

# Endbericht SimplestFATE

SimplestFATE: Modellierung des Verhaltens von Spurenstoffen in der Siedlungswasserwirtschaft



## **Impressum**

Projektnehmer:in: TU Wien, Institut für Wassergüte und Ressourcenmanagement  
Forschungsbereich Wassergütewirtschaft

Adresse: 1040 Karlsplatz 13/226-1

Projektleitung: Matthias Zessner

Autorinnen und Autoren: Heidemarie Schaar, Ottavia Zoboli, Matthias Zessner

Mitwirkende: Renata Kaps, Lara Vrecar

Fotonachweis: Heidemarie Schaar

Wien, 4. Oktober 2024

# Inhalt

<b>Inhalt</b> .....	<b>3</b>
<b>1 Einleitung</b> .....	<b>4</b>
1.1 Hintergrund.....	4
1.2 Projektziele .....	5
<b>2 Material und Methodik</b> .....	<b>6</b>
2.1 Erweiterung und Verbesserung des Datensatzes.....	6
2.2 Modellerstellung.....	7
2.2.1 Allgemeines.....	7
2.2.2 Ermittlung des Austrags über verschiedene Pfade.....	9
2.2.3 Einstufung in Abbaubarkeits- und Adsorptionskategorien .....	17
<b>3 Ergebnisse und Diskussion</b> .....	<b>27</b>
3.1 Kategorisierung und Austragspfade .....	27
3.2 Modellüberprüfung und -adaptierung .....	35
3.2.1 Einstufung der Substanzen anhand ihrer Adsorbierbarkeit .....	35
3.2.2 Einstufung der Substanzen anhand ihrer biologischen Abbaubarkeit .....	39
3.2.3 Austragspfade mit adaptierter Kategorisierung.....	43
3.3 SimplEstFATE.....	53
3.3.1 Modellerläuterung.....	53
3.3.2 Modellanwendung.....	56
<b>4 Zusammenfassung</b> .....	<b>76</b>
<b>Literaturverzeichnis</b> .....	<b>80</b>
<b>Abkürzungsverzeichnis</b> .....	<b>92</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b> .....	<b>94</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b> .....	<b>96</b>
<b>Verzeichnis für Tabellen im Anhang</b> .....	<b>99</b>
<b>Anhang</b> .....	<b>100</b>

# 1 Einleitung

## 1.1 Hintergrund

Spurenstoffe werden durch Anwendung in unterschiedlichsten Bereichen freigesetzt. Abhängig vom Einsatzbereich werden sie entweder aus Industrie oder Haushalten mit dem Schmutzwasser oder über Oberflächen mit dem Regenwasser in die Siedlungswasserwirtschaftliche Kanalisation eingetragen. Je nach Herkunft, vorhandenem Kanalsystem, Art der Abwasserreinigung und chemisch-physikalischen Stoffeigenschaften verlassen die Spurenstoffe die Siedlungswasserwirtschaft über unterschiedliche Austragspfade oder werden auf der Kläranlage ab- bzw. umgebaut. Eine langfristige Speicherung im Kanalsystem oder auf der Kläranlage wird dagegen in der Regel als nicht relevant erachtet. Im Projekt SiWaWi „Zukünftige stoffliche und mikrobiologische Herausforderungen für die kommunale Siedlungswasserwirtschaft“ (Zessner et al., 2022) wurde ein Modellansatz entwickelt, welcher darauf abzielt, ausgehend von dominanten Eintragspfaden, sowie von der Adsorbierbarkeit und der Abbaubarkeit von Spurenstoffen auf den wahrscheinlichen Verbleib bzw. den dominanten Austragspfad aus der Siedlungswasserwirtschaft zu schließen. Dazu wurden die Spurenstoffe in 27 Stoffkategorien eingeteilt und für diese unterschiedlichen Kategorien wurden Hypothesen zu wahrscheinlichen Austragspfaden aufgestellt. In einem nächsten Schritt wurden Daten zu Herkunftsbereichen unterschiedlicher Spurenstoffe, chemisch-physikalischen Stoffeigenschaften sowie Konzentration in Schmutzwasser, Regenwasser, wie den Austragspfaden Mischwasserüberlauf, Kläranlagenablauf und Klärschlamm gesammelt und in einer Datenbank gespeichert. Diese Daten wurden im Weiteren genutzt, um über Frachtberechnungen die Austragsfrachten über unterschiedliche Pfade zu berechnen und die Ergebnisse für unterschiedliche Kategorien mit den Hypothesen zu vergleichen.

Letztendlich war es möglich für 61 Stoffe eine quantitative Aussage über die Hauptaustragspfade zu tätigen und diese mit der Einschätzung aufgrund der Stoffkategorie zu vergleichen. In vielen Fällen konnte die Einschätzung eines Hauptaustragspfades über die Kategorisierung und somit auch die Sinnhaftigkeit des Modellansatzes bestätigt werden. Allerdings wurde auch eine Reihe von Problemen identifiziert, die es für eine generelle Anwendung des gewählten Ansatzes noch zu klären galt:

- Bei einigen Kategorien (z.B. jene mit guter Abbaubarkeit) wurde für keinen oder nur für einen Stoff ein vollständiger Datensatz erhoben um den Hauptaustragspfad über Daten zu belegen.
- Aus einigen Literaturquellen wurden nur aggregierte statistische Kennwerte, wie z.B. Mittelwerte oder Mediane, nicht aber die Einzelwerte von Monitoringprogrammen in die Datensammlung aufgenommen. Dies erschwerte die statistische Auswertung des Datensatzes deutlich.
- Dem bisherigen Datensatz fehlte eine umfassende Qualitätskontrolle.
- Die gewählten Grenzen der Kategorien „mittlere Abbaubarkeit“ und „mittlere Adsorbierbarkeit“ führten zu keiner klaren Zuordenbarkeit zu den wahrscheinlich dominanten Austragspfaden.
- Für einzelne Stoffe ließ sich auch bei einer klaren Zuordnung zu einer Abbaubarkeit oder Adsorbierbarkeit der zu erwartende Verbleib nicht durch die Daten bestätigen.

Um den gewählten Ansatz zu einer Anwendungsreife zu führen, waren daher noch zusätzliche Datenerhebungen und Auswertungen erforderlich.

## 1.2 Projektziele

Ziel des Projektes war es, den Modellansatz für die Abschätzung des Hauptaustragspfades von Spurenstoffen aus der Siedlungswasserwirtschaft in Abhängigkeit der Einsatzbereiche und der chemisch-physikalischen Stoffeigenschaften weiterzuentwickeln. Dies soll es ermöglichen, auch ohne umfassendes Monitoring eine erste Einschätzung dafür zu erhalten, welches Verhalten für Stoffe in der Siedlungswasserwirtschaft zu erwarten ist und über welche Austragspfade (Regenkanalisation, Mischwasserüberlauf, Kläranlagenablauf, Klärschlamm oder Abbau in der Kläranlage) sie die Siedlungswasserwirtschaft voraussichtlich verlassen werden. Basierend darauf könnten maßgeschneiderte Monitoringprogramme erstellt, aber auch geeignete Maßnahmen zur Reduktion der Emissionen identifiziert werden. Die Umsetzung des Projektvorhabens umfasste drei wesentliche Arbeitsschritte:

1. Erweiterung und Verbesserung des Datensatzes
2. Modellerstellung
3. Modellerläuterung und Anwendung

# 2 Material und Methodik

## 2.1 Erweiterung und Verbesserung des Datensatzes

Für die Erweiterung des Datensatzes aus dem SiWaWi-Projekt wurden die bereits im Datensatz vorhandenen Stoffe um die Indikatorsubstanzen für die vierte Reinigungsstufe in der Revision der kommunalen Abwasserrichtlinie bzw. um die im aktuellen Entwurf der Richtlinie der prioritären Stoffe (Stand Oktober 2022) neu aufgenommenen Substanzen ergänzt. Darüber hinaus wurden, soweit möglich, dort Substanzen ergänzt, wo bisher keine oder nur einzelne Stoffe den im Projekt SiWaWi vordefinierten Kategorien zugeordnet waren. Insgesamt wurden im Zuge des gegenständlichen Projektes Daten zu 274 organischen Spurenstoffen gesammelt. Im Anhang in Tabelle A 1 sind alle Stoffe mit CAS Nummer, Verwendungsgruppe und Informationen zur weiteren Verwendung im Rahmen des Projektes zusammengestellt.

Metalle wurden in diesem Projekt nicht mehr betrachtet, da das Verhalten dieser Stoffgruppe auf Kläranlagen nicht auf ihrer Adsorbier- und Abbaubarkeit basiert, sondern ihre Entfernung maßgeblich durch Fällungsvorgänge beeinflusst wird. Aus diesem Grund sind sie anders zu betrachten und ein Rückschluss auf ihre Charakteristik würde die Aussagen verfälschen.

Um eine gute Datenbasis für die Modellansätze zu gewährleisten, wurde der Datensatz zu den chemisch-physikalischen Eigenschaften aus den Projekt SiWaWi systematisch überprüft und um zusätzliche Quellen erweitert. Während der ursprüngliche Datensatz für die chemisch-physikalischen Eigenschaften auf einer Quelle basierte und somit die vorhandene Variabilität der Daten nicht widerspiegelte, wurden nun Daten zu den chemisch-physikalischen Eigenschaften aus den im Folgenden aufgelisteten etablierten Datenbanken über chemische Verbindungen hinzugefügt:

- **NORMAN:** [www.norman-network.com/nds/factsheets/](http://www.norman-network.com/nds/factsheets/)
- **ECHA REACH** registration dossier: <https://echa.europa.eu/> bzw. <https://chem.echa.europa.eu/>
- **PUBCHEM:** <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
- **ChemSpider:** [www.chemspider.com](http://www.chemspider.com)

Zur Erweiterung und Verbesserung des Messwertdatensatzes wurde eine gezielte und vertiefende Literaturrecherche durchgeführt und bei fehlenden Einzeldaten wurden die Autor:innen gebeten, diese zur Verfügung zu stellen. Darüber hinaus wurden, soweit vorhanden, Metadaten ergänzt, die eine robustere und gezieltere Anwendung der Daten für die Frachtberechnung ermöglichen. Dazu zählen z.B. die Wetterbedingungen bei der Beprobung von Kläranlagenzuläufen oder das Vorhandensein einer Behandlung bei den beprobten Mischwasserentlastungen. Die erhobenen Daten wurden einer umfassenden Qualitätskontrolle unterzogen. Wo immer eine ausreichende Datenbasis vorhanden war, wurden Datensätze priorisiert und beibehalten, die aktueller, plausibler und repräsentativer für das derzeitige Emissionsniveau der mitteleuropäischen Länder waren. Insgesamt wurden Messwerte aus 58 verschiedenen Studien entnommen.

## 2.2 Modellerstellung

### 2.2.1 Allgemeines

Die Arbeiten im Rahmen dieses Projektes bauen auf dem Projekt SiWaWi (Zessner et al., 2022) auf und versuchen den dort entwickelten Modellansatz, bei dem ausgehend von dominanten Eintragungspfaden, sowie von den Adsorptions- und Abbaubarkeitseigenschaften von Spurenstoffen auf den wahrscheinlichen Verbleib bzw. den dominanten Austragspfad aus der Siedlungswasserwirtschaft geschlossen wird, weiter zu verfolgen. Das so entwickelte Modell (im Weiteren, in Anlehnung an das Modell SimpleTreat als SimpleEstFATE – Simple Estimation of the Fate of organic trace compounds in sanitary engineering – benannt) soll eine einfache Möglichkeit bieten, beim Auftreten bisher wenig bekannter und untersuchter Stoffe eine erste Einschätzung zu tätigen, wo für diesen Stoff ein Austrag aus dem Bereich der Siedlungswasserwirtschaft und damit eine allfällige Belastung der Umwelt zu erwarten ist.

Im Projekt SiWaWi wurden die Stoffe anhand der Faktoren Herkunftsbereich (überwiegend Schmutzwasser, überwiegend Niederschlagswasser, gemischter Eintrag), Abbaubarkeit (gut, mittel, schlecht) und Adsorbierbarkeit (gut, mittel, schlecht) in 27 Kategorien eingeteilt, überlegt wo der dominante Austragspfad aus der Siedlungswasserwirtschaft je nach Kategorie sein könnte (Hypothesen) und diese Annahmen in einem weiteren Schritt überprüft. Teilweise fiel bei dieser Überprüfung auf, dass eine Zuordnung zu den Kategorien (z.B. Abbaubarkeit), die über eine Halbwertszeit getroffen wurde, nicht dem entspricht, was aus Erfahrungen mit dem Abbau auf

Kläranlagen zu erwarten gewesen wäre. Gerade für die Abbaubarkeit und die Adsorbierbarkeit spielen die Vorgänge auf Kläranlagen eine herausragende Rolle für die zu erwartenden Austragspfade aus der Siedlungswasserwirtschaft. Aus diesem Grund wurde die Vorgangsweise aus dem Projekt SiWaWi zur Entwicklung von SimplEstFATE etwas adaptiert.

Dazu wurden über in der Literatur veröffentlichte Untersuchungen (vor allem ein umfassender Reviewartikel von Margot et al. (2015), aber auch Ekpeghere et al. (2018), Ianku et al. (2019), Lenka et al. (2021), Liu et al. (2017), Paun et al. (2022), Sadaria et al. (2017), Song et al. (2006), Verovšek et al. (2022) und Voulvoulis et al. (2004)) ermittelt, wie sich Substanzen auf Kläranlagen verhalten und zu welchem Anteil sie an den Klärschlamm sorbiert bzw. abgebaut werden. Diese Informationen wurden für die weitere Vorgangsweise als „Benchmarkdatensatz“ für das Verhalten der Stoffe auf der Kläranlage verwendet.

1. In einem ersten Schritt wurde dieser Benchmarkdatensatz verwendet, um die Kategorisierung unter Berücksichtigung von Abbau und Adsorption auf Kläranlagen möglichst korrekt durchführen zu können und anhand einer Vielzahl von Konzentrationsdaten in Eintrags- und Austragspfaden über eine Stoffbilanzierung der Siedlungswasserwirtschaft eine Identifikation der Hauptaustragspfade je Kategorie durchführen zu können (Ergebniskapitel 3.1 Kategorisierung und Austragspfade).
2. In einem zweiten Schritt wurden die Daten von Margot et al. (2015) genutzt um zu evaluieren, wie weit über allgemein verfügbare Daten zu chemisch-physikalischen Stoffeigenschaften das Verhalten auf der Kläranlage abgebildet werden kann, und ob sich aus diesen Überlegungen im Vergleich zum Projekt SiWaWi eine Verbesserung der Einstufung in Kategorien von Stoffen ableiten lässt, für die es keine Detailuntersuchungen zum Verhalten auf Kläranlagen wie jene von Margot et al. (2015) gibt (Ergebniskapitel 3.2.1 Einstufung der Substanzen anhand ihrer Adsorbierbarkeit und 3.2.2 Einstufung der Substanzen anhand ihrer biologischen Abbaubarkeit). Dieser Schritt ist auch jener, bei dem die chemisch-physikalischen Stoffeigenschaften und die verwendeten Grenzen als Kriterien für die letztendliche Einteilung der Stoffe in die Kategorien der Adsorbier- und Abbaubarkeit des Modells SimplEstFATE festgelegt wurden.
3. In einem dritten Schritt wurden die Erkenntnisse aus dem zweiten Schritt nochmals in Anlehnung an den ersten Schritt angewandt und so auf Basis vorhandenen Wissens

die beste Zuordnung von Stoffen zu den Kategorien getätigt und dann die relevanten Austragspfade je Kategorie auf Basis der vorhandenen Stoffbilanzen nochmals zugeordnet (Ergebniskapitel 3.2.3 Austragspfade mit adaptierter Kategorisierung)

### 2.2.2 Ermittlung des Austrags über verschiedene Pfade

Je nach Herkunft bzw. Einsatzgebiet der Stoffe variieren sowohl die Einträge in die kommunale Kanalisation als auch die Transport- und Behandlungsprozesse in der Siedlungswasserwirtschaft. Daher werden in dieser Studie, wie auch im SiWaWi-Projekt, die Stoffe entsprechend ihrem Haupteintragspfad in drei Kategorien eingeteilt:

- **Haupteintrag über Schmutzwasser** – überwiegend (> 80% der Gesamteinträge) über Abwässer aus Haushalten, Gewerbe und Industrie, die in die kommunale Kanalisation eingeleitet werden
- **Haupteintrag über Niederschlagswasser** – überwiegend (> 80% der Gesamteinträge) über Oberflächenabfluss/Regenwasser, das von den Oberflächen abgeleitet und in die Kanalisation eingeleitet wird
- **Gemischter Eintrag** – sowohl über Abwässer aus Haushalten, Gewerbe und Industrie als auch über Oberflächenabfluss/Regenwasser, jeweils 20-80% der Gesamteinträge.

Um die Relevanz verschiedener Austragspfade je nach Kategorie zu ermitteln, wurde von einer für Österreich typischen Entsorgungssituation ausgegangen. Dabei wurden – neben dem Abbau/Umbau in der Kläranlage – vier Austragspfade berücksichtigt:

- **Regenwasserkanal:** Kanal zur Ableitung von Niederschlagswasser in der Trennkantisation und Austragspfad aus der Siedlungswasserwirtschaft für Niederschlagswasser, das nicht über ein Mischsystem entsorgt wird. Für die weiteren Betrachtungen im Projekt wird von keiner derzeitigen Behandlung des Niederschlagswassers ausgegangen.
- **Mischwasserüberlauf:** über Mischwasserentlastungen in Gewässer abgeleitetes Mischwasser. Es wird von einem Weiterleitungsgrad nach ÖWAV-Regelblatt 19, 2. Auflage aus 2007, ausgegangen, aber keine Reinigungsschritte angesetzt.
- **Kläranlagenablauf:** Ablauf einer kommunalen Kläranlage mit Abwasserreinigung nach dem Stand der Technik (Nährstoffentfernung – Nitrifikation/Denitrifikation und P-Fällung).
- **Klärschlamm:** stabilisierter kommunaler Klärschlamm (aerob oder anaerob) nach Entwässerung.

Für die Berechnung der Input- und Outputfrachten in für Österreich typischen urbanen Entsorgungssystemen wurden zwei bestehende repräsentative Beispiele für zwei unterschiedliche Systeme herangezogen, nämlich das urbane Gebiet Tulln als Beispiel für ein städtisches System mit überwiegend Mischkanalisation und Klosterneuburg als Beispiel für ein städtisches Gebiet mit überwiegend Trennkanalisation (Clara et al., 2014; Zessner et al., 2022). Die jeweiligen mittleren Wasserbilanzen sind in Abbildung 1 und Abbildung 2 dargestellt.

Abbildung 1: Mittlere Jahreswasserbilanz des Einzugsgebietes der Kläranlage Tulln (städtisches Gebiet mit überwiegend Mischkanalisation) bezogen auf Einwohnerwerte (EW), Quelle: Clara et al. (2014). Die Abweichung in der Wasserbilanz von  $2 \text{ m}^3/(\text{EW} \cdot \text{a})$  lässt sich durch Sickerwasserverluste erklären. Aufgrund der großen Unsicherheiten in diesem Bereich werden diese in der weiteren Auswertung nicht berücksichtigt.

