priorisierter und priorisierter Befundstoffe	81

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Empfehlungen zur Dimensionierung der Testansätze und zur Probenahmestrategie für die drei Fälle basierend auf der Variante des Abbautests und dem für die Analyse erforderlichen Probenvolumen je Probenahmezeitpunkt	25
Tabelle 2:	Priorisierte Stoffe für die Durchführung eines „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309. Sortierung nach absteigendem vPvM-Score, Teil 1	34
Tabelle 3:	Priorisierte Stoffe für die Durchführung eines „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309. Sortierung nach absteigendem vPvM-Score, Teil 2	56
Tabelle 4:	Min-, Max- und Median-Werte der vPvM-Scores der de- priorisierten und priorisierten Befundstoffe	81
Tabelle 5:	De-priorisierte Befundstoffe	83

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Erläuterung
BF	Uferfiltrat
CLP	Einstufung, Kennzeichnung und Verpackung von Stoffen und Gemischen
CSS	Chemikalienstrategie für Nachhaltigkeit
DW	Trinkwasser
ECHA	Europäische Chemikalienagentur
GC	Gaschromatographie
GW	Grundwasser
HILIC	hydrophile Interaktionschromatographie
IC	Ionenaustauschchromatographie
InChI	IUPAC International Chemical Identifier
IUPAC	Internationale Union für reine und angewandte Chemie
NaNa-Stoffe	nicht abbaubare und nicht adsorbierbare Stoffe
NER	nicht-extrahierbare Rückstände
OECD	Organisation für wirtschaftliche Zusammenarbeit und Entwicklung
PFAS	per- und polyfluorierte Alkylverbindungen
PMOC	persistente und mobile organische Schadstoffe
PMT/vPvM	persistente, mobil und toxisch oder sehr persistent und sehr mobil
PPOP	polare persistente organische Schadstoffe
PPP, P3	persistente polare Schadstoffe
QSAR	Quantitative Struktur-Wirkungs-Beziehung
RIVM	Nationales Institut für öffentliche Gesundheit und Umwelt der Niederlande
RPLC	Umkehrphasen-Flüssigchromatographie
RW	Rohwasser
SFC	überkritische Flüssigkeitschromatographie
SMILES	Simplified Molecular Input Line Entry System
SW	Oberflächenwasser
TG	technische Richtlinie
WTPE	Kläranlagenablauf
WVU	Wasserversorgungsunternehmen

Zusammenfassung

Auf die Gefährdung der Trinkwasserressourcen durch persistente und mobile Stoffe wird seit Jahrzehnten hingewiesen. Eine fehlende bzw. unzureichende intrinsische Abbaubarkeit (Persistenz) wird wissenschaftlich als die problematischste Stoffeigenschaft einer Chemikalie bewertet. Wasserversorgungsunternehmen (WVU) warnen, dass die Trinkwassergewinnung steigenden Aufwand erfordert. Für zahlreiche Befundstoffe in den Trinkwasserressourcen fehlt allerdings nach wie vor eine abschließende Bewertung ihrer intrinsischen Abbaubarkeit in der aquatischen Umwelt durch die verantwortlichen Unternehmen. Für WVU, Überwachungs- und Regulierungsbehörden ist es aber essenziell zu wissen, ob die in den eigenen Wasserressourcen detektierten Chemikalien persistent sind und somit gegebenenfalls eine Bedrohung für die Trinkwassergewinnung darstellen.

Wenn eine Chemikalie, die keine besondere Relevanz für Böden oder Sedimente hat, im Screening nicht vom Verdacht einer fehlenden oder unzureichenden intrinsischen Abbaubarkeit (Persistenz) entlastet wurde, empfiehlt die ECHA, standardmäßig immer zuerst den Abbautest nach OECD TG 309 durchzuführen. Durch den Verzicht auf eine ^{14}C -Markierung der Testsubstanz (sog. „kalter“ Abbautest) kann für Befundstoffe in den eigenen Wasserressourcen ein valider Abbautest nach OECD TG 309 auch von WVU und Behörden mit Laborinfrastruktur und etablierter Analytik einfach, kostengünstig und effizient durchgeführt werden.

Das erste Ziel des vorliegenden Sachverständigengutachtens war es Kriterien zu definieren, bei deren Erfüllung eine Testsubstanz geeignet für einen "kalten" Abbautest nach OECD TG 309 ist. Die Kriterien sollen erkennen, ob eine Testsubstanz in der Wasserphase keine ausgeprägte intrinsische aerobe biologische Abbaubarkeit aufweist und gleichzeitig aufgrund ihrer physikochemischen Eigenschaften weder an Schwebstoff, Sediment oder Glasoberfläche adsorbiert noch in die Gasphase übergeht, d. h., während der Testdauer in der Wasserphase verbleibt.

Das zweite Ziel war die Beurteilung von 1250 Befundstoffen hinsichtlich ihrer intrinsischen Eignung für einen „kalten“ Abbautest nach OECD TG 309. In diesem Sachverständigengutachten wurde also anhand der definierten Kriterien beurteilt, ob ein Befundstoff vermutlich für einen solchen Abbautests geeignet ist, jedoch nicht, ob dieser Test wissenschaftlich oder regulatorisch für diesen Befundstoff notwendig ist.

Für die Abschätzung der Sorptionsneigung wurden Verteilungskoeffizienten wie $\log K_{oc}$ und $\log D$, für die Flüchtigkeit der Befundstoffe der Henry-Koeffizient (berechnet für 12 °C, die empfohlene Temperatur im Abbautest) verwendet. Für eine Abschätzung, ob für eine Testsubstanz eine ausreichende intrinsische Abbaubarkeit vermutet werden kann, wurde sowohl auf bereits vorliegende Bewertungen als auch auf verschiedene QSAR-Verfahren (Quantitative Struktur-Wirkungs-Beziehung) zurückgegriffen.

Die Liste der 832 für einen „kalten“ Abbautest nach OECD TG 309 priorisierten Befundstoffe wurde in zwei Prioritätsstufen unterteilt: Befundstoffe, die bereits in Trinkwasser, Grundwasser, Rohwasser oder Uferfiltrat nachgewiesen wurden (Kategorie A, 422 Befundstoffe) und Befundstoffe, die bislang ausschließlich in Kläranlagenablauf und/oder Oberflächenwasser nachgewiesen wurden (Kategorie B, 410 Befundstoffe).

Das dritte Ziel dieses Sachverständigengutachtens war es, Empfehlungen für eine einfache, kostengünstige und effiziente Durchführung eines testrichtlinienkonformen und validen „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309 zu erarbeiten. Die Empfehlungen gelten ausschließlich für solche Testsubstanzen, für die im Testverlauf keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase erwartet wird:

- ▶ Testsubstanz nicht radioaktiv markieren und Variante „*pelagic test*“ durchführen.
- ▶ Testsubstanzen in Mischung testen und die Mischung der Testsubstanzen und die verwendeten analytischen Methoden aufeinander abstimmen.
- ▶ Zwei Testkonzentrationen pro Testsubstanz; Summe der Testkonzentrationen in einer Mischung maximal 10 µg/L und 50 µg/L.
- ▶ Referenzsubstanz direkt in die Testgefäße mit den Testsubstanzen applizieren und nach analytischer Kompatibilität auswählen.
- ▶ Die dotierte Konzentration der Referenzsubstanz entspricht dem Hundertfachen der analytischen Bestimmungsgrenze.
- ▶ Stamm- und Dotierlösungen in deionisiertem Wasser herstellen und die wasserlöslichen Salze der Testsubstanzen verwenden.
- ▶ Entnahmeort von Wasser und Sediment ist für die testdurchführende Institution relevant.
- ▶ Abbautest bei 12 °C und im Dunkeln über eine Testdauer von 60 Tagen durchführen.
- ▶ Testgefäße schütteln, nicht rühren.
- ▶ Dimensionierung der Testansätze und die Probenahmestrategie an die Variante des Abbautests und an die Anforderungen der Analytik anpassen.
- ▶ Bei einzelner Testsubstanz vier und bei Mischungen sechs technische Replikate.
- ▶ Auf eine sterile Kontrolle verzichten.
- ▶ Die Probenahme für die Analyse der Test-/Referenzsubstanz(en) nach 0, 3, 7, 14, 28, 42 und 60 Tagen durchführen.
- ▶ Proben einfrieren und in einer gemeinsamen Sequenz analysieren.

Die Empfehlungen sollen einem breiten Anwenderkreis, z. B. den Laboratorien von WVU und Behörden mit etablierter Analytik, die Durchführung eines „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309 für Befundstoffe in den eigenen Wasserressourcen erleichtern. Um möglichst viele Chemikalien in möglichst kurzer Zeit testen zu können, ist es von entscheidender Bedeutung, den Aufwand für die Testdurchführung zu minimieren und eine einfache, kostengünstige und effiziente Durchführung zu gewährleisten. Die Empfehlungen zielen darauf ab, die Testbedingungen (Temperatur, Konzentrationsbereich der Testsubstanz, Inokulum) so zu wählen, dass für die Testsubstanz standardisierte, allgemeingültige, vergleichbare und umweltrelevante Ergebnisse erzielt werden.

Summary

Please note: This report is also available in English as TEXTE XX/2024.

The threat posed to drinking water resources by persistent and mobile substances has been recognized for decades. Lack of or insufficient intrinsic degradability (persistence) is scientifically considered to be the most problematic property of a chemical. Water utilities warn that the production of drinking water requires increasing efforts. However, for many substances, some of which have been detected in drinking water resources for decades, there is still no conclusive assessment of their intrinsic biodegradability in the aquatic environment by the responsible companies. However, it is essential for water utilities and monitoring and regulatory authorities to know whether the chemicals detected in their water resources are persistent and therefore pose a threat to drinking water production.

If a chemical of no particular relevance to soils or sediments has not been cleared of the suspicion of lacking or insufficient intrinsic degradability (persistence) in the screening, ECHA recommends as a standard that the OECD TG 309 degradation test should always be performed first. By eliminating the need to label the test substance with ^{14}C , a valid OECD TG 309 degradation test can be easily, cost effectively and efficiently performed by water suppliers and authorities with laboratory infrastructure and established analytical methods for substances found in their water resources.

The first objective of this report was to define criteria which, if fulfilled, would make a test substance suitable for a "cold" degradation test according to OECD TG 309. The criteria should indicate whether a test substance does not exhibit pronounced intrinsic aerobic biodegradability in the aqueous phase and, at the same time, due to its physicochemical properties, neither adsorbs to suspended matter, sediment or glass surfaces nor passes into the gas phase, i. e. remains in the aqueous phase during the test period.

The second objective was to assess the intrinsic suitability of 1250 substances already detected in water resources for a "cold" degradation test according to OECD TG 309. In this report, the defined criteria were used to assess whether a substance is likely to be suitable for a "cold" degradation test according to OECD TG 309, but not whether such a test is scientifically or legally required for that substance.

Distribution coefficients such as $\log K_{\text{oc}}$ and $\log D$ were used to estimate the sorption tendency, and the Henry coefficient (calculated at 12 °C, the recommended temperature for the biodegradation test) was used to estimate the volatility of the test substances. Both existing assessments and various QSAR (quantitative structure-activity relationship) methods were used to assess whether a test substance can be assumed to have sufficient intrinsic biodegradability.

The list of 832 substances prioritized for "cold" degradation testing according to OECD TG 309 has been divided into two priority levels: Substances that have already been detected in drinking water, groundwater, raw water or bank filtrate (Category A, 422 substances) and substances that have only been detected in wastewater treatment plant effluent and/or surface water (Category B, 410 substances).

The third objective of this report was to develop recommendations for a simple, cost-effective and efficient implementation of a valid "cold" degradation test according to OECD TG 309. The recommendations apply only to those test substances for which no pronounced and significant decrease in concentration in the aqueous phase is expected during the test:

- ▶ No ^{14}C -labelling of the test substance and perform the '*pelagic test*' variant.

- ▶ Test the test substances in a mixture and align the mixture of test substances and analysis.
- ▶ Two test concentrations per test substance; sum of the test concentrations in a mixture maximum 10 µg/L and 50 µg/L.
- ▶ Add the reference substance directly to the test vessels containing the test substances and select according to analytical compatibility.
- ▶ The spiked concentration of the reference substance corresponds to one hundred times the analytical limit of quantification.
- ▶ Prepare stock and spiking solutions in deionized water and use the water-soluble salts of the test substances.
- ▶ The sampling location of water and sediment for the test is relevant for the institution performing the test.
- ▶ Perform the degradation test at 12 °C and in the dark, test duration of 60 days.
- ▶ Shake test vessels, do not stir.
- ▶ Adapt the dimensions of the test vessels and the sampling strategy to the variant of the degradation test and the analytical requirements.
- ▶ Four technical replicates for a single test substance and six for mixtures.
- ▶ Do not perform a sterile control.
- ▶ Sampling for analysis of the test/reference substance(s) after 0, 3, 7, 14, 28, 42 and 60 days.
- ▶ Freeze samples and analyze in a common sequence.

The recommendations are intended to make it easier for a wide range of users, such as water utility laboratories and government agencies with established analytical facilities, to perform a "cold" degradation test in accordance with OECD TG 309 for substances found in their own water resources. To be able to test as many chemicals as possible in the shortest possible time, it is essential to minimize the effort required to perform the test and to ensure that it is simple, cost-effective and efficient. The recommendations aim at selecting the test conditions (temperature, concentration range of the test substance, inoculum) in such a way that standardized, generally valid, comparable and environmentally relevant results are obtained for the test substance.

1 Hintergrund

Auf die Gefährdung der Trinkwasserressourcen durch persistente und mobile Stoffe wird seit Jahrzehnten wissenschaftlich hingewiesen (Loos et al., 2010; Reemtsma et al., 2016; Schwarzenbach et al., 2006). Chemikalien mit diesen beiden intrinsischen Stoffeigenschaften werden als NaNa-Stoffe (nicht abbaubar und nicht adsorbierbar), polare persistente organische Schadstoffe (PPOP), persistente polare Schadstoffe (PPP, P3-Stoffe), persistente und mobile organische Schadstoffe (PMOC) und persistente, mobile und toxische Stoffe oder sehr persistente und sehr mobile Stoffe (PMT/vPvM-Stoffe) bezeichnet (z. B. Neumann & Schliebner, 2019; Reemtsma et al., 2016; Steinhäuser & Richter, 2006). Aktuell werden kurzkettige per- und polyfluorierte Alkylverbindungen (PFAS) als mobile Ewigkeitschemikalien bezeichnet.

Das Vorkommen polarer Chemikalien in der aquatischen Umwelt ist seit den 1980er Jahren bekannt (Giger et al., 1984). Schon vor Jahrzehnten wurde in den USA darauf hingewiesen, dass viele dieser Chemikalien vor allem deshalb in der Umwelt vorkommen, weil sie bei der Abwasserbehandlung nicht abgebaut werden (Kolpin et al., 2002). Auch in Europa sind etwa 90 % der Oberflächenwasserproben mit persistenten und mobilen Chemikalien belastet (Loos et al., 2010). Aktuell detektieren moderne chromatographische Techniken ein breites Spektrum von polaren, ionisierbaren und ionischen Chemikalien in Trinkwasserressourcen (Neuwald et al., 2022; Scheurer et al., 2017).

Gleichzeitig setzen die chemische Industrie und ihre nachgeschalteten Anwender seit Jahrzehnten in zunehmender Anzahl und Menge persistente Chemikalien ein (UN, 2019). Eine fehlende bzw. unzureichende intrinsische Abbaubarkeit (Persistenz) wird wissenschaftlich als die problematischste Stoffeigenschaft einer Chemikalie bewertet (Cousins et al., 2019; Persson et al., 2022; Schäffer et al., 2022). Sie verstärkt das Potenzial zur Bioakkumulation, verursacht eine Anreicherung in der Umwelt und verhindert einen Abbau der Kontamination auch bei Beendigung der Emissionen. All dies erhöht die Exposition sowie die Wahrscheinlichkeit des Auftretens von Effekten und macht eine quantitative Risikoabschätzung unmöglich (Scheringer, 2023).

Wasserversorgungsunternehmen (WVU) warnen, dass die Trinkwassergewinnung steigenden Aufwand erfordert (ERM-Koalition, 2020). Die EU-Kommission hat deswegen im Rahmen des Green Deals (EC, 2019) und der Chemikalienstrategie für Nachhaltigkeit (CSS) (EC, 2020) nach umfangreicher Konsultation die neuen Gefahrenklassen PMT und vPvM zum Rohwasserschutz in die CLP-Verordnung (EC, 2022) aufgenommen. Ab November 2026 müssen Unternehmen in Europa ihre Chemikalien auf Persistenz, Mobilität und Toxizität bewerten. Falls ein Stoff die Kriterien erfüllt, muss er durch die verwendenden Unternehmen als PMT-Stoff (EUH450, „Kann langanhaltende und diffuse Verschmutzung von Wasserressourcen verursachen“) und/oder vPvM-Stoff (EUH451, „Kann sehr lang anhaltende und diffuse Verschmutzung von Wasserressourcen verursachen“) selbsteingestuft werden (ECHA, 2023a).

Für zahlreiche Befundstoffe, welche teilweise seit Jahrzehnten in den Wasserressourcen detektiert werden, fehlt allerdings nach wie vor eine abschließende Bewertung ihrer intrinsischen Abbaubarkeit in der aquatischen Umwelt durch die verantwortlichen Unternehmen (Arp & Hale, 2022). Für WVU, Überwachungs- und Regulierungsbehörden ist es aber essenziell zu wissen, ob die in den eigenen Wasserressourcen detektierten Chemikalien persistent sind und somit gegebenenfalls eine Bedrohung für die Trinkwassergewinnung darstellen.

2 Der Test auf aerobe biologische Abbaubarkeit im Oberflächenwasser nach OECD TG 309

Für die abschließende Bewertung der intrinsischen aeroben biologischen Abbaubarkeit einer Chemikalie stehen drei standardisierte OECD-Tests mit Boden (TG 307), Wasser/Sediment (TG 308) und Oberflächenwasser (TG 309) zur Verfügung. Diese Simulationstests müssen durch die verantwortlichen Unternehmen immer dann durchgeführt werden, wenn eine Chemikalie im Screening nicht vom Verdacht auf fehlende bzw. unzureichende intrinsische Abbaubarkeit (Persistenz) entlastet wurde. Die ECHA empfiehlt für Chemikalien, die keine besondere Relevanz für Böden oder Sedimente haben, als Standard immer zuerst den Abbautest nach OECD TG 309 durchzuführen (ECHA, 2023b).

Ziel des Abbautests nach OECD TG 309 ist es, die intrinsische aerobe biologische Abbaubarkeit nachzuweisen und eine valide Halbwertszeit des aeroben biologischen Abbaus (*degradation half time*, DegT_{50}) im Oberflächenwasser abzuleiten. Bei der Beurteilung, ob das Ergebnis valide ist und eine wissenschaftlich fundierte Aussage erlaubt, sind zwei grundsätzliche Fälle zu unterscheiden.

Fall 1: Im Testverlauf wird eine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme der Testsubstanz in der Wasserphase beobachtet.

Damit valide und zuverlässig die intrinsische aerobe biologische Abbaubarkeit der Testsubstanz festgestellt werden kann, muss nun zweifelsfrei nachgewiesen werden, dass aus der Summe aller Prozesse, die zum Verschwinden (*dissipation*) der Testsubstanz aus der Wasserphase beigetragen haben, der aerobe biologische Abbau (*degradation*) der dominierende Prozess gewesen ist. Abiotischer Abbau wie Hydrolyse oder reine Verteilungsprozesse, wie Verflüchtigung oder Adsorption sowie die Bildung von nicht-extrahierbaren Rückständen (NER) sind dagegen ursächlich auszuschließen. Weiterhin muss aufgeklärt werden, ob lediglich primärer Abbau zu stabilen (ggf. persistenten) Transformationsprodukten oder vollständiger Abbau (d. h., eine Umwandlung in anorganische Verbindungen, Mineralisierung) beobachtet wurde.

Im Fall 1 ist dies am sichersten über eine ^{14}C -Markierung der Testsubstanz zu erreichen. Dabei werden die verflüchtigten, adsorbierten, mineralisierten, NER-gebundenen Anteile der Radioaktivität sowie die ^{14}C -markierten Transformationsprodukte quantifiziert. Allerdings erfordern Herstellung, Handhabung und Entsorgung des radioaktiven Materials spezielle Sicherheitsvorkehrungen, Umgangsgenehmigungen, geschultes Personal sowie eine entsprechende Laboreinrichtung.

Ohne ^{14}C -Markierung der Testsubstanz (sog. „kalter“ Abbautest) ist im Fall 1 eine zuverlässige Aufklärung der verschiedenen Prozesse dagegen nur mit einem sehr hohen analytischen Aufwand möglich. Zur Quantifizierung verflüchtigter (z. B. nach Anreicherung über eine Falle mit Paraffinöl-getränkter Glaswolle) oder adsorbierter Anteile der Testsubstanz müsste eine substanzspezifische Analytik durchgeführt werden, die in der Regel eine Extraktion, Aufreinigung und gegebenenfalls Aufkonzentrierung vor der Analyse bedarf. Auch die Mineralisierung der Testsubstanz müsste analytisch nachgewiesen, aufgeklärt und quantifiziert werden. Gerade diese Quantifizierung ist allerdings ohne ^{14}C -Markierung der Testsubstanz wegen zu geringer Testkonzentrationen praktisch nicht möglich. Bei der Variante „*suspended sediment test*“ wäre ohne ^{14}C -Markierung der Testsubstanz insbesondere der zuverlässige Ausschluss einer Bildung von NER praktisch nicht möglich.

Fall 2: Im Testverlauf wird keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme der Testsubstanz in der Wasserphase beobachtet.

Damit valide und zuverlässig die fehlende bzw. unzureichende intrinsische aerobe biologische Abbaubarkeit und damit die Persistenz der Testsubstanz festgestellt werden kann, muss in diesem Fall lediglich nachgewiesen werden, dass ein ausreichend hohes aerobes biologisches Abbaupotenzial (d. h., ein vitales Inokulum) im Testsystem vorhanden war. Dies erfolgt über den Einsatz einer Referenzsubstanz.

Im Fall 2 kann ein valides Ergebnis des Abbautests nach OECD TG 309 immer auch ohne ¹⁴C-Markierung der Testsubstanz erreicht werden. Analytisch ist lediglich die Quantifizierung der Testsubstanz selbst und nur in der Wasserphase erforderlich. Da im Fall 2 keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme beobachtet wird, ist auch keine Aufklärung und Quantifizierung verschiedener Prozesse notwendig.

Der Fall 2 wird insbesondere für persistente und mobile Chemikalien erwartet.

Durch den Verzicht auf eine ¹⁴C-Markierung der Testsubstanz kann für Befundstoffe in den eigenen Wasserressourcen ein valider Abbautest nach OECD TG 309 auch von WVU und Behörden mit entsprechender Laborinfrastruktur und etablierter Analytik einfach, kostengünstig und effizient durchgeführt werden. Dies konnte das *KWR Watercycle Research Institute* in den Niederlanden in Zusammenarbeit mit dem Umweltbundesamt (UBA) anhand von sieben Testsubstanzen zeigen (Hofman-Caris & Claßen, 2020).

3 Ziele

Das erste Ziel des vorliegenden Sachverständigengutachtens war es Kriterien zu definieren, bei deren Erfüllung eine Testsubstanz geeignet für einen "kalten" Abbautest nach OECD TG 309 ist. Die Kriterien sollen geeignet sein, um festzustellen, ob eine Testsubstanz in der Wasserphase keine ausgeprägte intrinsische aerobe biologische Abbaubarkeit aufweist und gleichzeitig aufgrund ihrer physikochemischen Eigenschaften weder an Schwebstoff, Sediment oder Glasoberfläche adsorbiert noch in die Gasphase übergeht, d. h., während der Testdauer in der Wasserphase verbleibt. Die Kriterien und die Vorgehensweise sind in Kapitel 5.2 beschrieben und können so auch auf Chemikalien angewendet werden, welche nicht in diesem Sachverständigengutachten beurteilt wurden (s. zweites Ziel).

Das zweite Ziel war die Beurteilung bekannter Befundstoffe hinsichtlich ihrer intrinsischen Eignung für einen „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309. In diesem Sachverständigengutachten wurde also beurteilt, ob ein Befundstoff vermutlich für einen „kalten“ Abbautest nach OECD TG 309 geeignet ist, jedoch nicht, ob dieser Test wissenschaftlich oder regulatorisch für diesen Befundstoff notwendig ist.

Als Ergebnis präsentiert die Stoffliste in Kapitel 6 die für einen „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309 priorisierten Befundstoffe, aufgeteilt in zwei Tabellen: Tabelle 2 listet die priorisierten Befundstoffe auf, die bereits in Trinkwasser, Rohwasser, Uferfiltration und/oder Grundwasser nachgewiesen wurden (Kategorie A). Tabelle 3 listet die verbleibenden priorisierten Befundstoffe auf, welche bisher ausschließlich in Kläranlagenablauf und/oder Oberflächenwasser detektiert wurden (Kategorie B).

Als zweites Ergebnis präsentiert die Stoffliste im Anhang in Kapitel A.2 (Tabelle 5) die für einen „kalten“ Abbautest nach OECD TG 309 de-priorisierten Befundstoffe. Für ein valides Testergebnis wäre bei diesen Befundstoffen vermutlich eine ¹⁴C-Markierung notwendig.

Beide Stofflisten – aufgeteilt in drei Tabellen – inklusive der beurteilten intrinsischen Stoffeigenschaften und zusätzlichen Informationen stehen im MS Excel-Format zum Download bereit.

Das dritte Ziel dieses Sachverständigengutachtens war es, Empfehlungen für eine einfache, kostengünstige und effiziente Durchführung eines testrictlinienkonformen und validen „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309 zu erarbeiten. Die Empfehlungen gelten ausschließlich für solche Testsubstanzen, für die im Testverlauf keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase erwartet wird (Fall 2), also beispielsweise für die priorisierten Befundstoffe in Tabelle 2 und Tabelle 3.

Die Empfehlungen in Kapitel 4 sollen einem breiten Anwenderkreis, z. B. den Laboratorien von WVU und Behörden mit etablierter Analytik, die Durchführung eines „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309 für Befundstoffe in den eigenen Wasserressourcen erleichtern. Im Vordergrund stehen dabei die Verringerung der Variabilität zwischen den Testgefäßen (technische Replikat), die Erhöhung der statistischen Aussagekraft, die Minimierung der Unsicherheit und damit insgesamt die Stärkung der Validität des Testergebnisses. Um möglichst viele Chemikalien in möglichst kurzer Zeit testen zu können, ist es von entscheidender Bedeutung, den Aufwand für die Testdurchführung zu minimieren und eine einfache, kostengünstige und effiziente Durchführung zu gewährleisten. Die Empfehlungen zielen darauf ab, die Testbedingungen (Temperatur, Konzentrationsbereich der Testsubstanz, Inokulum) so zu wählen, dass für die Testsubstanz standardisierte, allgemeingültige, vergleichbare und umweltrelevante Ergebnisse erzielt werden.

4 Empfehlungen für die Durchführung eines „kalten“ Abbautests auf aerobe biologische Abbaubarkeit im Oberflächenwasser nach OECD TG 309

Der Test auf aerobe biologische Abbaubarkeit im Oberflächenwasser ist grundsätzlich nach OECD TG 309 durchzuführen (OECD, 2004) und muss konform mit deren Vorgaben sein, um ein valides Testergebnis zu ermöglichen.

Die Testrichtlinie erlaubt die Durchführung mit und ohne einer ^{14}C -Markierung der Testsubstanz, zwei grundsätzliche Varianten der Testdurchführung hinsichtlich einer vorhandenen Feststofffraktion (*pelagic test* oder *suspended sediment test*) sowie weitere Variationen der Testbedingungen.

Es folgen Empfehlungen für eine einfache, kostengünstige und effiziente Durchführung eines testrichtlinienkonformen und validen „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309, jeweils in thematische Schwerpunkte unterteilt und kategorisiert nach den Absätzen der Testrichtlinie.

Die Empfehlungen beziehen sich ausschließlich auf Fall 2 und damit auf Testsubstanzen, die mit hoher Wahrscheinlichkeit in der Wasserphase keine ausgeprägte intrinsische aerobe biologische Abbaubarkeit und keine ausgeprägte abiotische Abbaubarkeit (z. B. durch Hydrolyse) aufweisen sowie aufgrund ihrer physikochemischen Eigenschaften während des gesamten Testverlaufs in der Wasserphase verbleiben.

Deswegen gilt für alle Empfehlungen grundsätzlich: Tritt im Verlauf des Abbautests nach OECD TG 309 nicht Fall 2 ein, sondern wird wider Erwarten eine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme der Testsubstanz in der Wasserphase (Fall 1) beobachtet, kann dies dazu führen, dass das Testergebnis nicht valide ist, da gegebenenfalls nicht eindeutig geklärt werden kann, ob der aerobe biologische Abbau (*degradation*) der dominierende Prozess war oder ob vor allem abiotischer Abbau durch Hydrolyse, andere physikalische Prozesse wie Sorption oder Verflüchtigung oder die Bildung von NER (relevant v. a. bei der Variante *suspended sediment test*) für die Konzentrationsabnahme in der Wasserphase ursächlich waren.

Um ohne ^{14}C -Markierung der Testsubstanz auch im Fall 1 ein valides Testergebnis zu erhalten, kann es notwendig sein, den genauen Abbaupfad der Testsubstanz analytisch aufzuklären. Es besteht auch die Möglichkeit, dass der Abbautest unter veränderten Bedingungen wiederholt werden muss, beispielsweise dann mit einer ^{14}C -Markierung der Testsubstanz.

4.1 Allgemeines Testprinzip (Absätze 5 und 6)

Die folgenden Empfehlungen beziehen sich zunächst auf das allgemeine Testprinzip, wie beispielsweise die Variante des Abbautests (*pelagic test* oder *suspended sediment test*), die Anzahl und Konzentrationen der Testsubstanz(en) sowie die Synergie von Analytik und Zusammensetzung der Testsubstanz-Mischung.

4.1.1 Empfehlung: Testsubstanz nicht radioaktiv markieren

Für Testsubstanzen, bei denen im Verlauf des Abbautests keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase (Fall 2) erwartet wird, also beispielsweise die priorisierten Befundstoffe der Stoffliste in Kapitel 6, wird empfohlen, zunächst auf eine ^{14}C -Markierung der Testsubstanz zu verzichten. Der Abbautest nach OECD TG 309 ist dadurch auch in Laboratorien von WVU und Behörden mit etablierter Analytik und Temperaturschrank bzw. Temperaturkammer einfach, kostengünstig und effizient durchzuführen.

4.1.2 Empfehlung: Testsubstanzen in Mischung testen

Der Verzicht auf eine ¹⁴C-Markierung der Testsubstanz und stattdessen die substanzspezifische Analyse und Quantifizierung der Testsubstanz in der Wasserphase ermöglichen das parallele Testen von mehreren Testsubstanzen in einer Mischung. Der Abbautest nach OECD TG 309 kann dadurch für mehrere Testsubstanzen gleichzeitig, und damit einfach, kostengünstig und effizient durchgeführt werden.