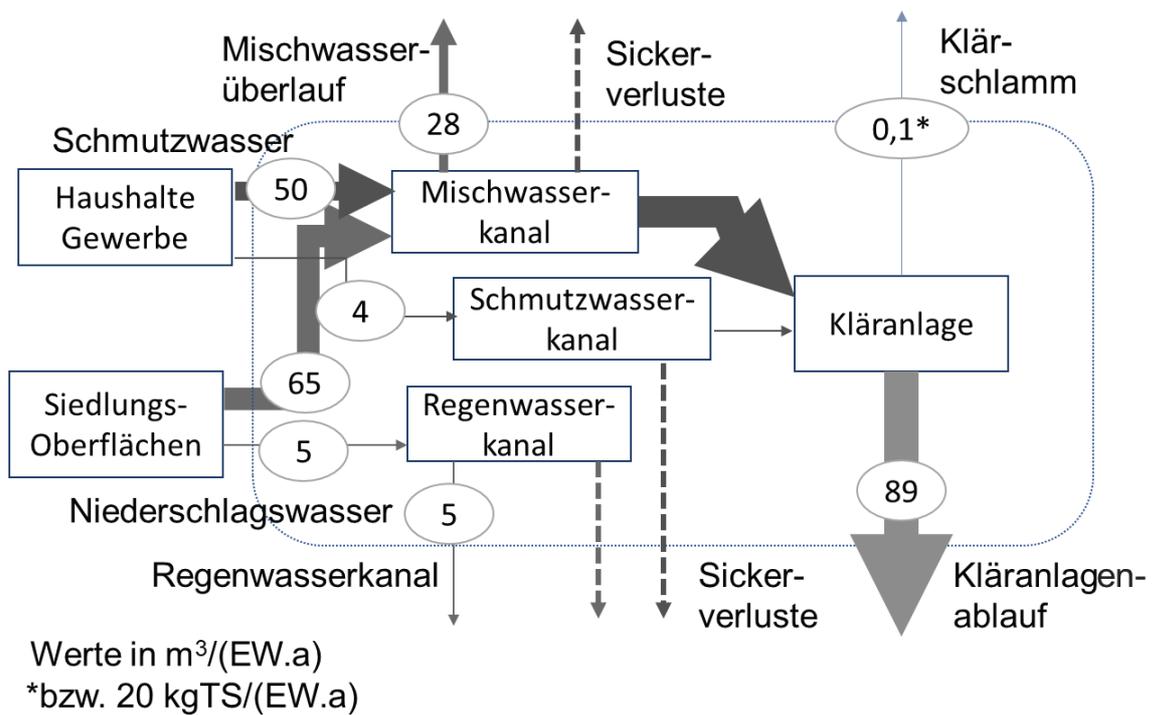
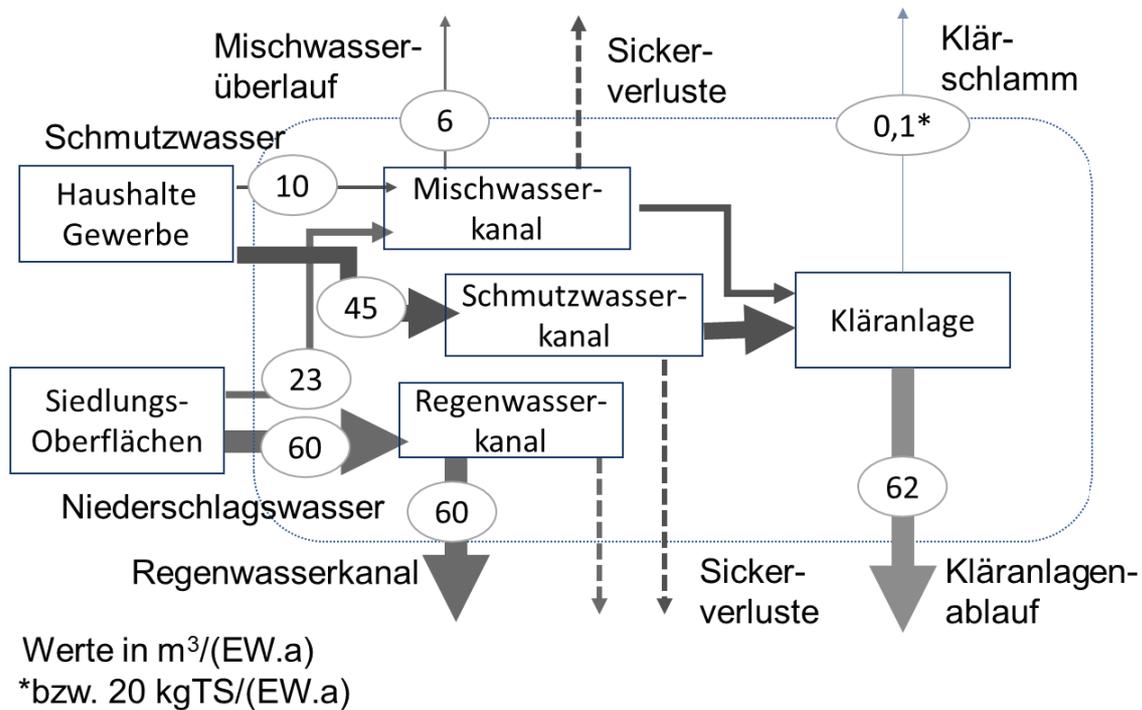


Abbildung 2: Mittlere Jahreswasserbilanz des Einzugsgebietes der Kläranlage Klosterneuburg (städtisches Gebiet mit überwiegend Trennkanalisation) bezogen auf Einwohnerwerte (EW), Quelle: Clara et al. (2014). Die Abweichung in der Wasserbilanz von  $10 \text{ m}^3/(\text{EW} \cdot \text{a})$  lässt sich durch Sickerwasserverluste erklären. Aufgrund der großen Unsicherheiten in diesem Bereich werden diese in der weiteren Auswertung nicht berücksichtigt.



Die Konzentrationsdaten für die für eine Stoffbilanzierung der Siedlungswasserwirtschaft erforderlichen Frachtberechnungen in Eintrags- und Austragspfaden wurden aus dem erweiterten und verbesserten Datensatz (siehe Kapitel 2.1) dieses Projektes entnommen. Die quantitative Auswertung war für 63 Substanzen möglich (Auflistung der Stoffe, ihrer Anwendungsbereiche und ihres Haupteintragspfades in Tabelle 1), da nur hier für alle notwendigen Pfade (Schmutzwasser, Niederschlagswasser, Kläranlagenablauf und Klärschlamm) ausreichend Messdaten in der Datenbank gesammelt werden konnten. Sofern Messwerte aus Mischwasserentlastungen vorlagen, wurden diese für die Frachtberechnungen verwendet. Ansonsten wurden die über Mischwasserentlastungen emittierten Stofffrachten auf Basis der Konzentrationen in Schmutzwasser und Niederschlagswasser und einer Schmutzwasser-Stofffracht zu Niederschlagswasser-Stofffracht im Verhältnis von 1:10 berechnet. Dies entspricht in der Größenordnung dem

Mindestmischungsverhältnis beim Anspringen eines Mischwasserüberlaufs unter Berücksichtigung der kritischen Regenspende (ÖWAV Regelblatt 19 / ATV-A-128).

Die 63 Stoffe, für die eine Bilanzierung durchgeführt werden konnte, stimmen nur zum Teil mit den 61 Stoffen überein, für die im SiWaWi-Projekt eine frachtbasierte quantitative Auswertung durchgeführt wurde. Aus der „SiWaWi -Liste“ wurden einerseits – wie im vorigen Kapitel erläutert – Metalle und Phosphor entfernt und andererseits neue organische Spurenstoffe aufgenommen. Dabei ist wichtig anzumerken, dass die Kategorisierung (wie schon in Kapitel 2.2.1 erläutert) für diese Auswertungen nicht nur auf den in den Datenbanken verfügbaren Daten zu den chemisch-physikalischen Eigenschaften beruht. Für die Abbaubarkeit wurde auf den umfassenden Reviewartikel von Margot et al. (2015) bzw. andere Literaturangaben wie Ekpeghere et al. (2018), Ianku et al. (2019), Lenka et al. (2021), Liu et al. (2017), Paun et al. (2022), Sadaria et al. (2017), Song et al. (2006), Verovšek et al. (2022) und Voulvoulis et al. (2004) zurückgegriffen, die das Verhalten von Spurenstoffen in der Kläranlage den dominanten Entfernungsmechanismen, vornehmlich der Adsorption bzw. Einlagerung in den Schlamm und dem biologischen Abbau zuordnet. Diese Werte wurden im gegenständlichen Bericht als Benchmarkdatensatz für das Verhalten auf der Kläranlage und im Weiteren für diese erste Kategorisierung der Stoffe verwendet.

Von den 63 Stoffen, für die eine Stoffbilanz der Siedlungswasserwirtschaft durchgeführt wurde und die einer Kategorie zugeordnet wurden, gelangen 27 vorwiegend über das Schmutzwasser in die Kanalisation. Die Liste enthält Pharmazeutika, Hormone, psychotrope Substanzen, Körperpflegemittel, Desinfektionsmittel, Insektizide, Konservierungsmittel, Flammschutzmittel, Weichmacher und andere Industriechemikalien, die vielfältig eingesetzt werden. 17 Stoffe werden hauptsächlich mit dem Niederschlagswasser eingetragen. Es handelt sich dabei um Biozide und Pestizide, Verbrennungsprodukte, psychotrope Substanzen und Industriechemikalien, die vielfältig eingesetzt werden. Die restlichen 19 Stoffe, die einen gemischten Eintrag aufweisen, inkludieren Substanzen, die sowohl Industriechemikalien als auch Verbrennungsprodukte sind, Korrosionsschutzmittel, Weichmacher, Substanzen, die in Pharmazeutika aber auch in Pestiziden enthalten sind, und Industriechemikalien mit Mehrfachverwendung.

Obwohl es nicht möglich war, ausreichend Messdaten für Stoffe in allen Kombinationen der Kategorien zusammenzustellen, zeigt die Liste der 63 Stoffe eine große Heterogenität hinsichtlich der Abbaubarkeit und Adsorption in kommunalen Kläranlagen. Speziell die Kategorien mit gut abbaubaren und gut bis mittel adsorbierbaren Stoffen sind aber

trotzdem nicht gefüllt. Hier ist auf ein methodisches Problem hinzuweisen, welches sich aus der Verwendung der Werte einer Entfernung auf der Kläranlage über Adsorption und Abbau für die Kategorisierung über Margot et al. (2015) ergibt. So werden gut abbaubare Stoffe über den Klärschlamm kaum entfernt werden, selbst wenn sie von ihren Eigenschaften her adsorbierbar sind, da auch der adsorbierte Anteil abgebaut wird. Diese Einschränkung wird in der Anwendung von SimplEstFATE in Hinblick auf relevante Austragspfade mit Berücksichtigung von Stoffen mit guter Abbaubarkeit und guter/mittlerer Adsorption zu beachten sein.

Bei Spurenstoffkonzentrationen ist es üblich, dass ein erheblicher Teil der Werte zensiert wird, d.h. dass die Werte unterhalb der Bestimmungsgrenze (BG) liegen oder Stoffe nicht nachweisbar sind. Daher ist es wichtig, diese Fälle bei der Datenauswertung mit geeigneten Methoden zu behandeln, um ein Maximum an Informationen zu erhalten und gleichzeitig eine Verzerrung der statistischen Analyse zu vermeiden (Helsel, 2006). Um zusammenfassende Statistiken zu berechnen, wurde die Methode "Regression on order statistics" (ROS) (Helsel, 2011) unter Verwendung des NADA R-Pakets (Lee, 2020) angewandt. Da diese Methode fehleranfällig ist, wenn der Anteil der zensierten Werte über 80% liegt oder weniger als drei Werte > BG vorliegen, wurden die Ergebnisse in diesen Fällen auf Plausibilität geprüft und ggf. durch die Hälfte der BG ersetzt. Tabelle A 2, Tabelle A 3, Tabelle A 4, Tabelle A 5, Tabelle A 6 im Anhang zeigen die zusammenfassende Statistik (Median, Mittelwert, 10-25-75-90 Perzentil) der Konzentrationen der 63 Stoffe jeweils in Schmutzwasser, Niederschlagswasser bzw. Regenwasserkanal, Mischwasserüberlauf, Kläranlagenablauf und Klärschlamm. Ebenfalls sind die Anzahl der verfügbaren Messwerte und ihre Beschreibung (ob Einzelwerte oder aggregierte Werte), der Anteil der zensierten Werte und die entsprechenden Quellen angegeben.

Tabelle 1: Ausgewählte Stoffe für die quantitative Bewertung durch Bilanzierung und deren Kategorisierung.

	<b>Stoffname</b>	<b>Abkürzung</b>	<b>Gruppe</b>	<b>Haupteintragspfad</b>
<b>1</b>	Acenaphthen	ACN	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	Gemischt
<b>2</b>	Acenaphthylen	ACY	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	Gemischt
<b>3</b>	Anthracen	ANT	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	Gemischt

	<b>Stoffname</b>	<b>Abkürzung</b>	<b>Gruppe</b>	<b>Haupteintragspfad</b>
<b>4</b>	Atrazin	ATR	Herbizide	Niederschlagswasser
<b>5</b>	2,2',4,4'-Tetrabromodiphenyl ether	BDE-47	Flammschutzmittel	Schmutzwasser
<b>6</b>	2,2',4,4',5-Pentabromodiphenyl ether	BDE-99	Flammschutzmittel	Schmutzwasser
<b>7</b>	2,2',4,4',6-Pentabromodiphenyl ether	BDE-100	Flammschutzmittel	Schmutzwasser
<b>8</b>	2,2',4,4',5,5'-Hexabromodiphenyl ether	BDE-153	Flammschutzmittel	Schmutzwasser
<b>9</b>	2,2',4,4',5,6'-Hexabromodiphenyl ether	BDE-154	Flammschutzmittel	Schmutzwasser
<b>10</b>	Benzisothiazolinon	BIT	Konservierungsmittel	Schmutzwasser
<b>11</b>	Benzotriazol	BTZ	Korrosionsschutzmittel	Gemischt
<b>12</b>	Benzo[a]anthracen	BaA	Verbrennungsprodukte	Niederschlagswasser
<b>13</b>	Benzo[a]pyren	BaP	Verbrennungsprodukte	Niederschlagswasser
<b>14</b>	Benzo[b]fluoranthen	BbF	Verbrennungsprodukte	Niederschlagswasser
<b>15</b>	Benzo[ghi]perylen	BghiP	Verbrennungsprodukte	Niederschlagswasser
<b>16</b>	Benzo[k]fluoranthen	BkF	Verbrennungsprodukte	Niederschlagswasser
<b>17</b>	Bis(2-ethylhexyl)phthalat	DEHP	Weichmacher	Schmutzwasser
<b>18</b>	Bisoprolol	BSP	Pharmazeutika	Schmutzwasser
<b>19</b>	Bisphenol A	BPA	Industriechemikalien	Gemischt
<b>20</b>	Carbamazepin	CBZ	Pharmazeutika	Schmutzwasser
<b>21</b>	Carbendazim	CBDZ	Pestizide	Niederschlagswasser
<b>22</b>	Chrysen	CHR	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	Gemischt
<b>23</b>	Clarithromycin	CLAR	Pharmazeutika	Schmutzwasser
<b>24</b>	Coffein	COF	Psychotrope Substanzen	Schmutzwasser
<b>25</b>	Cybutryn	CYB	Pestizide	Niederschlagswasser
<b>26</b>	Cypermethrin	CP	Insektizide	Gemischt
<b>27</b>	Dibenz[a,h]anthracen	DahA	Verbrennungsprodukte	Niederschlagswasser
<b>28</b>	Dibutylphthalat	DBP	Weichmacher	Gemischt

	<b>Stoffname</b>	<b>Abkürzung</b>	<b>Gruppe</b>	<b>Haupteintragspfad</b>
<b>29</b>	Dibutyltin	DBT	Industriechemikalien	Gemischt
<b>30</b>	5-chloro-2-(4-chlorphenoxy)phenol	DCPP	Desinfektionsmittel	Schmutzwasser
<b>31</b>	Diclofenac	DCF	Pharmazeutika	Schmutzwasser
<b>32</b>	Diethyltoluamid	DEET	Insektenabwehrmittel	Schmutzwasser
<b>33</b>	Diuron	DIU	Herbizide	Niederschlagswasser
<b>34</b>	Estradiol	E2	Hormone	Schmutzwasser
<b>35</b>	Estron	E1	Hormone	Schmutzwasser
<b>36</b>	Ethinylestradiol	EE2	Pharmazeutika (Kontrazeptiv)	Schmutzwasser
<b>37</b>	Fluoranthen	FLT	Verbrennungsprodukte	Niederschlagswasser
<b>38</b>	Fluoren	FLU	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	Gemischt
<b>39</b>	Ibuprofen	IBU	Pharmazeutika	Schmutzwasser
<b>40</b>	Imidacloprid	IMD	Pharmazeutika und Pestizide (Insektizid)	Gemischt
<b>41</b>	Indeno[1,2,3-cd]pyren	I123cdP	Verbrennungsprodukte	Niederschlagswasser
<b>42</b>	Mecoprop	MCPP	Pestizide	Niederschlagswasser
<b>43</b>	Metolachlor	Meto	Pestizide	Niederschlagswasser
<b>44</b>	Metoprolol	MET	Pharmazeutika	Schmutzwasser
<b>45</b>	5-Methyl-1H-benzotriazol	1H-5MeBTA	Korrosionsschutzmittel	Gemischt
<b>46</b>	Naphthalin	NAP	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	Gemischt
<b>47</b>	Nicotin	NIC	psychotrope Substanzen	Niederschlagswasser
<b>48</b>	4-Nonylphenol	4NP	Industriechemikalien	Schmutzwasser
<b>49</b>	Perfluorhexansäure	PFHxA	Industriechemikalien	Gemischt
<b>50</b>	Perfluoroctansulfonsäure	PFOS	Industriechemikalien	Gemischt
<b>51</b>	Perfluoroctansäure	PFOA	Industriechemikalien	Gemischt
<b>52</b>	Permethrin	PER	Pharmazeutika (Insektizid)	Schmutzwasser
<b>53</b>	Phenanthren	PHE	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	Gemischt

	<b>Stoffname</b>	<b>Abkürzung</b>	<b>Gruppe</b>	<b>Haupteintragspfad</b>
<b>54</b>	Pyren	PYR	Verbrennungsprodukte	Niederschlagswasser
<b>55</b>	4-tert-Octylphenol	4-tert-OP	Industriechemikalien	Niederschlagswasser
<b>56</b>	Tributylphosphat	TBP	Industriechemikalien	Gemischt
<b>57</b>	Tributyltin	TBT	Biozide	Gemischt
<b>58</b>	Triclosan	TCS	Pflegeprodukte	Schmutzwasser
<b>59</b>	Triphenylphosphat	TPHP	Flammschutzmittel	Schmutzwasser
<b>60</b>	Tris(2-butoxyethyl)phosphat	TBEP	Flammschutzmittel	Schmutzwasser
<b>61</b>	Tris(2-chlorisopropyl)phosphat	TCPP	Flammschutzmittel	Schmutzwasser
<b>62</b>	Tris(1,3-dichlorisopropyl)phosphat	TDCPP	Flammschutzmittel	Schmutzwasser
<b>63</b>	Triisobutylphosphat	TIBP	Flammschutzmittel	Schmutzwasser

Die zeitliche und räumliche Variabilität von Spurenstoffemissionen führt dazu, dass insbesondere in einem Datensatz, der sich aus Messwerten vieler Untersuchungen aus unterschiedlichen Jahren und Ländern zusammensetzt, die Konzentration eines Stoffes in einem Pfad sehr stark schwanken kann. Da es das Ziel dieser Auswertung war, eine durchschnittliche Situation darzustellen, um die Relevanz verschiedener Austragspfade grob abzuschätzen und damit die Validität des Konzeptes zu testen, wurden für die Frachtberechnungen die Mediane der Konzentrationen verwendet. Der Grund dafür ist, dass der Medianwert wesentlich weniger anfällig für Ausreißer ist und somit eine robustere Bewertung ermöglicht.

Die Ergebnisse der Frachtberechnungen werden letztendlich verwendet, um die dominanten Austragspfade aus der Siedlungswasserwirtschaft für Stoffe in Abhängigkeit der Zuordnung zu Stoffkategorien zu identifizieren. Ausgangspunkt dafür sind die Hypothesen, die im SiWaWi-Projekt ausformuliert wurden. Diese werden vor allem in Hinblick auf das jeweils dominante Kanalsystem näher spezifiziert und so erforderlich angepasst.

### 2.2.3 Einstufung in Abbaubarkeits- und Adsorptionskategorien

Neben der Frage des Einsatzes eines Stoffes und des damit verbundenen Eintragspfades in die Kanalisation, wird der Austrag eines Stoffes aus einer Kläranlage, vor allem durch das Verhalten bei der Abwasserreinigung bestimmt. Das Verhalten von Stoffen während der biologischen Abwasserreinigung kann grob in die drei Prozesse Adsorption, biologischer Abbau und Verflüchtigung/Strippung eingeteilt werden (Clara, 2004). Auch wenn der Entfernungspfad Verflüchtigung/Strippung für volatile Substanzen durchaus von Bedeutung sein kann, beschränken sich die dominanten Prozesse für den Großteil an Substanzen auf die zwei Entfernungspfade „Adsorption“ und „biologische Abbaubarkeit“ (Poseidon, 2004). Daher erfolgt die Bearbeitung ausschließlich anhand dieser zwei Prozesse. Flüchtige organische Verbindungen (VOC) wurden somit nur dann betrachtet, wenn aus Literaturdaten über das Verhalten in Kläranlagen hervorging, dass sie zu weniger als 20% durch Strippung entfernt werden.

Um das Verhalten zu kategorisieren, werden ausgewählte chemisch-physikalische Eigenschaften bzw. Eigenschaften zur Charakterisierung des Umweltverhaltens herangezogen. Im Rahmen der Erweiterung und Verbesserung des Datensatzes (siehe Kap. 2.1) erfolgte eine vertiefte Erhebung dieser Eigenschaften.

Für die Auswahl der Stoffeigenschaften zur Kategorisierung der Adsorbierbarkeit und biologischen Abbaubarkeit spielen im Hinblick auf Substanzen, deren Verhalten in der Siedlungswasserwirtschaft noch nicht untersucht und durch Monitoringdaten belegt ist, mehrere Faktoren eine Rolle. Während die chemisch-physikalischen Stoffeigenschaften das Verhalten in der Matrix Abwasser bzw. Belebtschlamm bestmöglich reflektieren sollten, spielt für diese „neuen Substanzen“ die Verfügbarkeit dieser Werte in Datenbanken für chemische Substanzen eine entscheidende Rolle. So wird z.B. die Adsorption an den Belebtschlamm am besten über den Sorptionskoeffizienten  $K_d$  oder die biologische Abbaubarkeit am besten über die Abbaukonstante  $k_{bio}$  charakterisiert (Poseidon, 2004). Einzelne Stoffeigenschaften sind jedoch für neu eingesetzte Substanzen nicht oder nur eingeschränkt verfügbar, weshalb hier Kompromisse im Hinblick auf die beste Charakterisierung eingegangen werden müssen, indem auf andere, leichter verfügbare Kenngrößen zurückgegriffen wird. Die Datenrecherche zeigt z.B., dass  $K_d$ -Werte nur sehr eingeschränkt verfügbar sind. Abbaukonstanten zur Charakterisierung der biologischen Abbaubarkeit wurden in den Datenbanken ebenso nicht gefunden, es ist jedoch eine Berechnung aus  $DT_{50}$  möglich.  $DT$  steht streng genommen für *Disappearance Time* („Zeit für das Verschwinden“) und  $DT_{50}$  ist die Zeit innerhalb der die Konzentration

um 50% verringert wird. Sie entspricht nur im Fall einer Abbaureaktion 1. Ordnung der Halbwertszeit, wird in diesem Bericht jedoch synonym verwendet.

Eine weitere Methode, die für die Auswahl passender Stoffeigenschaften für die Einstufung angewendet wurde, ist das Modell SimpleTreat 4.1 (Struijs, 2014). Dabei handelt es sich um ein mathematisches Modell, welches das Verhalten von Chemikalien in der Abwasserreinigung anhand von Substanzeigenschaften, Kläranlagenbetriebsparametern und Eingaben zum biologischen Abbau simuliert und auch auf EU-Ebene im Rahmen der Chemikalienbewertung eingesetzt wird (Pistocchi et al., 2022). Die Substanzeigenschaften umfassen Chemikalienklasse (neutral, sauer, basisch), Molekulargewicht,  $K_{ow}$ ,  $D_{ow}$  (pH-Wert-angepasster  $K_{ow}$  bei basischen Chemikalien), Dampfdruck, Löslichkeit,  $pK_a$ , Henrykonstante,  $K_{oc}$  und die Verteilungskoeffizienten im Rohwasser (Kläranlagenzulauf) und im Belebtschlamm  $K_p$ . Die Kläranlagenbetriebsparameter umfassen neben dem Kläranlagentyp (kommunale oder industrielle Anlage) u.a. typische einwohnerspezifische Kennwerte wie z.B. Zulaufmenge, Feststoffgehalt oder  $BSB_5$ . Dabei können entweder die Standardwerte aus dem Modell oder anlagenspezifische Kennwerte eingegeben werden.

Die Anwendung von SimpleTreat für ausgewählte Stoffe (Benzotriazol, Bisphenol A, Carbamazepin, Clarithromycin, Diclofenac,  $17\beta$ -Estradiol, Ibuprofen, Metolachlor) zeigte den Einfluss unterschiedlicher chemisch-physikalischer Stoffeigenschaften auf die modellierte Entfernung durch Adsorption und biologischen Abbau und untermauerten so die Auswahl passender Kenngrößen. Für die Adsorption ergab die Modellierung, dass der  $K_{oc}$  die dominante Kenngröße für die Adsorption darstellt und für die biologische Abbaubarkeit konnte das Modell den Einfluss der Schwankungsbreite an publizierten Abbaukonstanten auf die Entfernung über diesen Prozess visualisieren (vgl. Abbildung 10 im Kapitel Ergebnisse und Diskussion) (Dreier 2024, Forti 2024).

### **Kriterien für die Abschätzung der Adsorption**

Bei der Adsorption einer Substanz an das Adsorbens sind sowohl chemische als auch physikalische Prozesse wirksam. Im Gegensatz zu den chemischen Prozessen bei denen es zu einer chemischen Veränderung durch chemische Bindungen zwischen Molekülen bzw. Molekülgruppen und der Adsorbentoberfläche kommt, sind die physikalischen Prozesse (Van-der-Waals-Kräfte) deutlich schwächer. Prinzipiell wirkt sich auch die Löslichkeit von Substanzen auf die Sorptionsfähigkeit aus, wobei Stoffe umso besser adsorbieren, je geringer die Wasserlöslichkeit und die Polarität sind.

Basierend auf den recherchierten chemisch-physikalischen Daten und dem Benchmarkdatensatz von Margot et al. (2015) erfolgte die Festlegung der Kriterien für die Kategorisierung der Adsorbierbarkeit anhand der folgenden fünf Schritte:

1. **Wahl der Kenngröße:** Auswahl potentiell geeigneter Stoffeigenschaften aus dem Datenset
2. **Identifikation von Grenzen:** Festlegung der Grenzen für die Einstufung in Kategorien. In einem ersten Schritt erfolgte dies basierend auf Literaturangaben.
3. **Einstufung:** Kategorisierung der Stoffe in gut, mittel, schlecht adsorbierbar anhand der zuvor festgelegten Grenzen und der Medianwerte der in Schritt 1 ausgewählten chemisch-physikalischen Stoffeigenschaften.
4. **Evaluierung:** Vergleich der Einstufung mit dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015)
5. **Optimierung:** Iterative Anpassung der Grenzen für die Einstufung im Sinne einer Modellkalibrierung zur Maximierung der Übereinstimmung mit dem Benchmarkdatensatz.

Für **Schritt 1 (Wahl der Kenngröße)** lassen sich aus dem erhobenen Datensatz mehrere Kenngrößen heranziehen. Einer davon ist der Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizient  $K_{OW}$ . Er ist ein Maß dafür, wie hydrophob eine Substanz ist, d.h. je höher der  $K_{OW}$ , umso hydrophober ist eine Chemikalie und umso mehr tendiert sie zur Adsorption. Der  $\log K_{OW}$  wurde z.B. von Rogers (1996) eingesetzt, um das Verhalten organischer Schadstoffe während der Abwasserreinigung und den Verbleib in der Schlammmatrix zu charakterisieren. Es handelt sich dabei um die am besten verfügbare chemisch-physikalische Eigenschaft zur Beschreibung der Sorptionsfähigkeit in den verwendeten Chemikalien-Datenbanken. Da der  $K_{OW}$  das Verhalten von neutralen und undissoziierten Substanzen beschreibt, ist für andere Zustände eine Korrektur notwendig (vgl. Struijs, 2014). Im SimpleTreat Modell erfolgt diese Korrektur durch die Eingabe der chemischen Klasse (neutral, sauer, basisch) und des pKa-Wertes automatisiert.

Der Adsorptionskoeffizient  $K_{OC}$  – der Verteilungskoeffizient zwischen Wasser und organischem Kohlenstoff im untersuchten Umweltmedium – ist eine weitere Kenngröße zur Beschreibung der Sorptionsfähigkeit, der im Rahmen der Datenrecherche erhoben bzw. dessen Datendichte vertieft wurde. Er ist ein Maß dafür, wie gut eine Chemikalie an organisches Material bindet und ist damit relevant für die Abschätzung des Verhaltens in kohlenstoffreichen Umweltmedien, wie z.B. Belebtschlamm. Je höher der  $K_{OC}$  ist, umso höher ist auch die Affinität zu organischen kohlenstoffhaltigen Kompartimenten und

damit die Tendenz zur Adsorption an den Schlamm. Auch bei dieser Kenngröße spielen die Substanzklasse und der pKa-Wert eine Rolle und werden z.B. in SimpleTreat durch die entsprechenden Eingaben angepasst.

In der Literatur wird für das adsorptive Verhalten an den Belebtschlamm auf Kläranlagen – wie einleitend beschrieben – der Verteilungskoeffizient zwischen Wasser und Boden, Sediment oder Klärschlamm  $K_d$  vorgeschlagen, der sowohl substanz- als auch schlammspezifisch ist (Poseidon, 2004; Joss et al., 2006). In der vertieften Datenrecherche zeigte sich, dass es für den  $K_d$  im Vergleich zum  $K_{ow}$  bzw. dem  $K_{oc}$  in den etablierten Datenbanken (vgl. Kap. 2.1) kaum Einträge gibt.

Für **Schritt 2 (Identifikation der Grenzen)** wurden im Rahmen der Optimierungsschleife unterschiedliche Ansätze verfolgt. In einem ersten Prozessdurchlauf (Durchlauf 1) wurden Grenzen aus der Literatur (Rogers, 1996; Fuchs et al., 2020; Zessner et al., 2022) untersucht (siehe Ansatz 1 in Tabelle 2).

Tabelle 2: Erste über Literatur erhobene Ansätze für die Kategorisierung einer Substanz in gut, mittel und schlecht adsorbierbar anhand der Kriterien  $\log K_{ow}$ ,  $\log K_{oc}$ .

Ansätze	SiWaWi-Ansatz 1 <sup>[1]</sup>	Kow-Ansatz 1 <sup>[2]</sup>	Koc-Ansatz 1 <sup>[3]</sup>	Kow-Ansatz 2 <sup>[4,5]</sup>	Koc-Ansatz 2 <sup>[5,6]</sup>
<b>Gut</b>	$\log K_{oc} > 4,5$ $\log K_{ow} > 5$	$\log K_{ow} > 4$	$\log K_{oc} > 3,7$	$\log K_{ow} > 5,5$	$\log K_{oc} > 4,5$
<b>Mittel</b>	$3 < \log K_{ow} \leq 5$	$2,5 < \log K_{ow} \leq 4$	$2,2 < \log K_{oc} \leq 3,7$	$3,2 < \log K_{ow} \leq 5,5$	$3,3 < \log K_{oc} \leq 4,5$
<b>Schlecht</b>	$\log K_{ow} \leq 3$ Lösl. > 1 mg/L	$\log K_{ow} \leq 2,5$	$\log K_{oc} \leq 2,2$	$\log K_{ow} \leq 3,2$	$\log K_{oc} \leq 3,3$

[1] SiWaWi-Kategorisierung, Lösl. ... Löslichkeit (Zessner et al., 2022),

[2] Rogers et al. (1996),

[3] Fuchs et al. (2020),

[4] Rückrechnung aus empirischem Modell  $K_d = 0,53 \times \log K_{ow} + 1,18$  (Lakshminarasimman et al., 2018),

[5] Grenzen aus Poseidon (2004):  $\log K_d > 4,1$  (gut adsorbierbar),  $\log K_d \leq 2,9$  (schlecht adsorbierbar),

[6] Rückrechnung aus  $K_d = K_{oc} \times f_{oc}$  ( $f_{oc}$  = von 0,37 lt. Struijs (2014) analog zum SimpleTreat-Standardfaktor).

Im Rahmen der Optimierung (siehe Schritt 5) wurden die Grenzen angepasst. Bei der 1. Optimierungsschleife erfolgte die Adaptierung durch eine Rückrechnung der Grenzen für den  $K_{ow}$  und den  $K_{oc}$  aus dem  $K_d$ -Wert über empirische Modelle aus der Literatur (siehe Ansatz 2 in Tabelle 2). Die Grenzen für den  $K_d$ -Wert wurden dabei aus Poseidon

(2004) abgeleitet:  $\log K_d = 4,1$  (Grenze gut/mittel adsorbierbar) und  $\log K_d = 2,9$  (Grenze mittel/schlecht adsorbierbar). Die Rückrechnung für den  $K_{ow}$  basierte auf Lakshminarasimman et al. (2018):  $K_d = 0,53 \times \log K_{ow} + 1,18$ . Für den  $K_{oc}$  ( $K_d = K_{oc} \times f_{oc}$ ) wurde ein Anteil an organischem Kohlenstoff ( $f_{oc}$ ) von 0,37 lt. Struijs (2014) analog zum SimpleTreat-Standardfaktor herangezogen.

In **Schritt 3 (Einstufung)** wurden jene Stoffe für die es Benchmarkdaten von Margot et al. (2015) gibt ( $N = 95$ , siehe Tabelle A 9 im Anhang) anhand der festgelegten Grenzen eingestuft. Da die zwei Entfernungsmechanismen Adsorption und biologischer Abbau parallel stattfinden, stehen sie miteinander in Wechselwirkung und die Benchmarkdaten sowie Modellergebnisse (SimpleTreat) zeigen, dass für Substanzen, die biologisch gut abbaubar sind, dieser Mechanismus gegenüber der Adsorption dominiert. Aus diesem Grund wurden jene Stoffe, die gut biologisch abbaubar sind und lt. Margot et al. (2015) zu  $\geq 72\%$  (d.h. 80% abzüglich einer 10%-igen Unschärfe) über diesen Pfad entfernt werden, nicht in die Auswertungen zur Festlegung der Kriterien für die Kategorisierung der Adsorbierbarkeit miteinbezogen. Durch diesen Filter reduzierte sich der Benchmarkdatensatz für die Evaluierung von 95 auf 72 Substanzen.

Die Einstufung der Stoffe wurde in **Schritt 4 (Evaluierung)** auf die Übereinstimmung mit dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015) überprüft. Dafür wurden auch die Benchmarkdaten nach demselben Schema in gut, mittel und schlecht adsorbierbar eingestuft. Die Grenze zwischen gut und mittel adsorbierbar wurde dabei nicht exakt bei 80% sondern bei 72% gesetzt, was eine 10%-ige Unsicherheit einberechnet. Dasselbe gilt für die Grenze zwischen mittel und schlecht adsorptiv entfernbar, wodurch sich die Grenze von  $\leq 20$  auf  $\leq 22\%$  verschiebt.

Je nach Grad der Übereinstimmung erfolgt in **Schritt 5** eine **Optimierung**. Diese Optimierungsschleife startet den Prozess wieder bei Schritt 2, zur Anpassung der Grenzen. Die adaptierten Grenzen führen zu einer Neueinstufung, die wiederum evaluiert wird. Der Prozess wird so lange durchlaufen, bis bei der Evaluierung kein besseres Ergebnis mehr erzielt werden kann.

Das Ergebnis des 5-Schritt-Prozesses ist sowohl die Auswahl der geeigneten Kenngröße als auch die Festlegung der Grenzen für die Kategorisierung in SimpleEstFATE. Anhand der so festgelegten Kategorien wurden im Zuge einer Anwendung des Modells am Ende alle Stoffe im Hinblick auf ihre Adsorbierbarkeit eingestuft, für die die entsprechenden Daten

vorhanden waren. Hierbei wurden im Gegensatz zum 5-Schritt-Prozess auch jene Stoffe kategorisiert, für die die Benchmarkdaten eine gute Abbaubarkeit vorhersagen.

### **Kriterien für die Abschätzung der Abbaubarkeit**

Die Verwertbarkeit eines Substrates über den biologischen Abbau ist von den chemischen Eigenschaften eines Spurenstoffes sowie der jeweiligen Biozönose und ihrer Adaptierung an das Substrat abhängig. Chemikalien können entweder direkt von den Mikroorganismen abgebaut (metabolisiert) werden oder es erfolgt ein co-metabolischer Abbau über ein anderes Primärsubstrat (Margot et al., 2015), wobei das Enzymsystem beim Abbau eines Primärsubstrates ausgebildet wird.

Idealerweise umfasst eine allgemeine Teststrategie von Chemikalien auf ihre Abbaubarkeit lt. OECD Leitfaden für das Testen von organischen Chemikalien (OECD, 2006) Untersuchungen auf unterschiedlichen Komplexitätsebenen. Den ersten Schritt bilden Screeningtests zur leichten biologischen Abbaubarkeit, sogenannte *Ready biodegradability Tests*, kurz *Ready Tests*. *Ready Tests* werden unter aeroben Bedingungen und hohen Konzentrationen der Testsubstanz im Bereich von 2-100 mg/l durchgeführt. Der biologische Abbau wird aus unspezifischen Parametern (DOC, BSB, CO<sub>2</sub>-Produktion) ermittelt. Als Inokulum wird nicht adaptierte Biomasse aus kommunalem Abwasser, Belebtschlamm oder Kläranlagenablauf verwendet. Ein positives Ergebnis indiziert einen schnellen biologischen Abbau in den meisten Umweltkompartimenten, inkl. Kläranlagen. Bei einem negativen Ergebnis muss auf eine höhere Komplexitätsebene gewechselt werden. Dies kann entweder ein Screeningtest für inhärent biologische Abbaubarkeit (*Inherent biodegradability Test*, kurz *Inherent Test*) oder ein Simulationstest sein. *Inherent Tests* bieten eine höhere Expositionszeit und ein geringeres Konzentrationsniveau (Testkonzentration-Inokulum-Verhältnis, ev. mit adaptierter Biomasse). Verglichen mit *Ready Tests* steigt dadurch die Chance auf ein positives Ergebnis. Aufgrund der begünstigten Testbedingungen kann aus einem positiven Ergebnis nicht allgemein auf einen schnellen biologischen Abbau unter Umweltbedingungen geschlossen werden. Diese Unsicherheit in der Übertragbarkeit von Ergebnissen zeigt sich auch in den im Vergleich zum *Ready Test* geringeren Abbauraten (siehe Tabelle 3).