Untersuchungen zeigen, dass die Aussagekraft eines Abbautests für die einzelne Testsubstanz durch die Anwesenheit weiterer Testsubstanzen nicht beeinträchtigt wird, sofern die Summe der Testkonzentrationen ausreichend gering ist (Birch et al., 2023a, 2023b; Li et al., 2019; Li & McLachlan, 2020; Tian et al., 2022). Der Stand der Technik in der Spurenanalytik erlaubt eine sichere Quantifizierung von niedrigen Testkonzentrationen auch in Mischungen. Die mathematische Modellierung der Abbaukinetik erfolgt im Anschluss für jede Testsubstanz in der Mischung separat (s. Kapitel 4.4.4 und Kapitel 4.5).

4.1.3 Empfehlung: Mischung der Testsubstanzen und Analytik aufeinander abstimmen

Moderne Multimethoden ermöglichen die Quantifizierung einer Vielzahl verschiedener Einzelstoffe nebeneinander mit nur einer Analyse. Es wird empfohlen, die Zusammensetzung der Testsubstanz-Mischung und die Analytik so aufeinander abzustimmen, dass möglichst alle Testsubstanzen in einer oder maximal zwei Analysen quantifiziert werden können. Dies verringert den analytischen Aufwand des Abbautests.

4.1.4 Empfehlung: Zwei Testkonzentrationen pro Testsubstanz; Summe der Testkonzentrationen in einer Mischung maximal 10 µg/L und 50 µg/L

Gemäß der OECD TG 309 werden zwei Testkonzentrationen mit einem Faktor von 5 bis maximal 10 zwischen niedriger und hoher Testkonzentration pro Testsubstanz empfohlen. Beide Testkonzentrationen sind so niedrig wie möglich und maximal so hoch wie analytisch notwendig anzusetzen (d. h., bei Testsubstanzen, für die keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase angenommen wird: Testkonzentration $\geq 10 \times$ Bestimmungsgrenze).

Falls eine Mischung von Testsubstanzen getestet wird, wird empfohlen, die Summe der Testkonzentrationen in der Mischung auf maximal 10 µg/L für die niedrigen und 50 µg/L bis maximal 100 µg/L für die hohen Testkonzentrationen zu begrenzen. Dieses Prinzip bestimmt damit die maximale Anzahl der Testsubstanzen in der Mischung.

4.1.5 Empfehlung: Variante „pelagic test“ durchführen

Für Testsubstanzen, bei denen im Verlauf des Abbautests keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase (Fall 2) erwartet wird, also beispielsweise die priorisierten Befundstoffe der Stoffliste in Kapitel 6, wird empfohlen, die Variante „pelagic test“ durchzuführen. Sie erfordert weniger Ressourcen bei der Durchführung als die Variante „suspended sediment test“.

Während der Vorbereitung werden die groben Partikel beispielsweise durch Filtration durch einen Nylonfilter mit etwa 100 µm Maschenweite, durch einen groben Papierfilter oder durch Sedimentation entfernt. Feinere Sedimentpartikel liegen so weiterhin vor und werden durch das kontinuierliche Schütteln während des Testverlaufs stetig in Schwebelage gehalten (s. Kapitel 4.3.5).

Entscheidend für die Validität ist der Nachweis, dass ein ausreichend hohes aerobes biologisches Abbaupotenzial durch ein vitales Inokulum im Testsystem vorhanden ist. Dies muss durch den biologischen Abbau der Referenzsubstanz (s. Kapitel 4.2) erbracht werden.

Ein weiterer Vorteil der Variante „*pelagic test*“ ist, dass die Testergebnisse einfacher zu interpretieren sind, da kein Sediment hinzugefügt wird, welches Einfluss auf den Konzentrationsverlauf der Testsubstanz nehmen könnte. Bereits geringe Mengen an suspendiertem Sediment können zu einer relevanten Bildung von NER führen (Holzmann et al., 2021). Kationische Testsubstanzen können an Tonmineralen, organischer Substanz (Humus) oder Ton-Humus-Komplexen sorbieren (Schaffer & Licha, 2015; Tian et al., 2024). Daher ist es in der Variante „*suspended sediment test*“ notwendig, eine Bildung von NER und eine Sorption an das hinzugefügte Sediment als ursächliche Prozesse für eine Konzentrationsabnahme in der Wasserphase auszuschließen. In der Praxis ist dies vermutlich nur mit einer ¹⁴C-Markierung der Testsubstanz möglich.

Auf der anderen Seite führt die Zugabe von Sediment in der Regel zu einer Erhöhung der mikrobiellen Aktivität, was zu einer Verringerung der Variabilität zwischen den Replikaten und zur Stärkung der Validität des Abbautests führen kann (Fenner et al., 2017; Seller et al., 2020). In dem Fall, dass keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase beobachtet wird (Fall 2) kann deswegen die Variante „*suspended sediment test*“ auch ohne eine ¹⁴C-Markierung der Testsubstanz die fehlende oder unzureichende intrinsische Abbaubarkeit (Persistenz) der Testsubstanz valide nachweisen. Wegen der geringen Sorptionsneigung von Anionen ist dies vor allem bei der Testung organischer Säuren in Betracht zu ziehen (Schaffer & Licha, 2015).

4.2 Wahl der Referenzsubstanz (Absätze 12 und 31) sowie Herstellung von Stamm- und Dotierlösungen (Absätze 17 und 23)

Der Nachweis einer ausreichend hohen mikrobiellen Aktivität im Testsystem wird mithilfe einer Referenzsubstanz erbracht. Es folgen Empfehlungen hinsichtlich der Wahl und Applikation der Referenzsubstanz sowie allgemein zur Herstellung von Stamm- und Dotierlösungen der Test- und Referenzsubstanz(en).

4.2.1 Empfehlung: Referenzsubstanz direkt in die Testgefäße applizieren und nach analytischer Kompatibilität auswählen

Die Verwendung moderner Multimethoden ermöglicht es, die Referenzsubstanz zusammen mit den Testsubstanzen in einer gemeinsamen Analyse quantifizieren zu können. Es bietet sich daher an, die Referenzsubstanz direkt in die Testgefäße (jeweils bei niedriger und hoher Testkonzentration) mit der Testsubstanz bzw. einer Mischung der Testsubstanzen zu applizieren. Der Verzicht auf einen separaten Ansatz, in den ausschließlich die Referenzsubstanz dotiert wird, verringert den operativen Aufwand des Abbautests.

Eine solche *in-situ*-Positivkontrolle stellt zusätzlich ein Höchstmaß der Qualitätssicherung dar, da die mit den Testsubstanzen exponierte mikrobielle Population unmittelbar auf seine ausreichend hohe Aktivität überprüft wird. Wird der erwartete Abbau der Referenzsubstanz festgestellt, kann eine hemmende Wirkung der Testsubstanz(en) auf die mikrobielle Aktivität sicher ausgeschlossen werden.

Die Quantifizierung der Referenzsubstanz zusammen mit den Testsubstanzen in einer gemeinsamen Analyse verringert auch den operativen Aufwand hinsichtlich der Analytik. Die OECD TG 309 schlägt die beiden Chemikalien Anilin und Benzoat als Referenzsubstanzen vor. Aufgrund der Möglichkeit der Bildung von NER wird die Verwendung von Anilin in der Variante „*suspended sediment test*“ nicht empfohlen (Shrestha et al., 2016).

Sofern Umkehrphasen-Flüssigchromatographie (RPLC) zum Einsatz kommt, wird Benzoat empfohlen. Hochpolare Testsubstanzen können die Anwendung spezieller Analysemethoden (z. B. hydrophile Interaktionschromatographie (HILIC), überkritische Flüssigkeitschromatographie (SFC) oder Ionenaustauschchromatographie (IC)) erfordern. In diesem Fall empfiehlt sich der Einsatz einer alternativen Referenzsubstanz mit hoher analytischer Kompatibilität. Dies ist zulässig, wenn für die alternative Referenzsubstanz Ergebnisse aus Abbaustudien vorliegen, die die ausreichend schnelle aerobe biologische Abbaubarkeit der Substanz belegen. Als erwartetes Intervall für den aeroben biologischen Abbau einer Referenzsubstanz nennt die OECD TG 309 einen Zeitraum von weniger als zwei Wochen. Es ist auch zulässig, eine Referenzsubstanz zu verwenden, für die noch kein Nachweis der ausreichend schnellen aeroben biologischen Abbaubarkeit in einem OECD TG 309 vorliegt. In diesem Fall muss allerdings die vorrangig aerobe biologische Abbaubarkeit und damit die Eignung der Chemikalie als Referenzsubstanz auch durch eine zusätzliche sterile Kontrolle nachgewiesen werden (s. Kapitel 4.4.3).

Nachteilig für die Validität kann bei der empfohlenen Vorgehensweise ein Auftreten von Diauxie sein. Unter diesem Begriff versteht man ein zweiphasiges Wachstum chemotropher Organismen, denen zwei unterschiedliche Möglichkeiten (d. h. Chemikalien) der Energiegewinnung zur Verfügung stehen. Die Energiequellen werden streng nacheinander genutzt. Eine Folge der Diauxie kann daher sein, dass der Abbau einer Testsubstanz erst nach dem Abbau der Referenzsubstanz einsetzt. Da Referenz- und Testsubstanzen auf einem ähnlich niedrigen Konzentrationsniveau in den Replikaten eingesetzt werden ($\mu\text{g/L}$ -Bereich, s. Kapitel 4.1.4 und Kapitel 4.2.2), ist die Wahrscheinlichkeit eines Auftretens von Diauxie als eher gering einzuschätzen. Falls dennoch der Verdacht auf Diauxie begründet ist (z. B. bei entsprechenden Auffälligkeiten in der Abbaukinetik einer Testsubstanz), sollte die Testsubstanz bzw. die Mischung der Testsubstanzen separat von der Referenzsubstanz getestet werden.

4.2.2 Empfehlung: Die dotierte Konzentration der Referenzsubstanz entspricht dem Hundertfachen der analytischen Bestimmungsgrenze

Um den schnellen aeroben biologischen Abbau der Referenzsubstanz analytisch mit ausreichend hoher Auflösung nachweisen zu können, muss die dotierte Konzentration zu Beginn des Abbautests ausreichend hoch sein. Falls die Referenzsubstanz gemeinsam mit der Testsubstanz getestet wird (s. Kapitel 4.2.1), ist aber gleichzeitig Diauxie vorzubeugen und daher die dotierte Konzentration so niedrig wie möglich anzusetzen. Es wird daher empfohlen, die dotierte Konzentration der Referenzsubstanz auf das Hundertfache der analytischen Bestimmungsgrenze zu begrenzen.

Falls eine Mischung von Testsubstanzen getestet wird, wird empfohlen, die dotierte Konzentration der Referenzsubstanz nicht zur maximalen Summe der Konzentrationen der Testsubstanzen hinzuzurechnen (s. Kapitel 4.1.4). Bei begründetem Verdacht auf Diauxie sollte die Testsubstanz bzw. die Mischung der Testsubstanzen separat von der Referenzsubstanz getestet werden. In diesem Fall entfällt die Empfehlung zur Begrenzung der dotierten Konzentration auf das Hundertfache der analytischen Bestimmungsgrenze.

4.2.3 Empfehlung: Stamm- und Dotierlösungen in deionisiertem Wasser herstellen und die wasserlöslichen Salze der Testsubstanzen verwenden

Für Test- und Referenzsubstanzen mit ausreichend hoher Wasserlöslichkeit über 1 mg/L wird empfohlen, die Stamm- und Dotierlösungen in deionisiertem Wasser herzustellen. Auf die Verwendung eines organischen Lösungsvermittlers kann verzichtet werden. Dies unterstützt eine einfache, kostengünstige und effiziente Durchführung, weil die Notwendigkeit einer Lösungskontrollkontrolle entfällt.

Die Stammlösungen der Referenz- und Testsubstanzen werden als Einzelsubstanzlösungen, die Dotierlösungen der Testsubstanzen als Mischung hergestellt. Die Dotierlösung der Referenzsubstanz wird als Einzelsubstanzlösung hergestellt. Um Fehler bei der Herstellung (Einwaage, Berechnung, Pipettieren, Auffüllen, etc.) auszuschließen zu können, wird eine analytische Überprüfung der Lösungen vor der Durchführung des Abbauersuchs empfohlen.

Um die Verdünnung des Testwassers bei der Dotierung zu minimieren, soll nach OECD TG 309 das verwendete Volumen der Dotierlösung(en) bei der Herstellung der Testansätze so gering wie möglich gehalten werden (d. h. <10 % des Endvolumens der Wasserphase). Kann dies unter Verwendung von deionisiertem Wasser als Lösungsmittel nicht eingehalten werden, wird empfohlen, die Dotierlösungen in autoklaviertem Testwasser herzustellen. Sollte ein Autoklavieren des Testwassers nicht möglich sein, wird die Herstellung der Dotierlösungen in Testwasser unmittelbar vor dem Ansetzen der Testreplikate empfohlen.

Da freie Säuren und freie Basen in nicht-gepuffertem Wasser (z. B. deionisiertes Wasser) schwer löslich sein können, wird bei entsprechender Verfügbarkeit empfohlen, deren wasserlösliche Salze bei der Herstellung von Stamm- und Dotierlösungen zu verwenden. Das jeweilige Gegenion ist bei der Einwaage zu berücksichtigen. Sollten sich extreme pH-Werte in der Dotierlösung einstellen, ist sicherzustellen, dass der von der OECD TG 309 gültige pH-Bereich während des Abbautests eingehalten wird. Eine relevante Beeinflussung des pH-Wertes ist jedoch aufgrund der hohen Verdünnung der Dotierlösung im Testgefäß nicht zu erwarten.

Bei Verwendung von Salzen der Testsubstanzen sind bevorzugt solche mit anorganischem Gegenion auszuwählen, auch um Diauxie auszuschließen. Jedoch werden auch typische organische Anionen organischer Basen (z. B. Acetat, Citrat, etc.) in der geringen Konzentration als unproblematisch eingeschätzt und eine Beeinflussung des Abbautests ist nicht zu erwarten. Gleiches gilt für Konzentrationen typischer anorganischer Kationen organischer Säuren wie Na⁺ oder K⁺.

4.3 Entnahme von Wasser und Sediment für den Abbautest (Absatz 18) und Testbedingungen (Absätze 24, 25 und 26)

Hinsichtlich der Auswahl des Oberflächenwassers für die Entnahme von Wasser und Sediment für den Abbautest verweist die OECD TG 309 auf den genauen Anlass der Untersuchung. Auch der CLP-Leitfaden erwägt die Verwendung eines Inokulums aus einem relevanten aquatischen System (ECHA, 2024; Punkt II.2.3.1 b). Es folgen Empfehlungen zur Auswahl des Oberflächenwassers und der Testbedingungen.

4.3.1 Empfehlung: Entnahmeort von Oberflächenwasser und Sediment ist für die testdurchführende Institution relevant

Für Testsubstanzen, bei denen im Verlauf des Abbautests keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase (Fall 2) erwartet wird, also beispielsweise die priorisierten Befundstoffe der Stoffliste in Kapitel 6, wird empfohlen, das Wasser für den Abbautest aus einem für das testdurchführende Institut relevanten Gewässer zu entnehmen, auch falls dies eventuell durch die Testsubstanz belastet ist. WVU und Behörden können auf diese Weise Befundstoffe testen, die in den eigenen Wasserressourcen detektiert wurden.

Falls keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase beobachtet wird (Fall 2), stärkt diese Empfehlung die Validität des Abbautests. Eine an die Testsubstanz potenziell adaptierte mikrobielle Population lässt ein erhöhtes aerobes biologisches Abbaupotenzial erwarten. Auch wird eine Testsubstanz, die unter Verwendung von vorbelastetem Wasser eine fehlende bzw. unzureichende intrinsische Abbaubarkeit in der Wasserphase zeigt,

vermutlich auch unter Verwendung von nicht vorbelastetem Wasser (d. h. potenziell nicht adaptierte mikrobielle Population) nicht abgebaut.

Eine Entnahme im direkten Abstrom von größeren Einleitern (z. B. im Ablaufbereich von industriellen Direkteinleitern oder kommunalen Kläranlagen) ist jedoch unbedingt zu vermeiden. Auch ist das Testwasser vor der Durchführung des Abbautests auf die Anwesenheit der Testsubstanz(en) zu analysieren und die gegebenenfalls nachgewiesenen Konzentrationen sind bei der Herstellung der Dotierlösungen zu berücksichtigen (s. Kapitel 4.1.4 und Kapitel 4.2.3). Das Testwasser sollte jedoch nicht mit der Referenzsubstanz belastet sein.

Wird wider Erwarten eine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase beobachtet (Fall 1), kann die Verwendung von vorbelastetem Wasser (d. h. potenziell adaptierte mikrobielle Population) dazu führen, dass das Testergebnis nicht valide ist. Zwar erlaubt die OECD TG 309 bei einer konkreten Fragestellung nach der Abbaubarkeit einer Chemikalie in einem zuvor exponierten Wasserkörper auch einen Entnahmeort mit entsprechender Belastungshistorie, allerdings lässt sich der biologische Abbau durch eine adaptierte mikrobielle Population nicht auf die aquatische Umwelt verallgemeinern.

Ist das Ziel ein möglichst allgemeingültiges Testergebnis zu erhalten, sollte ein durch die Testsubstanz unbeeinflusster Gewässerabschnitt (d. h. ohne adaptierte mikrobielle Population) gewählt werden.

4.3.2 Empfehlung: Den Abbautest bei 12 °C durchführen

Es wird empfohlen, den Abbautest nach OECD TG 309 bei 12 °C durchzuführen. Zwar empfiehlt die Testrichtlinie die Freilandtemperatur des Oberflächenwassers als Testtemperatur, jedoch wird in den Leitlinien zu Informationsanforderung und Stoffsicherheitsbeurteilung der ECHA (Kapitel R.7b (ECHA, 2023c) und Kapitel R.11 (ECHA, 2023b)) eine Temperatur von 12 °C als Referenztemperatur für Europa angegeben. Bei einer Testtemperatur von 12 °C kann die DegT₅₀ als Ergebnis des Abbautests unmittelbar mit den Kriterien der CLP-Verordnung für P und vP verglichen werden. Bei einer davon abweichenden Testtemperatur wäre eine Normalisierung der ermittelten DegT₅₀ auf 12 °C notwendig.

4.3.3 Empfehlung: Test im Dunkeln durchführen

Gemäß Testrichtlinie OECD TG 309 kann der Test im Dunkeln oder bei diffusem Licht durchgeführt werden. Die Testrichtlinie empfiehlt eine Durchführung im Dunkeln, dieser Empfehlung schließt sich das vorliegende Sachverständigen Gutachten an.

4.3.4 Empfehlung: Testdauer von 60 Tagen

Gemäß CLP-Verordnung gilt eine Chemikalie als sehr persistent (vP), wenn in der Wasserphase nach 60 Tagen weniger als 50 % der Ausgangskonzentration aerob biologisch abgebaut wurden. Für Testsubstanzen, bei denen im Verlauf des Abbautests keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase (Fall 2) erwartet wird, also beispielsweise die priorisierten Befundstoffe der Stoffliste in Kapitel 6, wird empfohlen, den Abbautest nach OECD TG 309 über die Testdauer von 60 Tagen durchzuführen.

4.3.5 Empfehlung: Testgefäße schütteln, nicht rühren

Es wird das Schütteln der Testgefäße empfohlen. Die Verwendung eines Magnetrührers kann zu einer kontinuierlichen Zerkleinerung des hinzugefügten Sediments bzw. auch der nach Filtration/Zentrifugation noch vorhandenen Feststofffraktion und damit zur kontinuierlichen

Schaffung neuer potenzieller Sorptionsstellen für die Test- und Referenzsubstanzen führen (Shrestha et al., 2016).

4.4 Herstellung der Testansätze (Absätze 28, 30 und 31) und spezifische chemische Analyse (Absatz 41)

Die Dimensionierung der Testansätze und auch die Entscheidung, ob ein Replikat während des laufenden Abbautests mehrfach (d. h. zu verschiedenen Zeitpunkten) für die stoffspezifische Analyse beprobt oder in Gänze verwendet wird (z. B. für eine Extraktion), hängen u. a. von der verwendeten Variante („*pelagic test*“ oder „*suspended sediment test*“) und den Anforderungen der Analytik ab. Die Empfehlungen sind daher grundsätzlich aufeinander abzustimmen.

4.4.1 Empfehlung: Dimensionierung der Testansätze und die Probenahmestrategie an die Variante des Abbautests und die Anforderungen an die Analytik anpassen

Die folgenden Empfehlungen zur Dimensionierung der Testansätze und zur Probenahmestrategie beziehen sich auf Testsubstanzen, bei denen im Verlauf des Abbautests keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase (Fall 2) erwartet wird, also beispielsweise die priorisierten Befundstoffe der Stoffliste in Kapitel 6. Basierend auf der Variante des Abbautests und dem für die Analyse erforderlichen Probenvolumen je Probenahmezeitpunkt werden drei Fälle unterschieden (s. Tabelle 1 und die folgenden Erläuterungen).

Tabelle 1: Empfehlungen zur Dimensionierung der Testansätze und zur Probenahmestrategie für die drei Fälle basierend auf der Variante des Abbautests und dem für die Analyse erforderlichen Probenvolumen je Probenahmezeitpunkt

Fall	Variante des Abbautests	Für die Analyse erforderliches Probenvolumen je Probenahmezeitpunkt	Dimensionierung der Testansätze	Teilprobe je Probenahmezeitpunkt
A1	<i>pelagic test</i>	≤ 25 mL	300 mL Testwasser, Flasche mit 1.000 mL Nennvolumen	5 - 25 mL
A2	<i>pelagic test</i>	> 25 - 100 mL	100 mL Testwasser, Flasche mit 300 mL Nennvolumen	gesamtes Replikat
B	<i>suspended sediment test</i>	≤ 100 mL	100 mL Testwasser, Flasche mit 300 mL Nennvolumen	gesamtes Replikat

Gemäß der Testrichtlinie OECD TG 309 sollen mindestens 100 mL Wasserphase verwendet werden und das Testgefäß sollte gleichzeitig zu nicht mehr als einem Drittel gefüllt sein.

Fall A1: Es wird empfohlen, den Abbautest mit einem Wasservolumen von 300 mL in einer Flasche mit einem Nennvolumen von 1.000 mL durchzuführen. Dies stellt in vielen Fällen einen geeigneten Kompromiss zwischen dem Platzbedarf auf der Schüttelvorrichtung und dem für die Analysen erforderlichen Volumen der Teilproben dar.

Von einem Replikat wird je Probenahmezeitpunkt (s. Kapitel 4.4.4) eine Teilprobe von 5 - 25 mL für die Analyse entnommen. Bei insgesamt sieben Probenahmezeitpunkten und einem maximalen Teilprobenvolumen von 25 mL ist sichergestellt, dass vor der letzten Probenahme eine Wassermenge von mindestens 100 mL im Abbautest nicht unterschritten wird.

Ein Replikat wird nach der Entnahme einer Teilprobe nicht verworfen, sondern der Abbaueversuch wird mit diesem Replikat fortgesetzt. Auf diese Weise kann erheblicher Mehraufwand bei der Herstellung der Replikate vermieden werden.

Fälle A2 und B: Es wird empfohlen, den Abbautest nach OECD TG 309 mit einem Wasservolumen von 100 mL in einer Flasche mit 300 mL Nennvolumen durchzuführen. Für die Analyse wird das gesamte Replikat verwendet bzw. im Falle einer Entnahme einer Teilprobe der Abbautest für das beprobte Replikat beendet. Dies erfordert eine insgesamt deutlich höhere Anzahl von Replikaten als Fall A1.

Bei einem „*suspended sediment test*“ ist es in Abhängigkeit von der Qualität des Sediments fraglich, ob es möglich ist, repräsentative Teilproben zu entnehmen und die verbleibende Suspension im Testgefäß hinsichtlich ihres Wasser/Feststoff-Verhältnisses über die gesamte Testdauer in ausreichendem Maße konstant zu halten. Daher gilt diese Empfehlung im Gegensatz zur Variante „*pelagic test*“ unabhängig von dem für die Analyse erforderlichen Probenvolumen.

4.4.2 Empfehlung: Bei einzelner Testsubstanz vier und bei Mischungen sechs technische Replikate

Gemäß der Testrichtlinie OECD TG 309 müssen wenigstens zwei Replikate pro Konzentration der Testsubstanz(en) hergestellt werden und die Verwendung von mindestens drei Replikaten pro Konzentration wird empfohlen. Sofern ein Replikat nach einer Probenahme nicht weiter inkubiert wird (z. B., weil die gesamte Wasserphase für die Analytik herangezogen wird, s. Kapitel 4.4.1), gilt die Empfehlung für jeden Zeitpunkt der Probenahme (s. Kapitel 4.4.4).

Über die Anforderungen der Testrichtlinie hinaus wird in diesem Sachverständigengutachten empfohlen, den Abbautest nach OECD TG 309 einer einzelnen Testsubstanz mit vier Replikaten, und bei der Testung von Mischungen mit sechs Replikaten, durchzuführen.

Diese Empfehlung erhöht zwar den Ressourcenbedarf, stärkt aber die statistische Aussagekraft der Testergebnisse und damit deren Validität. Durch mehr Replikate können Ausreißer leichter identifiziert werden und die Testergebnisse sind besser reproduzierbar. Vor allem bei der Testung von Mischungen ist der Mehraufwand durch sechs Replikate vertretbar, da die gleichzeitige Testung mehrerer Chemikalien in einem Ansatz bereits erhebliche Ressourcen einspart.

4.4.3 Empfehlung: Verzicht auf eine sterile Kontrolle

Für Testsubstanzen, bei denen im Verlauf des Abbautests keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase (Fall 2) angenommen wird, also beispielsweise die priorisierten Befundstoffe der Stoffliste in Kapitel 6, wird empfohlen, den Abbautest nach OECD TG 309 ohne sterile Kontrolle durchzuführen.

Der Verzicht auf die sterile Kontrolle unterstützt eine einfache, kostengünstige und effiziente Durchführung des Abbautests. Im Fall 2 können abiotische Prozesse wie Hydrolyse, Verflüchtigung und Sorption auch ohne eine sterile Kontrolle ausgeschlossen werden und somit ein valides Ergebnis erreicht werden.

Sofern Zweifel hinsichtlich der Datenlage zu den physikochemischen Eigenschaften der Testsubstanz bestehen, ist eine sterile Kontrolle durchzuführen. Denn, falls wider Erwarten eine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase beobachtet wird (Fall 1), kann diese Empfehlung dazu führen, dass das Testergebnis nicht valide ist, da ohne eine sterile Kontrolle eine Unterscheidung von biologischen und abiotischen Prozessen nicht möglich ist. In diesem Fall muss der Abbautest mit einer sterilen Kontrolle wiederholt werden. In der Variante

“*suspended sediment test*” ist vermutlich zusätzlich auch die ^{14}C -Markierung der Testsubstanz notwendig.

Eine grundsätzliche Ausnahme von dieser Empfehlung stellt der Einsatz einer Chemikalie als Referenzsubstanz dar, deren Eignung noch nicht durch vorliegende Ergebnisse aus standardisierten Abbautests nachgewiesen wurde. Um abiotische Prozesse wie Hydrolyse, Verflüchtigung und Sorption ausschließen zu können, muss eine sterile Kontrolle durchgeführt werden. In diesem Fall wird empfohlen, auch die Testsubstanz(en) zur sterilen Kontrolle hinzuzufügen, da der Mehraufwand aufgrund der aufeinander abgestimmten Analytik vernachlässigbar ist.

4.4.4 Empfehlung: Probenahme für die Analyse nach 0, 3, 7, 14, 28, 42 und 60 Tagen

Für Testsubstanzen, bei denen im Verlauf des Abbautests keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase (Fall 2) erwartet wird, also beispielsweise die priorisierten Befundstoffe der Stoffliste in Kapitel 6, wird empfohlen, die Probenahme für die Analyse zu Beginn wöchentlich und zum Ende zweiwöchentlich durchzuführen. Aufgrund der Applikation der Referenzsubstanz im Testgefäß wird eine zusätzliche Entnahme an Tag 3, also innerhalb der ersten Expositionswoche, empfohlen.

In der Regel sind mindestens fünf Messpunkte während der Abbauphase erforderlich. Sieben Messpunkte erhöhen die Wahrscheinlichkeit, durch die Modellierung der Abbaukinetik eine zuverlässige Geschwindigkeitskonstante und damit eine valide DegT_{50} ableiten zu können.

4.4.5 Empfehlung: Proben einfrieren und in einer gemeinsamen Sequenz analysieren

Es wird empfohlen, die zu analysierenden Proben einzufrieren und deren Analyse in einer gemeinsamen Analysensequenz durchzuführen. Gemäß OECD TG 309 sollen Proben für eine längere Lagerung bei unter -18 °C eingefroren oder chemisch konserviert werden.

Voraussetzung für die Empfehlung ist, dass die Stabilität der Testsubstanz(en) und Referenzsubstanz durch entsprechende Vorversuche nachgewiesen wurde. Für diesen Vortest kann die Probe von Tag 0 (c_0) herangezogen werden, welche gemäß OECD TG 309 zunächst zeitnah (d. h. innerhalb von 24 h) ohne vorheriges Einfrieren zu analysieren ist. Ein Einfrier- und Auftauzyklus der Testsubstanzen im verwendeten Testwasser ist als Vortest zur Bestimmung der Lagerungsstabilität ausreichend, da dies die kritischen Prozesse bei dieser Art der Lagerung sind. Nach der initialen Analyse (c_0) wird die Probe eingefroren, an einem der nächsten zwei Folgetage (d. h. vor der nächsten Probenahme) aufgetaut und analysiert. Wurden alle Testsubstanzen als stabil beurteilt (z. B. maximale Abweichung der ursprünglich nachgewiesenen Konzentration von 10 % (EC, 2023)), kann die Empfehlung für alle weiteren Proben des Abbautests umgesetzt werden. Die Ergebnisse der Vorversuche sind zu dokumentieren und dem Bericht zur fachlichen Legitimation der Vorgehensweise beizulegen.

Diese Empfehlung unterstützt eine einfache, kostengünstige und effiziente Durchführung. Mögliche Tagesschwankungen der Messempfindlichkeit müssen bei dieser Vorgehensweise nicht berücksichtigt werden, was sich vorteilhaft auf die statistische Auswertung der Messergebnisse auswirkt.

Erfolgt die Analyse der Proben innerhalb von 24 Stunden, sind diese gemäß OECD TG 309 bei 2 °C bis 4 °C zu lagern.

4.5 Testdaten und Berichterstattung (Absätze 43 bis 53)

Vorgaben zur kinetischen Auswertung der Messdaten und zur Berichterstattung sind in der Testrichtlinie OECD TG 309 beschrieben. Erläuterungen bietet u. a. der FOCUS-Leitfaden zur Abschätzung der Persistenz und Abbaukinetik aus Studien zum Umweltverhalten (FOCUS, 2006).

Zwar werden durch das vorliegende Sachverständigengutachten keine Empfehlungen gegeben, aber die Autoren streben die Etablierung eines Netzwerkes zwischen testdurchführenden Institutionen zur Unterstützung bei der kinetischen Auswertung der Messdaten und der Berichterstattung an. Interessierte sind eingeladen, sich zu beteiligen.