Im Gegensatz zu Screeningtests ergeben Simulationstests Daten zum biologischen Abbau unter bestimmten Bedingungen für spezifische Umweltkompartimente. Dabei wird die Abbaubarkeit durch Transformation im Boden, aquatischem Sediment, Oberflächenwasser (Süßwasser oder Meerwasser) oder Kläranlagen nach OECD Norm (z.B. Test No. 303, 307-

309, 314) simuliert. Idealerweise reflektieren die Testbedingungen auch die spezifischen Umweltbedingungen um möglichst repräsentative Daten zu generieren. Die Testkonzentrationen sind gering (1-100 µg/l), sodass die Abbaukinetik repräsentativ für das spezifische Umweltkompartiment ist.

Basierend auf den recherchierten Daten zur Abbaubarkeit aus den etablierten Datenbanken und dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015) erfolgte die Festlegung der Kriterien für die Kategorisierung der Abbaubarkeit anhand der folgenden fünf Schritte:

1. **Wahl der Kenngröße:** Auswahl geeigneter Kenngrößen aus dem Datensatz.
2. **Identifikation von Grenzen:** Festlegung der Grenzen für die Einstufung in Kategorien.
3. **Einstufung:** Kategorisierung der Stoffe in gut, mittel, schlecht abbaubar anhand der zuvor festgelegten Grenzen und der Medianwerte der in Schritt 1 ausgewählten Kenngrößen.
4. **Evaluierung:** Vergleich der Einstufung mit dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015).
5. **Optimierung:** Iterative Anpassung der Grenzen für die Einstufung im Sinne einer Modellkalibrierung zur Maximierung der Übereinstimmung mit dem Benchmarkdatensatz.

Für **Schritt 1 (Wahl der Kenngröße)** stand im ursprünglich erhobenen Datensatz eine Kenngröße zur Einstufung der Abbaubarkeit zur Verfügung, nämlich der  $DT_{50}$ , hier als Halbwertszeit bezeichnet. Diese Daten wurden im Rahmen der Erweiterung des Datensatzes ergänzt und in Summe umfasst das Datensatz 425  $DT_{50}$ -Werte. Über zwei Drittel davon stammen aus Vorhersagen (Modellierung), der überwiegende Teil aus der Norman-Datenbank. Etwa 30% der Daten sind Messergebnisse von OECD-Simulationstests, die zum überwiegenden Teil aus Simulationstests für das Medium Wasser-Sediment, teilweise auch für Wasser beruhen. Der Datensatz für die Auswertung zur Kategorisierung umfasst 63 Medianwerte, basierend auf 148 Einzelmesswerten, wovon ca. 60% auf Vorhersagen (der Großteil davon aus der Norman-Datenbank) zurückgehen.

Im Rahmen der Erweiterung und Verbesserung des Datensatzes wurden auch Daten zur Abbaubarkeit aus Ergebnissen von OECD-Screeningtests, sowohl *Ready Tests* (OECD Testserie 301 und 310) als auch ergänzend bzw. alternativ *Inherent Tests* (OECD Testserie 302) erhoben. Diese dienen einem ersten Screening der Abbaubarkeit von Chemikalien

und sind Teil der allgemeinen Teststrategie lt. OECD (2006). Für 111 Substanzen konnten Ergebnisse von Screeningtests in der ECHA-Datenbank erhoben werden. Für die anderen Substanzen lagen entweder keine REACH-Dossiers vor oder die Dossiers beinhalteten keine Screening Testergebnisse. Für 43 dieser 111 Substanzen gibt es Informationen zum Verhalten auf Kläranlagen im Benchmarkdatensatz von Margot et al. (2015).

Für **Schritt 2 (Identifikation der Grenzen)** wurden im Rahmen der Optimierungsschleife unterschiedliche Ansätze verfolgt. In einem ersten Prozessdurchlauf wurde der SiWaWi-Ansatz untersucht. Im Projekt SiWaWi wurde eine  $DT_{50}$ -Grenze von einem Tag für gut abbaubare Stoffe festgelegt (Tabelle 3). Unter der Hypothese, dass der Abbau über eine Reaktion 1. Ordnung passiert, erfolgte zur Vergleichbarkeit eine Umrechnung der  $DT_{50}$ -Werte in Abbaukonstanten basierend auf der Formel  $DT_{50} = \ln(2)/k_{bio}$ . Die Abbaukonstante  $k_{bio}$  repräsentiert die Abbaurate pro Zeiteinheit (Tag oder Stunde). Im Rahmen der Optimierungsschleife wurden neue Grenzen definiert, wobei diese auf die Daten aus OECD-Screeningtests angewendet wurden, da auch aus den Ergebnissen der *Ready* und *Inherent Tests* Abbauraten abgeleitet werden können, die für die Abschätzung bzw. Modellierung des Abbaus auf Kläranlagen angewendet werden können (EC, 2003; OECD, 2006; Struijs, 2014; Comber et al., 2019). Die Zuordnung der Testergebnisse zu Abbauraten gemäß Technical Guidance Document (TGD) der Europäischen Kommission (EC, 2003) kann Tabelle 3 und Tabelle 4 entnommen werden. Beim *Ready Test* wird zusätzlich danach unterschieden, ob das 10-Tage-Fenster erreicht wurde ( $k_{bio} = 1 \text{ h}^{-1}$ ) oder nicht ( $k_{bio} = 0,3 \text{ h}^{-1}$ ). Diese Abschätzung der Reaktionsraten  $k_{bio} [\text{h}^{-1}]$  gemäß TGD (EC, 2003) wird auch im SimpleTreat-Modell als eine von drei Methoden zur Ermittlung der biologischen Abbaubarkeit angewendet, wenn keine spezifischen Abbauraten zur Verfügung stehen (Struijs, 2014). Analog dazu empfiehlt die US-EPA (2000) für eine Modellierung des Verhaltens in der Abwasserreinigung in einem interemistischen Leitfaden die Verwendung von Screeningtests um die Eingangsdaten zur biologischen Abbaubarkeit herzuleiten (Tabelle 4).

Für **Schritt 3, die Einstufung** der biologischen Abbaubarkeit wurden jene Stoffe für die es Benchmarkdaten von Margot et al. (2015) gibt ( $N = 95$ , siehe Tabelle A 9 im Anhang) anhand der festgelegten Grenzen (Tabelle 3) eingestuft. Aufgrund der Wechselwirkungen zwischen Abbaubarkeit und Adsorbierbarkeit wurden jene Stoffe, die gut adsorbierbar sind und lt. Margot et al. (2015) zu  $\geq 72\%$  (d.h. 80% abzüglich einer 10%-igen Unsicherheit) über Adsorption entfernt werden, nicht in diese Einstufung miteinbezogen.

Tabelle 3: Untersuchte Ansätze für die Kategorisierung einer Substanz in gut, mittel und schlecht abbaubar anhand von DT<sub>50</sub>-Werten und Ergebnissen aus Screening Tests (*Ready* bzw. *Inherent Tests*).

Ansätze → Kategorien ↓	SiWaWi- Ansatz <sup>[1]</sup> DT <sub>50</sub> [h]	SiWaWi- Ansatz k <sub>bio</sub> <sup>[2]</sup> [h <sup>-1</sup> ]	Ergebnis OECD- Screeningtest	TGD- Ansatz <sup>[3]</sup> DT <sub>50</sub> [h]	TGD- Ansatz <sup>[3]</sup> k <sub>bio</sub> [h <sup>-1</sup> ]
<b>Gut</b>	DT <sub>50</sub> < 24	> 0,029	Leicht abbaubar <sup>[a1]</sup>	0,69	1
			Leicht abbaubar <sup>[a2]</sup>	2,3	0,3
<b>Mittel</b>	24 ≤ DT <sub>50</sub> < 120	0,06 < k <sub>bio</sub> ≤ 0,029	Inhärent abbaubar <sup>[b]</sup>	6,9	0,1
<b>Schlecht</b>	DT <sub>50</sub> ≥ 120	≤ 0,06	Nicht abbaubar <sup>[c]</sup>	-	0

[1] SiWaWi-Kategorisierung, ursprünglich in Tagen (Zessner et al., 2022), [2] berechnet aus DT<sub>50</sub>, [3] EC (2003), [a1] leicht biologisch abbaubar (readily biodegradable), [a2] leicht biologisch abbaubar, 10 d-Fenster nicht erfüllt (readily biodegradable, not fulfilling 10-day window), [b] inhärent biologisch abbaubar, erfüllt die spezifischen Kriterien (inherently biodegradable), [c] nicht biologisch abbaubar (no biodegradation)

Tabelle 4: Einstufung der biologischen Abbaubarkeit nach Herleitung der Halbwertszeiten nach dem Technical Guidance Document (EC, 2003) und der US-EPA (2000).

Ergebnis Screeningtest	Kategorie	DT <sub>50</sub> [h] EC, 2003	Entfernung [%] <sup>[1]</sup>	DT <sub>50</sub> [h] US-EPA
<b>Leicht biologisch abbaubar<sup>[a]</sup></b>	gut abbaubar	0,69	95	1
<b>Leicht biologisch abbaubar<sup>[a]</sup>, 10 d-Fenster nicht erfüllt</b>	gut abbaubar	2,3	80	3
<b>Inhärent biologisch abbaubar<sup>[b]</sup>, erfüllt spezifische Kriterien</b>	mittel abbaubar	6,9	60	10
<b>Inhärent biologisch abbaubar<sup>[b]</sup>, spezifische Kriterien nicht erfüllt</b>	schlecht abbaubar	-	0	30*
<b>Nicht biologisch abbaubar<sup>[c]</sup></b>				10 000

[a]...readily biodegradable, [b]... inherently biodegradable, [c]...no biodegradation; [1] Struijs (2014), \* je nach Ergebnis des *Inherent Tests* erfolgen noch Abstufungen in sehr langsam abbaubar (DT<sub>50</sub> = 30 h) oder nicht biologisch abbaubar (10 000 h).

Die eingestuften Stoffe wurden in **Schritt 4 (Evaluierung)** auf die Übereinstimmung mit dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015) überprüft.

Das Ergebnis des 5-Schritt-Prozesses ist sowohl die Auswahl der Kenngröße als auch die Festlegung der Grenzen für die Kategorisierung. Anhand der so festgelegten Kategorien wurden am Ende zur Anwendung von SimplEstFATE alle Stoffe, für die die erforderlichen Kenngrößen vorliegen, eingestuft. Hierbei wurden im Gegensatz zum 5-Schritt-Prozess auch jene Stoffe kategorisiert, für die die Benchmarkdaten eine gute Adsorbierbarkeit vorhersagen.

# 3 Ergebnisse und Diskussion

## 3.1 Kategorisierung und Austragspfade

In diesem Kapitel werden Frachtberechnungen in Ein- und Austragspfaden der Siedlungswasserwirtschaft durchgeführt und zu einer Stoffbilanz verknüpft. Für die Frachtberechnungen werden mittlere Konzentrationsniveaus auf Basis der Medianwerte der in 58 unterschiedlichen Studien gemessenen Konzentrationen und der mittleren Wasserbilanzen für zwei reale Beispiele aus Österreich, ein Mischsystem und ein Trennsystem, herangezogen. Dazu wurden die Mediankonzentrationen aus Tabelle A 2 bis Tabelle A 6 mit den Wassermengen nach Abbildung 1 und Abbildung 2 für ein typischen Mischsystem und ein typischen Trennsystem multipliziert. Daraufhin werden die Ergebnisse für die unterschiedlichen Stoffkategorien dargestellt und die im Projekt SiWaWi (Zessner et al., 2022) ausformulierten Hypothesen zu den dominanten Austragspfaden aus der Siedlungswasserwirtschaft für Stoffe in Abhängigkeit der Zuordnung zu 27 Stoffkategorien unter Berücksichtigung des dominanten Kanalisationssystems adaptiert.

Die Einzelergebnisse der Stoffbilanzen für alle Stoffe, für die diese berechnet werden konnten, sind im Anhang in Tabelle A 7 und Tabelle A 8 jeweils für das Mischsystem und das Trennsystem dargestellt. Für die meisten Stoffe zeigt die Gegenüberstellung von Einträgen und Austrägen aus der Siedlungswasserwirtschaft einen Bilanzfehler. Mehrheitlich (68% der Fälle für das Mischsystem und 80% der Fälle für das Trennsystem) ist die Differenz positiv. Bei den gut und mäßig abbaubaren Stoffen entspricht eine positive Differenz dem erwarteten Abbau bzw. Umbau in der Kläranlage. Für die übrigen Stoffe sowie für den Anteil mit einer negativen Differenz handelt es sich um einen tatsächlichen Bilanzfehler. Angesichts der großen Heterogenität des verwendeten Datensatzes werden jedoch der Median des Bilanzfehlers von jeweils +31% bzw. -23% im Mischsystem und +34% bzw. -13% im Trennsystem für die spezifische Fragestellung als unkritisch und für das realistisch erreichbare Genauigkeitsniveau als gut betrachtet. Basierend auf den Mittelwerten der Bilanzfehler würden ähnliche Werte errechnet werden. Tabelle A 7 und Tabelle A 8 des Anhangs zeigen auch die frachtbezogene Aufteilung der Gesamteinträge zwischen Schmutzwasser und Niederschlagswasser, die gut mit der Zuordnung des Haupteintragspfades nach der vertieften Recherche der Herkunft und Anwendungsbereiche übereinstimmt.

Abbildung 3, Abbildung 4 und Abbildung 5 zeigen den frachtbezogenen Anteil der Austragspfade für die 63 Stoffe aus Tabelle 1, kategorisiert nach den 27 im SIWAWI-Projekt definierten Kategorien. Dabei wurde, sofern verfügbar, der Informationsgehalt von Benchmarkdaten höher gewichtet als die Einstufung über chemisch-physikalische Eigenschaften aus Datenbanken.

Abbildung 3 stellt den frachtbezogenen Anteil der Austragspfade für die Stoffe dar, die überwiegend über das Schmutzwasser in Siedlungsgebiete eingetragen werden (siehe Kap. 2.2.2 für die Definition der Haupteintragspfade). Fünf der neun Kategorien sind durch 3-8 auswertbare Stoffe vertreten, zwei Kategorien nur durch einen Stoff. Für die Kategorien „gut abbaubar und gut adsorbierbar“ sowie „gut abbaubar und mittel adsorbierbar“ konnten keine Vertreter mit ausreichender Datenverfügbarkeit für eine Quantifizierung aller Pfade gefunden werden. Die Ergebnisse zeigen generell eine gute Übereinstimmung mit den im Projekt SiWaWi aufgestellten Hypothesen. Kleinere Adaptierungen in Hinblick auf die Einschätzung der Relevanz der Austragspfade je Kategorie waren jedoch im Bereich Mischwasserüberlauf und Regenkanalisation erforderlich.

Bei den gut abbaubaren und schlecht adsorbierbaren Stoffen werden ca. 10-15% der Einträge über Mischwasserüberläufe und Kläranlagenabläufe emittiert, da ein Großteil der Einträge in Kanal und Kläranlage ab- bzw. umgebaut wird. Bei den schlecht abbaubaren Stoffen ist entweder der Klärschlamm mit ca. 75% für die gut adsorbierbaren Stoffe oder der Kläranlagenablauf mit ca. 85% für die schlecht adsorbierbaren Stoffe der eindeutig dominierende Austragspfad. Im Fall einer mittleren Abbaubarkeit und schlechten Adsorbierbarkeit passen die Ergebnisse auch gut zu den Hypothesen aus dem Projekt SIWAWI, aber sie sind weniger eindeutig als bei den Extremfällen. Vor allem der Anteil des Kläranlagenablaufes schwankt zwischen ca. 10% und 70% in einem weiten Bereich. Der Vergleich der beiden Kanalsysteme zeigt ein ähnliches und konsistentes Muster, allerdings mit einem plausibel höheren Anteil der Emissionen über den Regenwasserkanal und einem entsprechend geringeren Anteil über den Mischwasserüberlauf im überwiegenden Trennsystem, wobei beide immer unter 20% bleiben. Die zu erwartenden Hauptaustragspfade sind in Tabelle 5 für das Mischsystem und in Tabelle 6 für das Trennsystem dargestellt.

Sehr vielschichtig sind die Ergebnisse für die Stoffe mit überwiegendem Eintrag über Niederschlagswasser (Abbildung 4). Für alle sechs auswertbaren Kategorien werden – unabhängig von dem Grad der Abbaubarkeit und Adsorbierbarkeit – im Trennsystem

zwischen 50% und 75% der Einträge über den Regenwasserkanal emittiert, was auch sehr gut mit den aufgestellten Hypothesen übereinstimmt. Im Mischsystem spielt der Regenwasserkanal hingegen eine untergeordnete Rolle. Der Mischwasserüberlauf hat in diesem Fall einen Anteil von ca. 15-30%, während der Klärschlamm einen Anteil von 40-50% bei den mittel bis gut adsorbierbaren Stoffen hat. Der Kläranlagenablauf spielt für die mittel abbaubaren und schlecht adsorbierbaren bzw. für die schlecht abbaubaren und mittel adsorbierbaren potentiell eine relevante Rolle, allerdings schwanken die basierend auf den Messwerten berechneten Anteile ziemlich stark zwischen ungefähr 5% und 60%. Eine Darstellung der zu erwartenden Hauptaustragspfade ist auch hier in Tabelle 5 für das Mischsystem und in Tabelle 6 für das Trennsystem dargestellt.

Abbildung 5 zeigt die Ergebnisse für die Stoffe mit einem gemischten Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser. Da nur eine der drei „gut abbaubar“ Kategorien durch einen Stoff vertreten ist (die beiden anderen weisen keine Vertreter auf), basieren die Aussagen für diese Gruppe überwiegend auf Expert:inneneinschätzung. Die einzige verfügbare Substanz (Bisphenol A) fällt in die Kategorie gut abbaubar, mittel adsorbierbar und weist das erwartete Muster auf, nämlich eine tendenzielle Dominanz vom Mischwasserüberlauf bzw. Regenwasserkanal je nach System (allerdings unter 30-40%), gefolgt von Klärschlamm. Bei den Kategorien „mittel abbaubar“ und „schlecht abbaubar“ erstreckt sich der Anteil der Mischwasserüberläufe bzw. der Regenwasserkanalisation je nach System von 10% bis 50%. Für die mittel- oder gut adsorbierbaren Substanzen, die auch schlecht oder mittel abbaubar sind, dominiert der Klärschlamm eindeutig als Austragspfad, während der Kläranlagenablauf sehr eindeutig bei schlecht abbaubaren und schlecht adsorbierbaren Stoffen dominiert. Die einzige Kategorie, in der die Relevanz der drei verschiedenen Austragspfade (Kläranlagenablauf, Klärschlamm und entweder Mischwasserüberlauf oder Regenwasserkanal je nach System) in etwa ausgeglichen ist, sind die schlecht abbaubaren und mittel adsorbierbaren Substanzen. Eine Zusammenstellung der zu erwartenden Hauptaustragspfade aller Kategorien ist in Tabelle 5 für das Mischsystem und in Tabelle 6 für das Trennsystem zu finden.

Abbildung 3: Anteil des Austrages aus Siedlungsgebieten über vier verschiedene Pfade für Stoffe, die hauptsächlich über das Schmutzwasser in das System gelangen. Oben: Auswertung am Beispiel eines Mischsystems; unten: Auswertung am Beispiel eines Trennsystems. N: Stoffanzahl in jeder Kategorie. Hinweis: die Kategorisierung beruht auf dem im SIWAWI-Projekt entwickelten Ansatz, der mit Information aus Benchmarkdaten kombiniert wurde. Das optimierte Ergebnis nach Anpassung der Kategorien ist in Abbildung 11 und Tabelle 9 dargestellt.

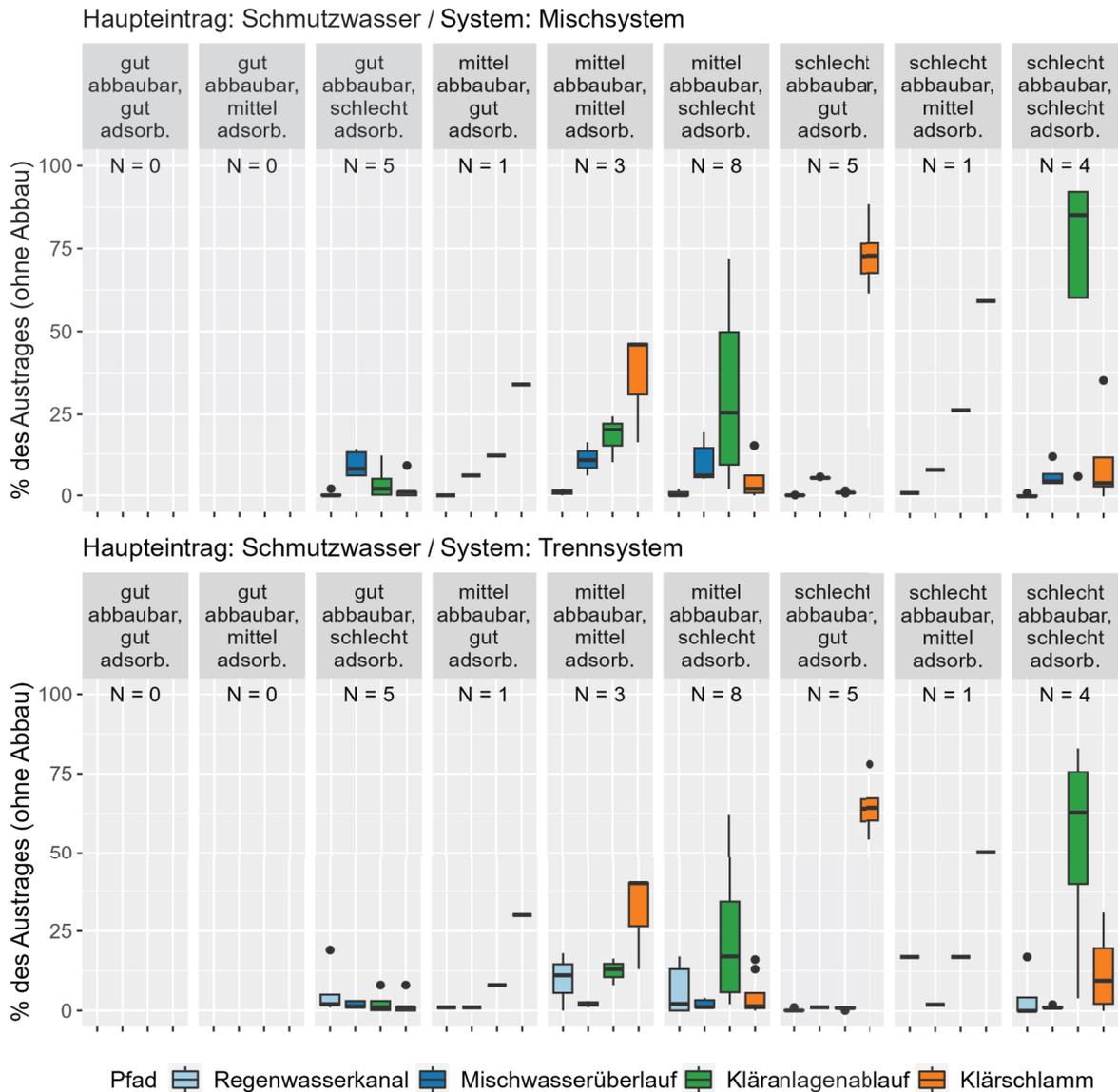


Abbildung 4: Anteil des Austrages aus Siedlungsgebieten über vier verschiedene Pfade für Stoffe, die hauptsächlich über das Niederschlagswasser in das System gelangen. Oben: Auswertung am Beispiel eines Mischsystems; unten: Auswertung am Beispiel eines Trennsystems. Hinweis: die Kategorisierung beruht auf dem im SIWAWI-Projekt entwickelten Ansatz, der mit Information aus Benchmarkdaten kombiniert wurde. Das optimierte Ergebnis nach Anpassung der Kategorien ist in Abbildung 12 und Tabelle 9 dargestellt.

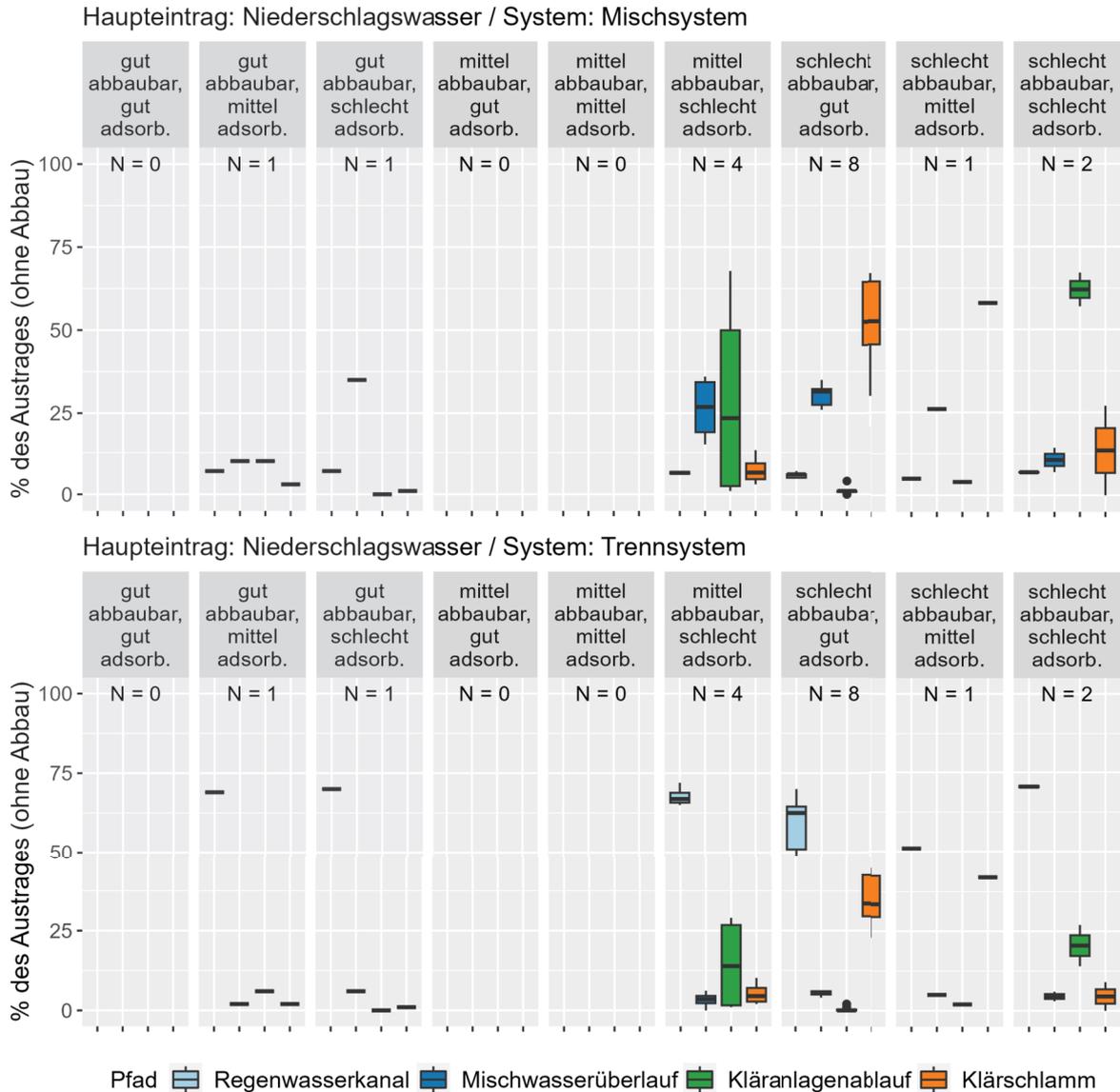


Abbildung 5: Anteil des Austrages aus Siedlungsgebieten über vier verschiedene Pfade für Stoffe, die über gemischte Einträge in das System gelangen. Oben: Auswertung am Beispiel eines Mischsystems; unten: Auswertung am Beispiel eines Trennsystems. N: Stoffanzahl in jeder Kategorie. Hinweis: die Kategorisierung beruht auf dem im SIWAWI-Projekt entwickelten Ansatz, der mit Information aus Benchmarkdaten kombiniert wurde. Das optimierte Ergebnis nach Anpassung der Kategorien ist in Abbildung 13 und Tabelle 9 dargestellt.

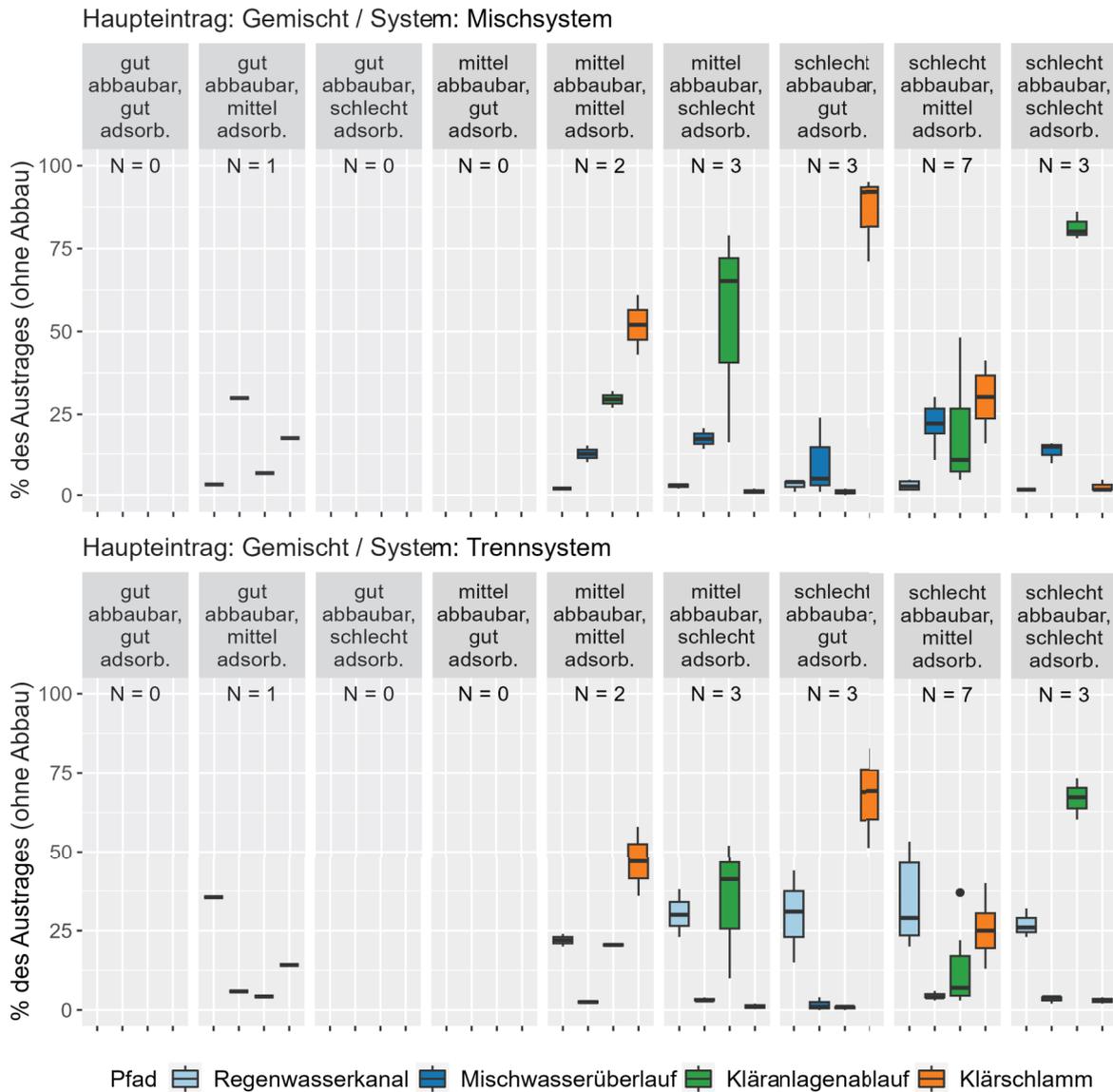


Tabelle 5: Dominanz der Austragspfade für Stoffe aus der Siedlungswasserwirtschaft in Abhängigkeit der Zuordnung zu Stoffkategorien für ein Kläranlageneinzugsgebiet mit überwiegend Mischsystem (KA = Kläranlage, Mischwasserü. = Mischwasserüberlauf).

Kategorie	Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser	Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser	Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser
gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar	Mischwasserü. > Regenwasserkanal, Klärschlamm und KA-Ablauf <sup>1</sup>	Mischwasserü. > Regenwasserkanal, Klärschlamm und KA-Ablauf <sup>1</sup>	Mischwasserü. > Regenwasserkanal > Klärschlamm > KA-Ablauf <sup>1</sup>
gut in KA abbaubar, mittel adsorbierbar	Mischwasserü. > Regenwasserkanal > Klärschlamm und KA-Ablauf <sup>1</sup>	<b>Mischwasserü.</b> <sup>2</sup> > Klärschlamm > KA-Ablauf und Regenwasserkanal	Mischwasserü. > Regenwasserkanal > Klärschlamm > KA-Ablauf <sup>1</sup>
gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar	<b>Mischwasserü.</b> <sup>2</sup> > KA-Ablauf > Klärschlamm und Regenwasserkanal	Mischwasserü. > KA-Ablauf > Klärschlamm und Regenwasserkanal <sup>1</sup>	<b>Mischwasserü.</b> <sup>2</sup> > Regenwasserkanal > KA-Ablauf und Klärschlamm
mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar	<b>Klärschlamm</b> <sup>2</sup> > Mischwasser und KA-Ablauf > Regenwasserkanal	Klärschlamm > Mischwasserü. > KA-Ablauf und Regenwasserkanal <sup>1</sup>	Mischwasserü. > Regenwasserkanal > Klärschlamm > KA-Ablauf <sup>1</sup>
mittel in KA abbaubar, mittel adsorbierbar	<b>Klärschlamm</b> <sup>2</sup> > KA-Ablauf > Mischwasserü. > Regenwasserkanal	<b>Klärschlamm &gt; KA-Ablauf und Mischwasserü.</b> <sup>2</sup> > Regenwasserkanal	<b>Mischwasserü.</b> <sup>2</sup> > Regenwasserkanal und Klärschlamm und KA-Ablauf
mittel in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar	<b>KA-Ablauf</b> <sup>2</sup> > Mischwasserü. > Klärschlamm > Regenwasserkanal	<b>KA-Ablauf &gt; Mischwasserü.</b> <sup>2</sup> > Klärschlamm und Regenwasserkanal	<b>KA-Ablauf und Mischwasserü.</b> <sup>2</sup> > Regenwasserkanal und Klärschlamm
schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar	<b>Klärschlamm</b> <sup>2</sup> > Mischwasserü. > KA-Ablauf, Regenwasserkanal	<b>Klärschlamm</b> <sup>2</sup> > Mischwasserü. > KA-Ablauf und Regenwasserkanal	<b>Klärschl.</b> > <b>Mischwasserü.</b> <sup>2</sup> > Regenwasserkanal > KA-Ablauf
schlecht in KA abbaubar, mittel adsorbierbar	<b>Klärschlamm</b> <sup>2</sup> > KA-Ablauf > Mischwasserü. > Regenwasserkanal	<b>Klärschlamm &gt; KA-Ablauf und Mischwasserü.</b> <sup>2</sup> > Regenwasserkanal	<b>Klärschlamm &gt; KA-Ablauf &gt; Mischwasserü.</b> <sup>2</sup> > Regenwasserkanal >
schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar	<b>KA-Ablauf</b> <sup>2</sup> > Mischwasserü. > Klärschlamm und Regenwasserkanal	<b>KA-Ablauf</b> <sup>2</sup> > Mischwasserü. > Klärschlamm und Regenwasserkanal	<b>KA-Ablauf &gt; Mischwasserü.</b> <sup>2</sup> > Regenwasserkanal > Klärschlamm

<sup>1</sup> Konnte nicht quantitativ überprüft werden und beruht daher nur auf Expertjudgement.

<sup>2</sup> Identifizierbare Hauptaustragspfade sind fett dargestellt

Tabelle 6: Dominanz der Austragspfade für Stoffe aus der Siedlungswasserwirtschaft in Abhängigkeit der Zuordnung zu Stoffkategorien für eine Kläranlageneinzugsgebiet mit überwiegend Trennsystem (KA = Kläranlage, Mischwasserü. = Mischwasserüberlauf).

Kategorie	Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser	Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser	Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser
<b>gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar</b>	<i>Regenwasserkanal &gt; Mischwasserü. &gt; Klärschlamm und KA-Ablauf, <sup>1</sup></i>	<i>Regenwasserkanal &gt; Mischwasserü. &gt; Klärschlamm und KA-Ablauf<sup>1</sup></i>	<i>Regenwasserkanal &gt; Mischwasserü. &gt; KA-Ablauf und Klärschlamm<sup>1</sup></i>
<b>gut in KA abbaubar, mittel adsorbierbar</b>	<i>Regenwasserkanal &gt; Mischwasserü. &gt; Klärschlamm und KA-Ablauf<sup>1</sup></i>	<b>Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; Klärschlamm &gt; Mischwasserü. und KA-Ablauf</b>	<i>Regenwasserkanal &gt; Mischwasserü. &gt; KA-Ablauf und Klärschlamm<sup>1</sup></i>
<b>gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar</b>	<i>Regenwasserkanal &gt; KA-Ablauf und Mischwasserü. &gt; Klärschlamm</i>	<i>Regenwasserkanal &gt; Mischwasserü. &gt; KA-Ablauf und Klärschlamm<sup>1</sup></i>	<b>Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. &gt; KA-Ablauf und Klärschlamm</b>
<b>mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar</b>	<b>Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf &gt; Mischwasserü. und Regenwasserkanal</b>	<i>Regenwasserkanal &gt; Klärschlamm &gt; Misch- und KA-Ablauf<sup>1</sup></i>	<i>Regenwasserkanal &gt; Klärschlamm &gt; Misch- und KA-Ablauf<sup>1</sup></i>
<b>mittel in KA abbaubar, mittel adsorbierbar</b>	<b>Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf und Regenwasserkanal &gt; Mischwasserü.</b>	<b>Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; Regenwasserkanal und KA-Ablauf &gt; Mischwasserü.</b>	<b>Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; Klärschlamm &gt; Mischwasserü und KA-Ablauf</b>
<b>mittel in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar</b>	<i>KA-Ablauf &gt; Mischwasserü., Klärschlamm und Regenwasserkanal</i>	<b>KA-Ablauf und Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. &gt; Klärschlamm</b>	<b>Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf &gt; Mischwasserü. und Klärschlamm</b>
<b>schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar</b>	<b>Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf, Mischwasserü. und Regenwasserkanal</b>	<b>Klärschlamm &gt; Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. und KA-Ablauf</b>	<b>Regenwasserkanal &gt; Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. &gt; KA-Ablauf</b>
<b>schlecht in KA abbaubar, mittel adsorbierbar</b>	<b>Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf und Regenwasserkanal &gt; Mischwasserü.</b>	<b>Regenwasserkanal und Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf &gt; Mischwasserü.</b>	<b>Regenwasserkanal &gt; Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf &gt; Mischwasserü.</b>
<b>schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar</b>	<b>KA-Ablauf<sup>2</sup> &gt; Klärschlamm und Regenwasserkanal &gt; Mischwasserü.</b>	<b>KA-Ablauf &gt; Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. und Klärschlamm</b>	<b>Regenwasserkanal &gt; KA-Ablauf<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. und Klärschlamm</b>

<sup>1</sup> Konnte nicht quantitativ überprüft werden und beruht daher nur auf Expertjudgement.