5 Vorgehensweise bei der Priorisierung und De-Priorisierung von Befundstoffen für einen „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309

5.1 Stoffliste mit 1250 Befundstoffen

Das UBA hat 2023 eine Literaturrecherche veröffentlicht, welche 1289 Chemikalien (Befundstoffe) auflistet, die bisher in den sechs Matrices Kläranlagenablauf (WTPE, 442 Stoffe), Oberflächenwasser (SW, 1021 Stoffe), Uferfiltrat (BF, 114 Stoffe), Grundwasser (GW, 338 Stoffe), Rohwasser (RW, 212 Stoffe) und Trinkwasser (DW, 385 Stoffe) detektiert wurden (Arp et al., 2023).

In diesem Sachverständigengutachten wurden zunächst die Identitäten dieser aus der Literatur bekannten Befundstoffe überprüft, gegebenenfalls Informationen ersetzt und ergänzt sowie Strukturmerkmale (SMILES, InChI) hinzugefügt. Auch wurden 45 Duplikate entfernt sowie sechs weitere Befundstoffe aus anderen Quellen ergänzt. Die resultierende Stoffliste enthielt damit 1250 Befundstoffe.

Für die 1250 Befundstoffe wurden ausgewählte Parameter zur Beschreibung von Adsorptionstendenz, Flüchtigkeit und Abbau recherchiert bzw. mittels QSAR (Quantitative/Qualitative Struktur-Wirkungs-Beziehungen) generiert und diese Informationen ergänzt. Auf Grundlage dieser Daten wurden die Befundstoffe hinsichtlich ihrer Eignung für einen „kalten“ Abbautest nach OECD TG 309 fachlich bewertet. Befundstoffe, die als ungeeignet für diese Variante des Abbautests identifiziert wurden, werden als *de-priorisiert* bezeichnet.

5.2 De-Priorisierung und Priorisierung

Das Vorgehen wurde in drei Arbeitsschritte unterteilt und ist in Abbildung 1 schematisch dargestellt.

Auf Basis der ermittelten Daten wurden im ersten Schritt solche Befundstoffe de-priorisiert, die aufgrund ihres hohen Potenzials zur Adsorption und/oder ihres hohen Potenzials zur Flüchtigkeit mit hoher Wahrscheinlichkeit nicht in der Wasserphase des Abbautests verbleiben. Dies betraf 269 Befundstoffe.

Im zweiten Schritt wurden solche Befundstoffe de-priorisiert, für die eine biologische Abbaubarkeit vermutet wird. Dies betraf 177 Befundstoffe.

Beide Arbeitsschritte wurden parallel durchgeführt, so dass 41 Befundstoffe sowohl aufgrund ihrer physikochemischen Eigenschaften als auch aufgrund ihrer vermuteten biologischen Abbaubarkeit de-priorisiert wurden.

Abschließend erfolgte als dritter Schritt eine finale Kontrolle der Ergebnisse.

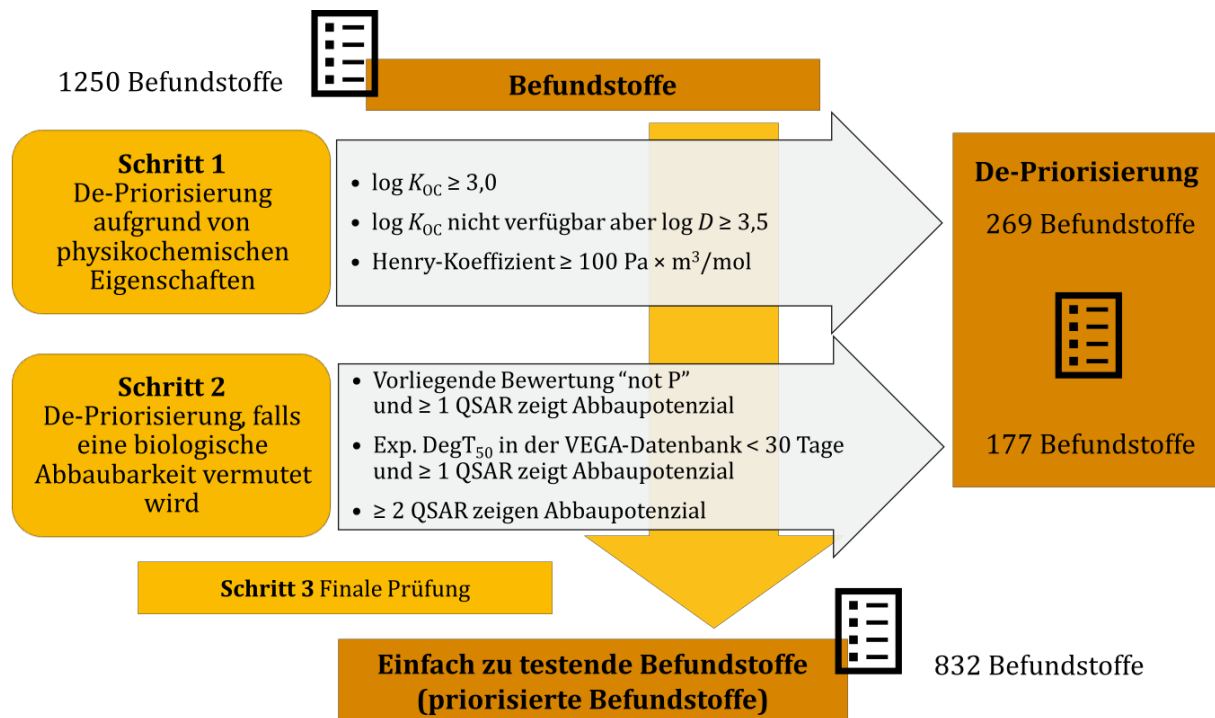
Die drei Arbeitsschritte werden in den folgenden Absätzen genauer beschrieben.

Schritt 1: Das Potenzial zur Adsorption, beispielsweise an der Wand des Testgefäßes und am suspendierten Sediment, wurde – sofern verfügbar – über Verteilungskoeffizienten wie dem M/vM-Kriterium $\log K_{oc}$ aus Arp & Hale (2022) sowie Arp et al. (2023) abgeschätzt. Ein $\log K_{oc} \geq 3,0$ führte zu einer De-Priorisierung. Lag kein $\log K_{oc}$ vor, wurde der $\log D$ bei pH 7,4 als Maß der Lipophilie mithilfe von zwei voneinander unabhängigen QSAR berechnet und der Mittelwert dieser Ergebnisse für die Beurteilung herangezogen. Für die Berechnung der Einzelwerte von $\log D$ wurden die Plattformen OPERA (Open (Quantitative) Structure-activity/property Relationship App) (Mansouri et al., 2018) sowie Percepta ACD/Labs Release 2022.2.3

(Build 3577, 7 Jun 2022, GALAS-Modell) verwendet. Bei einem Mittelwert von $\log D \geq 3,5$ wurde ein Befundstoff de-priorisiert. Da der $\log D$ im Gegensatz zum herangezogenen $\log K_{OC}$ berechnet war, wurde mit dem um 0,5 Einheiten höheren Wert einer potenziellen Unsicherheit Rechnung getragen.

Der Henry-Koeffizient als Maß der Flüchtigkeit wurde ebenfalls mittels genannter Software von ACD/Labs berechnet (Bezugstemperatur 12 °C). Ein Wert von $100 \text{ Pa} \times \text{m}^3/\text{mol}$ oder mehr führte zur De-Priorisierung. Dieser Wert wurde den Vorgaben der OECD TG 309 entnommen.

Abbildung 1: De-Priorisierung und Priorisierung der bekannten Befundstoffe



Quelle: eigene Darstellung, TZW: DVGW-Technologiezentrum Wasser

Schritt 2: Bei der Bewertung, ob für einen bekannten Befundstoff eine für die De-Priorisierung ausreichende biologische Abbaubarkeit in einem Abbautest nach OECD TG 309 vermutet wird, wurde unter anderem auf die Bewertung abgeschlossener Arbeiten (Arp & Hale, 2022; Arp et al., 2023) sowie auf experimentell bestimmte DegT_{50} , die in der VEGA-Datenbank¹ als Modellgrundlage hinterlegt sind, zurückgegriffen. Zusätzlich wurden verschiedene QSAR sowie Kombinationen aus diesen verwendet, wie beispielsweise der Ansatz innerhalb der Hot-Target-Analytik (BI-OWIN-Kombination aus Nödler et al. (2019)) sowie der P-Score (Hartmann et al., 2023).

Ergebnisse der beiden QSAR VEGA sowie eines aktuell noch in der Entwicklung befindlichen Verfahrens von Hafner et al. (2023) wurden berücksichtigt, sofern die Qualität der Ergebnisse als *moderate* oder *good* gekennzeichnet wurde (VEGA) bzw. die log Standardabweichung der berechneten DegT_{50} nach Hafner et al. (2023) weniger als 0,75 betrug. Eine biologische Abbaubarkeit im Sinne dieses Sachverständigengutachtens wird bei einer berechneten DegT_{50} von unter 30 Tagen vermutet. Die DegT_{50} der Befundstoffe nach Hafner et al. (2023) wurden freundlicherweise von Jasmin Hafner für dieses Sachverständigengutachten berechnet und zur Verfügung gestellt.

¹ <https://www.vegahub.eu/>

Die BIOWIN-Kombination aus Nödler et al. (2019) berücksichtigt die Modelle 1 bis 6 der EPI-Suite der US-EPA. Mittels Kalibrierung über 45 Chemikalien, für die TZW-interne Realdaten zum Verhalten während der Uferfiltration und/oder Abwasserbehandlung vorlagen, wurde für Chemikalien, für die eine biologische Abbaubarkeit vermutet wird, der Ergebnisbereich $\geq 0,6$ abgeleitet (Nödler et al., 2019). Zielwert der durchgeführten Kalibrierung war eine Vorhersage mit mindestens 80%iger Richtigkeit.

Forscher des niederländischen Nationalen Instituts für öffentliche Gesundheit und Umwelt (RIVM) haben ein computergestütztes Screening-Tool zur Erkennung persistenter, mobiler und toxischer Chemikalien entwickelt, den sogenannten PMT-Score (Hartmann et al., 2023). Der grundlegende Ansatz besteht darin, Chemikalien von 0 (geringes PMT-Potenzial) bis 1 (sehr hohes PMT-Potenzial) einzustufen. Der PMT-Score setzt sich rechnerisch aus den Einzelscores für P, M und T zusammen. Grundlage für die Berechnung des P-Scores ist das Ergebnis des BIOWIN-3-Modells der EPI-Suite der US-EPA. Eine biologische Abbaubarkeit im Sinne dieses Sachverständigengutachtens wird bei einem P-Score von $\leq 0,09$ vermutet. Dieser Wert wurde anhand von Beispielen empirisch abgeleitet. Die P-Scores aller Befundstoffe wurden freundlicherweise vom RIVM für dieses Sachverständigengutachten berechnet und zur Verfügung gestellt.

Schritt 3: Im dritten Arbeitsschritt erfolgte eine abschließende Überprüfung der Einzelbewertungen anhand nachträglich festgelegter Kriterien. Es wurden Befundstoffe, die aufgrund ihrer bekannten biologischen Abbaubarkeit gute Indikatoren für unbehandeltes Abwasser darstellen (z. B. Coffein (Warner et al., 2019)), nachträglich de-priorisiert (sechs Befundstoffe: Coffein, Paraxanthin, Theobromin, Theophyllin, Anilin und Ibuprofen). Auch wurden sieben Befundstoffe, die das für eine De-Priorisierung festgelegte Kriterium für Flüchtigkeit (berechneter Henry-Koeffizient) nicht erfüllten, nachträglich de-priorisiert. Dies betrifft die Befundstoffe 1,1,2,2-Tetrachlorethan, 1,1,2-Trichlorethan, 1,2,3-Trichlorpropan, Dibromchlormethan, Bromoform, 1,2-Dibromethan und Dibrommethan. Aufgrund von Erfahrungswerten weisen diese sieben Befundstoffe sehr wahrscheinlich eine erhöhte Tendenz für eine Verflüchtigung aus der wässrigen Phase auf. Bei den genannten Trihalogenmethanen handelt es sich zudem um Desinfektionsnebenprodukte und deren Befundlage im Trinkwasser steht meist nicht in Zusammenhang mit einer Kontamination des Rohwassers.

De-priorisierte Befundstoffe: Eine De-Priorisierung in diesem Sachverständigengutachten bedeutet nicht, dass für diese Befundstoffe ein valides Testergebnis nicht auch ohne ^{14}C -Markierung erreicht werden könnte. Im Vergleich zu den priorisierten Befundstoffen ist bei einem „kalten“ Abbautest nach OECD TG 309 mit de-priorisierten Befundstoffen von einem deutlich höheren methodischen Aufwand sowie einem erhöhten Risiko für einen nicht-validen Testausgang auszugehen. Die de-priorisierten 418 Chemikalien sind im Anhang in Tabelle 5 aufgelistet.

Ranking innerhalb der Stofflisten: Die Befundstoffe in beiden Stofflisten aufgeteilt auf Tabelle 2, Tabelle 3 und Tabelle 5 wurden jeweils nach absteigendem vPvM-Score sortiert. Der vPvM-Score setzt sich rechnerisch aus den Einzelscores für P und M zusammen und kann als Maß für die Trinkwasserrelevanz einer Chemikalie angesehen werden.

Die vPvM-Scores aller Befundstoffe wurden freundlicherweise vom RIVM für dieses Sachverständigengutachten generiert und zur Verfügung gestellt. Ein statistischer Vergleich der vPvM-Scores der de-priorisierten und priorisierten Befundstoffe ist im Anhang in Kapitel A.1 dargestellt.

6 Stoffliste mit den für einen „kalten“ Abbautest nach OECD TG 309 priorisierten Befundstoffen

Mittels der in Kapitel 5.2 dargestellten drei Arbeitsschritte wurden die Befundstoffe identifiziert und priorisiert, für die in einem Abbautest nach OECD TG 309 keine ausgeprägte und signifikante intrinsische aerobe biologische Abbaubarkeit vermutet wird und die aufgrund ihrer physikochemischen Eigenschaften während der gesamten Testdauer in der Wasserphase verbleiben.

Die Liste der 832 für einen „kalten“ Abbautest nach OECD TG 309 priorisierten Befundstoffe wurde in zwei Prioritätsstufen unterteilt: Tabelle 2 enthält Befundstoffe, die bereits in Trinkwasser, Grundwasser, Rohwasser oder Uferfiltrat nachgewiesen wurden (Kategorie A). Tabelle 3 enthält Befundstoffe, die bislang ausschließlich in Kläranlagenablauf und/oder Oberflächenwasser nachgewiesen wurden (Kategorie B).

Die Befundstoffe in Kategorie A (422 Befundstoffe) und Kategorie B (410 Befundstoffe) wurden jeweils nach absteigendem vPvM-Score sortiert.

Die Spalten der Tabellen enthalten folgende Informationen:

- ▶ Die Spalten **CAS Nr.**, **EC Nr.** und **Name** enthalten die **Identifikationsmerkmale** der Befundstoffe. *CAS Nr.* und *EC Nr.* stehen jeweils beispielhaft für eine in der CAS- bzw. REACH-Datenbank erfasste Chemikalie, in der der in diesem Sachverständigengutachten betrachtete Befundstoff (d. h. die organische Spezies) enthalten ist. Somit können *CAS Nr.* und *EC Nr.* gegebenenfalls Salze der betrachteten Befundstoffe repräsentieren (z. B. ein Na-Salz einer Säure – der betrachtete Befundstoff war aber die freie Säure bzw. das organische Anion). In der Spalte *Name* wird, sofern anwendbar, der Name der freien Säure bzw. Base angegeben. Aus Darstellungsgründen werden bevorzugt Trivialnamen und gegebenenfalls gängige Abkürzungen verwendet.
- ▶ In der Spalte **vPvM** sind die **vPvM-Scores** (dimensionslos) der Befundstoffe aufgelistet. Der vPvM-Score setzt sich rechnerisch aus den Einzelscores für P und M zusammen und kann als Maß für die Trinkwasserrelevanz einer Chemikalie angesehen werden (von 0 = gering bis 1 = hoch).
- ▶ In den Spalten **Ad1** und **Ad2** (Ad für Adsorption) sind die verwendeten Größen zur Abschätzung der Adsorptionstendenz der Befundstoffe aufgelistet. Aus Darstellungsgründen werden die Werte auf eine Nachkommastelle gerundet angegeben. In der Spalte *Ad1* sind, sofern verfügbar, die $\min \log\text{-}K_{OC}$ -Werte aus Arp & Hale (2022) bzw. Arp et al. (2023) aufgelistet. Eine Leerzelle bedeutet, dass diese Information nicht vorliegt. In Spalte *Ad2* sind die Mittelwerte der berechneten $\log\text{-}D$ -Werte aufgelistet.
- ▶ In der Spalte **V** (V für Verflüchtigung) sind die berechneten **Henry-Koeffizienten** (in $\text{Pa} \times \text{m}^3/\text{mol}$) der Befundstoffe aufgelistet. Aus Darstellungsgründen werden die Werte auf ganze Zahlen gerundet angegeben.
- ▶ In den Spalten **Deg1** bis **Deg6** (Deg für *degradation*) sind die verwendeten Größen zur Abschätzung, ob eine **biologische Abbaubarkeit** vermutet wird, aufgelistet.
 - Die Spalte *Deg1* enthält die Schlussfolgerungen zur Persistenz (*P-conclusion*) von Arp & Hale (2022) bzw. Arp et al. (2023). Eine Leerzelle bedeutet, dass diese Information nicht vorliegt.

- Die Spalte *Deg2* enthält die angepasste Kombination verschiedener BIOWIN-Modelle (BIOWIN1 bis BIOWIN6) nach Nödler et al. (2019) (dimensionslos).
- Die Spalte *Deg3* enthält die berechneten DegT₅₀-Werte (in Tagen) der Befundstoffe nach Hafner et al. (2023), sofern bei der log Standardabweichung des DegT₅₀-Werts ein Wert von 0,75 nicht überschritten wurde. Eine Leerzelle bedeutet, dass dieses Qualitätskriterium nicht erreicht wurde. Aus Darstellungsgründen werden die Werte auf ganze Zahlen gerundet angegeben.
- Die Spalte *Deg4* enthält, sofern verfügbar, die in der VEGA-Datenbank hinterlegten experimentellen DegT₅₀ (in Tagen) der Befundstoffe. Eine Leerzelle bedeutet, dass diese Information nicht vorliegt.
- Die Spalte *Deg5* enthält die mittels VEGA-QSAR berechneten DegT₅₀ (in Tagen) der Befundstoffe, sofern die Qualität des Ergebnisses von der Plattform als *moderate* oder *good* kategorisiert wurde. Eine Leerzelle bedeutet, dass dieses Qualitätskriterium nicht erreicht wurde.
- Die Spalte *Deg6* enthält die P-Scores (dimensionslos) der Befundstoffe nach Hartmann et al. (2023).

Die Stofflisten stehen auch im MS Excel-Format zum Download bereit. Zusätzlich zu den genannten Spalten enthalten diese Dateien die Strukturmerkmale der Befundstoffe (SMILES, InChI) und aufbauend auf der Tabelle von Arp et al. (2023) die maximal nachgewiesenen Konzentrationen der Befundstoffe in den verschiedenen Wassermatrizes (WTPE, SW, DW, GW, RW, BF) sowie die dazugehörigen Referenzen in einem gesonderten Blatt („Ref Index“).

Tabelle 2: Priorisierte Stoffe für die Durchführung eines „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309. Sortierung nach absteigendem vPvM-Score, Teil 1

Kategorie A: Befundstoffe, für die mindestens in einem der folgenden Kompartimente Positivbefunde vorliegen: Trinkwasser, Grundwasser, Rohwasser, Uferfiltrat

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
110871-86-8	629-019-8	Sparfloxacin	0,89		-0,9	0	n.a.	-0,15				0,97
73334-07-3	277-385-9	Iopromide	0,89		-2,6	0	n.a.	-0,26				0,85
1401-69-0	215-754-8	Tylosin	0,88		0,8	0	n.a.	-0,15				0,95
8025-81-8	232-429-6	Spiramycin	0,88		0,8	0	n.a.	-0,20				0,98
98079-51-7	619-317-6	Lomefloxacin	0,87	-1,5	-2,8	0	no conclusion/data	-0,05				0,94
79660-72-3	677-525-2	Fleroxacin	0,87	-1,4	-0,8	0	n.a.	-0,15				0,98
100-97-0	202-905-8	Methenamine	0,87		-1,3	0	vP	0,14				0,81
82419-36-1	680-263-1	Ofloxacin	0,86	-0,8	-4,0	0	n.a.	0,04				0,93
112398-08-0	638-772-1	Danofloxacin	0,85		-3,5	0	n.a.	0,00				0,92
57-62-5	200-341-7	Chlortetracycline	0,85		-2,1	0	n.a.	0,24				0,93
93106-60-6	618-911-2	Enrofloxacin	0,84		-4,7	0	n.a.	0,00				0,92
28179-44-4	248-887-5	Ioxitalamic acid	0,84		-2,0	0	vP	-0,26				0,85
98106-17-3	-	Difloxacin	0,84	0,9	-4,1	0	n.a.	-0,18				0,98
78649-41-9	-	Iomeprol	0,84		-3,1	0	n.a.	-0,13				0,74
60166-93-0	262-093-6	Iopamidol	0,83		-2,6	0	n.a.	-0,15				0,74
70458-92-3	274-611-8	Pefloxacin	0,83	-0,3	-1,9	0	n.a.	0,01				0,90
10118-90-8	800-277-5	Minocycline	0,83		-1,5	0	n.a.	0,26				0,89
80214-83-1	617-007-5	Roxithromycin	0,82		2,4	0	n.a.	-0,31				0,99

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
74011-58-8	-	Enoxacin	0,82	-1,6	-1,7	0	n.a.	0,08				0,87
98105-99-8	-	Sarafloxacin	0,82		-4,7	0	n.a.	-0,07				0,95
66108-95-0	266-164-2	Iohexol	0,82		-3,4	0	Potential P/vP++	-0,10				0,70
16846-24-5	240-871-6	Josamycin	0,82		2,2	0	n.a.	0,11				0,91
354812-41-2	-	Moxifloxacin	0,81	0,6	-2,7	0	n.a.	0,13				0,88
39405-35-1	-	Kitasamycin	0,80		0,5	0	n.a.	0,13				0,77
70458-96-7	274-614-4	Norfloxacin	0,80	-1,5	-2,9	0	n.a.	0,12				0,77
86386-73-4	627-806-0	Fluconazole	0,80	0,4	0,6	0	n.a.	-0,03				0,94
3922-90-5	223-495-7	Oleandomycin	0,79		0,9	0	n.a.	-0,09				0,86
85721-33-1	617-751-0	Ciprofloxacin	0,79	-1,7	-5,2	0	n.a.	0,11				0,78
117-96-4	204-223-6	Diatrizoic Acid	0,78		-0,6	0	Potential P/vP++	-0,32				0,89
81103-11-9	617-200-4	Clarithromycin	0,77		2,3	0	n.a.	-0,20				0,98
114-07-8	204-040-1	Erythromycin	0,76		1,9	0	n.a.	-0,13				0,97
79-57-2	230-540-4	Oxytetracycline	0,76		-2,9	0	n.a.	0,36				0,74
83905-01-5	617-500-5	Azithromycin	0,74		1,7	0	Potential P/vP++	-0,22				0,99
60-54-8	200-481-9	Tetracycline	0,74		-1,7	0	n.a.	0,30				0,81
-	-	1,3,5-Triazin-2-ol, 4,6-di-4-morpholinyl-	0,71		0,3	0	n.a.	0,11				0,80
62037-80-3	700-242-3	GenX	0,71	1,1	-3,4	0	vP	-0,03				0,98
17090-79-8	241-154-0	Monensin	0,71		1,6	0	n.a.	-0,24				0,94
1893-33-0	606-172-9	Pipamperone	0,69		0,8	0	Pot. P/vP	0,05				0,98

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
375-73-5	206-793-1	PFBS	0,69		-4,8	0	vP	0,12				0,92
114311-32-9	601-305-7	Imazamox	0,68		-1,7	0	n.a.	0,29	30			0,65
111991-09-4	601-148-4	Nicosulfuron	0,68		-1,7	0	n.a.	0,49	27			0,79
90357-06-5	-	Bicalutamide	0,68		2,0	0	n.a.	0,03				0,99
2706-90-3	220-300-7	PFPeA (Perfluorovaleric acid)	0,68	0,8	-4,4	0	n.a.	0,18				0,83
375-85-9	206-798-9	PFHpA	0,67	1,6	-2,9	0	n.a.	0,12				0,93
76-57-3	200-969-1	Codeine	0,67	0,4	0,2	0	n.a.	0,49				0,71
30125-63-4	634-816-9	Desethylterbutylazin	0,67		1,8	0	n.a.	0,13	62			0,83
15676-16-1	239-753-7	Sulpiride	0,66	0,2	-1,1	0	Pot. P/vP	0,44				0,68
80370-57-6	688-302-4	Ceftiofur	0,66		-1,8	0	n.a.	0,32				0,62
2706-91-4	220-301-2	PFPS (C5-Sulfonate)	0,66	1,4	-4,1	0	n.a.	0,06				0,97
88040-23-7	643-019-5	Cefepime	0,65		-3,2	0	n.a.	0,38				0,54
27619-97-2	248-580-6	6:2 fluorotelomer sulfonic acid	0,65	1,3	-2,5	0	Potential P/vP++	-0,01				0,99
3682-35-7	222-965-9	TPTZ (2,4,6-tri(2-pyridinyl)-1,3,5-triazine)	0,65		2,9	0	n.a.	0,17				0,91
108-78-1	203-615-4	Melamine	0,65		-1,2	0	vP	0,18	108		13	0,53
140-08-9	205-397-6	(2-chlorethyl) phosphite	0,65		2,0	0	n.a.	0,26				0,68
1007-28-9	623-281-7	Deisopropylatrazine	0,64		1,2	0	Pot. P/vP	0,19	88		13	0,67
88-50-6	201-836-0	4-amino-2,5-dichlorobenzenesulphonic acid	0,63		-5,1	0	Pot. P/vP	0,13				0,54
21725-46-2	244-544-9	Cyanazine	0,63		2,3	0	n.a.	0,17	50			0,90

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
6190-65-4	622-793-8	Deethylatrazine	0,63	0,6	1,2	0	Pot. P/vP	0,16	74		141	0,69
56038-13-2	259-952-2	Sucralose	0,63		-0,9	0	n.a.	0,27				0,45
18467-77-1	242-348-8	Diprogulic acid	0,62		-3,4	0	n.a.	-0,02				0,52
15318-45-3	239-355-3	Thiamphenicol	0,62		-0,2	0	n.a.	0,41				0,48
138261-41-3	428-040-8	Imidacloprid	0,62		-1,4	0	Pot. P/vP	0,22				0,58
375-22-4	206-786-3	PFBA	0,62	0,4	-4,3	0	n.a.	0,24				0,62
3871-99-6	223-393-2	PFHxS	0,62	1,8	-4,9	0	n.a.	0,00				0,99
56-75-7	200-287-4	Chloramphenicol	0,61	0,3	1,0	0	Pot. P/vP	0,30				0,56
58-93-5	200-403-3	Hydrochlorothiazide	0,61	-0,0	-0,1	0	n.a.	0,16				0,59
914637-49-3	811-572-3	5:3 FTCA	0,61		0,2	1	n.a.	0,12				0,95
51940-44-4	257-530-2	Pipemidic acid	0,61	-1,0	-4,6	0	n.a.	0,28				0,43
914-00-1	213-017-5	Methacycline	0,61		-2,2	0	n.a.	0,41				0,55
738-70-5	212-006-2	Trimethoprim	0,61	0,4	0,8	0	n.a.	0,45				0,71
122-34-9	204-535-2	Simazine	0,61		2,2	0	Pot. P/vP	0,18	91			0,71
3737-09-5	223-110-2	Disopyramide	0,61	1,4	0,8	0	Pot. P/vP	0,21				0,87
152459-95-5	604-855-6	Imatinib	0,60		2,3	0	Potential P/vP++	-0,02				0,98
5011-34-7	225-690-2	Trimetazidine	0,60		-1,6	0	Pot. P/vP	0,64				0,58
42835-25-6	255-962-6	Flumequine	0,60		-1,3	0	n.a.	0,18				0,56
335-67-1	206-397-9	PFOA	0,60	2,1	-1,9	0	n.a.	0,00				0,99
84057-84-1	281-901-8	Lamotrigine	0,60	1,9	2,5	0	n.a.	0,07				0,77

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
5915-41-3	227-637-9	Terbutylazine	0,60	2,1	3,1	0	n.a.	0,12	81			0,86
106266-06-2	600-733-1	Risperidone	0,59	1,6	2,5	0	n.a.	0,09				0,94
1912-24-9	217-617-8	Atrazine	0,59	1,4	2,6	0	Potential P/vP++	0,15	87			0,73
54-31-9	200-203-6	Furosemide	0,59	1,3	-1,4	0	n.a.	0,23				0,57
144689-63-4	604-433-1	Olmesartan	0,59		1,2	0	n.a.	0,19				0,84
25953-19-9	247-362-8	Cefazolin	0,58	-0,8	-2,6	0	n.a.	0,55				0,44
27203-92-5	248-319-6	Tramadol	0,58	1,8	0,8	0	Pot. P/vP	0,31				0,67
144689-24-7	646-413-5	Olmesartan	0,58		0,0	0	Potential P/vP++	0,26				0,73
139-40-2	205-359-9	Propazine	0,58	1,7	3,0	0	Potential P/vP++	0,12	75		10	0,75
107534-96-3	403-640-2	Tebuconazol	0,57	2,4	3,3	0	Pot. P/vP	0,18	10			0,84
542-02-9	208-796-3	Acetoguanamine	0,57		0,4	0	vP	0,27				0,48
375-92-8	206-800-8	PFHpS	0,57	2,2	-4,1	0	n.a.	-0,06				1,00
66357-35-5	266-332-5	Ranitidine	0,57	-0,9	-1,1	0	Pot. P/vP	0,29				0,50
5786-21-0	227-313-7	Clozapine	0,57	2,3	2,4	0	n.a.	0,09				0,80
52722-86-8	258-132-1	Hydroxyethyl tetramethylpiperidinol	0,57		-0,8	0	P	0,45				0,42
846-49-1	212-687-6	Lorazepam	0,57	1,7	2,5	0	n.a.	0,33				0,60
1511-16-6	689-044-5	Haloperidol	0,57	2,6	3,1	0	Pot. P/vP	0,00				0,97
2008-58-4	214-787-5	2,6-Dichlorobenzamide	0,57	0,4	1,0	0	no conclusion/data	0,39	297			0,49
841-06-5	212-664-0	Methoprotryn	0,57		3,0	0	n.a.	0,11				0,68
515-64-0	208-204-3	Sulfisomidine	0,56	-0,2	-0,3	0	n.a.	0,27				0,50