<sup>2</sup> Identifizierbare Hauptaustragspfade sind fett dargestellt

## 3.2 Modellüberprüfung und -adaptierung

### 3.2.1 Einstufung der Substanzen anhand ihrer Adsorbierbarkeit

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse des 5-Schritt-Prozesses zur Festlegung der Kriterien für die Kategorisierung der Adsorbierbarkeit bestehend aus 1. Auswahl der Kenngrößen, 2. Identifikation von Grenzen, 3. Einstufung, 4. Evaluierung und 5. Optimierung dargestellt und diskutiert.

Tabelle 7 zeigt die Ergebnisse der Evaluierung (Schritt 4) und damit den Vergleich der Einstufung basierend auf Ansatz 1 und Ansatz 2 (siehe Tabelle 3) mit dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015). Dargestellt ist einerseits die Übereinstimmung über alle drei Kategorien (gut, mittel, schlecht adsorbierbar; in der Tabelle als „alle Kategorien“ bezeichnet) als prozentueller Anteil an Stoffen, der gleich eingestuft wurde wie im Benchmarkdatensatz. Andererseits wurde die Übereinstimmung für die einzelnen Kategorien (gut/mittel/schlecht) separat ausgewertet. Dieses Ergebnis ist sowohl als Quote dargestellt, d.h. die Anzahl an Stoffen, die gleich wie im Benchmarkdatensatz eingestuft wurde ( $N_{\text{überein}}$ ), im Verhältnis zur Summe der in der jeweiligen Kategorie eingestuften Stoffe ( $N_x$ ) als auch in Prozent (in der Tabelle mit „überein“ bezeichnet). Für den SiWaWi-Ansatz 1 liegt die gesamte Übereinstimmung bei 54%, während für den Ansatz 1 basierend auf den Kenngrößen  $K_{OW}$  und  $K_{OC}$  eine wesentlich geringere Übereinstimmung von 47 bzw. 36% erreicht wurde. In einer Optimierungsschleife wurden für den  $K_{OW}$ - und  $K_{OC}$ -basierten Ansatz 2 neue Grenzen aus Literaturwerten und empirischen Modellen aus der Literatur durch Rückrechnung über den  $K_d$ -Wert gewählt (Schritt 2). Die Neueinstufung (Schritt 3) gemäß Ansatz 2 führte in der Evaluierung zu einer deutlichen Verbesserung der Übereinstimmung (Tabelle 7). Der  $K_{OC}$ -basierte Ansatz 2 erreicht mit 65% die beste Übereinstimmung und liegt knapp über dem  $K_{OW}$ -basierten Ansatz (61%). Vergleicht man jedoch die Übereinstimmung der unterschiedlichen Ansätze für die einzelnen Kategorien (gut, mittel, schlecht adsorbierbar), zeigt sich ein etwas diverseres Bild. Während die Übereinstimmung für schlecht adsorbierbare Stoffe mit > 80% für alle untersuchten Ansätze relativ gut ist, kommt es bei der mittleren Adsorbierbarkeit zu deutlicheren Unterschieden und Ansatz 2 führt zwar zu einer Verbesserung der Übereinstimmung bei den  $K_{OW}$ - und  $K_{OC}$ -basierten Ansätzen (ungefähre Verdoppelung bis Verdreifachung), das Maximum liegt jedoch bei 38% ( $K_{OC}$ -Ansatz 2). Bei der Einstufung in gut adsorbierbar führt die Anpassung der Grenzen nur beim  $K_{OW}$ -basierten Ansatz zu einer deutlichen Steigerung von 45 auf 67% Übereinstimmung. Der SiWaWi-Ansatz weist ebenso 67% Übereinstimmung auf und der  $K_{OC}$ -basierte Ansatz

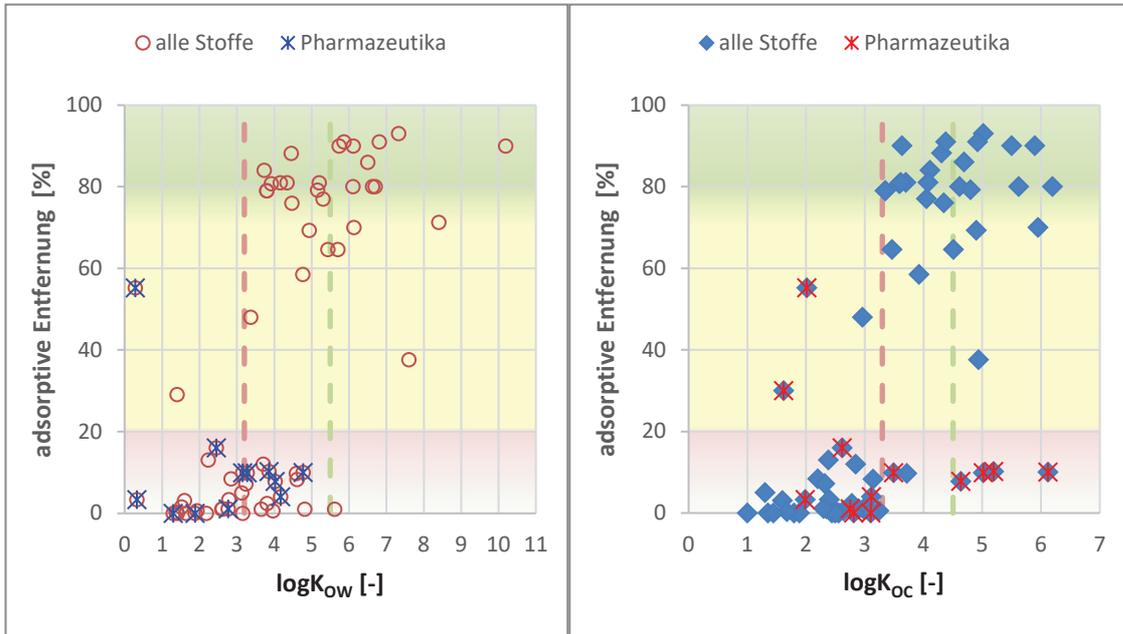
bleibt relativ gleich (48 vs. 47%). Die geringste Übereinstimmung wird somit bei der mittleren Kategorie erreicht, was bereits im SiWaWi-Projekt beobachtet wurde. Verdeutlicht wird dies in Abbildung 6.

Tabelle 7: Übereinstimmung der Einstufung in gut, mittel und schlecht adsorbierbar anhand von Ansatz 1 und 2 mit dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015).

Übereinstimmung	SiWaWi-Ansatz 1 <sup>[1]</sup>	Kow-Ansatz 1 <sup>[2]</sup>	Koc-Ansatz 1 <sup>[3]</sup>	Kow-Ansatz 2 <sup>[4,5]</sup>	Koc-Ansatz 2 <sup>[5,6]</sup>
<b>alle Kategorien</b>	54%	47%	36%	61%	65%
<b>Grenzen gut adsorbierbar</b>	$\log K_{oc} > 4,5$ $\log K_{ow} > 5$	$\log K_{ow} > 4$	$\log K_{oc} > 3,7$	$\log K_{ow} > 5,5$	$\log K_{oc} > 4,5$
<b>N<sub>überein</sub>/N<sub>gut</sub></b>	8/12	14/31	12/25	10/15	8/17
<b>überein*</b>	67%	45%	48%	67%	47%
<b>Grenzen mittel adsorbierbar</b>	$3 < \log K_{ow} \leq 5$	$2,5 < \log K_{ow} \leq 4$	$2,2 < \log K_{oc} \leq 3,7$	$3,2 < \log K_{ow} \leq 5,5$	$3,3 < \log K_{oc} \leq 4,5$
<b>N<sub>überein</sub>/N<sub>mittel</sub></b>	9/34	3/20	4/32	9/28	6/16
<b>überein*</b>	26%	15%	13%	32%	38%
<b>Grenzen schlecht adsorbierbar</b>	$\log K_{ow} \leq 3$ L. > 1 mg/L	$\log K_{ow} \leq 2,5$	$\log K_{oc} \leq 2,2$	$\log K_{ow} \leq 3,2$	$\log K_{oc} \leq 3,3$
<b>N<sub>überein</sub>/N<sub>schlecht</sub></b>	22/25	17/20	10/12	25/28	33/36
<b>überein*</b>	88%	85%	83%	89%	92%

[1] SiWaWi-Kategorisierung, L. ... Löslichkeit (Zessner et al., 2022), [2] Rogers et al. (1996), [3] Fuchs et al. (2020), [4] Rückrechnung aus empirischem Modell  $K_d = 0,53 \times \log K_{ow} + 1,18$  (Lakshminarasimman et al., 2018), [5] Grenzen aus Poseidon (2004):  $\log K_d > 4,1$  (gut adsorbierbar),  $\log K_d \leq 2,9$  (schlecht adsorbierbar), [6] Rückrechnung aus  $K_d = K_{oc} \times f_{oc}$  ( $f_{oc} = 0,37$  analog zum SimpleTreat-Standardfaktor). n... Anzahl, \* überein... Übereinstimmung mit dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015)

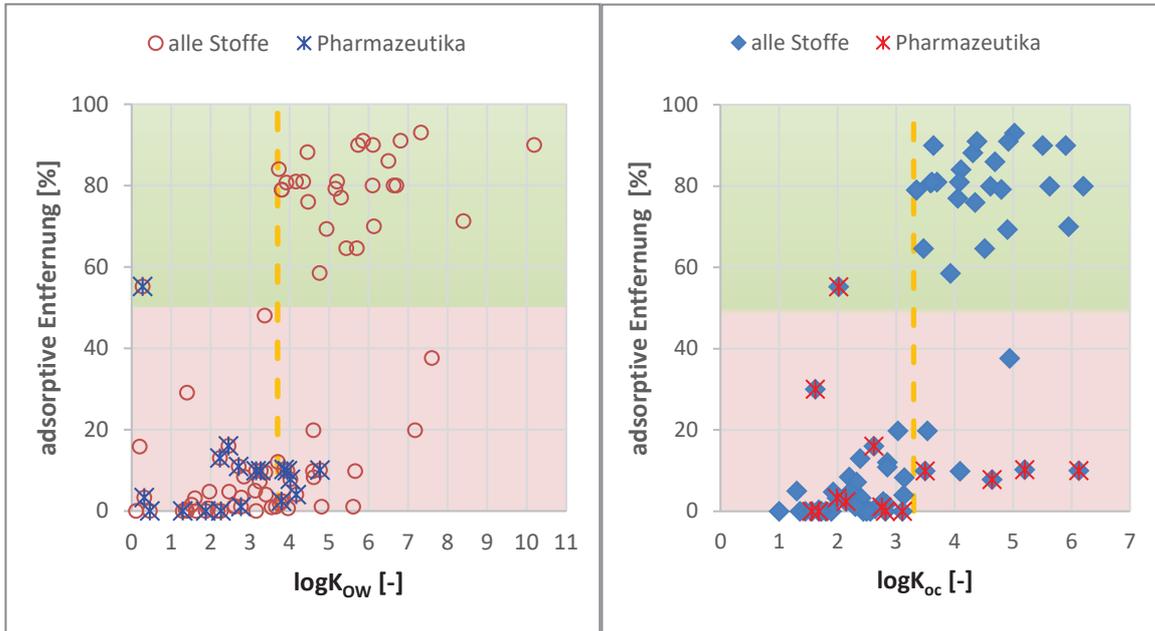
Abbildung 6: Darstellung des Zusammenhangs zwischen der adsorptiven Entfernung auf Kläranlagen (Benchmarkdatensatz nach Margot et al., 2015) mit den Medianwerten von  $\log K_{ow}$  (links) und  $\log K_{oc}$  (rechts) gemäß Ansatz 2.



Die drei Kategorien für die Benchmarkdaten (Margot et al., 2015) sind farblich hinterlegt. Die vertikalen Strichlinien zeigen die Grenzen von Ansatz 2 für  $\log K_{ow}$  bzw.  $\log K_{oc}$  zwischen schlecht und mittel adsorbierbar (rote Linie) sowie mittel und gut adsorbierbar (grüne Linie). Pharmazeutika sind zusätzlich mit einem Stern markiert.

Aufgrund der schlechten Übereinstimmung bei den mittel adsorbierbaren Stoffen und der breiten Streuung in dieser Kategorie ohne deutliche Abgrenzung zu den anderen Kategorien erfolgte eine Optimierung (Schritt 5) über Ansatz 3. Dabei wurden nicht nur die Grenzen optimiert, sondern es wurden die ursprünglichen drei Kategorien auf die zwei Kategorien gut und schlecht adsorbierbar reduziert. Die Grenzen für die Benchmarkdaten wurden dabei auf 50% adsorptive Entfernung gesetzt. Die Identifikation von Grenzen für den  $K_{ow}$ - und den  $K_{oc}$ -Ansatz 3 erfolgte basierend auf einer graphischen Auswertung. Die als gut adsorbierbar eingestuftene Stoffe bilden bei einer Grenze von  $\log K_{ow} = 3,7$  (Abbildung 7 links) bzw.  $\log K_{oc} = 3,3$  (Abbildung 7 rechts) eine relativ gut abgegrenzte Gruppe, während die Grenze bei den als schlecht adsorbierbar eingestuftene Stoffen weniger klar verläuft. Verantwortlich dafür ist zum größeren Anteil die Stoffgruppe der Pharmazeutika.

Abbildung 7: Darstellung des Zusammenhangs zwischen der adsorptiven Entfernung auf Kläranlagen (Benchmarkdatensatz nach Margot et al., 2015) mit den Medianwerten von  $\log K_{ow}$  (links) und  $\log K_{oc}$  (rechts) gemäß Ansatz 3.



Die zwei Kategorien für die Benchmarkdaten (Margot et al., 2015) sind farblich hinterlegt. Die vertikale Strichlinie zeigt die Grenze von Ansatz 3 für  $\log K_{ow}$  bzw.  $\log K_{oc}$  zwischen schlecht und gut adsorbierbar. Pharmazeutika sind zusätzlich mit einem Stern markiert.

Die Ergebnisse der Evaluierung für die neue Kategorisierung nach Ansatz 3 sind in Tabelle 8 sowohl für alle kategorisierten Stoffe als auch für ein Datenset ohne Pharmazeutika dargestellt. Über alle Kategorien ergibt sich eine Übereinstimmung zwischen den Einstufungen nach Ansatz 3 und den Benchmarkdaten-Einstufungen von über 80%, wobei der  $K_{oc}$ -Ansatz 3 etwas besser abschneidet. Im Fall, dass die Pharmazeutika nicht mitbetrachtet werden, liegt die Übereinstimmung beim  $K_{oc}$ -Ansatz 3 sogar bei 96%. Für die als schlecht adsorbierbar eingestuft Stoffe stimmen beide Ansätze zu 97 bzw. 100% mit den Einstufungen der Benchmarkdaten überein. Für die über Ansatz 3 als gut abbaubar eingestuft Stoffe liegt die Übereinstimmung beim  $K_{ow}$ -Ansatz 3 bei 69 bzw. 77% (ohne Pharmaka), während der  $K_{oc}$ -Ansatz 3 sogar eine Übereinstimmung von 79 bzw. 93% erreicht.

Basierend auf diesen Ergebnissen der neuen Kategorisierung wird der  $K_{oc}$ -Ansatz mit einer Grenze von  $\log K_{oc} = 3,3$  für das SimplEstFate-Modell sowie vorläufig eine generelle Einstufung von Pharmazeutika als schlecht adsorbierbar vorgeschlagen.

Tabelle 8: Übereinstimmung der Einstufung in gut und schlecht adsorbierbar anhand von Ansatz 3 mit dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015).

Übereinstimmung	Kow-Ansatz 3	Koc-Ansatz 3
	alle Stoffe   ohne Pharmaka	alle Stoffe   ohne Pharmaka
gesamter Datensatz	81%   86%	85%   96%
Grenzen gut adsorbierbar	$\log K_{ow} \geq 3,7$	$\log K_{oc} \geq 3,3$
$N_{\text{überein}}/N_{\text{gut}}$	27/39   27/35	26/33   26/28
überein*	69%   77%	79%   93%
Grenzen schlecht adsorbierbar	$\log K_{ow} < 3,7$	$\log K_{oc} < 3,3$
$N_{\text{überein}}/N_{\text{schlecht}}$	31/32   22/22	35/36   27/27
überein*	97%   100%	97%   100%

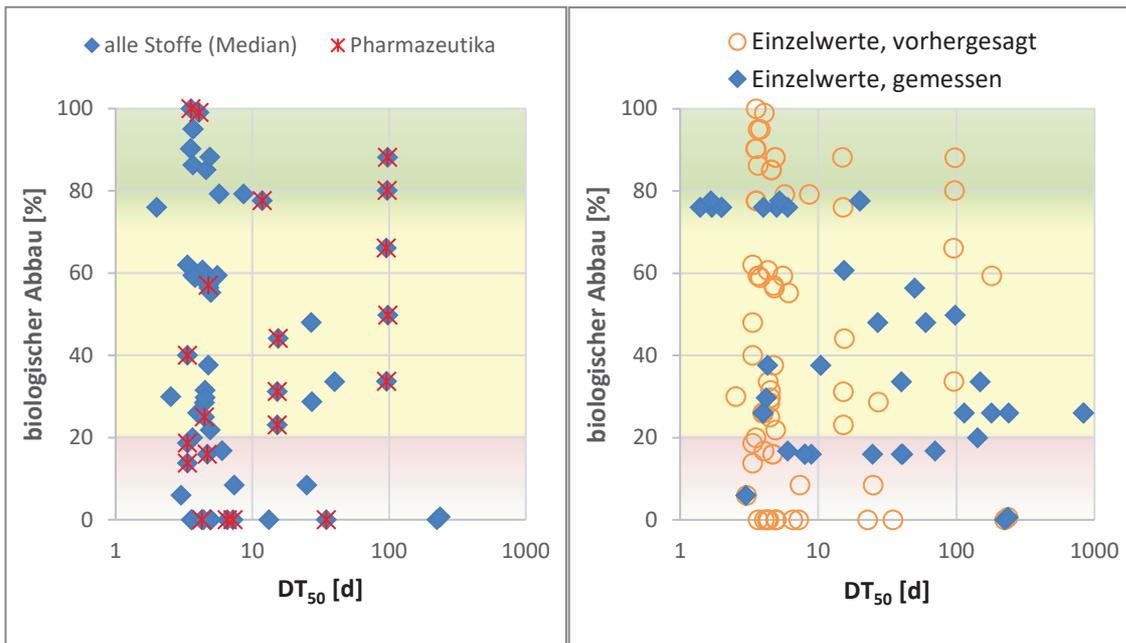
### 3.2.2 Einstufung der Substanzen anhand ihrer biologischen Abbaubarkeit

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse des 5-Schritt-Prozesses zur Festlegung der Kriterien für eine Kategorisierung der Abbaubarkeit bestehend aus 1. Auswahl der Kenngrößen, 2. Identifikation von Grenzen, 3. Einstufung, 4. Evaluierung und 5. Optimierung dargestellt und diskutiert.

Abbildung 8 zeigt den Zusammenhang zwischen der Entfernung über biologischen Abbau aus den Benchmarkdaten und den  $DT_{50}$ -Werten aus den OECD-Simulationstests bzw. den Vorhersagen. Im Gegensatz zur Adsorbierbarkeit ist bei der Abbaubarkeit kein spezifisches Muster für die Pharmazeutika erkennbar. In Abbildung 8 rechts sind die Einzelwerte, getrennt nach Art der Erhebung (gemessen bzw. vorhergesagt) dargestellt. Generell lässt sich aus Abbildung 8 schließen, dass weder auf Betrachtungsebene der Mediane noch der Einzelwerte ein Zusammenhang zwischen  $DT_{50}$  und dem biologischen Abbau aus dem Benchmarkdatensatz von Margot et al. (2015) beobachtet werden kann. Der Vergleich zwischen gemessenen und vorhergesagten Werten (rechte Abbildung) zeigt zwar Unterschiede auf, diese haben aber keinen Einfluss auf dieses Ergebnis. Ein möglicher Grund dafür ist die Matrix in denen die Simulationstests durchgeführt wurden. In OECD (2006) wird mehrfach darauf hingewiesen, dass Simulationstests spezifisch für bestimmte Umweltkompartimente, z.B. Süßwasser oder Boden durchgeführt werden und nur für diese reprä-

sentativ sind. Bei der Recherche in den etablierten Datenbanken wurden jedoch keine Angaben zu Simulationstests auf Kläranlagen gefunden. Es kann nun der Schluss gezogen werden, dass die im Rahmen dieses Projektes erhobenen Daten zu  $DT_{50}$  nicht repräsentativ für das Verhalten der Stoffe auf Kläranlagen sind. Unabhängig davon weist der SiWaWi-Ansatz dahingehend eine Schwachstelle auf, dass die Grenze für gut abbaubar nicht für den Abbau in Kläranlagen anwendbar ist. Sowohl in der Literatur (US-EPA, 2000; TGD, 2003; Poseidon, 2004; Comber et al., 2019) als auch im SimpleTreat Modell liegen die  $DT_{50}$ -Werte nicht in der Größenordnung von Tagen, sondern bei 1-2 Stunden (vgl. Tabelle 4 im Methodikkapitel sowie Abbildung 9 in diesem Kapitel).

Abbildung 8: Zusammenhang zwischen dem biologischen Abbau aus dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015) und den Halbwertszeiten ( $DT_{50}$ ) aus OECD-Simulationstests und Vorhersagen (SiWaWi-Ansatz) als Medianwerte (links) sowie als Einzelwerte (rechts).

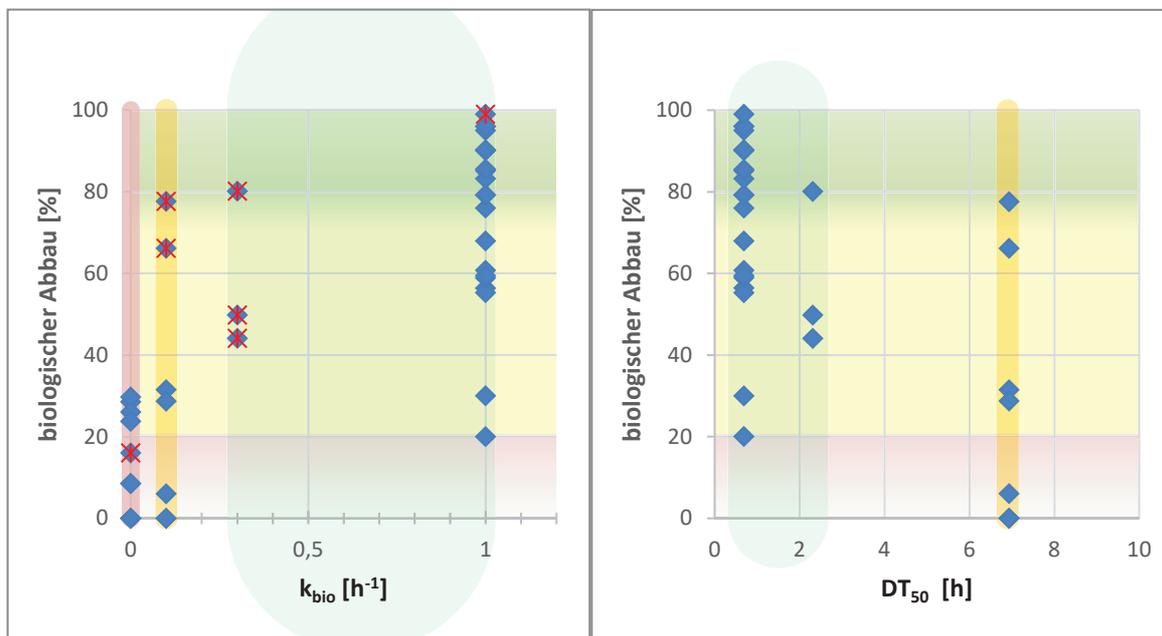


Pharmazeutika sind mit einem Stern markiert.

Um hier eine verbesserte Anwendung des Modellansatzes zu ermöglichen wurden im Rahmen der Optimierungsschleife die Abbaubarkeit aus den OECD-Screeningtests gemäß TGD-Ansatz (siehe Kapitel Methodik) herangezogen, den Ergebnissen zur Abbaubarkeit aus Margot et al. (2015) gegenübergestellt und so neue Grenzen für die Kategorisierung der Abbaubarkeit festgelegt.

Die Ergebnisse der Evaluierung des TGD-Ansatzes im Hinblick auf die Übereinstimmung mit dem Benchmark sind in Abbildung 9 dargestellt. Abbildung 9 links zeigt die Abbaukonstanten und Abbildung 9 rechts die umgerechneten Halbwertszeiten (schlecht abbaubare Stoffe sind aufgrund der TGD-Abbaukonstante von null rechts nicht abgebildet).

Abbildung 9: Zusammenhang zwischen dem biologischen Abbau aus dem Benchmarkdaten (Margot et al., 2015) und den aus den OECD-Screeningtests gemäß TGD-Ansatz abgeleiteten Abbaukonstanten 0/0,1/0,3/1 [h<sup>-1</sup>] (links) bzw. den daraus berechneten Halbwertszeiten (rechts).



Pharmazeutika sind in der linken Abbildung zusätzlich mit einem Stern markiert. Die Bereiche für die unterschiedliche Abbaubarkeit lt. TGD-Ansatz sind farblich markiert (vertikal: grün, gelb, rot für gut, mittel und schlecht).

In Zahlen dargestellt, liegt die allgemeine Übereinstimmung über alle Kategorien bei 56%. Für die 24 als gut abbaubar eingestuftene Stoffe ( $k_{\text{bio}} = 0,3$  und  $1 \text{ h}^{-1}$ ) liegt die Übereinstimmung bei 58%, für 7 als mittel abbaubar eingestufte Stoffe ( $k_{\text{bio}} = 0,1 \text{ h}^{-1}$ ) bei 43% und für die 10 als schlecht abbaubar eingestufte Werte bei 60%. Für Pharmazeutika lagen relativ wenige Screeningtests vor ( $N = 7$ ) und ungefähr die Hälfte davon wurde anders eingestuft als im Benchmarkdatensatz, was dem allgemeinen Muster (56% Übereinstimmung) entspricht. Konkret liegt z.B. die aus dem OECD-Screeningtest ermittelte Abbaukonstante für Ibuprofen bei  $k_{\text{bio}} = 0,1 \text{ h}^{-1}$ , wodurch sie als mittel abbaubar eingestuft wird, obwohl bekannt ist, dass Ibuprofen auf Kläranlagen gut abgebaut wird. Eine Optimierung dieses Ansatzes durch Anpassung der Grenzen für die Kategorien ist auf



Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die Ergebnisse aus den Screeningtests zwar Unsicherheiten aufweisen, jedoch im Gegensatz zu den Daten aus Simulationstests repräsentativer für das Verhalten auf den Kläranlagen sind und zumindest eine Kategorisierung zulassen. Eine Verbesserung der Einstufung der Abbaubarkeit zu den drei Kategorien erscheint nach derzeitigem Stand der Untersuchungen nur durch gezielte Abbaubarkeitstests unter Bedingungen einer schwach belasteten Belebungsanlage möglich.

### **3.2.3 Austragspfade mit adaptierter Kategorisierung**

Aufbauend auf den Erkenntnissen aus Kapitel 3.2.1 und 3.2.2 wird die Kategorisierung nun für jene Stoffe angepasst, für die eine Stoffbilanzierung der Siedlungswasserwirtschaft möglich war. Dabei war es das Ziel, die Stoffe den Kategorien bestmöglich zuzuordnen und die Ergebnisse der Frachtberechnung in den Ein- und Austragspfaden der Siedlungswasserwirtschaft auf Basis dieser bestmöglichen Zuordnung darzustellen. Die Änderungen gegenüber Kapitel 3.1 bestehen darin, dass die Stoffe aufgrund ihrer Adsorbierbarkeit nun in zwei statt ursprünglich drei Kategorien eingeteilt werden, nämlich gut adsorbierbar und schlecht adsorbierbar. Dabei wird die Grenze bei einer Entfernung von schlecht adsorbierbaren Stoffen von  $< 50\%$  durch Adsorption in der Kläranlage gezogen. Allerdings wurde davon abweichend für gut abbaubare Stoffe der  $\log K_{oc}$  mit einer Grenze von  $> 3,3$  zur Identifikation von gut adsorbierbaren Stoffen herangezogen, da hier Beobachtungen auf der Kläranlage an ihre Grenzen stoßen. Bei Pharmazeutika wurde zudem eine Ausnahme gemacht und diese generell als schlecht adsorbierbar eingestuft (siehe auch Kapitel 3.2.1). Die aktualisierte Kategorisierung ist in Tabelle 9 dargestellt. Nach diesen Adaptierungen verbleibt für jeden Eintragstragspfad nur noch eine Kategorie (Schmutzwasser und gemischter Eintrag: gut abbaubar und gut adsorbierbar, Niederschlagswasser: mittel abbaubar, gut adsorbierbar), für die keine Vertreter mit ausreichenden Messdaten gefunden werden konnten.

Die resultierenden Aussagen zu den dominanten Austragspfaden aus der Siedlungswasserwirtschaft unterscheiden sich nur geringfügig von denen, die in Kapitel 3.1 identifiziert wurden (Tabelle 5 und Tabelle 6). Dies unterstützt die Schlussfolgerung, dass eine zusätzliche Kategorie für die mittlere Adsorbierbarkeit nicht nur keinen Mehrwert für die Anwendung des SimplEstFate-Modells bringt, sondern eher ein Hindernis für seine Validierung darstellt, da nun die Aussagen für mehr Kategorien nicht durch Messdaten verifiziert werden können.

Tabelle 9: Ausgewählte Stoffe für die quantitative Ermittlung des Austrags über verschiedene Pfade und deren Kategorisierung nach angepasster Zuordnung.

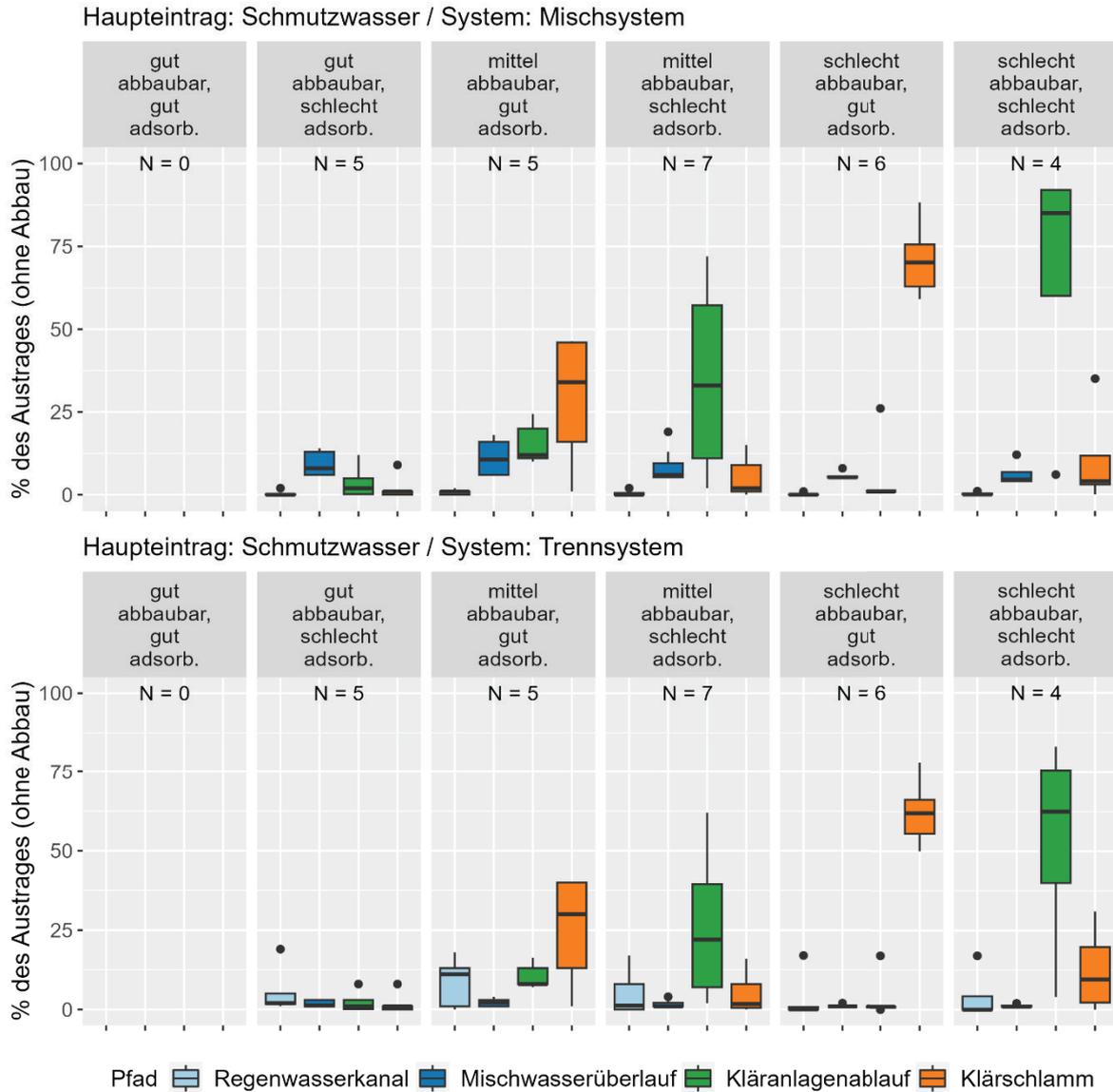
Stoffname	Abkürzung	Haupteintragspfad	Abbaubarkeit	Adsorbierbarkeit
<b>Coffein</b>	COF	Schmutzwasser	gut	schlecht
<b>Estradiol</b>	E2	Schmutzwasser	gut	schlecht
<b>Ibuprofen</b>	IBU	Schmutzwasser	gut	schlecht
<b>Tris(2-butoxyethyl)phosphat</b>	TBEP	Schmutzwasser	gut	schlecht
<b>Triisobutylphosphat</b>	TIBP	Schmutzwasser	gut	schlecht
<b>Bis(2-ethylhexyl)phthalat</b>	DEHP	Schmutzwasser	mittel	gut
<b>4-Nonylphenol</b>	4NP	Schmutzwasser	mittel	gut
<b>Permethrin</b>	PER	Schmutzwasser	mittel	gut
<b>Triclosan</b>	TCS	Schmutzwasser	mittel	gut
<b>Triphenylphosphat</b>	TPHP	Schmutzwasser	mittel	gut
<b>Bisoprolol</b>	BSP	Schmutzwasser	mittel	schlecht
<b>Clarithromycin</b>	CLAR	Schmutzwasser	mittel	schlecht
<b>Diethyltoluamid</b>	DEET	Schmutzwasser	mittel	schlecht
<b>Estron</b>	E1	Schmutzwasser	mittel	schlecht
<b>Ethinylestradiol</b>	EE2	Schmutzwasser	mittel	schlecht
<b>Metoprolol</b>	MET	Schmutzwasser	mittel	schlecht
<b>Tris(2-chlorisopropyl)phosphat</b>	TCPP	Schmutzwasser	mittel	schlecht
<b>2,2',4,4'-Tetrabromodiphenyl ether</b>	BDE-47	Schmutzwasser	schlecht	gut
<b>2,2',4,4',5-Pentabromodiphenyl ether</b>	BDE-99	Schmutzwasser	schlecht	gut
<b>2,2',4,4',6-Pentabromodiphenyl ether</b>	BDE-100	Schmutzwasser	schlecht	gut
<b>2,2',4,4',5,5'-Hexabromodiphenyl ether</b>	BDE-153	Schmutzwasser	schlecht	gut
<b>2,2',4,4',5,6'-Hexabromodiphenyl ether</b>	BDE-154	Schmutzwasser	schlecht	gut

Stoffname	Abkürzung	Haupteintragspfad	Abbaubarkeit	Adsorbierbarkeit
<b>5-chloro-2-(4-chlorphenoxy)phenol</b>	DCPP	Schmutzwasser	schlecht	gut
<b>Benzisothiazolinon</b>	BIT	Schmutzwasser	schlecht	schlecht
<b>Carbamazepin</b>	CBZ	Schmutzwasser	schlecht	schlecht
<b>Diclofenac</b>	DCF	Schmutzwasser	schlecht	schlecht
<b>Tris(1,3-dichlorisopropyl)phosphat</b>	TDCPP	Schmutzwasser	schlecht	schlecht
<b>4-tert-Octylphenol</b>	4-tert-OP	Niederschlagswasser	gut	gut
<b>Nicotin</b>	NIC	Niederschlagswasser	gut	schlecht
<b>Atrazin</b>	ATR	Niederschlagswasser	mittel	schlecht
<b>Carbendazim</b>	CBDZ	Niederschlagswasser	mittel	schlecht
<b>Cybutryn</b>	CYB	Niederschlagswasser	mittel	schlecht
<b>Diuron</b>	DIU	Niederschlagswasser	mittel	schlecht
<b>Benzo[a]anthracen</b>	BaA	Niederschlagswasser	schlecht	gut
<b>Benzo[a]pyren</b>	BaP	Niederschlagswasser	schlecht	gut
<b>Benzo[b]fluoranthen</b>	BbF	Niederschlagswasser	schlecht	gut
<b>Benzo[ghi]perylen</b>	BghiP	Niederschlagswasser	schlecht	gut
<b>Benzo[k]fluoranthen</b>	BkF	Niederschlagswasser	schlecht	gut
<b>Dibenz[a,h]anthracen</b>	DahA	Niederschlagswasser	schlecht	gut
<b>Fluoranthen</b>	FLT	Niederschlagswasser	schlecht	gut
<b>Indeno[1,2,3-cd]pyren</b>	I123cdP	Niederschlagswasser	schlecht	gut
<b>Pyren</b>	PYR	Niederschlagswasser	schlecht	gut
<b>Mecoprop</b>	MCPP	Niederschlagswasser	schlecht	schlecht
<b>Metolachlor</b>	Meto	Niederschlagswasser	schlecht	schlecht
<b>Bisphenol A</b>	BPA	Gemischt	gut	schlecht
<b>Cypermethrin</b>	CP	Gemischt	mittel	gut
<b>Benzotriazol</b>	BTZ	Gemischt	mittel	schlecht
<b>Dibutylphthalat</b>	DBP	Gemischt	mittel	schlecht