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
13674-87-8	237-159-2	TDCPP	0,56	2,2	3,7	0	vP	0,30				0,96
42399-41-7	255-796-4	Diltiazem	0,56	2,5	2,6	0	n.a.	0,53				0,70
104-23-4	203-187-9	4'-aminoazobenzene-4-sulphonic acid	0,56	2,4	-2,5	0	Pot. P/vP	0,13				0,51
115-96-8	204-118-5	Tris(2-chloroethyl) phosphate	0,56		1,6	0	Potential P/vP++	0,51				0,58
1812-30-2	217-322-4	Bromazepam	0,56	1,0	2,0	0	n.a.	0,32				0,67
93413-62-8	700-516-2	Desvenlafaxine	0,55		-0,2	0	Pot. P/vP	0,28				0,64
142459-58-3	604-290-5	Flufenacet	0,55		3,0	0	n.a.	0,10				0,96
375-95-1	206-801-3	PFNA	0,55	2,4	-1,4	0	n.a.	-0,06				1,00
96-88-8	202-543-0	Mepivacaine	0,55	1,2	1,4	0	n.a.	0,48				0,59
144-83-2	205-642-7	Sulfapyridine	0,55	0,2	-0,4	0	Not P	0,21				0,50
335-76-2	206-400-3	PFDA	0,55	2,8	-0,4	0	n.a.	-0,01				0,99
88-53-9	201-839-7	5-amino-2-chlorotoluene-4-sulphonic acid	0,54		-4,5	0	no conclusion/data	0,20				0,39
68-22-4	200-681-6	Norethisterone	0,54		2,9	0	Potential P/vP++	0,27				0,67
87674-68-8	618-045-5	Dimethenamid	0,54	1,8	2,3	0	n.a.	0,31	11			0,58
57-68-1	200-346-4	Sulfadimidine	0,54	0,7	0,0	0	Potential P/vP++	0,27				0,50
201668-32-8	-	Flufenacet ESA	0,54		-3,0	0	n.a.	0,26				0,49
63527-52-6	264-299-1	Cefotaxime	0,54		-2,8	0	no conclusion/data	0,56				0,38
74191-85-8	616-059-6	Doxazosin	0,54		2,2	0	Pot. P/vP	0,50				0,93
1014-69-3	213-800-1	Desmetryn	0,53		2,6	0	n.a.	0,19				0,58
886-50-0	212-950-5	Terbutryn	0,53	2,4	3,4	0	n.a.	0,15				0,77

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
1610-17-9	216-547-5	Atraton	0,53	1,1	2,6	0	n.a.	0,25				0,62
2062-84-2	218-172-2	Benperidol	0,53		3,1	0	n.a.	0,07				0,89
214217-88-6	-	p-Hydroxyatorvastatin	0,53		3,1	0	n.a.	0,28				0,62
13674-84-5	237-158-7	TCPP	0,53	2,2	2,6	0	vP	0,43				0,66
41859-67-0	255-567-9	Bezafibrate	0,53		1,1	0	n.a.	0,45				0,62
127-69-5	204-858-9	Sulfisoxazole	0,52	0,8	-1,7	0	n.a.	0,28				0,48
1610-18-0	216-548-0	Prometon (H)	0,52	1,6	2,9	0	n.a.	0,22				0,64
50563-36-5	256-625-6	Dimethachlor CGA 369873	0,52		2,5	0	n.a.	0,36			26	0,55
56773-42-3	260-375-3	PFOS Tetraethylammonium	0,52	2,6	-2,6	0	vP	-0,12				1,00
2447-57-6	219-504-9	Sulfadoxine	0,52	0,7	-0,5	0	n.a.	0,44				0,54
35255-37-9	-	N-Acetylsulfamethazine	0,52		0,7	0	n.a.	0,23				0,58
797-63-7	212-349-8	Levonorgestrel	0,52		3,1	0	n.a.	0,27				0,69
76824-35-6	-	Famotidine	0,52		-0,9	0	n.a.	0,28				0,38
137-58-6	205-302-8	Lidocaine	0,52	1,6	1,8	0	Pot. P/vP	0,51				0,57
57-53-4	200-337-5	Meprobamate	0,51	0,2	0,5	0	n.a.	0,49				0,41
834-12-8	212-634-7	Ametryn	0,51	2,1	3,0	0	vP	0,18				0,60
3144-16-9	221-554-1	2-oxobornane-10-sulphonic acid	0,51		-3,8	0	Pot. P/vP	0,51				0,40
80-08-0	201-248-4	Dapsone	0,51	1,8	1,0	0	vP	0,17				0,44
66753-07-9	634-744-8	Terbutylazine-2-hydroxy	0,51		-0,3	0	n.a.	0,34				0,33
51218-45-2	257-060-8	Metolachlor	0,51	1,8	3,2	0	n.a.	0,29	11			0,60

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
6145-73-9	228-150-4	Tris-2-chloropropyl phosphate	0,51		3,0	0	n.a.	0,43				0,66
19982-08-2	690-724-9	Memantine	0,51		0,3	0	n.a.	0,38				0,59
77732-09-3	-	Oxadixyl	0,51		1,0	0	n.a.	0,28				0,40
64-85-7	200-596-4	Desoxycortone	0,51		2,9	0	n.a.	0,36				0,62
69-81-8	200-717-0	Carbazochrome	0,50		-0,1	0	n.a.	0,37				0,30
126-86-3	204-809-1	2,4,7,9-tetramethyldec-5-yne-4,7-diol	0,50		2,8	0	P	0,27				0,52
4304-30-7	-	3'-O-Acetylthymidine	0,50		-4,9	0	n.a.	0,31				0,32
61-33-6	200-506-3	Benzylpenicillin	0,50		-0,8	0	n.a.	0,60				0,38
134523-00-5	-	Atorvastatin	0,50		1,8	0	n.a.	0,28				0,62
125-33-7	204-737-0	Primidone	0,50		0,8	0	n.a.	0,69				0,41
98-36-2	202-661-2	2-Chloroaniline-5-sulfonic acid	0,50		-4,2	0	n.a.	0,20				0,31
87-08-1	201-722-0	Phenoxymethylpenicillin	0,49		-0,8	0	n.a.	0,67				0,39
67129-08-2	266-583-0	Metazachlor	0,49	1,8	2,2	0	n.a.	0,50	16			0,58
7287-19-6	230-711-3	Prometryn	0,49		3,5	0	n.a.	0,16				0,63
826-36-8	212-554-2	Triacetonamine	0,49		-0,4	0	Pot. P/vP	0,47				0,39
127-79-7	204-866-2	Sulfamerazine	0,49	0,5	-0,3	0	n.a.	0,26				0,42
839705-03-2	445-750-3	<i>N,N</i> -Didesmethylvenlafaxine	0,49		-0,4	0	no conclusion/data	0,58				0,48
34256-82-1	251-899-3	Acetochlor	0,49	1,9	3,0	0	n.a.	0,32	11			0,57
80-35-3	201-272-5	Sulfamethoxy pyridazine	0,49	0,0	-0,1	0	n.a.	0,33				0,43
214217-86-4	-	<i>o</i> -Hydroxyatorvastatin	0,49		3,2	0	n.a.	0,28				0,62

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
63-05-8	200-554-5	Androst-4-ene-3,17-dione	0,49		2,8	0	Not P	0,31				0,67
56211-40-6	637-197-3	Torasemide	0,49	2,4	2,4	0	n.a.	0,14				0,73
3575-80-2	609-173-2	Melperone	0,49		2,2	0	Pot. P/vP	0,15				0,78
651-06-9	211-480-8	Sulfamethoxine	0,49		-0,1	0	n.a.	0,33				0,43
26787-78-0	248-003-8	Amoxicillin	0,48		-1,0	0	Potential P/vP++	0,63				0,33
100-90-3	-	N4-acetylsulfamethazine	0,48		0,0	0	n.a.	0,50				0,51
330-54-1	206-354-4	Diuron	0,48	2,6	2,7	0	vP	0,24	55			0,53
149289-30-5	-	N-Desmethylvenlafaxine	0,48		0,4	0	n.a.	0,56				0,51
144-82-1	205-641-1	Sulfamethizole	0,48	0,3	-1,3	0	n.a.	0,25				0,43
1897-45-6	217-588-1	Chlorthalonil M12	0,48		3,1	0	n.a.	0,34		7		0,91
58-15-1	200-365-8	Dimethylaminophenazone	0,48	0,2	0,6	0	n.a.	0,34	77			0,38
723-46-6	211-963-3	Sulfamethoxazole	0,48	0,6	-0,6	0	n.a.	0,27				0,40
69-53-4	200-709-7	Ampicillin	0,48	-1,7	-1,0	0	Pot. P/vP	0,63				0,33
93-76-5	202-273-3	2,4,5-T	0,48	2,5	-1,1	0	n.a.	0,33		23		0,49
37439-34-2	253-506-0	3,5,6-trichloropyridin-2-olate	0,48		2,9	0	Pot. P/vP	0,21			2	0,74
519-65-3	208-274-5	AMDOHPH	0,48		-1,3	0	n.a.	0,55				0,28
122-11-2	204-523-7	Sulfadimethoxine	0,48	1,1	-0,0	0	n.a.	0,44				0,54
59-89-2	627-564-6	NMOR (N-nitrosomorpholine)	0,47	-0,4	-0,3	0	n.a.	0,22				0,31
72-14-0	200-771-5	Sulfathiazole	0,47		-0,0	0	n.a.	0,25				0,34
1220-83-3	624-483-8	Sulfamonomethoxine	0,47	0,5	-0,6	0	n.a.	0,33				0,43

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
21312-10-7	244-330-5	N4-Acetylsulfamethoxazole	0,47		-0,5	0	n.a.	0,50				0,41
205939-58-8	-	Dimethenamid ESA	0,47		-3,2	0	n.a.	0,49	56			0,37
1493-13-6	216-087-5	TFMSA (Trifluoromethanesulphonic acid)	0,47	-0,2	-5,8	0	Potential P/vP++	0,45				0,31
5205-93-6	226-002-3	DMAPMA	0,47		-1,5	0	Not P	0,55				0,33
110964-79-9	601-017-1	4-methanesulfonyl-2-nitrobenzoic acid	0,47		-4,7	0	Potential P/vP++	0,38	9			0,29
2855-13-2	220-666-8	Isophoronediamine	0,47		-3,2	0	P	0,48				0,38
330-55-2	206-356-5	Linuron	0,47	2,3	3,1	0	n.a.	0,23	46	23		0,56
389-08-2	206-864-7	Nalidixic acid	0,47	0,5	-1,4	0	n.a.	0,34				0,35
127-73-1	204-861-5	N-Acetylsulfamerazine	0,47		-1,8	0	n.a.	0,49				0,43
93-72-1	202-271-2	Fenoprop	0,46		-0,5	0	n.a.	0,29			6	0,51
15972-60-8	240-110-8	Alachlor	0,46	2,3	3,3	0	n.a.	0,29	13			0,57
58-22-0	200-370-5	Testosterone	0,46		3,2	0	Pot. P/vP	0,36				0,52
88150-42-9	425-820-1	Amlodipine	0,46	1,7	1,4	0	no conclusion/data	0,56				0,47
126924-38-7	-	Norfluoxetine	0,46		0,2	0	n.a.	0,33				0,72
120923-37-7	601-744-4	Amidosulfuron	0,46		-3,2	0	n.a.	0,48	17			0,53
126-54-5	204-792-0	TOSU	0,46		0,2	0	n.a.	0,18				0,27
1231710-75-0	-	Dimethachlor ESA	0,46		-3,5	0	n.a.	0,53	56			0,33
3337-71-1	222-077-1	Asulam	0,46		-2,2	0	n.a.	0,27	4			0,30
171118-09-5	812-484-8	Metolachlor ESA	0,46		-2,3	0	n.a.	0,47	67			0,38
67035-22-7	620-752-9	Dehydronifedipine	0,45		2,5	0	n.a.	0,50				0,60

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
76-99-3	200-996-9	Methadone	0,45	2,6	3,3	0	Pot. P/vP	0,27				0,69
154-21-2	205-824-6	Lincomycin	0,45		0,0	0	n.a.	0,44				0,26
144-80-9	205-640-6	Sulfacetamide	0,45	-0,8	-2,5	0	no conclusion/data	0,28				0,28
15307-79-6	239-346-4	Diclofenac	0,45		1,6	0	Potential P/vP++	0,19				0,52
486-56-6	207-634-9	Cotinine	0,45		0,2	0	n.a.	0,57				0,31
439-14-5	207-122-5	Diazepam	0,45	2,3	3,1	0	n.a.	0,47				0,48
68-35-9	200-685-8	Sulfadiazine	0,45	0,3	-1,9	0	Potential P/vP++	0,25				0,33
53-86-1	200-186-5	Indometacin	0,45	2,7	3,1	0	Pot. P/vP	0,41				0,45
88-22-2	201-811-4	2-amino-3,5-xylenesulphonic acid	0,45	1,3	-4,3	0	Not P	0,30				0,26
172960-62-2	-	Metazachlor ESA	0,45		-4,8	0	n.a.	0,56	185			0,36
930-55-2	213-218-8	N-Nitrosopyrrolidin	0,44	-0,4	0,1	0	n.a.	0,31				0,28
88407-82-3	618-161-6	Atenolol (2E)-2-butenedioate	0,44	-0,7	-1,4	0	no conclusion/data	0,71				0,27
604-75-1	210-076-9	Oxazepam	0,44	1,3	2,1	0	n.a.	0,56				0,35
5165-97-9	225-948-4	AMPS	0,44		-6,5	0	Potential P/vP++	0,60				0,23
187022-11-3	-	Acetochlor ESA	0,44		-2,9	0	n.a.	0,50	59			0,36
142363-53-9	-	Alachlor ESA	0,44		-1,9	0	n.a.	0,47	45			0,36
37517-30-9	922-246-6	Acebutolol, 2-hydroxybenzoate	0,44	0,9	-0,2	0	no conclusion/data	0,69				0,34
50-06-6	200-007-0	Phenobarbital	0,44	0,9	1,2	0	no conclusion/data	0,41				0,35
14698-29-4	238-750-8	Oxolinic acid	0,43		-1,8	0	n.a.	0,66				0,28
143-24-8	205-594-7	Bis(2-(2-methoxyethoxy)ethyl) ether	0,43	-1,5	-0,4	0	vP	0,14				0,23

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
56070-16-7	634-681-6	Terbufos-sulfon	0,43		2,5	0	n.a.	0,52				0,39
6493-05-6	229-374-5	Pentoxifylline	0,43	0,0	0,6	0	n.a.	0,38				0,30
55-18-5	200-226-1	<i>N</i> -Nitrosodiethylamin	0,42	-0,0	0,5	0	n.a.	0,32				0,28
83-15-8	201-457-0	<i>N</i> -Acetyl-4-aminoantipyrin	0,42		1,3	0	n.a.	0,57				0,26
15545-48-9	239-592-2	Chlortoluron	0,42	1,7	2,5	0	n.a.	0,34	66		15	0,38
42017-89-0	255-626-9	Fenofibric acid	0,42		1,1	0	no conclusion/data	0,36				0,45
10595-95-6	621-991-1	<i>N</i> -Nitrosomethylethylamin	0,42	-0,4	0,1	0	n.a.	0,32				0,26
1698-60-8	216-920-2	Pyrazon	0,42		0,2	0	n.a.	0,48	42			0,28
62-75-9	200-549-8	<i>N</i> -Nitrosodimethylamine	0,42	-0,8	-0,3	0	n.a.	0,33				0,24
125-40-6	204-738-6	Butabarbital	0,42	0,6	1,5	0	n.a.	0,35				0,33
77-04-3	201-000-5	Pyrithyldione	0,42		0,7	0	n.a.	0,67				0,31
53-16-7	200-164-5	Estrone	0,42		3,2	0	Pot. P/vP	0,40				0,53
87-61-6	201-757-1	1,2,3-trichlorobenzene	0,42	2,9	4,0	61	Potential P/vP++	0,24		71		0,60
59277-89-3	261-685-1	Aciclovir	0,42		-0,8	0	n.a.	0,29				0,20
116-06-3	204-123-2	Aldicarb	0,41		1,0	0	n.a.	0,35		23		0,29
28721-07-5	249-188-8	Oxcarbazepine	0,41		1,8	0	n.a.	0,40				0,31
76-74-4	200-983-8	Pentobarbital	0,41	0,9	2,0	0	Pot. P/vP	0,34				0,35
108-60-1	203-598-3	2,2'-dichlorodiisopropyl ether	0,41	1,0	2,4	3	n.a.	0,25		23		0,37
105293-89-8	-	<i>N,N</i> -Dipropyl-1,4-benzenediamine	0,41		2,3	0	n.a.	0,26			16	0,43
66722-44-9	613-980-5	Bisoprolol	0,41	0,1	-0,1	0	no conclusion/data	0,30				0,28

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
17254-80-7	-	Chloridazon-methyl-desphenyl	0,41		0,1	1	n.a.	0,47	84			0,21
1582-09-8	216-428-8	Trifluralin	0,41	1,8	5,2	0	n.a.	-0,07	90	71		0,96
57-41-0	200-328-6	Phenytoin	0,41	1,7	2,4	0	Potential P/vP++	0,47				0,36
36016-40-7	636-838-4	<i>o</i> -mesitylsulfonylhydroxylamine	0,41		1,1	0	n.a.	0,52				0,34
58-73-1	200-396-7	Diphenhydramine	0,40	2,5	2,0	0	Pot. P/vP	0,26				0,41
3060-89-7	221-301-5	Metobromuron	0,40	1,8	2,3	0	n.a.	0,33	29			0,35
50-27-1	200-022-2	Estriol	0,40	1,5	2,5	0	n.a.	0,58				0,29
1672-58-8	216-808-3	FAA (4-Formylaminoantipyrine)	0,40		-0,3	0	n.a.	0,58				0,24
3380-34-5	222-182-2	Triclosan	0,40	2,4	5,0	0	Potential P/vP++	0,25			19	0,77
76-22-2	200-945-0	Bornan-2-one	0,40	2,1	2,5	1	Not P	0,45				0,41
464-49-3	207-355-2	(+)-bornan-2-one	0,40	1,2	2,5	1	Not P	0,45				0,41
118-88-7	204-282-8	4-aminotoluene-2-sulphonic acid	0,40		-4,1	0	Pot. P/vP	0,29				0,20
38821-53-3	254-137-8	Cefradine	0,40		-3,5	0	n.a.	0,63				0,21
56681-55-1	-	Hydroxylachlor	0,40		2,2	0	n.a.	0,52				0,28
374064-02-5	664-145-7	5-(2-Pyridinyl)-1 <i>H</i> -pyrazole-3-carboxylic acid	0,40		-1,2	0	n.a.	0,60				0,24
1746-81-2	217-129-5	Monolinuron	0,40	1,6	2,2	0	n.a.	0,32				0,33
6339-19-1	-	Desphenyl chloridazon	0,39		-1,8	0	n.a.	0,49	62			0,20
63-74-1	200-563-4	Sulphanilamide	0,39	-0,7	-0,6	0	no conclusion/data	0,33	8			0,22
21087-64-9	244-209-7	Metribuzin	0,39		1,5	0	n.a.	0,26	8			0,33
150-68-5	205-766-1	Monuron	0,39	1,4	1,9	0	no conclusion/data	0,34	48			0,30

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
36507-30-9	641-693-5	10,11-Dihydro-10,11-Epoxy carbamazepine	0,39		1,4	0	n.a.	0,26				0,25
139481-59-7	604-138-8	Candesartan	0,39		-2,3	0	Potential P/vP++	0,47				0,54
30223-73-5	-	EDDP	0,39		2,4	0	n.a.	0,29				0,62
84-86-6	201-567-9	4-aminonaphthalene-1-sulphonic acid	0,39		-4,7	0	Pot. P/vP	0,24				0,20
84-89-9	201-571-0	5-aminonaphthalene-1-sulphonic acid	0,39		-4,5	0	no conclusion/data	0,24				0,20
82626-48-0	617-367-3	Zolpidem	0,39	2,2	3,2	0	Pot. P/vP	0,51				0,55
77-71-4	201-051-3	5,5-dimethylhydantoin	0,39	1,8	-0,6	0	vP	0,47				0,21
2706-56-1	220-295-1	2-pyridylethylamine	0,39		-2,1	0	n.a.	0,57				0,23
98-32-8	202-657-0	3-amino-4-hydroxybenzenesulphonamide	0,39		0,1	0	Pot. P/vP	0,37				0,21
63659-18-7	613-310-1	Betaxolol	0,39	1,4	0,4	0	n.a.	0,49			6	0,30
882-09-7	212-925-9	Clofibric acid	0,39		-0,5	0	n.a.	0,49				0,26
6804-07-5	229-879-0	Carbadox	0,38		0,2	0	n.a.	0,36				0,26
95-51-2	202-426-4	2-chloroaniline	0,38		2,0	0	Pot. P/vP	0,31		7		0,29
81-81-2	201-377-6	Warfarin	0,38		1,1	0	P	0,69				0,33
51235-04-2	257-074-4	Hexazinone	0,38		1,4	0	n.a.	0,39				0,25
15686-71-2	239-773-6	Cefalexin	0,38		-1,9	0	n.a.	0,66				0,19
97-39-2	202-577-6	1,3-di-o-tolylguanidine	0,38		1,0	0	Potential P/vP++	0,31				0,43
50-36-2	200-032-7	Cocaine	0,38	1,4	1,4	0	n.a.	0,65				0,29
51-28-5	200-087-7	2,4-dinitrophenol	0,38	1,1	-1,0	0	Potential P/vP++	0,21			2	0,34

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
37350-58-6	253-483-7	Metoprolol	0,38	0,7	-0,9	0	n.a.	0,53			6	0,24
85441-61-8	-	Quinapril	0,38		1,1	0	n.a.	0,62				0,29
2163-68-0	-	Hydroxyatrazine	0,38		1,0	0	no conclusion/data	0,44				0,18
152019-73-3	690-353-2	Metolachlor-OA	0,37		-2,2	0	n.a.	0,46			26	0,19
64744-50-9	451-630-1	Gabapentin-lactam	0,37		1,9	0	Pot. P/vP	0,69				0,28
54063-53-5	258-955-6	Propafenone	0,37	2,3	2,1	0	no conclusion/data	0,67				0,35
1093205-95-8	700-837-8	3-hydroxy-2,2-dimethyl-N-propylpropa- namide	0,37		0,3	0	no conclusion/data	0,78				0,19
2760-98-7	220-425-7	Isophthalohydrazide	0,37		-1,7	0	no conclusion/data	0,38				0,17
112-49-2	203-977-3	1,2-bis(2-methoxyethoxy)ethane	0,37	-1,3	-0,3	0	no conclusion/data	0,24				0,17
551-92-8	209-001-2	Dimetridazole	0,37	0,1	0,4	0	n.a.	0,35				0,24
116-43-8	204-141-0	Succinylsulfathiazole	0,37		-2,5	0	n.a.	0,52				0,20
164265-78-5	-	Valsartan acid	0,36		-2,4	0	n.a.	0,56				0,21
1231244-60-2	-	Metazachlor OXA	0,36		-1,9	0	n.a.	0,65	89			0,18
100-88-9	202-898-1	N-cyclohexylsulphamic acid	0,36		-3,5	0	no conclusion/data	0,50				0,16
55589-62-3	259-715-3	Acesulfame	0,36		-0,8	0	n.a.	0,49				0,14
131341-86-1	603-476-3	Fludioxonil	0,36		3,2	0	n.a.	0,62	159			0,55
19988-24-0	-	Atrazin-desethyl-2-hydroxy	0,36		-2,3	0	n.a.	0,47				0,15
36894-69-6	253-258-3	Labetalol	0,36	1,2	2,1	0	Pot. P/vP	0,65				0,27
519-09-5	208-263-5	Benzoyllecgonine	0,36		0,9	0	n.a.	0,60				0,15
171262-17-2	-	Alachlor OA	0,36		-2,0	0	n.a.	0,47	31			0,18

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
194992-44-4	-	Acetochlor OA	0,36		-2,4	0	n.a.	0,51	41			0,18
134-62-3	205-149-7	DEET	0,36	1,2	2,3	0	n.a.	0,67	61			0,24
58-25-3	200-371-0	Chlordiazepoxide	0,35	1,8	2,5	0	n.a.	0,30				0,46
121-57-3	204-482-5	Sulphanilic acid	0,35		-6,3	0	Pot. P/vP	0,29				0,15
87-62-7	201-758-7	2,6-xylidine	0,35	1,6	1,7	0	P	0,49		7		0,24
108-62-3	203-600-2	Metaldehyde	0,35		0,5	0	no conclusion/data	0,14	14			0,17
443-48-1	207-136-1	Metronidazole	0,35	-0,5	0,0	0	no conclusion/data	0,45				0,19
526-36-3	208-390-6	Xylometazoline	0,35	2,9	0,3	0	n.a.	0,38				0,57
133-64-2	-	5-Isopropyl-2-methylbenzenesulfonic acid	0,35		-5,0	0	n.a.	0,43				0,20
7313-54-4	-	Deisopropylhydroxyatrazine	0,35		-2,9	0	no conclusion/data	0,52				0,14
76-05-1	200-929-3	Trifluoroacetic acid	0,35	-0,8	-6,2	0	Potential P/vP++	0,37	2048			0,16
541-73-1	208-792-1	1,3-dichlorobenzene	0,35	2,4	3,4	68	Potential P/vP++	0,33		71		0,37
96-12-8	202-479-3	1,2-dibromo-3-chloropropane	0,35	2,3	2,9	7	Pot. P/vP	0,32				0,30
2164-08-1	218-499-0	Lenacil	0,35		2,0	0	n.a.	0,42	30			0,22
3930-20-9	-	Sotalol	0,35	-0,9	-0,9	0	n.a.	0,53				0,17
552-79-4	209-022-7	Methylephedrine	0,34		-0,4	0	n.a.	0,52				0,19
114798-26-4	601-329-8	Losartan	0,34		1,8	0	Potential P/vP++	0,28				0,39
103-83-3	203-149-1	Benzyl dimethylamine	0,34	1,1	0,3	0	Not P	0,47				0,23
314-40-9	206-245-1	Bromacil	0,34	1,6	-0,6	0	no conclusion/data	0,31				0,24
25321-41-9	246-839-8	Dimethylbenzene sulfonic acid	0,34		-5,5	0	n.a.	0,49				0,17

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
665-66-7	211-560-2	Amantadine hydrochloride	0,34	1,6	-0,4	0	P	0,55				0,22
31431-39-7	250-635-4	Mebendazole	0,34		2,7	0	n.a.	0,47				0,34
27213-90-7	248-326-4	Diisobutyl-naphthalenesulphonate	0,34	1,8	-1,1	0	P	0,24				0,35
121-82-4	204-500-1	Perhydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine	0,34	2,0	-2,7	0	Potential P/vP++	0,42				0,21
83-07-8	201-452-3	4-Aminoantipyrine	0,34	-0,3	1,2	0	n.a.	0,57				0,16
483-63-6	207-596-3	Crotamiton	0,33		2,5	0	n.a.	0,63				0,26
87333-19-5	642-904-3	Ramipril	0,33		1,3	0	n.a.	0,66				0,21
25057-89-0	246-585-8	Bentazone	0,33		0,4	0	n.a.	0,38	18			0,23
138402-11-6	604-078-2	Irbesartan	0,33		1,7	0	n.a.	0,36				0,52
791-28-6	212-338-8	Triphenylphosphine oxide	0,33	1,4	3,5	0	Pot. P/vP	0,54				0,24
70-55-3	200-741-1	Toluene-4-sulphonamide	0,33	0,3	0,9	0	Not P	0,53				0,19
5440-00-6	226-621-9	5,6-Diamino-1,3-Dimethyluracil	0,33		-2,0	0	n.a.	0,59				0,13
1707-03-5	216-948-5	Diphenylphosphinic acid	0,33		-2,4	0	n.a.	0,56				0,18
72-44-6	200-780-4	Methaqualone	0,33		2,5	0	n.a.	0,56				0,33
75-65-0	200-889-7	2-methylpropan-2-ol	0,33	-0,3	0,6	3	Potential P/vP++	0,60				0,15
80-39-7	232-465-2	N-ethyl-o-toluenesulphonamide	0,33		1,6	0	no conclusion/data	0,50	6			0,22
92-41-1	202-154-6	Naphthalene-2,7-disulfonic acid	0,33		-6,4	0	n.a.	0,24				0,14
102-06-7	203-002-1	1,3-diphenylguanidine	0,33	2,5	0,2	0	Potential P/vP++	0,46				0,25
479-92-5	207-539-2	Propyphenazone	0,32		2,5	0	n.a.	0,48				0,20
60-80-0	200-486-6	Phenazone	0,32	-0,8	1,4	0	Potential P/vP++	0,54				0,16

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
23031-25-6	245-385-8	Terbutaline	0,32	-0,9	-1,2	0	n.a.	0,66				0,17
298-46-4	206-062-7	Carbamazepine	0,32	2,4	2,2	0	n.a.	0,40				0,22
13523-86-9	236-867-9	Pindolol	0,32	1,4	0,1	0	n.a.	0,66				0,17
2465-59-0	219-570-9	Oxypurinol	0,32		-2,1	0	n.a.	0,52				0,13
123732-85-4	-	Propachlor ESA	0,32		-2,9	0	n.a.	0,59				0,16
1418095-19-8	-	Metolachlor NOA 413173	0,32		-4,4	0	n.a.	0,59				0,15
81-07-2	201-321-0	Saccharin	0,32		-4,0	0	Potential P/vP++	0,47	41			0,16
18559-94-9	242-424-0	Salbutamol	0,31	-0,9	-1,0	0	Potential P/vP++	0,68				0,14
15763-76-5	239-854-6	Sodium <i>p</i> -cumesulphonate	0,31		-4,8	0	Not P	0,41				0,15
34123-59-6	251-835-4	Isoproturon	0,31	1,7	2,6	0	n.a.	0,46	12			0,23
111-96-6	203-924-4	Bis(2-methoxyethyl) ether	0,31	-1,2	-0,2	0	vP	0,33			26	0,13
4710-17-2	225-198-8	DMSA (Dichlofluamid metabolite)	0,31		1,4	0	n.a.	0,53	5			0,17
41394-05-2	255-349-3	Metamitron	0,31	0,8	0,8	0	n.a.	0,45	16			0,17
1125-21-9	214-406-2	Ketosisophorone	0,31		1,2	0	Not P	0,51				0,27
57775-29-8	260-945-1	Carazolol	0,31	2,6	1,3	0	n.a.	0,60				0,23
10605-21-7	234-232-0	Carbendazim	0,31	1,0	0,7	0	Pot. P/vP	0,51				0,19
3768-63-6	-	Tetramethylsulfamide	0,31		0,2	0	n.a.	0,51				0,13
34123-57-4	621-315-5	Isoproturon-monodemethyl	0,31		2,3	0	n.a.	0,49	13			0,21
1115-70-4	214-230-6	Metformin hydrochloride	0,30		-3,9	0	P	0,56				0,12
104-15-4	203-180-0	Toluene-4-sulphonic acid	0,30		-5,5	0	Not P	0,48				0,13

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
58955-93-4	-	10,11-Dihydro-10,11-Dihydroxy-carbamazepine	0,30		-0,3	0	n.a.	0,58				0,11
56-93-9	200-300-3	Benzyltrimethylammonium chloride	0,30		-2,7	0	Potential P/vP++	0,59				0,13
18691-97-9	242-505-0	Methabenzthiazuron	0,30		2,4	0	n.a.	0,41				0,21
333-41-5	206-373-8	Diazinon	0,30	2,7	3,8	0	n.a.	0,57	17	71		0,32
2634-33-5	220-120-9	1,2-benzisothiazol-3(2H)-one	0,30	1,0	0,8	0	Pot. P/vP	0,53				0,13
80-05-7	201-245-8	4,4'-isopropylidenediphenol	0,30	2,6	3,5	0	Not P	0,47				0,27
28657-80-9	249-133-8	Cinoxacin	0,30	0,5	-2,2	0	n.a.	0,77				0,14
2163-69-1	218-493-8	Cycluron	0,29		2,4	0	n.a.	0,48				0,18
17675-60-4	241-659-6	Amidinourea phosphate	0,29		-1,7	0	Pot. P/vP	0,61				0,10
130-14-3	204-976-0	Sodium naphthalene-1-sulphonate	0,29	1,3	-5,2	0	no conclusion/data	0,38				0,13
55-52-7	200-236-6	Pheniprazine	0,29		0,6	0	n.a.	0,49				0,15
1223748-39-7	-	3-[4-(Methoxycarbonyl)phenyl]-1-propanesulfonic acid	0,29		-3,2	0	n.a.	0,65				0,13
80-09-1	201-250-5	4,4'-sulphonyldiphenol	0,29	2,3	1,2	0	Pot. P/vP	0,52				0,18
3984-14-3	818-440-4	DMS (N,N-dimethylsulfamide)	0,29		-0,6	0	n.a.	0,57				0,11
332927-03-4	629-212-7	Acridin-9-carbonic acid	0,29		-0,5	0	n.a.	0,64				0,16
36993-94-9	-	Metamitron-Desamino	0,29		0,9	0	n.a.	0,64				0,18
132-57-0	205-066-6	7-hydroxynaphthalene-1-sulphonic acid	0,29		-3,6	0	no conclusion/data	0,43				0,12
93-01-6	202-209-4	6-hydroxynaphthalene-2-sulphonic acid	0,29		-3,5	0	Pot. P/vP	0,43				0,12
84-87-7	201-568-4	4-hydroxynaphthalene-1-sulphonic acid	0,29		-3,9	0	Pot. P/vP	0,43				0,12

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
58-61-7	200-389-9	Adenosine	0,29	-1,1	-1,1	0	Not P	0,38				0,11
22504-72-9	245-045-9	<i>N,N'</i> -dimethylsulfamide	0,29		-0,5	0	n.a.	0,57				0,11
98-95-3	202-716-0	Nitrobenzene	0,28	1,7	1,8	3	Potential P/vP++	0,45		71		0,17
1066-51-9	623-325-5	(aminomethyl)phosphonic Acid	0,28		-4,8	0	n.a.	0,66	85			0,10
5142-23-4	225-908-6	3-Methyladenine	0,28		-2,2	0	n.a.	0,52				0,13
92-27-3	202-142-0	6,7-Dihydroxy-2-naphthalenesulfonic acid	0,28		-3,4	0	n.a.	0,47				0,11
120-18-3	204-375-3	Naphthalene-2-sulphonic acid	0,28		-5,0	0	Pot. P/vP	0,38				0,13
2682-20-4	220-239-6	2-methyl-2 <i>H</i> -isothiazol-3-one	0,28		-0,2	0	Not P	0,59				0,11
79-43-6	201-207-0	Dichloroacetic acid	0,28	0,4	-3,5	0	Not P	0,45				0,11
114-83-0	204-055-3	AMPH	0,28		0,9	0	n.a.	0,50				0,12
2212-67-1	218-661-0	Molinat	0,28	2,0	2,8	0	n.a.	0,58			8	0,19
60142-95-2	262-075-8	Gabapentin hydrochloride	0,28		-1,8	0	Pot. P/vP	0,69				0,09
1066-42-8	213-915-7	Dimethylsilanediol	0,28		-0,1	0	no conclusion/data	0,63				0,09
1068-90-2	213-952-9	Diethyl acetamidomalonate	0,28		-1,0	0	no conclusion/data	0,92				0,11
2465-65-8	-	<i>O,O</i> -Diethyl thiophosphate	0,27		-1,2	0	n.a.	0,51				0,15
29878-31-7	249-921-1	4-Methylbenzotriazole	0,27		1,9	0	n.a.	0,60				0,15
136-85-6	205-265-8	6-methylbenzotriazole	0,27		1,3	0	no conclusion/data	0,60				0,15
85-98-3	201-645-2	1,3-diethyldiphenylurea	0,27	2,5	3,4	0	Pot. P/vP	0,53				0,24
537-46-2	208-668-7	Methamphetamine	0,27	1,1	-0,6	0	n.a.	0,61			141	0,14
148-79-8	205-725-8	Thiabendazole	0,26		2,4	0	n.a.	0,45	22			0,18

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
55406-53-6	259-627-5	Iodopropynyl butylcarbamate	0,26	1,8	2,4	0	no conclusion/data	0,51				0,15
123-91-1	204-661-8	1,4-dioxane	0,26		-0,3	0	vP	0,43			23	0,09
2749-59-9	220-389-2	2,4-dihydro-2,5-dimethyl-3H-pyrazol-3-one	0,26		-0,0	0	no conclusion/data	0,60				0,10
108-79-2	203-617-5	4,6-dimethyl-2-hydroxypyrimidine	0,26		-0,3	0	n.a.	0,57				0,11
137862-53-4	604-045-2	Valsartan	0,26		-1,5	0	n.a.	0,50				0,14
95-16-9	202-396-2	Benzothiazole	0,26	1,3	2,1	1	Pot. P/vP	0,57				0,12
603-52-1	210-047-0	Ethyl diphenylcarbamate	0,25		3,3	0	no conclusion/data	0,57				0,23
10338-69-9	676-256-8	4-phenyl-1,2,3,6-tetrahydropyridine	0,25		-0,2	0	n.a.	0,65				0,12
78-40-0	201-114-5	Triethyl phosphate	0,25	-0,3	0,9	0	Potential P/vP++	0,71				0,10
108-80-5	203-618-0	Cyanuric acid	0,24	1,7	-1,3	0	vP	0,55				0,12
95-14-7	202-394-1	1H-benzotriazole	0,24	1,5	1,0	0	vP	0,60				0,11
1333-16-0	908-912-9	2,2'-Methylenediphenol	0,24		3,0	0	Pot. P/vP	0,60			4	0,16
288-88-0	206-022-9	1,2,4-triazole	0,24		-0,5	0	P	0,59				0,08
108-20-3	203-560-6	Diisopropyl ether	0,24		1,7	66	Potential P/vP++	0,41			10	0,10
22071-15-4	244-759-8	Ketoprofen	0,23		0,1	0	no conclusion/data	0,60				0,11
119-61-9	204-337-6	Benzophenone	0,23	2,7	3,0	0	Potential P/vP++	0,65				0,15
84-65-1	201-549-0	Anthraquinone	0,22	3,0	3,3	0	Not P	0,48				0,21
14260-98-1	238-141-7	2-Butoxyethyl dihydrogenphosphate	0,22		-3,3	0	n.a.	0,43				0,08
23386-52-9	245-629-3	Sodium 1,4-dicyclohexyl sulphonatosuccinate	0,21		-3,9	0	P	0,72				0,13

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
140-60-3	205-422-0	4-Decylbenzenesulfonic acid	0,20		0,5	0	n.a.	0,46				0,12
82571-53-7	919-112-4	Ozagrel	0,20		-1,8	0	n.a.	0,51				0,07
84238-45-9	282-500-0	Benzenesulfonic acid, 4-dodecyl-	0,19		1,2	0	Not P	0,45				0,14
3622-84-2	222-823-6	<i>N</i> -butylbenzenesulphonamide	0,18		1,8	0	vP	0,59				0,08
924-16-3	213-101-1	<i>N</i> -Nitrosodibutylamin	0,18	1,6	2,5	0	n.a.	0,49				0,07
67-43-6	200-652-8	DTPA	0,16		-8,4	0	vP	0,44				0,03
60-00-4	200-449-4	Edetic acid	0,13		-6,8	0	Pot. P/vP	0,53				0,02
538-75-0	208-704-1	Dicyclohexylcarbodiimide	0,11		3,3	1	Potential P/vP++	0,49				0,19

Tabelle 3: Priorisierte Stoffe für die Durchführung eines „kalten“ Abbautests nach OECD TG 309. Sortierung nach absteigendem vPvM-Score, Teil 2

Kategorie B: Befundstoffe, die bislang ausschließlich in Kläranlagenablauf und/oder Oberflächenwasser nachgewiesen wurden

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
1404-90-6	215-772-6	Vancomycin	0,94		-6,9	0	n.a.	0,59				1,00
100986-85-4	-	Levofloxacin	0,86		-4,0	0	n.a.	0,04				0,93
59017-64-0	927-786-6	Ioxaglic acid	0,86		-2,2	0	Pot. P/vP	-1,09				1,00
113617-63-3	638-855-2	Orbifloxacin	0,85		-0,4	0	n.a.	-0,23				0,99
115550-35-1	640-416-5	Marbofloxacin	0,85		-1,3	0	n.a.	0,11				0,86
20830-75-5	244-068-1	Digoxin	0,85		1,3	0	n.a.	-0,02				0,87
79356-08-4	635-502-4	Maduramycin	0,85		1,4	0	n.a.	-0,82				1,00
112811-59-3	664-293-2	Gatifloxacin	0,82		-3,1	0	n.a.	0,14				0,86
66-28-4	200-626-6	Strophanthidin	0,82		0,7	0	n.a.	0,66				0,85
3089-11-0	221-422-3	Hexa(methoxymethyl)melamine	0,81		1,4	0	n.a.	-0,28				0,97
90566-53-3	-	Fluticasone	0,80		2,4	0	n.a.	0,16				0,93
3576-88-3	222-695-1	Melam	0,80		-0,6	0	vP	-0,03				0,93
97240-79-4	619-263-3	Topiramate	0,80		0,7	0	n.a.	-0,13				0,86
2276-90-6	218-897-4	Iotalamic acid	0,79		-1,4	0	Pot. P/vP	-0,32				0,89
73384-59-5	277-405-6	Ceftriaxone	0,78		-2,5	0	n.a.	0,22				0,67
76-42-6	200-960-2	Oxycodone	0,77	-0,4	0,2	0	n.a.	0,30				0,91
5250-39-5	-	Flucloxacillin	0,76		-1,3	0	n.a.	0,15				0,92
965-52-6	226-051-0	Nifuroxazide	0,76		-1,3	0	n.a.	0,15				0,92
13292-46-1	236-312-0	Rifampicin	0,75		1,5	0	n.a.	0,15				0,96

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
69377-81-7	-	Fluroxypyr	0,75		-2,4	0	n.a.	0,09	14			0,85
66258-76-2	262-811-8	Piperacillin	0,75		-1,4	0	n.a.	0,55				0,69
100286-90-6	691-567-9	Irinotecan	0,75		-0,2	0	n.a.	0,22				0,95
486460-32-6	690-730-1	Sitagliptin	0,74		-0,1	0	Pot. P/vP	-0,26				1,00
173159-57-4	605-666-1	Foramsulfuron	0,74		-1,0	0	n.a.	0,57	6			0,75
33069-62-4	-	Paclitaxel	0,73		2,5	0	n.a.	0,57				0,96
23893-13-2	-	Anhydroerythromycin	0,73		1,7	0	n.a.	-0,28				0,98
33419-42-0	251-509-1	Etoposide	0,72		0,6	0	n.a.	0,37				0,68
83799-24-0	801-893-7	Fexofenadine	0,72		3,1	0	Pot. P/vP	0,23				0,75
28797-61-7	249-228-4	Pirenzepine	0,72	-0,3	-0,1	0	Pot. P/vP	0,23				0,92
124-94-7	204-718-7	Triamcinolone	0,71	0,2	0,7	0	n.a.	0,34				0,79
53-03-2	200-160-3	Prednisone	0,71	0,7	1,6	0	n.a.	0,31				0,81
2135-17-3	218-370-9	Flumetasone	0,71		1,5	0	Pot. P/vP	0,27				0,88
83881-51-0	695-115-1	Cetirizine	0,71		-0,9	0	n.a.	0,11				0,73
71675-85-9	275-831-7	Amisulpride	0,71		-1,2	0	n.a.	0,27				0,80
1918-02-1	217-636-1	Picloram	0,71		0,2	0	n.a.	0,17				0,85
108050-54-0	639-676-2	Tilimicosin	0,70		0,1	0	n.a.	-0,15				0,94
35607-66-0	252-641-2	Cefoxitin	0,70		-3,0	0	n.a.	0,36				0,61
50-02-2	200-003-9	Dexamethasone	0,70		1,8	0	n.a.	0,28				0,86
378-44-9	206-825-4	Betamethasone	0,70		1,8	0	Pot. P/vP	0,28				0,86

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
82097-50-5	617-298-9	Triasulfuron	0,70		-1,4	0	n.a.	0,33	43			0,88
24560-70-1	-	Ethinylestradiol-3-sulfate	0,70		-0,3	0	n.a.	0,18				0,85
158062-67-0	605-127-0	Flonicamid	0,70		0,4	0	n.a.	0,38	2			0,83
127-33-3	200-592-2	Demeclocycline hydrochloride	0,69		-1,5	0	n.a.	0,34				0,74
36749-35-6	-	Deethylcyanazine acid	0,69		-4,5	0	n.a.	0,18				0,65
43200-80-2	256-138-9	Zopiclone	0,69	1,0	1,0	0	n.a.	0,15				0,92
129618-40-2	-	Nevirapine	0,69	1,5	2,0	0	n.a.	0,25				0,84
68-88-2	200-693-1	Hydroxyzine	0,69	2,2	2,7	0	n.a.	0,13				0,83
2013-58-3	217-938-3	Meclocycline	0,68		-1,5	0	n.a.	0,33				0,76
139-91-3	205-384-5	Furaltadone	0,68		-2,3	0	n.a.	0,06				0,70
61-72-3	200-514-7	Cloxacillin	0,68		-1,2	0	n.a.	0,38				0,74
76639-94-6	620-107-1	Florfenicol	0,67		0,6	0	n.a.	0,32				0,61
51333-22-3	257-161-7	Budesonide	0,66	2,2	2,4	0	n.a.	0,19				0,81
53-06-5	200-006-5	Cortisone	0,66	1,1	1,1	0	n.a.	0,34				0,87
2479-86-9	-	Androsterone sulfate	0,66		-1,0	0	n.a.	0,22				0,77
125-28-0	204-732-3	dihydrocodeine	0,66	0,8	0,2	0	n.a.	0,50				0,71
50-23-7	200-020-1	Hydrocortisone	0,66		1,7	0	Not P	0,37				0,71
34084-50-9	690-803-8	7-aminoflunitrazepam	0,66		1,9	0	n.a.	0,14				0,75
113844-99-8	-	Torasemide carbonic acid	0,65	2,4	-1,3	0		0,20				0,66
50-24-8	200-021-7	Prednisolone	0,65		1,6	0	Potential P/vP++	0,36				0,71

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
83-43-2	201-476-4	Methylprednisolone	0,65	0,9	1,7	0	n.a.	0,33				0,73
73-48-3	200-800-1	Bendroflumenthiazide	0,65	1,3	1,1	0	n.a.	0,04				0,92
98319-26-7	620-534-3	Finasteride	0,65		2,9	0	n.a.	0,30				0,90
25614-03-3	247-128-5	Bromocriptine	0,65		3,0	0	n.a.	0,03				1,00
35689-59-9	252-677-9	Doxycycline	0,64		-1,7	0	Pot. P/vP	0,41				0,61
120983-64-4	691-449-7	Prothioconazole-desthio	0,64		3,3	0	n.a.	0,15	21			0,90
303-81-1	216-023-6	Novobiocin	0,64		0,5	0	n.a.	0,30				0,90
66215-27-8	266-257-8	Cyromazine	0,64	0,2	0,4	0	n.a.	0,16	28		141	0,60
69477-29-8	614-977-1	2,6-bis-(Diethanolamino)-4,8-dipi- peridinopyrimido-(5,4-d)-pyrimi- dine, tosylat salt	0,64	1,1	1,6	0	Pot. P/vP	0,21				0,88
364-62-5	206-662-9	Metoclopramide	0,63	1,7	-0,4	0	Pot. P/vP	0,26				0,83
51481-65-3	257-233-8	Mezlocillin	0,63		-1,7	0	n.a.	0,44				0,68
6331-96-0	700-413-2	2-amino-4,5-dichlorobenzenesul- fonic acid	0,63		-4,7	0	Potential P/vP++	0,13				0,54
887-54-7	-	Dacthal monoacid	0,63		0,0	0	n.a.	0,30			7	0,79
676228-91-4	-	Thiacloprid amide	0,63		0,7	0	n.a.	0,21				0,60
27314-13-2	248-397-1	Norflurazon	0,63		2,9	0	n.a.	0,18				0,81
59-05-2	200-413-8	Methotrexate	0,63		-4,8	0	n.a.	0,15				0,47
126-07-8	204-767-4	Griseofulvin	0,62		2,5	0	n.a.	0,35				0,86
81403-80-7	617-230-8	Alfuzosin	0,62		1,1	0	Pot. P/vP	0,23				0,86
42028-21-7	-	Estriol-17-sulfate	0,62		-0,9	0	n.a.	0,36				0,55

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
211914-51-1	859-177-5	Dabigatran	0,62		0,1	0		0,19				0,65
76963-41-2	627-310-4	Nizatidine	0,61	-0,9	-0,7	0	n.a.	0,27				0,54
438-67-5	207-120-4	Estrone-3-sulfate	0,61		-1,1	0	n.a.	0,25				0,71
29094-61-9	249-427-6	Glipizide	0,61		0,1	0	n.a.	0,38				0,73
23214-92-8	245-495-6	Doxorubicin	0,61		0,3	0	n.a.	0,31				0,72
918-00-3	620-529-6	1,1,1-Trichloro-2-propanone	0,61		1,7	10	n.a.	0,28				0,67
125-29-1	204-733-9	Hydrocodone	0,60		0,5	0	n.a.	0,39				0,82
4205-90-7	224-119-4	Clonidine	0,60		1,3	0	n.a.	0,17				0,63
79277-27-3	616-673-4	Thifensulfuron-methyl	0,60		0,1	0	n.a.	0,42	9			0,66
126535-15-7	603-146-9	Triflursulfuron-methyl	0,60		1,6	0	n.a.	0,15	10			0,98
18323-44-9	242-209-1	Clindamycin	0,60		1,8	0	n.a.	0,30				0,55
503612-47-3	639-684-6	Apixaban	0,60		2,1	0		0,59				0,80
54143-55-4	685-650-9	Flecainide	0,59	1,6	1,8	0	Pot. P/vP	0,23				0,98
25122-46-7	246-634-3	Clobetasol	0,59		3,3	0	n.a.	0,24				0,95
481-95-8	-	Estriol-3-sulfate	0,59		-1,3	0	n.a.	0,40				0,47
466-99-9	207-383-5	Hydromorphone	0,59		-0,5	0	n.a.	0,34				0,73
37148-27-9	253-366-0	Clenbuterol	0,59		0,3	0	n.a.	0,20				0,73
848-75-9	212-700-5	Lormetazepam	0,59	1,9	3,0	0	n.a.	0,32				0,63
83066-88-0	617-435-2	Fluazifop-P	0,58	1,6	-2,8	0	no conclusion/data	0,29	12			0,74
34205-21-5	251-879-4	Dimefuron	0,58		1,9	0	n.a.	0,17				0,71

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
606-17-7	210-105-5	Iodipamide	0,58		1,1	0	n.a.	-1,14				1,00
55335-06-3	259-597-3	Triclopyr	0,58		1,2	0	n.a.	0,28	24			0,66
26839-75-8	248-032-6	Timolol	0,58		-0,6	0	n.a.	0,28				0,63
481-96-9	-	Estradiol-3-sulfate	0,58		-0,5	0	n.a.	0,32				0,57
18683-91-5	242-500-3	Ambroxol	0,58		1,6	0	Pot. P/vP	0,25				0,63
773058-82-5	415-180-1	Seroquel	0,58	1,8	2,6	0	no conclusion/data	0,21				0,55
110488-70-5	613-102-0	Dimethomorph(E)	0,58		2,4	0	n.a.	0,36	44			0,76
133-90-4	205-123-5	Chloramben (Amiben)	0,57		-1,9	0	n.a.	0,29			2	0,52
68-96-2	200-699-4	21-alpha-hydroxyprogesterone	0,57		3,2	0	n.a.	0,24				0,85
87848-99-5	618-080-6	Acrivastine	0,57		2,0	0	n.a.	0,25				0,55
61337-67-5	288-060-6	Mirtazapine	0,57	2,1	1,5	0	n.a.	0,14				0,84
21593-23-7	244-466-5	Cefapirin	0,57		-4,3	0	no conclusion/data	0,63				0,38
50-18-0	200-015-4	Cyclophosphamide	0,57		0,6	0	n.a.	0,29				0,52
66-79-5	200-635-5	Oxacillin	0,57		-1,3	0	n.a.	0,57				0,50
80-32-0	201-269-9	Sulfachloropyridazine	0,56		-0,7	0	n.a.	0,17				0,56
208465-21-8	606-653-3	Mesosulfuron-methyl	0,56		2,0	0	n.a.	0,50	35			0,66
976-71-6	213-554-5	Canrenone	0,56		2,5	0	n.a.	0,34				0,78
36322-90-4	252-974-3	Piroxicam	0,56	1,5	1,9	0	n.a.	0,23				0,54
4394-00-7	224-516-2	Niflumic acid	0,56	2,5	2,1	0	Pot. P/vP	0,17				0,84
5355-16-8	226-333-3	Diaveridin	0,56		0,6	0	n.a.	0,37				0,62

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
53774-07-5	-	Bifenox-acid	0,56		0,6	0	n.a.	0,24	43		7	0,78
68-89-3	256-627-7	Metamizole	0,56		-7,4	0	n.a.	0,43				0,36
139755-83-2	604-158-7	Sildenafil	0,56		1,6	0	no conclusion/data	0,09				0,91
3778-73-2	223-237-3	Ifosfamide	0,56		0,8	0	n.a.	0,29				0,52
2152-44-5	218-439-3	Betamethasone 17-Valerate	0,56		3,4	0	n.a.	0,39				0,73
75277-39-3	278-169-7	HEPES sodium salt	0,56		-4,7	0	Pot. P/vP	0,49				0,33
28159-98-0	248-872-3	Irgarol	0,56	2,6	3,0	0	n.a.	0,14				0,79
520-85-4	208-298-6	Medroxyprogesterone	0,56	2,6	3,6	0	n.a.	0,22				0,86
58-94-6	200-404-9	Chlorothiazide	0,55	-1,1	-0,7	0	n.a.	0,24				0,47
23950-58-5	245-951-4	Pronamide	0,55		3,4	0	n.a.	0,26				0,76
81335-37-7	-	Imazaquin	0,55		-1,0	0	n.a.	0,55	83			0,48
96525-23-4	619-224-0	Flurtamone	0,55		2,0	0	n.a.	0,17	13			0,76
54739-18-3	611-193-1	Fluvoxamine	0,55	2,0	2,3	0	n.a.	0,18				0,74
132539-06-1	-	Olanzapine	0,55	1,9	1,7	0	n.a.	0,15				0,70
56980-93-9	260-497-7	Celiprolol	0,55	0,6	0,8	0	n.a.	0,47				0,54
287714-41-4	689-191-5	Rosuvastatin	0,55		-0,8	0	n.a.	0,20				0,47
113096-99-4	619-020-1	Cyproconazole	0,55	2,2	3,0	0	n.a.	0,22	111			0,64
55268-75-2	259-560-1	Cefuroxime	0,54	-0,5	-3,9	0	n.a.	0,57				0,36
177406-68-7	605-799-5	Benthiavalicarb-isopropyl	0,54		1,2	0	n.a.	0,04				0,77
1622-61-3	216-596-2	Clonazepam	0,54	1,8	2,5	0	n.a.	0,21				0,69

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
85509-19-9	617-717-5	Flusilazole	0,54	3,0	3,9	0	n.a.	-0,01				0,89
36734-19-7	253-178-9	Iprodione	0,54		1,5	0	n.a.	0,16	22			0,70
564-35-2	-	11-Ketotestosterone	0,54		2,4	0	n.a.	0,37				0,57
53179-11-6	258-416-5	Loperamide	0,54	2,7	2,7	0	vP	0,13				0,97
60168-88-9	262-095-7	Fenarimol	0,54		3,3	0	n.a.	0,15				0,82
132-22-9	205-054-0	Chlorphenamine	0,54	2,2	1,3	0	n.a.	0,17				0,82
153719-23-4	428-650-4	Thiamethoxam DP	0,54		-1,5	0	n.a.	0,17				0,47
2164-17-2	218-500-4	Fluometuron	0,53	1,5	2,4	0	Pot. P/vP	0,22	98			0,61
60282-87-3	262-145-8	Gestoden	0,53		2,8	0	n.a.	0,26				0,69
106133-20-4	600-716-9	Tamsulosin	0,53		0,9	0	n.a.	0,58				0,68
73986-53-5	-	O-Desmethyltramadol	0,53		0,3	0	n.a.	0,28				0,56
59729-33-8	261-891-1	Citalopram	0,53	2,4	1,8	0	Pot. P/vP	0,03				0,93
23103-98-2	245-430-1	Pirimicarb	0,53	1,0	1,7	0	n.a.	0,35	48			0,57
13311-84-7	236-341-9	Flutamide	0,53	2,4	3,1	0	n.a.	0,15				0,82
38345-66-3	253-893-6	Chirald	0,52		1,0	0	n.a.	0,29				0,68
137-88-2	221-272-9	Amprolium	0,52		0,0	0	n.a.	0,29				0,44
6104-71-8	636-421-7	N-Desmethylozapine	0,52		0,8	0	n.a.	0,20				0,59
647-29-0	-	PFOSi	0,52	2,6	-2,4	1	n.a.	-0,14				1,00
71758-44-6	-	2-(2-(Chlorophenyl)amino)benzaldehyde	0,52		3,4	0	n.a.	0,10				0,77
119446-68-3	601-613-1	Difenoconazol I	0,52		3,4	0	n.a.	0,04	148			0,91

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
673-04-1	211-601-4	Simeton	0,52	0,6	2,3	0	n.a.	0,28				0,59
3572-43-8	222-684-1	Bromhexine	0,52		2,6	0	Pot. P/vP	0,09				0,88
1014-70-6	213-801-7	Simetryn	0,51	1,7	2,7	0	n.a.	0,21				0,58
73590-58-6	615-996-8	Omeprazole	0,51		2,2	0	Pot. P/vP	0,48				0,76
102625-70-7	600-331-6	Pantoprazole	0,51		1,4	0	Pot. P/vP	0,49				0,76
335104-84-2	608-879-8	Tembotrione	0,51		-0,6	0	n.a.	0,04	14			0,95
87392-12-9	618-004-1	S-Metolachlor	0,51		3,2	0	n.a.	0,29	11	71		0,60
7206-76-0	230-583-9	2-ethyl-2-phenylmalonamide	0,51		-0,3	0	n.a.	0,70				0,38
52-53-9	200-145-1	Verapamil	0,51	2,7	2,5	0	n.a.	0,54				0,96
61869-08-7	-	Paroxetine	0,51		1,9	0	n.a.	0,21				0,80
53994-73-3	258-909-5	Cefaclor	0,50		-2,5	0	n.a.	0,62				0,33
28981-97-7	249-349-2	Alprazolam	0,50	1,8	2,4	0	n.a.	0,30				0,54
135590-91-9	603-923-2	Mefenpyr-diethyl	0,50	2,8	4,3	0	Pot. P/vP	0,43				0,71
514-65-8	208-184-6	Biperiden	0,50	2,9	2,1	0	n.a.	0,25				0,69
139528-85-1	604-145-6	Metosulam	0,50		2,1	0	n.a.	0,25	10			0,89
38649-73-9	801-861-2	Talinolol	0,50		1,6	0	n.a.	0,49				0,50
10418-03-8	233-894-8	Stanozolol	0,50		3,5	0	n.a.	0,18				0,89
55219-65-3	259-537-6	Triadimenol	0,50	2,3	3,0	0	n.a.	0,35	74			0,56
71125-39-8	-	Meloxicam	0,50		1,8	0	n.a.	0,27				0,46
81777-89-1	617-258-0	Clomazone	0,50		2,5	0	n.a.	0,24	44			0,54

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
396-01-0	206-904-3	Triamterene	0,50	0,6	1,0	0	n.a.	0,11				0,54
2536-31-4	219-800-8	Chlorflurecol-methyl ester	0,49		2,2	0	n.a.	0,40				0,49
1867-66-9	217-484-6	Ketamine hydrochloride	0,49		1,6	0	no conclusion/data	0,33				0,54
599-79-1	209-974-3	Sulfasalazine	0,49		-2,3	0	n.a.	0,27				0,38
5902-51-2	227-595-1	Terbacil	0,49		0,3	0	n.a.	0,28				0,47
78-44-4	201-118-7	Carisoprodol	0,49	0,4	1,9	0	n.a.	0,40				0,49
90717-03-6	402-790-6	Quinmerac	0,49		-1,8	0	no conclusion/data	0,56	41			0,33
125-73-5	204-754-3	Dextrorphan	0,48		1,6	0	n.a.	0,27				0,63
169590-42-5	685-962-5	Celecoxib	0,48	3,0	3,2	0	n.a.	0,13				0,86
107868-30-4	643-090-2	Exemestane	0,48		3,3	0	n.a.	0,29				0,68
31430-15-6	250-624-4	Flubendazole	0,48		2,5	0	n.a.	0,15				0,71
125-71-3	204-752-2	Dextromethorphan	0,48		2,0	0	n.a.	0,30				0,73
210880-92-5	433-460-1	Clothianidin	0,48		0,0	0	no conclusion/data	0,27				0,39
122-16-7	-	Sulfanitran	0,48		1,9	0	n.a.	0,25				0,56
123312-89-0	602-927-1	Pymetrozin	0,48	1,0	0,2	0	n.a.	0,33	6			0,34
846-48-0	212-686-0	Boldenone	0,47		2,7	0	Not P	0,35				0,52
16773-42-5	240-826-0	Ornidazole	0,47		0,6	0	n.a.	0,30				0,38
1852-43-3	-	Androsterone-glucuronide	0,47		-1,4	0	n.a.	0,30				0,31
103577-45-3	627-144-2	Lansoprazole	0,47	1,9	2,6	0	n.a.	0,15				0,93
53003-10-4	258-290-1	Salinomycin	0,46		3,5	0	n.a.	-0,22				0,97

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
141854-21-9	-	4'-O-demethyl-PPZ sulfide	0,46		2,0	0		0,31				0,46
111988-49-9	601-147-9	Thiacloprid	0,46		1,3	0	n.a.	0,23				0,57
1180-25-2	634-203-6	Testosterone glucuronide	0,46		-1,3	0	n.a.	0,30				0,30
74222-97-2	277-780-6	Sulfometuron-methyl	0,46		-1,4	0	n.a.	0,51				0,43
19044-88-3	242-777-0	Oryzalin	0,46		2,1	0	n.a.	0,02	85			0,82
1639-60-7	207-420-5	Dextropropoxyphene hydrochloride	0,46		2,8	0	n.a.	0,46				0,67
638-73-3	-	Chlorodiodomethane	0,46		2,1	21	n.a.	0,24				0,46
437-38-7	207-113-6	Fentanyl	0,46	2,6	3,4	0	n.a.	0,48				0,65
136470-78-5	620-487-9	Abacavir	0,46		1,4	0	n.a.	0,23				0,38
152-62-5	205-806-8	Dydrogesterone	0,46		3,3	0	n.a.	0,28				0,71
626-43-7	210-948-9	3,5-dichloroaniline	0,46	2,2	2,9	0	Pot. P/vP	0,22	28		58	0,51
135062-02-1	629-921-1	Repaglinide	0,46		3,0	0	n.a.	0,49				0,82
846-50-4	212-688-1	Temazepam	0,46	2	2,2	0	n.a.	0,54				0,38
26225-79-6	247-525-3	Ethofumesate	0,46		2,4	0	n.a.	0,27	9			0,51
93479-97-1	642-919-5	Glimepiride	0,46		-0,1	0	n.a.	0,18				0,71
127-71-9	204-859-4	Sulfabenzamide	0,46	1,6	-0,9	0	n.a.	0,29				0,36
57-42-1	200-329-1	Pethidine	0,46	1,5	1,1	0	no conclusion/data	0,55				0,46
57-67-0	200-345-9	Sulfaguanidine	0,45	-0,9	-0,9	0	no conclusion/data	0,28				0,28
25451-15-4	247-001-4	Felbamate	0,45	0,4	0,5	0	n.a.	0,57				0,32
23696-28-8	245-832-7	Olaquinox	0,45		-0,2	0	n.a.	0,64				0,24

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
2479-90-5	-	Estrone glucuronide	0,45		-1,4	0	n.a.	0,48				0,27
104206-82-8	600-533-4	Mesotrione	0,45	-0,0	-0,7	0	n.a.	0,23	14			0,58
99102-04-2	-	Erythrohydrobupropion	0,45		0,3	0	n.a.	0,36				0,40
1122-58-3	214-353-5	<i>N,N</i> -dimethylpyridin-4-amine	0,45	0,8	0,0	0	no conclusion/data	0,33				0,37
55142-85-3	259-498-5	ticlopidine	0,45		2,3	0	n.a.	0,18				0,68
42200-33-9	255-706-3	Nadolol	0,45	-0,6	-1,4	0	n.a.	0,72				0,27
3337-62-0	222-075-0	3,5-dibromo-4-hydroxybenzoe a-cid	0,45		-1,7	0	n.a.	0,53	1			0,41
68157-60-8	-	Forchlorfenuron	0,44		3,0	0	n.a.	0,27				0,54
7681-76-7	231-675-1	Ronidazole	0,44		-1,7	0	n.a.	0,29				0,31
644-62-2	211-419-5	Meclofenamic acid	0,44		1,6	0	n.a.	0,23				0,73
67392-87-4	266-679-2	Drospirenone	0,44		3,4	0	n.a.	0,30				0,81
66085-59-4	266-127-0	Nimodipine	0,44	2,9	3,6	0	n.a.	0,41				0,48
37115-43-8	636-833-7	alpha-Hydroxyalprazolam	0,44		2,0	0	n.a.	0,34				0,38
64520-05-4	-	10-Hydroxy-amitriptyline	0,44		0,8	0	n.a.	0,32				0,44
513-88-2	208-175-7	1,1-dichloroacetone	0,44	0,7	0,9	10	no conclusion/data	0,38				0,31
140923-17-7	604-209-3	lprovalicarb	0,44		3,0	0	n.a.	0,48	7			0,49
21187-98-4	244-260-5	Gliclazide	0,44		0,4	0	n.a.	0,27				0,41
1185255-09-7	815-493-5	Azoxystrobin acid	0,44		-0,4	0	n.a.	0,57	37			0,35
118134-30-8	601-505-4	Spiroxamine I	0,44		1,9	0	n.a.	0,08	59			0,82
15686-51-8	-	Clemastine	0,44		3,0	0	n.a.	0,10				0,85

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
15310-01-7	239-352-7	Benodanil	0,44		3,1	0	n.a.	0,15				0,41
58581-89-8	611-699-2	Azelastine	0,43		2,8	0	n.a.	0,13				0,83
220899-03-6	-	Metrafenone	0,43		3,2	0	n.a.	0,68	155			0,86
67018-85-3	266-544-8	Norverapamil	0,43		1,4	0	n.a.	0,66				0,90
76-73-3	200-982-2	Secobarbital	0,43	0,9	1,8	0	n.a.	0,33				0,37
1088-11-5	214-123-4	Nordazepam	0,43		2,8	0	no conclusion/data	0,49				0,45
100643-71-8	-	Desloratadine	0,43		1,8	0	n.a.	0,24				0,76
34970-00-8	-	Bromochloriodomethane	0,43		1,7	98	n.a.	0,28				0,35
135410-20-7	603-921-1	Acetamidrid	0,43		1,5	0	n.a.	0,24				0,52
99105-77-8	619-394-6	Sulcotrione	0,43		0,3	0	n.a.	0,29	21			0,59
121-14-2	204-450-0	2,4-Dinitrotoluene	0,43	1,6	2,0	0	n.a.	0,19		2		0,44
83-98-7	201-509-2	Orphenadrine	0,43	2,3	2,5	0	no conclusion/data	0,23				0,51
59-40-5	200-423-2	Sulfaquinoxaline	0,43	1,3	1,0	0	n.a.	0,21				0,42
51803-78-2	257-431-4	Nimesulide	0,43	2,3	1,8	0	n.a.	0,35				0,49
90982-32-4	618-690-2	Chlorimuron ethyl	0,43		-1,6	0	vP	0,45				0,62
95058-81-4	619-100-6	Gemcitabine	0,43		-2,1	0	n.a.	0,36				0,20
28343-61-5	881-469-6	Chlorothalonil-4-hydroxy	0,43		0,4	0	n.a.	0,49			4	0,78
131860-33-8	603-524-3	Azoxystrobin	0,42		2,7	0	n.a.	0,60	66			0,55
77-26-9	201-017-8	Butalbital	0,42	0,6	1,5	0	n.a.	0,33				0,35
83055-99-6	401-340-6	Bensulfuron methyl	0,42		-0,4	0	no conclusion/data	0,57	52			0,49

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
2403-88-5	219-291-2	2,2,6,6-tetramethylpiperidin-4-ol	0,42		-1,3	0	Potential P/vP++	0,56				0,26
634-03-7	211-204-6	Phendimetrazine	0,42		1,6	0	n.a.	0,27				0,32
149979-41-9	604-715-4	Tepraloxydim	0,42		3,2	0	n.a.	0,24				0,57
161326-34-7	605-252-0	Fenamidone	0,41		2,5	0	n.a.	0,33	10			0,47
23135-22-0	245-445-3	Oxamyl	0,41	-1,1	-1,5	0	n.a.	0,55	14			0,23
120375-14-6	-	Metolachlor-Morpholinon	0,41		2,6	0	n.a.	0,44	38		26	0,36
28249-77-6	248-924-5	Benthiocarb	0,41		3,3	0	n.a.	0,31	66			0,44
87857-41-8	804-562-5	Norsertaline	0,41		3,2	0	n.a.	0,25				0,67
35045-02-4	-	Metribuzin DA	0,41		1,8	0	n.a.	0,35	7			0,31
402-45-9	206-945-7	4-(Trifluoromethyl)phenol	0,41	1,8	2,7	2	n.a.	0,30				0,43
359-83-1	206-634-6	Pentazocine	0,41		2,1	0	n.a.	0,24				0,68
99-55-8	202-765-8	5-nitro-o-toluidine	0,41	1,5	1,7	0	Pot. P/vP	0,23			2	0,35
637-07-0	211-277-4	Clofibrate ethyl	0,41	2,5	3,5	0	n.a.	0,65				0,48
14214-32-5	238-068-0	Difenoxuron	0,41		2,6	0	n.a.	0,58				0,38
196618-13-0	-	Oseltamivir	0,41		-1,5	0	n.a.	0,60				0,26
34911-55-2	-	Bupropion	0,41	2,1	1,9	0	n.a.	0,30				0,54
34014-18-1	251-793-7	Tebuthiuron	0,40		1,7	0	n.a.	0,31				0,36
474-86-2	207-488-6	Equilin	0,40		3,2	0	n.a.	0,40				0,52
6988-21-2	230-253-4	Dioxacarb	0,40		0,7	0	n.a.	0,24	11			0,25
21829-25-4	244-598-3	Nifedipine	0,40	2,1	3,1	0	n.a.	0,55				0,35

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
532-03-6	208-524-3	Methocarbamol	0,40	-0,4	0,3	0	n.a.	0,79				0,23
23210-56-2	245-491-4	Ifenprodil	0,40		2,4	0	n.a.	0,42				0,43
91-53-2	202-075-7	Ethoxyquin	0,40		3,4	0	no conclusion/data	0,34				0,49
23887-31-2	245-926-8	Clorazepate	0,40		-1,4	0	n.a.	0,52				0,25
75-99-0	200-923-0	Dalapon	0,40		-3,3	0	n.a.	0,40			2	0,22
1918-16-7	217-638-2	Propachlor	0,40	1,6	2,2	0	n.a.	0,56	21			0,32
1709-59-7	216-970-5	4-Amino- <i>N,N</i> -dimethylbenzene-sulfonamide	0,39		0,7	0	n.a.	0,30				0,26
33089-74-6	861-087-6	Amitraz metabolite (Methanimidamide, <i>N</i> -(2,4-dimethylphenyl)- <i>N'</i> -methyl-)	0,39		0,5	0	n.a.	0,40				0,30
1668-19-5	214-966-8	Doxepin	0,39		2,1	0	n.a.	0,34				0,53
102-77-2	203-052-4	2-(morpholiniothio)benzothiazole	0,39	1,2	1,9	0	Pot. P/vP	0,27				0,25
10161-33-8	600-229-1	Trenbolone	0,39	1,5	2,7	0	n.a.	0,41				0,32
16118-49-3	240-286-6	Carbetamide	0,39		1,7	0	n.a.	0,60	11			0,27
88671-89-0	410-400-0	Myclobutanil	0,39		3,1	0	no conclusion/data	0,49	253			0,46
81-25-4	201-337-8	Cholic acid	0,39	1,7	0,1	0	n.a.	0,46				0,20
6164-98-3	228-200-5	Chlordimeform	0,39		2,0	0	n.a.	0,35				0,36
73-40-5	200-799-8	Guanine	0,39	-1,3	-1,0	0	no conclusion/data	0,35				0,19
51481-61-9	257-232-2	Cimetidine	0,39		-0,3	0	n.a.	0,41				0,29
106-47-8	203-401-0	4-chloroaniline	0,39	1,5	1,8	0	Potential P/vP++	0,31			6	0,29
1689-83-4	216-881-1	Ioxynil	0,38		1,5	0	n.a.	-0,08				0,53

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
137-17-7	205-282-0	2,4,5-Trimethylaniline	0,38	1,9	2,2	0	n.a.	0,50			6	0,31
102767-28-2	-	Levetiracetam	0,38		-1,2	0	n.a.	0,76				0,20
5352-88-5	688-804-3	1-(4-chlorophenyl)-3-methylurea	0,38	1,3	2,0	0	n.a.	0,35	52			0,28
83463-62-1	690-348-5	Bromochloroacetonitrile	0,38		1,7	10	n.a.	0,46				0,25
529-38-4	637-078-6	Cocaethylene	0,38		1,7	0	n.a.	0,64				0,31
1689-84-5	216-882-7	Bromoxynil	0,38	2,3	0,8	0	n.a.	0,54	2			0,51
2032-65-7	217-991-2	Methiocarb	0,38		2,5	0	n.a.	0,51	4			0,34
593-94-2	-	Dibromiodomethane	0,38		2,1	8	n.a.	0,28				0,28
87-65-0	201-761-3	2,6-Dichlorophenol	0,38	2,0	2,5	0	n.a.	0,36		2		0,36
124750-92-1	-	Losartansäure	0,37		-0,4	0		0,35				0,47
517-09-9	208-230-5	Equilenin	0,37		3,3	0	n.a.	0,40				0,52
4065-45-6	223-772-2	Sulisobenzone	0,37	2,0	-1,7	0	P	0,54				0,24
101-21-3	202-925-7	Chlorpropham	0,37		3,4	1	n.a.	0,35	44		7	0,36
29331-92-8	-	10,11-Dihydro-10-hydroxycarbamazepine	0,37		1,8	0	n.a.	0,50				0,20
129-03-3	204-928-9	Cyproheptadine	0,36		2,9	0	n.a.	0,25				0,50
17902-23-7	241-846-2	Tegafur	0,36	-0,7	-0,3	0	n.a.	0,30				0,19
75847-73-3	-	Enalapril	0,36		-0,9	0	n.a.	0,69				0,17
88-85-7	201-861-7	Dinoseb	0,36	2,9	0,1	0	vP	0,18			4	0,49
15299-99-7	239-333-3	Napropamide	0,36	2,5	3,6	0	n.a.	0,62	169			0,35
39809-25-1	663-371-3	Penciclovir	0,36		-1,8	0	n.a.	0,47				0,15

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
165252-70-0	605-399-0	Dinotefuran	0,36		-0,7	0	no conclusion/data	0,32				0,19
1806-98-0	-	17-beta-estradiol-17-glucuronide	0,36		-0,6	0	n.a.	0,34				0,19
938-73-8	213-346-4	Ethenzamide	0,36	0,5	1,0	0	n.a.	0,78				0,20
1491-59-4	216-079-1	Oxymetazoline	0,36	1,8	1,9	0	Pot. P/vP	0,43				0,55
2631-37-0	220-113-0	Promecarb	0,36		3,0	0	n.a.	0,53			7	0,31
69610-10-2	-	MDMA / Methylendioxyamphetamin	0,35	1,3	-0,5	0	n.a.	0,72				0,27
33704-61-9	251-649-3	Cashmeran	0,35	2,3	4,1	1	Potential P/vP++	0,35				0,51
102-36-3	203-026-2	3,4-dichlorophenyl isocyanate	0,35		2,8	17	Pot. P/vP	0,28				0,45
52-01-7	-	Spirolactone	0,35		0,8	0	n.a.	0,63				0,23
30516-87-1	623-849-4	Zidovudine	0,35	-0,7	-0,4	0	n.a.	0,33				0,18
53112-28-0	414-220-3	Pyrimethanil	0,35	2,0	3,1	0	n.a.	0,45	43			0,35
1400-61-9	215-749-0	Nystatin	0,35		-1,3	0	n.a.	0,48				0,13
94-97-3	202-378-4	CBT (5-chloro-1H-benzotriazole)	0,35		2,2	0	n.a.	0,40				0,24
60397-77-5	-	2,4-dimethylphenylformamide	0,35		1,6	0	n.a.	0,71				0,23
950-81-2	213-452-0	4-formyl-antipyrine	0,34		1,1	0	n.a.	0,72				0,18
957-51-7	213-482-4	Diphenamid	0,34	1,5	2,6	0	n.a.	0,62				0,28
82801-81-8	-	MDEA (3,4-Methylenedioxyamphetamin)	0,34		-0,9	0	n.a.	0,72				0,29
519-98-2	208-281-3	4-MAA (4-methylaminoantipyrine)	0,34		1,2	0	n.a.	0,55				0,18
76608-88-3	278-498-6	Triapenthenol	0,34		2,5	0	n.a.	0,39				0,30

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
91-44-1	202-068-9	7-(diethylamino)-4-methyl-2-benzopyrone	0,34		2,8	0	Pot. P/vP	0,55				0,29
134678-17-4	-	Lamivudine	0,34		-1,1	0	n.a.	0,36				0,14
88768-40-5	641-006-9	Cilazapril	0,34		-0,1	0	n.a.	0,61				0,18
950-37-8	213-449-4	Methidathion	0,34	2,2	1,4	0	n.a.	0,54				0,22
78-59-1	201-126-0	Isoacetophorone	0,34	1,3	1,8	0	Not P	0,51				0,23
27503-81-7	248-502-0	Ensulizole	0,34		-2,4	0	Potential P/vP++	0,37				0,18
68011-66-5	809-752-1	2-hydroxycarbamazepine	0,34		1,8	0	n.a.	0,45				0,21
67306-00-7	614-049-6	Fenpropidin	0,33		3,4	0	n.a.	0,21	71			0,70
77-19-0	201-009-4	Dicycloverine	0,33		2,9	0	Pot. P/vP	0,43				0,60
3252-43-5	221-843-2	Dibromoacetonitrile	0,33		1,9	3	n.a.	0,42				0,19
6923-22-4	230-042-7	Monocrotophos	0,33		-0,3	0	n.a.	0,67				0,16
1852-50-2	633-751-3	Estriol-16-glucuronide	0,33		-1,2	0	n.a.	0,39				0,14
1077-56-1	214-073-3	N-Ethyl-o-toluenesulfonamide	0,33		1,6	0	n.a.	0,50	7			0,22
110235-47-7	432-140-7	Mepanipirim	0,32		2,9	0	no conclusion/data	0,39				0,33
3376-94-1	-	Norpropoxyphene	0,32		2,0	0	n.a.	0,59				0,42
175217-20-6	605-752-9	Silthiopham	0,32		3,4	0	n.a.	0,55				0,42
99-99-0	202-808-0	4-nitrotoluene	0,32		2,4	1	Potential P/vP++	0,36		2		0,24
2479-91-6	-	Estriol-3-glucuronide	0,31		-2,1	0	n.a.	0,66				0,12
107-14-2	203-467-0	Chloroacetonitrile	0,31	0,0	0,5	1	no conclusion/data	0,73				0,17
13071-79-9	235-963-8	Terbufos	0,31	2,9	4,4	0	n.a.	0,54				0,34

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
99-88-7	202-797-2	4-isopropylaniline	0,31	1,7	2,4	0	Potential P/vP++	0,42			2	0,22
838-85-7	212-657-2	Diphenyl phosphate	0,31	0,1	-2,1	0	n.a.	0,53				0,22
98-53-3	202-678-5	4-tert-butylcyclohexanone	0,31		3,1	3	Not P	0,50				0,26
43210-67-9	256-145-7	Fenbendazole	0,30		3,1	0	n.a.	0,45				0,33
934-32-7	213-280-6	2-aminobenzimidazole	0,30		0,6	0	no conclusion/data	0,39	13			0,17
14769-73-4	238-836-5	Levamisole	0,30		1,1	0	n.a.	0,54				0,17
10265-92-6	10265-92-6	Methamidophos	0,30		-0,8	0	n.a.	0,53				0,13
16752-77-5	240-815-0	Methomyl	0,30		0,6	0	n.a.	0,50	11			0,14
26093-31-2	247-454-8	7-Amino-4-methylcoumarin	0,30		1,3	0	n.a.	0,59				0,15
4184-79-6	224-058-3	Xtri (5,6-dimethyl-1H-benzotriazole)	0,30		1,9	0	n.a.	0,60				0,20
16051-77-7	240-197-2	Isosorbide mononitrate	0,30		-1,1	0	n.a.	0,32				0,11
1134-23-2	214-482-7	S-ethyl N-cyclohexylthiocarbamate	0,30	2,5	3,8	0	no conclusion/data	0,53			8	0,22
94-24-6	202-316-6	Tetracaine	0,30	2,4	2,7	0	n.a.	0,48			7	0,23
13392-18-2	680-817-2	Fenoterol	0,30		0,0	0	no conclusion/data	0,64				0,16
116539-59-4	-	Duloxetine	0,29		3,0	0	n.a.	0,55				0,34
3094-09-5	-	Doxifluridine	0,29		-1,6	0	n.a.	0,41				0,10
92-67-1	202-177-1	4-Aminodiphenyl	0,29	2,3	2,8	0	n.a.	0,44				0,20
835-31-4	212-641-5	Naphazoline	0,29	1,9	-0,3	0	no conclusion/data	0,46				0,23
491-80-5	207-744-7	Biochanin A	0,29	2,4	2,7	0	n.a.	0,72				0,31

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
76547-98-3	278-488-1	Lisinopril	0,29		-1,1	0	n.a.	0,69				0,10
101-42-8	202-941-4	Fenuron	0,29	0,5	1,2	0	no conclusion/data	0,58			4	0,14
934-34-9	213-281-1	2-Hydroxybenzothiazole	0,29		1,5	0	no conclusion/data	0,58				0,15
98-10-2	202-637-1	Benzenesulphonamide	0,29	-0,1	0,4	0	Pot. P/vP	0,59				0,13
82834-16-0	617-394-0	Perindopril	0,28		-1,1	0	n.a.	0,70				0,14
486-66-8	207-635-4	Daidzein	0,28	2,0	2,7	0	n.a.	0,66				0,23
497-18-7	207-837-2	Carbonohydrazide	0,28	1,3	-2,5	0	Pot. P/vP	0,49				0,09
256-96-2	205-970-0	Iminostilbene	0,28		3,5	0	Pot. P/vP	0,32				0,25
2814-20-2	220-561-7	2-Isopropyl-6-methyl-pyrimidin-4-ol	0,28		0,6	0	n.a.	0,50				0,13
26725-51-9	625-298-5	4-hydroxybenzotriazole	0,28		-0,5	0	n.a.	0,59				0,13
154361-50-9	-	Capecitabine	0,28		-1,0	0	n.a.	0,45				0,10
88-75-5	201-857-5	2-nitrophenol	0,28	1,4	1,5	0	Potential P/vP++	0,40			2	0,17
17804-35-2	241-775-7	Benomyl	0,27		2,3	0	n.a.	0,50		7		0,16
87269-97-4	807-772-5	Ramiprilate	0,27		-0,2	0		0,64				0,09
52888-80-9	401-730-6	Prosulfocarb	0,27	2,7	4,4	0	no conclusion/data	0,54	15			0,26
31218-83-4	250-517-2	Propetamphos	0,27		3,4	0	n.a.	0,55				0,20
120-75-2	204-423-3	2-methylbenzothiazole	0,27		2,5	0	n.a.	0,57				0,16
2592-95-2	219-989-7	1-hydroxybenzotriazole	0,26		-0,9	0	no conclusion/data	0,56				0,12
73573-88-3	700-442-0	Mevastatin	0,26		3,4	0	no conclusion/data	0,71				0,17
51-64-9	200-112-1	Dexamphetamine	0,26	0,9	-0,8	0	no conclusion/data	0,63				0,13

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
479-13-0	207-525-6	Coumesterol	0,26		2,8	0	n.a.	0,67				0,14
61676-87-7	262-890-9	Cymiazole	0,25		1,5	0	n.a.	0,49	57			0,29
446-72-0	207-174-9	Genistein	0,25	2,3	2,6	0	n.a.	0,68				0,22
74103-06-3	616-049-1	Ketorolac	0,25	1,7	1,2	0	no conclusion/data	0,61				0,11
50512-35-1	-	Isoprothiolane	0,25		3,2	0	n.a.	0,69				0,14
119-65-3	204-341-8	Isoquinoline	0,25		2,0	0	Pot. P/vP	0,59			31	0,12
615-22-5	210-417-1	2-(methylthio)-benzothiazol	0,25		1,7	0	n.a.	0,48				0,16
109-87-5	203-714-2	Dimethoxymethane	0,25	-0,4	0,2	6	no conclusion/data	0,43				0,09
3878-19-1	223-404-0	Fuberidazole	0,24		2,6	0	n.a.	0,48	12			0,16
7786-34-7	206-051-7	Mevinphos	0,24		0,3	0	n.a.	0,76				0,09
50-33-9	200-029-0	Phenylbutazone	0,23	2,5	1,6	0	n.a.	0,55				0,14
64228-79-1	-	Atracurium	0,23		-0,8	0	n.a.	0,71				1,00
1143-72-2	214-540-1	2,3,4-trihydroxybenzophenone	0,20		2,6	0	no conclusion/data	0,68				0,14
56354-06-4	690-035-3	THC-COOH	0,20		2,6	0	n.a.	0,61				0,19
133040-01-4	-	Eprosartan	0,16		-0,3	0	n.a.	0,55				0,13

7 Danksagung

Die Autoren danken Emiel Rorije und Eric Verbruggen (RIVM) für die Bereitstellung von P- und vPvM-Scores und Jasmin Hafner (EAWAG) für die Berechnung und Bereitstellung von Abbauhalbwertszeiten. Kathrin Fenner (EAWAG) danken wir für die fachliche Unterstützung. Dirk Scheerbaum (Noack Laboratorien GmbH), Daniela Claßen, Ulrich Jöhncke, Daniel Sättler, Ivo Schliebner (UBA IV 2.3 Chemikalien), Jana Schmidt, Ricardo Schöps (UBA FG IV 1.2 Biozide), Anna Pissarello, Jan Priegnitz (UBA IV 1.3 Pflanzenschutzmittel), Astrid Wiemann, Silvia Berkner (UBA FG IV 2.2 Arzneimittel) danken wir für die fachlich hilfreichen Hinweise bei der Formulierung der Empfehlungen.

8 Quellenverzeichnis

- Arp, H.P.H. & Hale, S. (2022): Assessing the persistence and mobility of organic substances to protect freshwater resources. *ACS Environmental Au* 2, 482–509. <https://doi.org/10.1021/acsenvironau.2c00024>
- Arp, H.P.H., Hale, S., Neumann, M. (2023): PMT/vPvM assessment of REACH registered Substances Detected in Wastewater Treatment Plant Effluent, Freshwater Resources and Drinking Water. *Texte | 20/2023*, German Environment Agency (UBA), Dessau-Roßlau, Germany. <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen>
- Birch, H., Dechesne, A., Knudsmark Sjøholm, K., Mayer, P. (2023a): Biodegradation of chemicals tested in mixtures and individually: mixture effects on biodegradation kinetics and microbial composition. *Biodegradation* 34, 139–153. <https://doi.org/10.1007/s10532-022-10009-y>
- Birch, H., Hammershøj, R., Torsbjerg Møller, M., Mayer, P. (2023b): Technical guidance on biodegradation testing of difficult substances and mixtures in surface water. *MethodsX* 10, 102138. <https://doi.org/10.1016/j.mex.2023.102138>
- Cousins, I.T., Ng, C.A., Wang, Z., Scheringer, M. (2019): Why is high persistence alone a major cause of concern? *Environmental Science: Processes and Impacts* 21, 781–792. <https://doi.org/10.1039/C8EM00515J>
- EC (2019): Communication from the Commission to the European Parliament, the European Council, the Council, the European Economic and Social Committee and the Committee of the regions - The European Green Deal. *EUR-Lex - 52019DC0640*
- EC (2020): Communication from the Commission to the European Parliament, the Council, the European Economic and Social Committee and the Committee of the Regions - Chemicals Strategy for Sustainability Towards a Toxic-Free Environment. *EUR-Lex - 52020DC0667*
- EC (2022): Commission Delegated Regulation (EU) 2023/707 of 19 December 2022 amending Regulation (EC) No 1272/2008 as regards hazard classes and criteria for the classification, labelling and packaging of substances and mixtures. *Delegated regulation - 2023/707*. <https://eur-lex.europa.eu>
- EC (2023): Guidance Document on Pesticide Analytical Methods for Risk Assessment and Post-approval Control and Monitoring Purposes. *SANTE/2020/12830, Rev.2*. <https://food.ec.europa.eu>
- ECHA (2023a): New hazard classes 2023. <https://echa.europa.eu/new-hazard-classes-2023> (2024-09-27)
- ECHA (2023b): Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment Chapter R.11: PBT/vPvB assessment Version 4.0 – December 2023. <https://echa.europa.eu/documents>
- ECHA (2023c): Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment Chapter R.7b: Endpoint specific guidance Version 5.0 – December 2023. <https://echa.europa.eu/documents>
- ECHA (2024): Guidance on the Application of the CLP Criteria - Guidance to Regulation (EC) No 1272/2008 on classification, labelling and packaging (CLP) of substances and mixtures, Version 6.0. ISBN: 978-92-9468-343-4. European Chemicals Agency, Helsinki, Finland
- ERM-Koalition (2020): Europäisches Fließgewässermemorandum zur qualitativen Sicherung der Trinkwassergewinnung. ISBN/EAN: 978-90-6683-177-3. <https://www.iawr.org>
- Fenner, K., Stamm, C., Bischoff, F., Honti, M., Varga, L. (2017): Suitability of laboratory simulation tests for the identification of persistence in surface waters. *Texte | 40/2017*, German Environment Agency (UBA), Dessau-Roßlau, Germany. <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen>
- FOKUS (2006): Guidance Document on Estimating Persistence and Degradation Kinetics from Environmental Fate Studies on Pesticides in EU Registration” Report of the FOCUS Work Group on Degradation Kinetics, EC Document Reference Sanco/10058/2005 version 2.0, 434 pp. <https://esdac.jrc.ec.europa.eu>

- Giger, W., Ahel, M., Schaffner, C. (1984): Determination of organic water pollutants by the combined use of high-performance liquid chromatography and high-resolution gas chromatography. In: Angeletti, G., Bjørseth, A. (eds) Analysis of Organic Micropollutants in Water. Springer, Dordrecht. https://doi.org/10.1007/978-94-009-6345-0_11
- Hafner, J., Fenner, K., Scheidegger, A. (2023): Systematic handling of environmental fate data for model development – Illustrated for the case of biodegradation half-life data. Environmental Science and Technology Letters 10, 859–864. <https://doi.org/10.1021/acs.estlett.3c00526>
- Hartmann, J., Rorije, E., Wassenaar, P.N.H., Verbruggen, E. (2023): Screening and prioritising persistent, mobile and toxic chemicals: development and application of a robust scoring system. Environmental Sciences Europe 35, 40. <https://doi.org/10.1186/s12302-023-00749-w>
- Hofman-Caris, R., Claßen, D. (2020): Persistence of gabapentin, 1H-benzotriazole, diglyme, DTPA, 1,4-dioxane, melamine and urotropin in surface water - Testing of chemicals according to the OECD 309 guideline. KWR 2020.118. <https://library.kwrwater.nl/publication/61787269>
- Kolpin, D.W., Furlong, E.T., Meyer, M.T., Thurman, E.M., Zaugg, S.D., Barber, L.B., Buxton, H.T. (2002): Pharmaceuticals, hormones, and other organic wastewater contaminants in U.S. streams, 1999–2000: A national reconnaissance. Environmental Science and Technology 36, 1202–1211. <https://doi.org/10.1021/es011055j>
- Li, Z. & McLachlan, M. (2019): Biodegradation of chemicals in unspiked surface waters downstream of wastewater treatment plants. Environmental Science and Technology 53, 1884–1892. <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b05191>
- Li, Z. & McLachlan, M. (2020): Comparing non-targeted chemical persistence assessed using an unspiked OECD 309 test to field measurements. Environmental Science: Processes and Impacts 22, 1233–1242. <https://doi.org/10.1039/C9EM00595A>
- Loos, R., Locoro, G., Comero, S., Contini, S., Schwesig, D., Werres, F., Balsaa, P., Gans, O., Weiss, S., Blaha, L., Bolchi, M., Gawlik, B.M. (2010): Pan-European survey on the occurrence of selected polar organic persistent pollutants in ground water. Water Research 44, 4115–4126. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2010.05.032>
- Mansouri, K., Grulke, C.M., Judson, R.S., Williams, A.J. (2018): OPERA models for predicting physicochemical properties and environmental fate endpoints. Journal of Cheminformatics 10, 10. <https://doi.org/10.1186/s13321-018-0263-1>
- Neumann, M., Schliebner, I. (2019): Protecting the sources of our drinking water: The criteria for identifying persistent, mobile and toxic (PMT) substances and very persistent and very mobile (vPvM) substances under EU Regulation REACH (EC) No 1907/2006, Texte | 127/2019, German Environment Agency (UBA), Dessau-Roßlau, Germany. <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen>
- Neuwald, I.J., Hübner, D., Wiegand, H.L., Valkov, V., Borchers, U., Nödler, K., Scheurer, M., Hale, S.E., Arp, H.P.H., Zahn, D. (2022): Occurrence, distribution, and environmental behavior of persistent, mobile, and toxic (PMT) and very persistent and very mobile (vPvM) substances in the sources of German drinking water. Environmental Science and Technology 56, 10857–10867. <https://doi.org/10.1021/acs.est.2c03659>
- Nödler, K., Scheurer, M., Happel, O., Sacher, F., Brauch, H.-J. (2019): Ableitung der Trinkwasserrelevanz organischer Stoffe. DVGW energie | wasser-praxis 06–07, 80–84
- OECD (2004): Test No. 309: Aerobic Mineralisation in Surface Water – Simulation Biodegradation Test. In: OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Section 3. <https://doi.org/10.1787/9789264070547-en>
- Persson, L., Carney Almroth, B.M., Collins, C.D., Cornell, S., de Wit, C.A., Diamond, M.L., Fantke, P., Hassellöv, M., MacLeod, M., Ryberg, M.W., Søgaard Jørgensen, P., Villarrubia-Gómez, P., Wang, Z., Zwicky Hauschild M. (2022): Outside the safe operating space of the planetary boundary for novel entities. Environmental Science and Technology 56, 1510–1521. <https://doi.org/10.1021/acs.est.1c04158>

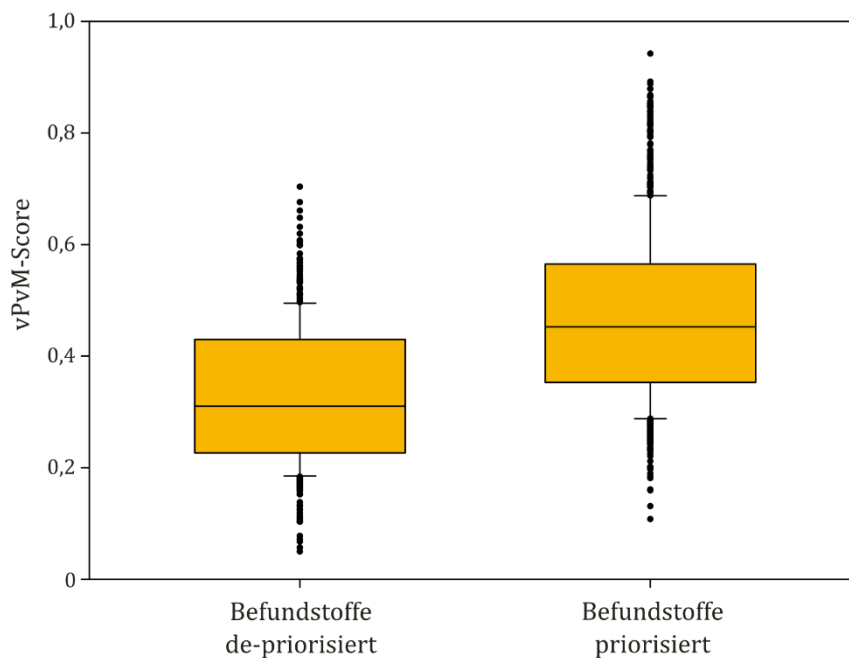
- Reemtsma, T., Berger, U., Arp, H.P.H., Gallard, H., Knepper, T.P., Neumann, M., Quintana, J.B., de Voogt, P. (2016): Mind the gap: Persistent and mobile organic compounds – Water contaminants that slip through. *Environmental Science and Technology* 50, 10308–10315. <https://doi.org/10.1021/acs.est.6b03338>
- Schäffer, A., Fenner, K., Wang, Z., Scheringer, M. (2022): To be or not to be degraded: in defense of persistence assessment of chemicals. *Environmental Science: Processes and Impacts* 24, 1104–1109. <https://doi.org/10.1039/D2EM00213B>
- Schaffer, M., Licha, T. (2015): A framework for assessing the retardation of organic molecules in groundwater: Implications of the species distribution for the sorption-influenced transport. *Science of the Total Environment* 524–252, 187–194. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.04.006>
- Scheringer, M. (2023): Innovate beyond PFAS. *Science* 381, 251. <https://doi.org/10.1126/science.adj7475>
- Scheurer, M., Nödler, K., Freeling, F., Janda, J., Happel, O., Riegel, M., Müller, U., Storck, F.R., Fleig, M., Lange, F.T., Brunsch, A., Brauch, H.-J. (2017): Small, mobile, persistent: Trifluoroacetate in the water cycle – Overlooked sources, pathways, and consequences for drinking water supply. *Water Research* 126, 460–471. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2017.09.045>
- Schwarzenbach, R.P., Escher, B.I., Fenner, K., Hofstetter, T.B., Johnson, C.A., von Gunten, U., Wehrli, B. (2006): The challenge of micropollutants in aquatic systems. *Science* 313, 1072–1077. <https://doi.org/10.1126/science.1127291>
- Seller, C., Honti, M., Singer, H., Fenner, K. (2020): Biotransformation of chemicals in water–sediment suspensions: Influencing factors and implications for persistence assessment. *Environmental Science and Technology Letters* 7, 854–860. <https://doi.org/10.1021/acs.estlett.0c00725>
- Shrestha, P., Junker, T., Fenner, K., Hahn, S., Honti, M., Bakkour, R., Diaz, C., Hennecke, D. (2016): Simulation studies to explore biodegradation in water–sediment systems: From OECD 308 to OECD 309. *Environmental Science and Technology* 50, 6856–6864. <https://doi.org/10.1021/acs.est.6b01095>
- Steinhäuser, K.G., Richter, S. (2006): Assessment and management of chemicals – How should persistent polar pollutants be regulated? In: Reemtsma, T., Jekel, M. (eds) *Organic pollutants in the water cycle: Properties, occurrence, analysis and environmental relevance of polar compounds*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim. <https://doi.org/10.1002/352760877X.ch12>
- Tian, R., Posselt, M., Fenner, K., McLachlan, M. (2022): Increasing the environmental relevance of biodegradation testing by focusing on initial biodegradation kinetics and employing low-level spiking. *Environmental Science and Technology Letters* 10, 40–45. <https://doi.org/10.1021/acs.estlett.2c00811>
- Tian, R., Posselt, M., Fenner, K., McLachlan, M. (2024): Variability of biodegradation rates of commercial chemicals in rivers in different regions of Europe. *Environmental Science and Technology* (in press), <https://doi.org/10.1021/acs.est.4c07410>
- UN (2019): *Global Chemicals Outlook II - From legacies to innovative solutions: Implementing the 2030 agenda for sustainable development*. United Nations Environment Programme, ISBN No: 978-92-807-3745-5. <https://www.unep.org/resources>
- Warner, W., Licha, T., Nödler, K. (2019): Qualitative and quantitative use of micropollutants as source and process indicators. A review. *Science of the Total Environment* 686, 75–89. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.05.385>

A Anhang

A.1 Statistischer Vergleich der Ergebnisse mit dem vPvM-Score der Befundstoffe

Die Verteilungen der vPvM-Scores der de-priorisierten und priorisierten Befundstoffe ist in Abbildung 2 dargestellt. Die Min-, Max- und Median-Werte der beiden Gruppen sind in Tabelle 4 aufgelistet.

Abbildung 2: Verteilung der vPvM-Scores de-priorisierter und priorisierter Befundstoffe



Quelle: eigene Darstellung, TZW: DVGW-Technologiezentrum Wasser

Tabelle 4: Min-, Max- und Median-Werte der vPvM-Scores der de-priorisierten und priorisierten Befundstoffe

	De-priorisierte Befundstoffe	Priorisierte Befundstoffe
Min	0,049	0,108
Max	0,703	0,942
Median	0,310	0,453

Für Befundstoffe, die de-priorisiert wurden, werden im Mittel niedrigere vPvM-Scores berechnet als für Befundstoffe, für die in einem Abbautest nach OECD TG 309 keine ausgeprägte und signifikante Konzentrationsabnahme in der Wasserphase erwartet wird. Es wurde ein Mann-Whitney Rank Sum Test (Software SigmaPlot 12.5) der beiden Gruppen (de-priorisierte und nicht de-priorisierte Befundstoffe) durchgeführt. Der Unterschied in den Medianwerten zwischen den beiden Gruppen ist statistisch signifikant ($p < 0,001$).

A.2 Stoffliste mit den für einen „kalten“ Abbautest nach OECD TG 309 de-priorisierten Befundstoffen

Die de-priorisierten Befundstoffe sind in Tabelle 5 aufgelistet. Die Beschreibungen der Spalten entsprechen denen in Kapitel 6. Zusätzlich sind die Kriterien, die zur De-Priorisierung des jeweiligen Stoffes geführt haben, **fuchsiifarben** markiert. Befundstoffe, die in Schritt 3 de-priorisiert wurden (s. Kapitel 5.2), sind **ockerfarben** hervorgehoben.

Tabelle 5: De-priorisierte Befundstoffe

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
70288-86-7	274-536-0	Ivermectine	0,70		5,3	0	n.a.	-0,43	28			0,97
71486-22-1	-	Vinorelbine	0,68		3,9	0	n.a.	0,01				1,00
117704-25-3	601-490-4	Doramectin	0,66	3,9	5,1	0	n.a.	-0,43	26			0,98
19794-93-5	243-317-1	Trazodone	0,65	3,0	2,3	0	no conclusion/data	0,03				0,90
361377-29-9	606-301-9	Fluoxastrobin	0,63		3,8	0	n.a.	0,10	36			0,94
57-27-2	200-320-2	Morphine	0,62	3,0	-0,2	0	n.a.	0,43				0,60
69-23-8	200-702-9	Fluphenazine	0,61	3,2	3,9	0	n.a.	0,00				0,98
58-39-9	200-381-5	Perphenazine	0,61	3,2	3,4	0	n.a.	0,08				0,94
2709-56-0	220-304-9	Flupentixol	0,60		3,9	0	n.a.	0,06				0,96
188425-85-6	606-143-0	Boscalid (Nicobifen)	0,60		3,9	0	n.a.	0,19				0,86
35367-38-5	252-529-3	Diflubenzuron	0,58	3,1	3,9	0	n.a.	-0,06	6,9			0,94
93413-69-5	618-944-2	1-[2-(dimethylamino)-1-(4-methoxyphenyl)ethyl]cyclohexanol	0,58	3,1	1,5	0	Potential P/vP++	0,31				0,74
53772-83-1	258-758-5	Zuclopenthixol	0,57		3,7	0	n.a.	0,14				0,86
133855-98-8	406-850-2	(2RS,3RS)-3-(2-chlorophenyl)-2-(4-fluorophenyl)-[(1H-1,2,4-triazol-1-yl)methyl]oxirane	0,57		3,6	0	Pot. P/vP	-0,01	280			0,90
56-23-5	200-262-8	Carbon tetrachloride	0,57	1,9	2,8	1443	Potential P/vP++	0,23		71		0,76
125116-23-6	603-031-3	Metconazole	0,57		3,9	0	n.a.	0,17	127			0,85

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
112281-77-3	407-760-6	(+/-) 2-(2,4-dichlorophenyl)-3-(1H-1,2,4-triazole-1-yl)propyl-1,1,2,2-tetrafluoroethylether	0,56		3,7	0	Pot. P/vP	0,07	2092			0,89
3562-63-8	222-628-6	Megestrol acetate	0,56		3,6	0	n.a.	0,22				0,86
79-34-5	201-197-8	Tetrachlorethan, 1,1,2,2-	0,56		2,6	38	n.a.	0,24		71		0,64
76-13-1	200-936-1	Trichlorotrifluoroethane	0,56	2,1	3,1	21243	n.a.	0,21				0,82
84-97-9	201-578-9	Pernazine	0,55		3,9	0	Pot. P/vP	0,09				0,89
60207-90-1	262-104-4	Propiconazole	0,55	3,2	3,6	0	n.a.	0,05	147			0,84
55-56-1	200-238-7	Chlorhexidine	0,54	3,9	-1,9	0	vP	-0,04				0,95
374726-62-2	609-434-0	Mandipropamid	0,54		3,6	0	n.a.	0,36	32			0,83
71-55-6	200-756-3	1,1,1-trichloroethane	0,54		2,5	638	Potential P/vP++	0,28			25	0,61
1918-00-9	217-635-6	Dicamba	0,54		-1,6	0	n.a.	0,57	6,8	23		0,48
75-69-4	200-892-3	Trichlorofluoromethane	0,54		2,4	10586	n.a.	0,27		708		0,62
280-57-9	205-999-9	1,4-diazabicyclooctane	0,53	3,4	-1,7	0	Potential P/vP++	0,34				0,39
55297-95-5	259-580-0	Tiamulin	0,53		3,6	0	n.a.	0,23				0,94
52485-79-7	257-950-6	Buprenorphine	0,53		4,3	0	n.a.	0,00				0,99
470-90-6	207-432-0	Chlorfenvinphos	0,52		3,8	0	n.a.	0,40				0,75
112410-23-8	412-850-3	N-tert-butyl-N'-(4-ethylbenzoyl)-3,5-dimethylbenzohydrazide	0,52		4,0	0	Pot. P/vP	0,19	72			0,74
57-63-6	200-342-2	Ethinylestradiol	0,52		3,7	0	n.a.	0,28				0,72

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
52169-36-5	610-790-4	5-chloro-N-[2-[4-(cyclohexylcarbonylsulfamoyl)phenyl]ethyl]-2-methoxybenzamide; potassium	0,52	3,4	2,6	0	Pot. P/vP	0,30				0,88
126833-17-8	422-530-5	Fenhexamid	0,51		4,2	0	n.a.	0,28	0,83			0,79
125225-28-7	603-038-1	Ipconazole	0,51		4,1	0	n.a.	0,19	153			0,75
3734-33-6	223-095-2	Denatonium benzoate	0,51	3,4	1,7	0	Pot. P/vP	0,55				0,51
65277-42-1	265-667-4	Ketoconazole	0,51		3,9	0	n.a.	-0,03				0,99
154598-52-4	620-492-6	Efavirenz	0,50		4,3	0	n.a.	0,10				0,93
72-33-3	200-777-8	Mestranol	0,50		4,2	0	n.a.	0,32				0,80
54-11-5	200-193-3	Nicotine	0,50	3,6	0,4	0	n.a.	0,30				0,44
83164-33-4	617-446-2	Diflufenican	0,49	3,8	4,5	0	n.a.	-0,10	71			1,00
79-00-5	201-166-9	1,1,2-trichloroethane	0,49	1,7	2,0	78	Potential P/vP++	0,31			25	0,43
83366-66-9	-	Nefazodone	0,49	3,7	4,1	0	n.a.	0,13				0,95
114369-43-6	406-140-2	4-(4-chlorophenyl)-2-phenyl-2-[(1H-1,2,4-triazol-1-yl)methyl]butanenitrile	0,49		3,5	0	Pot. P/vP	0,42	154			0,79
5630-53-5	227-069-1	Tibolone	0,49		3,6	0	n.a.	0,26				0,69
54910-89-3	611-209-7	Fluoxetine	0,49	3,2	0,4	0	n.a.	0,32				0,74
530-78-9	208-494-1	Flufenamic acid	0,49	4,0	1,6	0	Pot. P/vP	0,21				0,72
594-04-7	-	Dichloriodomethane	0,48		1,7	648	n.a.	0,27				0,43
427-51-0	207-048-3	Cyproterone	0,48		3,8	0	n.a.	0,23				0,92

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
113665-84-2	601-269-2	Clopidogrel	0,48		3,7	0	n.a.	0,28				0,67
60-57-1	200-484-5	Dieldrin	0,48		5,0	0	n.a.	-0,09		708		1,00
72-20-8	200-775-7	Endrin	0,48		5,0	0	n.a.	-0,09		708		1,00
58-89-9	200-401-2	Lindane	0,48		3,8	7	n.a.	0,12				0,93
96-18-4	202-486-1	1,2,3-trichloropropane	0,48	1,9	2,2	17	Potential P/vP++	0,31		71		0,46
144-11-6	205-614-4	Trihexyphenidyl	0,48	3,8	2,4	0	Pot. P/vP	0,26				0,67
75-71-8	200-893-9	Dichlorodifluoromethane	0,48	1,2	2,1	36248	Potential P/vP++	0,32				0,44
1563-66-2	216-353-0	Carbofuran	0,48		1,9	0	n.a.	0,54	19	7		0,49
15165-67-0	403-980-1	R-(+)-2-(2,4-dichlorophen- oxy)propionic acid	0,48		-1,7	0	no conclusion/data	0,40	10		6	0,29
79983-71-4	413-050-7	(RS)-2-(2,4-dichlorophenyl)-1- (1H-1,2,4-triazol-1-yl)hexan-2-ol	0,48		3,7	0	Pot. P/vP	0,22				0,60
1861-32-1	217-464-7	DCPA mono/di-acid degradate	0,47	3,3	4,3	0	n.a.	0,31	25		6	0,78
67-66-3	200-663-8	Chloroform	0,47	2,0	2,0	569	Potential P/vP++	0,31		71		0,41
7082-99-7	806-361-8	Chlorbenseide sulfone	0,47		3,7	0	n.a.	0,19				0,65
24219-97-4	246-088-6	Mianserin	0,47	3,2	3,4	0	n.a.	0,18				0,71
116-29-0	204-134-2	Tetradifon	0,47		4,8	0	n.a.	0,07				0,92
19666-30-9	243-215-7	Oxadiazon	0,47		4,2	0	n.a.	0,17	278			0,86
101-77-9	202-974-4	4,4'-methylenedianiline	0,47	3,8	1,6	0	Pot. P/vP	0,21		9		0,41
95-76-1	202-448-4	3,4-dichloroaniline	0,47	2,3	2,7	0	Potential P/vP++	0,22	4,4		13	0,51
141517-21-7	604-237-6	Trifloxystrobin	0,47		4,6	0	n.a.	0,19	0,33			0,78

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
71-58-9	200-757-9	Medroxyprogesterone acetate	0,47		3,8	0	n.a.	0,30				0,84
709-98-8	211-914-6	Propanil	0,47		3,2	0	n.a.	0,36	1,6		22	0,55
303-49-1	206-144-2	Clomipramine	0,47	4,1	4,0	0	Pot. P/vP	0,11				0,90
24579-73-5	607-406-2	Propamocarb	0,47		-1,2	0	n.a.	0,42	22		2	0,36
127-18-4	204-825-9	Tetrachloroethylene	0,46	2,1	3,4	448	vP	0,25		23		0,63
72509-76-3	620-472-7	Felodipine	0,46	3,5	4,4	0	n.a.	0,54				0,61
18181-80-1	242-070-7	Bromopropylate	0,46		5,2	0	n.a.	0,26				0,79
155213-67-5	-	Ritonavir	0,46		3,8	0	n.a.	0,27				0,94
82560-54-1	-	Benfuracarb	0,46		4,1	0	n.a.	0,49	0,8			0,67
82-68-8	201-435-0	Pentachloronitrobenzene	0,46		4,7	0	n.a.	-0,03				0,96
2058-94-8	218-165-4	PFUnDA	0,46	3,3	-0,5	1	n.a.	-0,18				1,00
79-01-6	201-167-4	Trichloroethylene	0,46	2,1	2,6	304	P	0,31		23		0,43
130-95-0	205-003-2	Quinine	0,45	3,6	1,9	0	n.a.	0,40				0,48
42874-03-3	255-983-0	Oxyfluorfen	0,45		4,6	0	n.a.	0,12	138			0,95
71-43-2	200-753-7	Benzene	0,45	1,5	2,1	329	Not P	0,74		7		0,39
521-18-6	208-307-3	Androstanolone	0,45		3,6	0	Pot. P/vP	0,36				0,53
120068-37-3	424-610-5	fipronil (ISO); (±)-5-amino-1-(2,6-dichloro- α,α,α -trifluoro-para-tolyl)-4-trifluoromethylsulfinyl-pyrazole-3-carbonitrile	0,45		3,6	0	Pot. P/vP	-0,13	119			1,00
50-48-6	200-041-6	Amitriptyline	0,44	4,0	0,0	0	Potential P/vP++	0,59				0,44
53-41-8	200-173-4	Androsterone	0,44		3,7	0	n.a.	0,36				0,53

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
481-29-8	207-563-3	Epiandrosterone	0,44		3,7	0	n.a.	0,36				0,53
81-15-2	201-329-4	Musk xylene	0,44		4,6	0	n.a.	-0,01				0,89
205650-65-3	803-116-7	Fipronil desulfinyl	0,44		3,5	0	n.a.	-0,10				1,00
67564-91-4	266-719-9	Fenpropimorph	0,44		4,6	0	n.a.	0,12	24			0,75
119168-77-3	601-585-0	Tebufenpyrad	0,44		4,6	0	n.a.	0,24	44			0,79
50-53-3	200-045-8	Chlorpromazine	0,44	4,3	4,0	0	Pot. P/vP	0,12				0,85
55134-13-9	611-230-1	Narasin	0,44		3,6	0	n.a.	-0,23				0,97
57-83-0	200-350-6	Progesterone	0,44	3,0	3,7	0	Pot. P/vP	0,28				0,71
2315-61-9	621-341-7	octylphenol diethoxylate	0,43		4,6	0	n.a.	0,39				0,57
2955-38-6	220-975-8	Prazepam	0,43	3,2	3,6	0	n.a.	0,44				0,55
79794-75-5	935-907-9	Loratadine	0,43		5,2	0	P	0,16				0,87
74070-46-5	277-704-1	Aclonifen	0,43		3,9	0	n.a.	0,18	47		7	0,69
70630-17-0	615-135-6	Mefenoxam	0,43		1,7	0	n.a.	0,62	16		7	0,34
57837-19-1	260-979-7	Metalaxyl	0,43		1,7	0	n.a.	0,62	16		7	0,34
101-20-2	202-924-1	Triclocarban	0,43	3,7	4,7	0	vP	0,14			22	0,80
60-87-7	200-489-2	Promethazine	0,43	3,8	3,5	0	Pot. P/vP	0,16				0,69
106700-29-2	600-765-6	Pethoxamid	0,43		3,5	0	n.a.	0,33	9,5			0,48
67906-42-7	206-401-9	PFDS	0,43	3,5	-2,8	0	n.a.	-0,25				1,00
2921-88-2	220-864-4	Chlorpyrifos	0,43		4,9	0	n.a.	0,35		7		0,87

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
58594-72-2	261-351-5	1-[2-(allyloxy)ethyl-2-(2,4-dichlorophenyl)-1H-imidazolium hydrogen sulphate	0,43		3,5	0	vP	0,16	36			0,65
64249-01-0	264-756-5	Anilofos	0,43		3,9	0	n.a.	0,51				0,52
77-10-1	621-588-0	PCP / Phencyclidine	0,43	3,7	2,4	0	n.a.	0,30				0,57
569-65-3	209-323-3	Meclozine	0,42		5,1	0	n.a.	0,08				0,92
175013-18-0	605-747-1	Pyraclostrobin	0,42		4,0	0	n.a.	0,24				0,68
75-27-4	200-856-7	Bromodichloromethane	0,42		2,1	238	n.a.	0,31		23		0,33
120-82-1	204-428-0	1,2,4-trichlorobenzene	0,42	3,3	4,0	82	Potential P/vP++	0,24		71		0,60
87-86-5	201-778-6	Pentachlorophenol	0,42	4,2	3,6	0	n.a.	0,12		23		0,90
81-14-1	201-328-9	4'-tert-butyl-2',6'-dimethyl-3',5'-dinitroacetophenone	0,41		4,1	0	Pot. P/vP	0,10				0,83
299-84-3	206-082-6	Fenchlorphos	0,41	4,1	5,0	0	n.a.	0,40			33	0,72
120014-06-4	-	Donepezil	0,41	3,5	2,5	0	n.a.	0,47				0,79
91-20-3	202-049-5	Naphthalene	0,41	2,6	3,3	31	Pot. P/vP	0,66		7		0,48
754-91-6	212-046-0	FOSA	0,41		3,7	0	n.a.	-0,15				1,00
307-55-1	206-203-2	PFDODA	0,41	3,6	0,6	2	n.a.	-0,24				1,00
38083-17-9	253-775-4	Climbazole	0,41	3,8	3,0	0	Potential P/vP++	0,29				0,70
118-74-1	204-273-9	Hexachlorobenzene	0,41	4,5	5,6	0	n.a.	0,03		2292		0,96
1665-48-1	216-777-6	Metaxalone	0,41		2,3	0	n.a.	0,65			6	0,38
140-31-8	205-411-0	2-piperazin-1-ylethylamine	0,41	4,6	-4,3	0	P	0,60				0,21
108-70-3	203-608-6	1,3,5-trichlorobenzene	0,41	3,3	4,1	155	Pot. P/vP	0,24		71		0,60

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
113-59-7	204-032-8	Chlorprothixene	0,41		4,2	0	n.a.	0,18				0,71
120067-83-6	930-638-3	Fipronil-sulfide	0,40		3,6	0	Pot. P/vP	-0,12				1,00
1918-11-2	-	Terbucarb	0,40		4,0	0	n.a.	0,26				0,71
96-83-3	202-539-9	Iopanoic acid	0,40	4,1	2,3	0	n.a.	-0,52				0,76
66063-05-6	266-096-3	Pencycron	0,40		4,4	0	n.a.	0,27	63			0,51
87130-20-9	617-968-0	Diethofencarb	0,40		2,9	0	n.a.	0,64	8,0			0,38
107-06-2	203-458-1	1,2-dichloroethane	0,39		1,6	105	P	0,44		71		0,25
79617-96-2	616-708-3	Sertraline	0,39	4,3	3,4	0	n.a.	0,24				0,69
55179-31-2	259-513-5	Bitertanol I	0,39		4,0	0	n.a.	0,50	11			0,45
75-09-2	200-838-9	dichloromethane; methylene chloride	0,39		1,3	323	vP	0,45		71		0,23
31329-57-4	250-572-2	Naftidrofuryl	0,39		3,9	0	Pot. P/vP	0,24				0,62
78-87-5	201-152-2	1,2-dichloropropane	0,38	1,7	2,0	361	Potential P/vP++	0,39		71		0,27
94-82-6	202-366-9	DB, 2,4- (4-(2,4-dichlorophenoxy)butyric acid)	0,38	2,6	0,1	0	n.a.	0,44	5,2		7	0,31
15574-96-6	239-632-9	Pizotifen	0,38		3,6	0	n.a.	0,23				0,63
2008-39-1	217-915-8	Dimethylammonium 2,4-dichlorophenoxyacetate	0,38		-1,5	0	no conclusion/data	0,46	9,2	2		0,27
99-09-2	202-729-1	3-nitroaniline	0,38	1,2	1,4	0	no conclusion/data	0,23	1,5		7	0,28
113-53-1	204-031-2	Dosulepin	0,38		3,7	0	n.a.	0,23				0,51
542-75-6	208-826-5	1,3-dichloropropene	0,38	1,6	2,1	102	Pot. P/vP	0,40	16		28	0,27
10061-01-5	233-195-8	(Z)-1,3-dichloropropene	0,38		2,1	102	Pot. P/vP	0,40	16		28	0,27

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
75-34-3	200-756-3	1,1-Dichloroethane	0,38	1,2	1,8	358	no conclusion/data	0,39			25	0,25
2315-67-5	264-520-1	4-tert-Octylphenol monoethoxylate	0,38		4,9	0	n.a.	0,54				0,48
49562-28-9	256-376-3	Fenofibrate	0,38		5,2	0	Pot. P/vP	0,43				0,71
1563-38-8	216-350-4	Carbofuran-7-phenol	0,37		2,2	0	n.a.	0,67	0,2			0,31
40487-42-1	254-938-2	Pendimethalin	0,37	3,8	4,8	0	n.a.	0,06	212		4	0,76
114-26-1	204-043-8	Propoxur	0,37	1,3	1,2	0	n.a.	0,59	13	23		0,25
36315-01-2	252-969-6	4,6-dimethoxypyrimidin-2-amine	0,37		0,4	0	no conclusion/data	0,64	22			0,27
68359-37-5	269-855-7	Cyfluthrin I	0,37		6,0	0	n.a.	0,19	22			0,97
72629-94-8	276-745-2	PFTriDA	0,37	4,1	1,8	3	n.a.	-0,31				1,00
156-59-2	205-859-7	cis-1,2-Dichloroethene	0,37	1,3	1,9	565	no conclusion/data	0,41			25	0,25
156-60-5	205-860-2	trans-dichloroethylene	0,37	1,4	1,9	565	Potential P/vP++	0,41			25	0,25
10262-69-8	233-599-4	Maprotiline	0,37	3,8	2,3	0	n.a.	0,39				0,48
124-48-1	204-704-0	Dibromochloromethane	0,37	1,7	2,2	87	n.a.	0,32				0,26
129-00-0	204-927-3	Pyrene	0,37		4,9	0	vP	0,21		71		0,76
50-28-2	200-023-8	Estradiol	0,36		3,6	0	Not P	0,50				0,38
57-91-0	200-354-8	17-alpha-Estradiol	0,36		3,6	0	n.a.	0,50				0,38
75-35-4	200-864-0	1,1-dichloroethylene	0,36	1,4	2,2	1973	Potential P/vP++	0,41			25	0,25
32598-11-1	630-497-5	PCB #70	0,36	5,2	6,1	0	n.a.	0,12			2292	0,87
95-68-1	202-440-0	2,4-xylidine	0,36	1,0	1,8	0	Pot. P/vP	0,49	0,3		6	0,24
95-50-1	202-425-9	1,2-dichlorobenzene	0,35		3,3	107	vP	0,33		71		0,37

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
61-68-7	200-513-1	Mefenamic acid	0,35	4,0	2,6	0	n.a.	0,52				0,37
60348-60-9	251-084-2	PBDE 99	0,35		7,0	0	n.a.	0,15				0,97
106-46-7	203-400-5	1,4-dichlorobenzene	0,35	2,4	3,4	105	Not P	0,33		71		0,37
120-12-7	204-371-1	Anthracene	0,35	4,5	4,6	0	P	0,59		23		0,57
1222-05-5	214-946-9	1,3,4,6,7,8-hexahydro-4,6,6,7,8,8-hexamethylin-deno[5,6-c]pyran	0,35	3,8	5,9	0	vP	0,18				0,65
32388-55-9	251-020-3	[3R-(3 α ,3 α β ,7 β ,8 α)]-1-(2,3,4,7,8,8a-hexahydro-3,6,8,8-tetramethyl-1H-3a,7-methanoazulen-5-yl)ethan-1-one	0,35	3,5	5,3	0	Pot. P/vP	0,30				0,58
5436-43-1	-	PBDE 47	0,35	6,6	6,6	0	n.a.	0,21				0,93
189084-62-6	620-888-9	PBDE 71	0,35		6,4	0	n.a.	0,21				0,93
122-14-5	204-524-2	Fenitrothion	0,35	2,9	3,3	0	no conclusion/data	0,47	3,1		21	0,35
143390-89-0	417-880-0	Kresoxim-methyl	0,35	2,5	3,3	0	n.a.	0,62	1,5			0,33
6452-71-7	229-257-9	Oxprenolol	0,35	0,99	0,0	0	n.a.	0,76			7	0,22
77-93-0	201-070-7	Triethyl citrate	0,34	0,13	0,5	0	Not P	0,92				0,16
58-08-2	200-362-1	Caffeine	0,34	-0,64	-0,3	0	Not P	0,45				0,17
37680-73-2	621-393-0	PCB101	0,34	5,7	6,1	0	n.a.	0,05			2292	0,95
22832-87-7	245-256-6	Miconazole nitrate	0,34	4,5	6,1	0	Pot. P/vP	-0,03				0,95
206-44-0	205-912-4	Fluoranthene	0,34	4,3	5,1	0	n.a.	0,21		71		0,76
83-67-0	201-494-2	Theobromine	0,34	-1,2	-0,4	0	Not P	0,47				0,16

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
87820-88-0	618-075-9	Tralkoxydim 1	0,34		3,8	0	n.a.	0,43				0,64
79902-63-9	616-751-8	Simvastatin	0,34		4,2	0	n.a.	0,65				0,34
64359-81-5	264-843-8	DCOIT	0,34		4,3	1	n.a.	0,33				0,32
1506-02-1	216-133-4	HHCB	0,34	3,1	5,6	0	Potential P/vP++	0,29				0,66
54464-57-2	259-174-3	OTNE	0,34		5,0	0	Potential P/vP++	0,32				0,56
128-37-0	204-881-4	2,6-di-tert-butyl-p-cresol	0,33		5,0	11	Pot. P/vP	0,35				0,53
74-97-5	200-826-3	Bromochloromethane	0,33	1,1	1,5	189	Pot. P/vP	0,40		23		0,18
113-45-1	204-028-6	methylphenidate	0,33	1,1	-1,2	0	n.a.	0,73			7	0,16
611-59-6	210-271-9	Paraxanthine	0,33	-1,0	-0,5	0	no conclusion/data	0,47				0,16
74-11-3	200-805-9	4-Chlorobenzoate	0,33		-0,7	0	no conclusion/data	0,67	3,8			0,19
58-55-9	200-385-7	Theophylline	0,33		0,0	0	Not P	0,47				0,16
120-32-1	204-385-8	Clorofene	0,33		3,9	0	Pot. P/vP	0,48				0,33
298-00-0	206-050-1	Parathion-methyl	0,33	2,0	2,8	0	n.a.	0,47	1,2	23		0,27
88-04-0	201-793-8	4-chloro-3,5-xylenol	0,33	2,1	3,3	0	Not P	0,55			3	0,30
10540-29-1	234-118-0	Tamoxifen	0,32	5,4	5,0	0	Pot. P/vP	0,43				0,66
31508-00-6	621-375-2	PCB118	0,32	5,9	6,7	0	n.a.	0,05			2292	0,95
60-51-5	200-480-3	Dimethoate	0,32	0,24	1,0	0	n.a.	0,68	4,1			0,16
95-53-4	202-429-0	<i>o</i> -toluidine	0,32	1,9	1,4	0	Not P	0,48			6	0,18
1634-04-4	216-653-1	tert-butyl methyl ether	0,32		1,2	200	Potential P/vP++	0,43				0,17
485-72-3	207-623-9	7-hydroxy-3-(4-methoxyphenyl)-4-benzopyrone	0,32		2,7	0	Not P	0,70				0,32

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
121552-61-2	601-785-8	Cyprodinil	0,32	3,0	3,8	0	n.a.	0,42	31			0,39
10287-53-3	233-634-3	Ethyl 4-dimethylaminobenzoate	0,32	2,7	3,0	0	no conclusion/data	0,60			6	0,24
25812-30-0	247-280-2	Gemfibrozil	0,31	3,0	1,6	0	no conclusion/data	0,69				0,28
63-25-2	200-555-0	Carbaryl	0,31	1,8	2,3	0	n.a.	0,51	16	7		0,21
75-45-6	200-871-9	Chlorodifluoromethane	0,31	0,64	1,0	21472	Potential P/vP++	0,47				0,15
72-69-5	200-788-8	Nortriptyline	0,31	3,4	1,5	0	n.a.	0,49				0,35
35065-28-2	621-377-3	PCB138	0,31	6,1	7,1	0	n.a.	-0,02			2292	0,98
101205-02-1	405-230-9	Cycloxydim	0,31		4,0	0	n.a.	0,36				0,39
91465-08-6	415-130-7	Cyhalothrin	0,31		6,6	0	n.a.	0,34	39			0,96
75-25-2	200-854-6	Bromoform	0,31		2,5	34	no conclusion/data	0,33		71		0,20
94-81-5	202-365-3	MCPB	0,31		-0,1	0	n.a.	0,66			7	0,20
637-92-3	211-309-7	2-ethoxy-2-methylpropane	0,31	0,57	1,6	234	Pot. P/vP	0,43				0,18
994-05-8	213-611-4	2-methoxy-2-methylbutane	0,31	0,72	1,7	117	Pot. P/vP	0,43				0,18
189084-64-8	-	PBDE 100	0,31		7,0	0	n.a.	0,15				0,97
39300-45-3	-	Dinocap I	0,31		4,5	0	n.a.	0,18			230	0,65
1929-86-8	217-683-8	Mecoprop	0,30		-0,3	0	no conclusion/data	0,60		7		0,18
16484-77-8	240-539-0	Mecoprop-P	0,30		-0,3	0	n.a.	0,60		7		0,18
28291-75-0	844-374-0	N-cyclohexyl-2-benzothiazole-a-mine	0,30		3,8	0	n.a.	0,29				0,31
89-57-6	201-919-1	5-aminosalicylic acid	0,30		-2,3	0	no conclusion/data	0,67			4	0,13
96-76-4	202-532-0	2,4-di-tert-butylphenol	0,30	3,7	4,9	0	P	0,35				0,44

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
25013-16-5	246-563-8	tert-butyl-4-methoxyphenol	0,30	3,1	3,3	0	Not P	0,64				0,28
52315-07-8	276-458-2	Cypermethrin	0,30		6,3	0	n.a.	0,52	25			0,87
51-03-6	200-076-7	2-(2-butoxyethoxy)ethyl 6-propylpiperonyl ether	0,30		4,3	0	P	0,31				0,32
140-66-9	205-426-2	4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol	0,30	4,0	4,5	0	P	0,37		60		0,44
1330-78-5	809-930-9	Tris(methylphenyl) phosphate	0,30	4,3	4,9	0	Not P	0,54				0,49
37594-64-2	807-571-2	Clotrimazole	0,30		5,1	0	Pot. P/vP	0,25				0,69
72-54-8	200-783-0	p,p'-DDD	0,29		6,1	0	n.a.	0,12			800	0,90
1119449-37-4	687-832-3	nonylphenol monoethoxylate	0,29		5,2	0	n.a.	0,63				0,34
60-27-5	200-466-7	2-imino-1-methylimidazolidin-4-one	0,29		-1,3	0	Not P	0,60				0,10
85-41-6	201-603-3	Phthalimide	0,29	0,86	1,2	0	Not P	0,54	3,0			0,13
94-74-6	202-360-6	MCPA	0,29		-0,9	0	n.a.	0,67			7	0,17
119515-38-7	423-210-8	Icaridine	0,29		1,4	0	Pot. P/vP	0,63			10	0,16
82657-04-3	617-373-6	Bifenthrin	0,29		6,4	0	n.a.	0,16	61			0,94
103-33-3	203-102-5	Azobenzene	0,29		4,0	1	n.a.	0,35				0,31
531-95-3	208-522-2	Equol	0,29		3,1	0	n.a.	0,65			7	0,29
103-90-2	203-157-5	Paracetamol (Acetaminophen)	0,29	1,3	0,4	0	Pot. P/vP	0,72			2	0,13
216667-08-2	-	Amidosulfobetaine-14	0,29		5,4	0	n.a.	0,57				0,20
74-87-3	200-817-4	chloromethane; methyl chloride	0,28	0,75	1,2	6324	Not P	0,62				0,12
17109-49-8	241-178-1	Edifenphos	0,28		3,8	0	n.a.	0,60				0,20

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
176969-34-9	700-093-4	3-(difluoromethyl)-1-methyl-1H-pyrazole-4-carboxylic acid	0,28		-2,7	0	Pot. P/vP	0,61	7,8			0,12
59777-72-9	611-882-7	Ethyl 2-sulfamoylbenzoate	0,28		1,0	0	n.a.	0,65	3,4			0,15
75-00-3	200-830-5	Chloroethane	0,28	0,83	1,5	2843	Potential P/vP++	0,61		71		0,13
106-93-4	203-444-5	1,2-dibromoethane	0,28	0,13	2,1	52	Potential P/vP++	0,39				0,14
105-59-9	203-312-7	2,2'-methyliminodiethanol	0,28	-1,6	-2,3	0	Potential P/vP++	0,77				0,09
69770-45-2	274-110-4	Flumethrin	0,28		6,7	0	n.a.	0,13				0,98
525-66-6	208-378-0	Propranolol	0,28	2,0	1,0	0	no conclusion/data	0,65			6	0,18
68140-48-7	268-799-0	1-[2,3-dihydro-1,1,2,6-tetramethyl-3-(1-methylethyl)-1H-inden-5-yl]ethan-1-one	0,28		5,4	0	Pot. P/vP	0,33				0,55
759-94-4	212-073-8	EPTC	0,28	3,0	3,2	0	Pot. P/vP	0,60		7		0,19
74-95-3	200-824-2	Dibromomethane	0,28	1,3	1,9	0	Pot. P/vP	0,39				0,13
62-53-3	200-539-3	Aniline	0,28	1,6	1,1	0	Not P	0,56		7		0,13
122-20-3	204-528-4	1,1',1''-nitritotripropan-2-ol	0,28	-0,86	-1,6	0	Potential P/vP++	0,69				0,09
105-60-2	203-313-2	ε-caprolactam	0,28		0,0	0	Not P	0,77				0,12
56392-14-4	641-558-0	Metoprolol acid	0,28		-0,1	0	n.a.	0,72			6	0,08
599-64-4	209-968-0	4-Cumylphenol	0,28	3,4	4,0	0	n.a.	0,52				0,27
207-08-9	205-916-6	Benzo[k]fluoranthene	0,28	5,7	5,7	0	n.a.	0,16		71		0,82
94-09-7	202-303-5	Benzocaine	0,27		1,8	0	no conclusion/data	0,64			3	0,14
75-01-4	200-831-0	Chloroethylene	0,27	0,86	1,5	4674	Potential P/vP++	0,59		23		0,13
3739-38-6	223-121-2	3-Phenoxybenzoate	0,27		0,7	0	no conclusion/data	0,81	12		7	0,17

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
100-02-7	202-811-7	4-nitrophenol	0,27	1,4	1,5	0	Not P	0,40	5,1			0,17
108-90-7	203-628-5	Chlorobenzene	0,27	2,5	2,7	435	Potential P/vP++	0,58		71		0,18
309-00-2	206-215-8	Aldrin	0,27	5,3	6,3	0	n.a.	-0,02		708		0,99
149-30-4	205-736-8	Benzothiazole-2-sulfonate	0,27	3,0	1,0	0	no conclusion/data	0,50				0,15
51263-08-2	257-093-8	Sodium hydrogen [6R-(6 α ,7 β)]-3-(acetoxymethyl)-7-[(5-amino-5-carboxylato-1-oxopentyl)amino]-8-oxo-5-thia-1-azabicyclo[4.2.0]oct-2-ene-2-carboxylate	0,26		-2,3	0	Not P	0,80				0,07
75330-75-5	616-212-7	Lovastatin	0,26		3,7	0	n.a.	0,69				0,19
122-39-4	204-539-4	Diphenylamine	0,26	3,4	3,3	0	Potential P/vP++	0,51		2		0,19
3965-55-7	223-578-8	Sodium dimethyl 5-sulphonato-isophthalate	0,26		-5,5	0	P	0,73				0,09
83-34-1	201-471-7	3-methylindole	0,26	2,6	2,6	0	vP	0,62	0,8		6	0,15
19395-41-6	243-020-7	Ritalinic acid	0,25		0,8	0	n.a.	0,67			4	0,08
107-07-3	203-459-7	2-chloroethanol	0,25		0,1	0	Not P	0,73				0,09
72-55-9	200-784-6	<i>p,p'</i> -DDE	0,25		6,6	0	n.a.	0,13		2292		0,87
95-63-6	202-436-9	1,2,4-trimethylbenzene	0,25	2,6	3,8	345	Not P	0,69		23		0,21
105-67-9	203-321-6	2,4-xylenol	0,25	1,6	2,3	0	Not P	0,72	1,5	2		0,15
115-86-6	204-112-2	Triphenyl phosphate	0,25	3,5	4,4	0	Not P	0,61				0,21
2078-54-8	218-206-6	Propofol	0,25		3,8	6	n.a.	0,59			4	0,20
461-58-5	207-312-8	Cyanoguanidine	0,25	-1,1	-1,7	4	vP	0,65				0,09

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
18507-89-6	242-389-1	Decoquinat	0,25		6,1	0	n.a.	0,73				0,39
112830-95-2	-	HU-210	0,25		6,9	0	n.a.	0,54				0,50
57-88-5	200-353-2	Cholesterol	0,25		5,4	0	Pot. P/vP	0,26				0,68
61566-34-5	262-853-7	ibuprofen methyl ester	0,24		4,3	0	n.a.	0,64			7	0,21
89-83-8	201-944-8	Thymol	0,24	3,1	3,2	0	Not P	0,65			2	0,17
121-75-5	204-497-7	Malathion	0,24	1,8	2,5	0	n.a.	0,82	1,0	2		0,12
360-68-9	206-638-8	5-beta-coprostanol	0,24		6,8	0	n.a.	0,26				0,68
76420-72-9	278-459-3	Enalaprilat	0,24		-2,0	0	n.a.	0,66				0,07
126-71-6	204-798-3	Triisobutyl phosphate	0,24		3,7	0	Not P	0,57				0,18
108-94-1	203-631-1	Cyclohexanone	0,24		0,9	1	Not P	0,71		7		0,10
131-57-7	205-031-5	Oxybenzone	0,24	3,2	3,9	0	vP	0,69				0,22
106-42-3	203-396-5	p-xylene	0,24	2,3	3,2	368	Not P	0,69		23		0,15
50-78-2	200-064-1	O-acetylsalicylic acid	0,24	0,74	-2,0	0	Not P	0,88			6	0,08
95-47-6	202-422-2	o-xylene	0,24	2,4	3,2	272	Not P	0,69		23		0,15
50-29-3	200-024-3	p,p'-DDT	0,24	6,0	6,6	0	n.a.	0,05		229		0,98
52556-42-0	258-004-5	Sodium 3-(allyloxy)-2-hydroxypropylsulfonate	0,24		-4,4	0	Potential P/vP++	0,61				0,06
13826-35-2	237-525-1	3-phenoxybenzyl alcohol	0,24	3,0	2,7	0	Pot. P/vP	0,73			3	0,13
22204-53-1	244-838-7	Naproxen	0,24		0,6	0	Pot. P/vP	0,67			7	0,11
102-71-6	203-049-8	2,2',2''-nitrioltriethanol	0,24	-1,9	-1,8	0	Not P	0,85				0,07
108-38-3	203-576-3	m-xylene	0,24	2,3	3,2	351	Not P	0,69		23		0,15

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
83-32-9	201-469-6	Acenaphthene	0,24	3,4	3,9	3	P	0,55		23		0,21
5495-84-1	226-827-9	2-isopropyl-9H-thioxanthen-9-one	0,24	4,0	5,0	0	no conclusion/data	0,41				0,31
120-72-9	204-420-7	Indole	0,24	2,0	2,3	0	no conclusion/data	0,61			6	0,11
74-83-9	200-813-2	Bromomethane	0,24	0,68	1,3	1013	Pot. P/vP	0,49	1,8			0,08
515815-48-2	485-140-4	Telmisartan Hydrochlorid	0,24	6,2	5,8	0	Pot. P/vP	0,29				0,73
55285-14-8	259-565-9	Carbosulfan	0,24		4,8	0	n.a.	0,52	5,2			0,27
70628-36-3	634-740-6	Propachlor-OXA	0,24		-2,8	0	n.a.	0,70				0,07
24280-93-1	246-119-3	Mycophenolic acid	0,23		1,8	0	n.a.	0,76				0,09
98-86-2	202-708-7	Acetophenone	0,23	1,3	1,6	0	Not P	0,70		7		0,11
142-68-7	205-552-8	Tetrahydropyran (THP)	0,23	0,38	1,0	18	n.a.	0,53			19	0,09
75-05-8	200-835-2	Acetonitrile	0,23	-0,55	-0,2	9	Not P	0,81				0,08
109-99-9	203-726-8	Tetrahydrofuran	0,23	1,3	0,6	10	Not P	0,55			23	0,08
78-93-3	201-159-0	Butanone	0,23	-0,19	0,4	4	Not P	0,73			6	0,08
67-64-1	200-662-2	Acetone	0,23		0,0	8	Not P	0,74			3	0,08
90-82-4	202-018-6	Pseudoephedrine	0,23	0,17	-0,8	0	n.a.	0,70				0,08
299-42-3	206-080-5	Ephedrine	0,23		-0,8	0	n.a.	0,70				0,08
1137-42-4	214-507-1	4-hydroxybenzophenone	0,23	-1,9	3,0	0	Not P	0,63	17			0,15
1561-92-8	216-341-5	Sodium 2-methylprop-2-ene-1-sulphonate	0,23	1,3	-5,1	0	P	0,64				0,07
1217465-10-5	-	metolachlor CGA 357704	0,23		-0,9	0	n.a.	0,67				0,06

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
60-29-7	200-467-2	Diethyl ether	0,23		1,1	87	no conclusion/data	0,54			23	0,08
13194-48-4	236-152-1	Ethoprophos	0,23		3,4	0	n.a.	0,66	28			0,15
106-44-5	203-398-6	<i>p</i> -cresol	0,22	1,7	2,0	0	Not P	0,72		1		0,11
95-48-7	202-423-8	<i>o</i> -cresol	0,22	1,3	2,0	0	Not P	0,72		1		0,11
31879-05-7	250-850-3	Fenoprofen	0,22		0,5	0	n.a.	0,69			7	0,11
14838-15-4	207-755-7	Norephedrine	0,22		-1,0	0	n.a.	0,72				0,07
77521-29-0	-	2-amino-3-(5-methyl-3-oxo-1,2-oxazol-4-yl)propanoic acid	0,22		-5,8	0	n.a.	0,62				0,05
581-42-0	209-464-0	2,6-Dimethylnaphthalene	0,22	3,4	4,3	20	n.a.	0,60			10	0,21
51276-47-2	257-102-5	Glufosinate	0,22		-1,9	0	n.a.	0,65				0,05
123-72-8	204-646-6	Butyraldehyde	0,22		0,9	10	Not P	0,90			3	0,07
83-46-5	-	Beta-Sitosterol	0,22		6,4	0	n.a.	0,23				0,72
99-87-6	202-796-7	<i>p</i> -cymene	0,22	3,7	4,2	490	Not P	0,63			16	0,18
108-88-3	203-625-9	Toluene	0,22	1,9	2,7	599	Not P	0,73		23		0,11
5975-78-0	637-367-7	Zearalanone	0,22		3,5	0	n.a.	0,68			7	0,24
5466-77-3	629-661-9	Octyl methoxy cinnamate	0,21		5,2	0	n.a.	0,74				0,25
3039-83-6	221-242-5	Sodium ethylenesulphonate	0,21		-6,0	0	Not P	0,67				0,06
54-21-7	200-198-0	Sodium salicylate	0,21	0,25	-1,4	0	Not P	0,83		2		0,08
19466-47-8	243-087-2	beta-Stigmastanol	0,21		7,2	0	n.a.	0,23				0,72
288-13-1	206-017-1	Pyrazole	0,21	-0,40	-0,2	0	Pot. P/vP	0,70				0,08
75-15-0	200-843-6	Carbon disulphide	0,21	1,1	1,9	3689	Not P	0,67				0,08

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
61789-40-0	224-292-6	(carboxymethyl)dimethyl-3-[(1-oxododecyl)amino]propylammonium hydroxide	0,21		0,4	0	Not P	0,80				0,08
101-84-8	202-981-2	Diphenyl ether	0,21	3,3	4,0	2	Potential P/vP++	0,73		23		0,16
15687-27-1	239-784-6	Ibuprofen	0,21	2,8	0,9	0	P	0,57			8	0,10
979-32-8	213-559-2	Estradiol-17-valerate	0,21		5,6	0	n.a.	0,60				0,31
86-73-7	201-695-5	Fluorene	0,21	3,5	4,1	9	Pot. P/vP	0,53	37	23		0,18
1071-83-6	213-997-4	glyphosate	0,21		-8,7	0	n.a.	0,69	11			0,05
77-73-6	201-052-9	3a,4,7,7a-tetrahydro-4,7-methanoindene	0,21	2,5	2,8	145	Potential P/vP++	0,57			10	0,12
86-74-8	201-696-0	Carbazole	0,21	3,4	3,4	0	Pot. P/vP	0,52				0,15
84-66-2	201-550-6	Diethyl phthalate	0,21	2,3	2,6	0	Not P	0,86		7		0,09
90-12-0	201-966-8	1-methylnaphthalene	0,21	3,1	4,1	15	Pot. P/vP	0,60		7		0,16
90-43-7	201-993-5	Biphenyl-2-ol	0,21	2,5	3,1	0	Not P	0,64			4	0,12
100-41-4	202-849-4	Ethylbenzene	0,21		3,1	383	Pot. P/vP	0,67		23		0,12
84-69-5	201-553-2	Diisobutyl phthalate	0,21	3,0	4,2	0	Not P	0,76			7	0,13
131-11-3	205-011-6	Dimethyl phthalate	0,21	1,9	1,8	0	Not P	0,86		7		0,08
90-15-3	201-969-4	1-naphthol	0,20	2,3	2,9	0	Not P	0,64			2	0,11
66069-34-9	266-104-5	[2R-(2α,3Z,5α)]-3-(2-hydroxyethylidene)-7-oxo-4-oxa-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid, compound with tert-butylamine (1:1)	0,20	1,3	-4,3	0	Not P	0,71				0,04

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
5728-52-9	227-233-2	Felbinac	0,20		0,4	0	n.a.	0,62				0,08
139110-80-8	691-117-1	Zanamivir	0,20		-6,9	0	n.a.	0,66				0,04
103-26-4	203-093-8	Methyl cinnamate	0,20		2,6	0	Not P	0,78				0,09
102-76-1	203-051-9	Triacetin	0,20	-0,73	0,4	0	Not P	0,96				0,06
13048-33-4	235-921-9	Hexamethylene diacrylate	0,20		2,7	0	Not P	0,90			6	0,10
98-82-8	202-704-5	Cumene	0,20		3,7	641	Pot. P/vP	0,67		23		0,13
521-35-7	689-788-0	CBN / Cannabinol	0,20	5,6	6,1	0	n.a.	0,57				0,38
89-78-1	201-939-0	Menthol	0,20	2,0	3,2	0	Not P	0,64			2	0,09
56-53-1	200-278-5	Diethylstilbestrol	0,20		4,6	0	n.a.	0,52				0,20
103-65-1	203-132-9	<i>n</i> -Propylbenzene	0,20		3,7	616	n.a.	0,67		23		0,13
26530-20-1	247-761-7	octhilinone (ISO); 2-octyl-2 <i>H</i> -isothiazol-3-one	0,19	1,3	2,7	0	no conclusion/data	0,63				0,08
148553-50-8	-	Pregabalin	0,19		-0,9	0	n.a.	0,71				0,04
120-51-4	204-402-9	Benzyl benzoate	0,19	3,8	3,7	0	Not P	0,72			7	0,12
108-95-2	203-632-7	Phenol	0,19	1,5	1,6	0	Not P	0,76			2	0,07
132-64-9	205-071-3	Dibenzofuran	0,19	3,5	3,9	8	n.a.	0,51		7		0,15
100-42-5	202-851-5	Styrene	0,19		3,1	182	Not P	0,69		7		0,09
208-96-8	205-917-1	Acenaphthylene	0,19	3,2	3,9	0	n.a.	0,54			10	0,13
65059-42-9	265-332-2	Trimethyloctylammonium methyl sulphate	0,19		-2,1	0	Not P	0,72				0,06
99-76-3	202-785-7	Methyl 4-hydroxybenzoate	0,19		2,1	0	Not P	0,81				0,07

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
141-78-6	205-500-4	Ethyl acetate	0,19		0,8	18	Not P	0,85			3	0,06
120-47-8	204-399-4	Ethyl 4-hydroxybenzoate	0,19		2,5	0	Not P	0,81			3	0,08
110-83-8	203-807-8	Cyclohexene	0,19	2,0	2,8	3484	Potential P/vP++	0,71		7		0,08
4247-02-3	224-208-8	Isobutyl 4-hydroxybenzoate	0,19		3,2	0	Not P	0,76			7	0,10
26538-44-3	247-769-0	A-zearalanol	0,19		3,7	0	n.a.	0,72			6	0,15
94-13-3	202-307-7	Propyl 4-hydroxybenzoate	0,19		2,9	0	Not P	0,81			3	0,09
120-40-1	204-393-1	<i>N,N</i> -bis(2-hydroxyethyl)dodecanamide	0,18		3,7	0	Not P	0,94				0,06
3598-16-1	222-746-8	Sodium phenoxyacetate hemihydrate	0,18		-2,4	0	Not P	0,84			13	0,05
142-78-9	205-560-1	<i>N</i> -(2-hydroxyethyl)dodecanamide	0,18		3,9	0	Not P	0,89				0,07
123-03-5	204-593-9	Cetylpyridinium chloride	0,18	4,8	3,2	0	Pot. P/vP	0,65				0,15
501-52-0	207-924-5	3-phenylpropionic acid	0,18	3,3	-0,9	0	no conclusion/data	0,73			5	0,05
119-36-8	204-317-7	Methyl salicylate	0,18	1,6	2,5	0	Not P	0,81			3	0,07
92-52-4	202-163-5	Biphenyl	0,18	2,9	3,9	22	Not P	0,65			10	0,12
57-09-0	200-311-3	Cetrimonium bromide	0,18		1,8	0	Not P	0,68				0,13
81093-37-0	689-360-3	Pravastatin	0,18		1,0	0	n.a.	0,76				0,04
62-49-7	200-535-1	Choline	0,17		7,6	0	Not P	-0,41				1,00
70434-92-3	804-093-6	Cannabicyclohexanol	0,17		7,3	0	n.a.	0,58				0,22
110-82-7	203-806-2	Cyclohexane	0,17		3,3	3039	Not P	0,72		23		0,09
104273-73-6	806-797-9	Trinexapac acid	0,17		-1,9	0	n.a.	0,72	10			0,05

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
68411-44-9	270-126-0	Benzene, butyl-, branched and linear	0,17	3,2	4,3	535	no conclusion/data	0,67			16	0,14
154826-10-5	833-627-0	Octylphenoxy acetic acid	0,17		1,8	0	n.a.	0,64			8	0,08
5989-27-5	227-813-5	(R)- <i>p</i> -mentha-1,8-diene	0,16	3,2	4,5	817	Not P	0,58			16	0,12
26636-32-8	257-203-4	Diethoxyoctylphenol	0,16		5,1	0	n.a.	0,83			19	0,10
106807-78-7	631-246-2	Nonylphenoxyethoxy acetic acid	0,16		2,3	0	n.a.	0,63			8	0,09
1241-94-7	214-987-2	2-ethylhexyl diphenyl phosphate	0,16		5,4	0	Not P	0,62				0,12
26027-38-3	500-045-0	4-Nonylphenol, ethoxylated	0,16	2,6	5,5	0	no conclusion/data	0,82			19	0,11
15935-54-3	-	Carboxyibuprofen	0,16		-2,5	0	n.a.	0,62			4	0,04
1643-20-5	216-700-6	Dodecyldimethylamine oxide	0,16	2,5	4,6	0	Not P	0,70				0,09
99-66-1	202-777-3	2-propylvaleric acid	0,15		0,6	0	Not P	0,74			4	0,04
209414-07-3	635-711-0	JWH-018	0,15		6,5	0	n.a.	0,42				0,20
110-62-3	203-784-4	Valeraldehyde	0,14	0,39	1,3	5	Not P	0,93			3	0,03
85-68-7	201-622-7	Benzyl butyl phthalate	0,13	3,4	4,7	0	Not P	0,82		7		0,06
6197-30-4	228-250-8	Octocrilene	0,13	4,5	5,8	0	Potential P/vP++	0,70				0,16
104-40-5	203-199-4	<i>p</i> -nonylphenol	0,13	4,6	5,9	0	Pot. P/vP	0,70				0,09
1806-26-4	217-302-5	octylphenol	0,12	4,2	5,3	0	n.a.	0,70				0,08
107-66-4	203-509-8	Dibutyl hydrogen phosphate	0,12	0,50	-1,3	0	Potential P/vP++	0,67				0,03
94-26-8	202-318-7	Butyl 4-hydroxybenzoate	0,11	2,6	3,3	0	Not P	0,85			7	0,04
71-36-3	200-751-6	Butan-1-ol	0,11	0,11	0,8	1	Not P	0,87			3	0,02
139-13-9	205-355-7	Nitrilotriacetic acid	0,11		-7,4	0	Not P	0,71				0,01

CAS Nr.	EC Nr.	Name	vPvM	Ad1	Ad2	V	Deg1	Deg2	Deg3	Deg4	Deg5	Deg6
78-51-3	201-122-9	Tris(2-butoxyethyl) phosphate	0,10	2,5	3,4	0	Not P	0,55				0,03
7173-51-5	230-525-2	Didecyldimethylammonium chloride	0,10	2,8	5,4	0	Not P	0,74				0,07
109-66-0	203-692-4	Pentane	0,10		3,7	15645	Not P	0,80		23		0,03
84-74-2	201-557-4	Dibutyl phthalate	0,08		4,6	0	Not P	0,93		7		0,02
117-81-7	204-211-0	DEHP	0,07	5,7	7,5	0	n.a.	0,83		7		0,05
13560-89-9	236-948-9	1,6,7,8,9,14,15,16,17,17,18,18-dodecachloropentacyclo[12.2.1.1.16,9.02,13.05,10]octadeca-7,15-diene	0,07		10,4	0	vP	-0,48				1,00
126-73-8	204-800-2	Tributyl phosphate	0,06	1,8	3,7	0	Not P	0,82				0,01
123312-54-9	404-050-8	<i>N,N</i> -dimethyl- <i>N,N</i> -dioctadecylammonium hydrogen sulfate	0,05		10,1	0	no conclusion/data	0,62	28			0,29