Stoffname	Abkürzung	Haupteintragspfad	Abbaubarkeit	Adsorbierbarkeit
5-Methyl-1H-benzotriazol	1H-5MeBTA	Gemischt	mittel	schlecht
Tributylphosphat	TBP	Gemischt	mittel	schlecht
Acenaphthen	ACN	Gemischt	schlecht	gut
Acenaphthylen	ACY	Gemischt	schlecht	gut
Anthracen	ANT	Gemischt	schlecht	gut
Chrysen	CHR	Gemischt	schlecht	gut
Dibutyltin	DBT	Gemischt	schlecht	gut
Fluoren	FLU	Gemischt	schlecht	gut
Phenanthren	PHE	Gemischt	schlecht	gut
Tributyltin	TBT	Gemischt	schlecht	gut
Imidacloprid	IMD	Gemischt	schlecht	schlecht
Naphthalin	NAP	Gemischt	schlecht	schlecht
Perfluorhexansäure	PFHxA	Gemischt	schlecht	schlecht
Perfluoroctansulfonsäure	PFOS	Gemischt	schlecht	schlecht
Perfluoroctansäure	PFOA	Gemischt	schlecht	schlecht

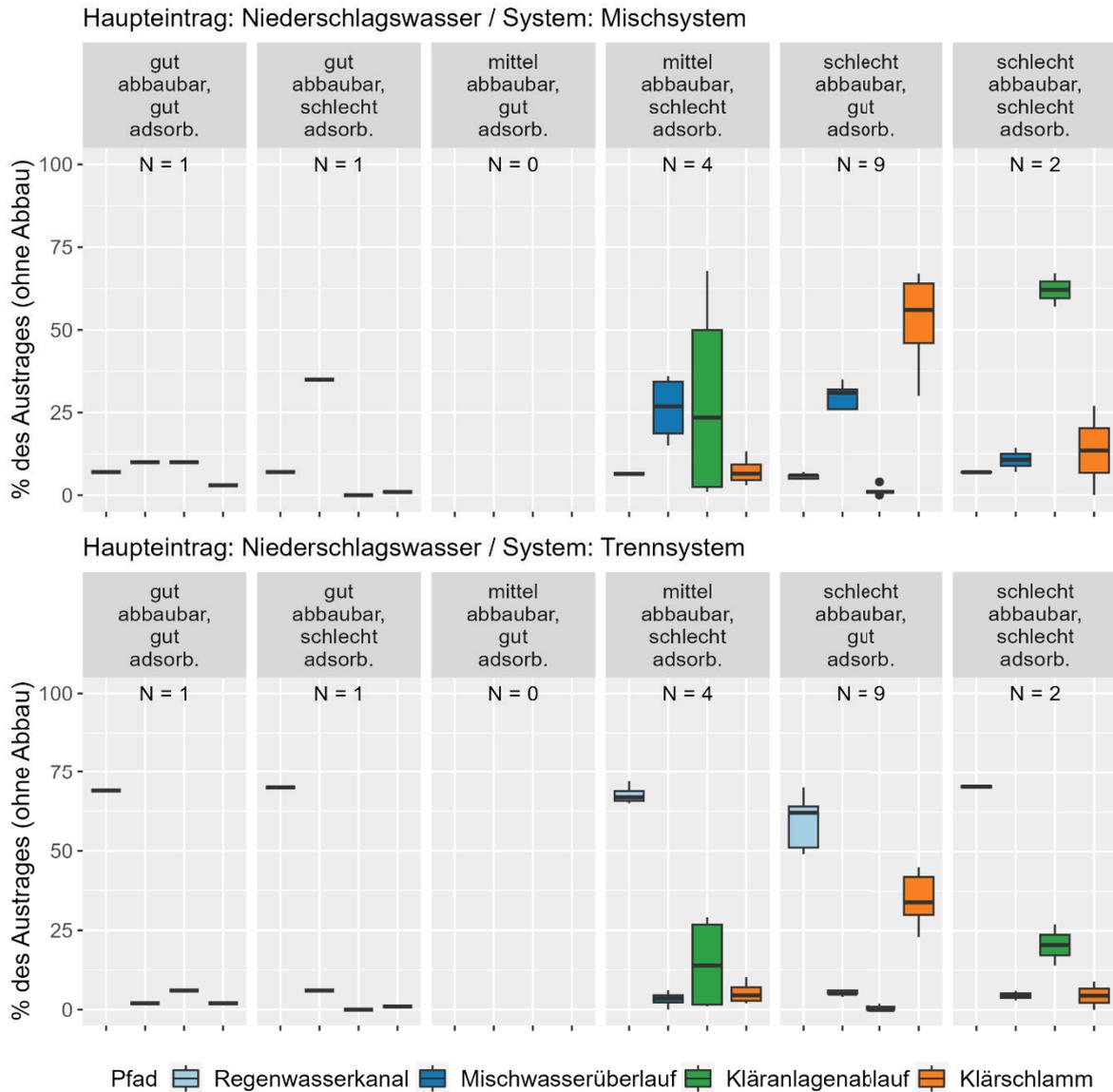
Im Falle eines überwiegenden Stoffeintrags über das Schmutzwasser (Abbildung 11) hat die vorgenommene Anpassung keinen Einfluss auf die Relevanz der Austragspfade, unabhängig vom Kanalisationssystem.

Abbildung 11: Anteil des Austrages aus Siedlungsgebieten über vier verschiedene Pfade für Stoffe, die hauptsächlich über das Schmutzwasser in das System gelangen. Optimierte Auswertung nach Anpassung der Kategorien (Tabelle 9). Oben: Auswertung am Beispiel eines Mischsystems; unten: Auswertung am Beispiel eines Trennsystems. N: Stoffanzahl in jeder Kategorie.



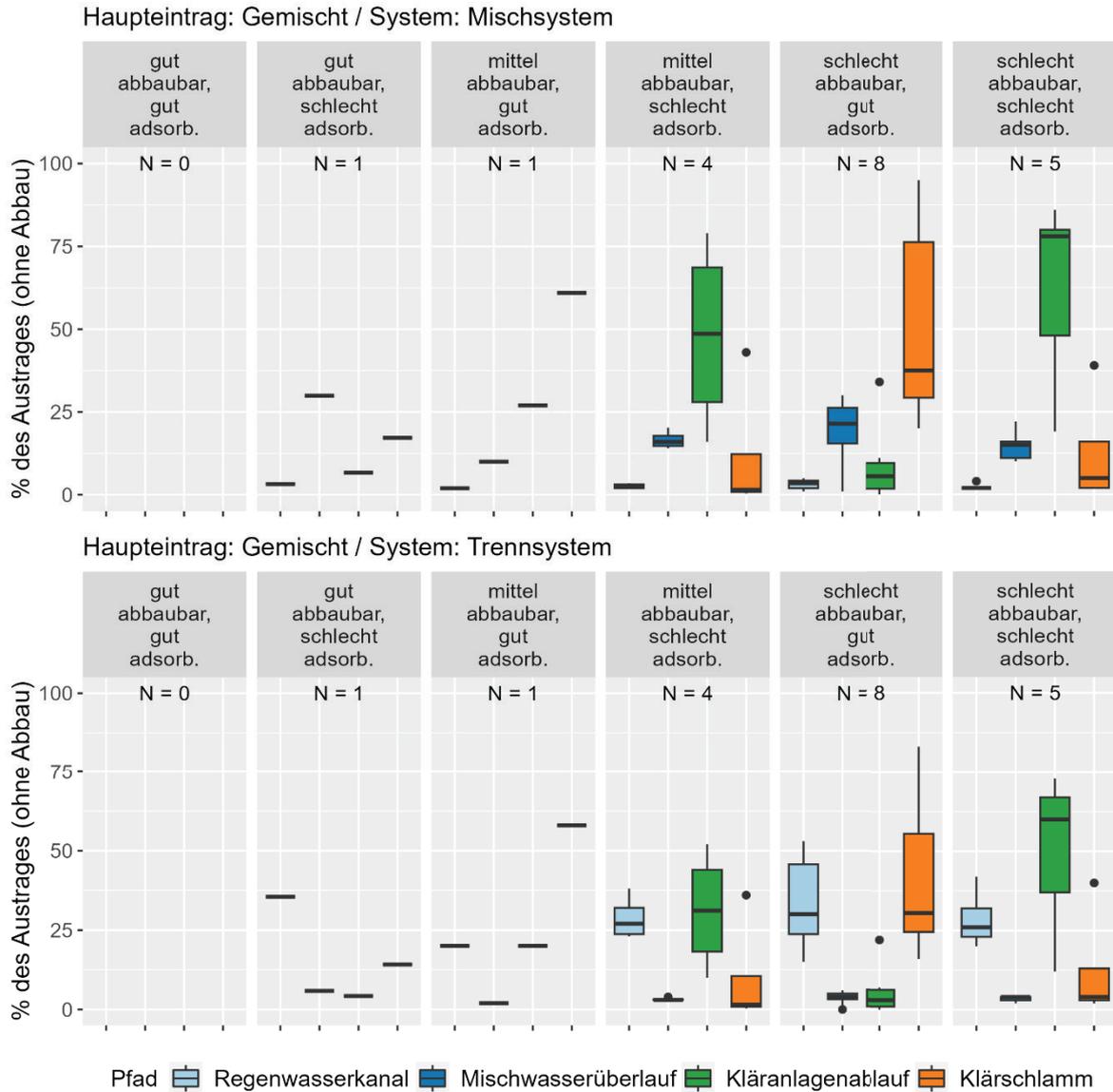
Wie Abbildung 12 zeigt, verschieben sich die in Kapitel 3.1 dargestellten Ergebnisse für gut abbaubare und mäßig adsorbierbaren Stoffe mit überwiegendem Eintrag über Niederschlagswasser in die Kategorie „gut abbaubar und gut adsorbierbar“, die bisher keine Vertreter hatte. Darüber hinaus kann keine Differenz festgestellt werden.

Abbildung 12: Anteil des Austrages aus Siedlungsgebieten über vier verschiedene Pfade für Stoffe, die hauptsächlich über das Niederschlagswasser in das System gelangen. Optimierte Auswertung nach Anpassung der Kategorien (Tabelle 9). Oben: Auswertung am Beispiel eines Mischsystems; unten: Auswertung am Beispiel eines Trennsystems.



Bei Stoffen mit gemischtem Eintrag sind mehrere, wenn auch nicht erhebliche Unterschiede zu beobachten (Abbildung 13). Die in Kapitel 3.1 dargestellten Ergebnisse für gut abbaubare und mittel adsorbierbare Stoffe werden auf die Kategorie „gut abbaubar und schlecht adsorbierbar“ übertragen, die bisher keine Vertreter hatte. Ebenfalls bisher nicht vertreten war die Kategorie „mittel abbaubar und gut adsorbierbar“, in die nun mindestens ein Stoff eingestuft wurde. Die plausiblen Ergebnisse der Frachtberechnung zeigen für diese Kategorie, dass der dominante Austragspfad (über 60%) Klärschlamm ist.

Abbildung 13: Anteil des Austrages aus Siedlungsgebieten über vier verschiedene Pfade für Stoffe, die über gemischte Einträge in das System gelangen. Optimierte Auswertung nach Anpassung der Kategorien (Tabelle 9). Oben: Auswertung am Beispiel eines Mischsystems; unten: Auswertung am Beispiel eines Trennsystems. N: Stoffanzahl in jeder Kategorie.



Der Kläranlagenablauf bleibt nach wie vor der eindeutig dominante Austragspfad für die mittel abbaubaren und schlecht adsorbierbaren Stoffe im Mischsystem und der zweitwichtigste Austragspfad im Trennsystem. Allerdings hat die Anpassung für diese Kategorie zu einer leichten Verschlechterung der Eindeutigkeit der Relevanz von Klärschlamm geführt. Während der Anteil dieses Pfades vorher nahe bei 0 lag, schwankt er jetzt bis zu ca. 40%, bleibt allerdings in zwei von drei Fällen unter 25%. Der einzige signifikante Verlust

an Aussagekraft und Eindeutigkeit betrifft jedoch die schlecht abbaubaren und gut adsorbierbaren Stoffe. Während zuvor Klärschlamm den eindeutig dominanten Austragspfad darstellte (über 75% im Mischsystem und über 60% im Trennsystem), hat die Einstufung in diese Kategorie von einigen polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen mit niedrigem Molekulargewicht zu einer Vergrößerung des Bereichs geführt. Im Mischsystem stellt Klärschlamm mit einem Anteil zwischen ca. 25% und 90% nach wie vor den wesentlichen Pfad dar. Demgegenüber zeigt sich im Trennsystem, dass die Anteile des Gesamtaustrags für Regenwasserkanal und Klärschlamm sehr ähnlich sind.

Tabelle 10: Dominanz der Austragspfade für Stoffe aus der Siedlungswasserwirtschaft in Abhängigkeit der Zuordnung zu Stoffkategorien für ein Kläranlageneinzugsgebiet mit überwiegend Mischsystem (KA = Kläranlage, Mischwasserü. = Mischwasserüberlauf) mit der neuen Kategorisierung betreffend die Adsorbierbarkeit.

Kategorie	Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser	Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser	Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser
<b>gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar</b>	<i>Mischwasserü. &gt; Klärschlamm &gt; KA-Ablauf, Regenwasserkanal<sup>1</sup></i>	<i>Mischwasserü. &gt; Klärschlamm &gt; KA-Ablauf und Regenwasserkanal<sup>1</sup></i>	<i>Mischwasserü. &gt; Regenwasserkanal &gt; Klärschlamm &gt; KA-Ablauf<sup>1</sup></i>
<b>gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar</b>	<b>Mischwasserü.<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf &gt; Klärschlamm und Regenwasserkanal</b>	Mischwasserü. > Regenwasserkanal, KA-Ablauf und Klärschlamm	<b>Mischwasserü.<sup>2</sup> &gt; Regenwasserkanal &gt; KA-Ablauf und Klärschlamm</b>
<b>mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar</b>	<b>Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf &gt; Mischwasser &gt; Regenwasserkanal</b>	<b>Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf &gt; Mischwasserü. &gt; Regenwasserkanal</b>	<i>Mischwasserü. &gt; Regenwasserkanal, KA-Ablauf und Klärschlamm</i>
<b>mittel in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar</b>	<b>KA-Ablauf<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. und Klärschlamm &gt; Regenwasserkanal</b>	<b>KA-Ablauf<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. &gt; Klärschlamm und Regenwasserkanal</b>	<b>KA-Ablauf und Mischwasserü.<sup>2</sup> &gt; Regenwasserkanal und Klärschlamm</b>
<b>schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar</b>	<b>Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. &gt; KA-Ablauf und Regenwasserkanal</b>	<b>Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. &gt; KA-Ablauf und Regenwasserkanal</b>	<b>Klärschl. &gt; Mischwasserü.<sup>2</sup> &gt; Regenwasserkanal &gt; KA-Ablauf</b>
<b>schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar</b>	<b>KA-Ablauf<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. &gt; Klärschlamm und Regenwasserkanal</b>	<b>KA-Ablauf<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. &gt; Klärschlamm und Regenwasserkanal</b>	<b>KA-Ablauf<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. &gt; Regenwasserkanal &gt; Klärschlamm</b>

<sup>1</sup> Konnte nicht quantitativ überprüft werden und beruht daher nur auf Expertjudgement.

<sup>2</sup> Identifizierbare Hauptaustragspfade sind fett dargestellt

Tabelle 11: Dominanz der Austragspfade für Stoffe aus der Siedlungswasserwirtschaft in Abhängigkeit der Zuordnung zu Stoffkategorien für eine Kläranlageneinzugsgebiet mit überwiegend Trennsystem (KA = Kläranlage, Mischwasserü. = Mischwasserüberlauf) mit der neuen Kategorisierung betreffend die Adsorbierbarkeit.

Kategorie	Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser	Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser	Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser
<b>gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar</b>	<i>Regenwasserkanal und Mischwasserü. &gt; Klärschlamm &gt; KA-Ablauf<sup>1</sup></i>	<i>Regenwasserkanal &gt; Mischwasserü. und Klärschlamm &gt; KA-Ablauf<sup>f</sup></i>	<b>Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. &gt; KA-Ablauf und Klärschlamm</b>
<b>gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar</b>	Regenwasserkanal > KA-Ablauf und Mischwasserü. > Klärschlamm	Regenwasserkanal > Mischwasserü., KA-Ablauf und Klärschlamm	<b>Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. &gt; KA-Ablauf und Klärschlamm</b>
<b>mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar</b>	<b>Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf &gt; Mischwasserü. und Regenwasserkanal</b>	Klärschlamm > Regenwasserkanal und KA-Ablauf > Mischwasserü.	<i>Regenwasserkanal &gt; Klärschlamm &gt; Mischwasserü. und KA-Ablauf<sup>f</sup></i>
<b>mittel in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar</b>	<b>KA-Ablauf<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü., Klärschlamm und Regenwasserkanal</b>	<b>KA-Ablauf und Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. und Klärschlamm</b>	<b>Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf &gt; Mischwasserü. und Klärschlamm</b>
<b>schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar</b>	<b>Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; KA-Ablauf, Mischwasserü. und Regenwasserkanal</b>	<b>Klärschlamm &gt; Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. und KA-Ablauf</b>	<b>Regenwasserkanal &gt; Klärschlamm<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. &gt; KA-Ablauf</b>
<b>schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar</b>	<b>KA-Ablauf<sup>2</sup> &gt; Klärschlamm und Regenwasserkanal &gt; Mischwasserü.</b>	<b>KA-Ablauf &gt; Regenwasserkanal<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. und Klärschlamm</b>	<b>Regenwasserkanal &gt; KA-Ablauf<sup>2</sup> &gt; Mischwasserü. und Klärschlamm</b>

<sup>1</sup> Konnte nicht quantitativ überprüft werden und beruht daher nur auf Expertjudgement.

<sup>2</sup> Identifizierbare Hauptaustragspfade sind fett dargestellt

Zusammenfassend lässt sich aus diesen Ergebnissen ableiten, dass der Regenwasserkanal der eindeutig dominante Austragspfad für die Spurenstoffe ist, die überwiegend über Niederschlagswasser im Trennsystem eingetragen werden. Dies gilt unabhängig von ihren chemisch-physikalischen Eigenschaften. Auch für die gut abbaubaren und schlecht adsorbierbaren Stoffe, die überwiegend über Schmutzwasser oder über gemischte Einträge in ein überwiegendes Trennsystem zugeführt werden, ist der Regenwasserkanal ein wichtiger Austragspfad. Im Mischsystem erfolgt die Emission dieser gut abbaubaren

und schlecht adsorbierbaren Stoffe primär über Mischwasserentlastungen, wobei die Art ihrer Einträge in das System eine untergeordnete Rolle spielt.

Des Weiteren sind die Emissionen über Mischwasserentlastungen auch für Stoffe mit anderen chemisch-physikalischen Eigenschaften von entscheidender Bedeutung, die überwiegend über Niederschlagswasser in ein Mischsystem eingetragen werden. Im Mischsystem stellt der Kläranlagenablauf den maßgeblichen Austragspfad für alle Stoffe dar, die entweder mittel oder schlecht abbaubar und schlecht adsorbierbar sind. Dies gilt unabhängig davon, über welche Pfade sie in das System eingetragen werden. Auch im Trennsystem kann der Kläranlagenablauf eine sehr wichtige Rolle spielen, und zwar sowohl für jene schlecht abbaubaren und schlecht adsorbierbaren Stoffe, die überwiegend über das Schmutzwasser eingetragen werden, als auch für die mittel oder schlecht abbaubaren sowie schlecht adsorbierbaren Stoffe, die gemischt eingetragen werden. Wenn gut adsorbierbare Stoffe entweder überwiegend über das Schmutzwasser oder gemischt über Schmutzwasser und Niederschlagswasser eingetragen werden, werden sie aus beiden Kanalisationssystemen in einem dominanten Ausmaß über Klärschlamm ausgetragen. Das gilt höchstwahrscheinlich nicht für gut adsorbierbaren Stoffe, die auch gut abbaubar sind. Allerdings konnte dies aufgrund der fehlenden Messdaten nicht überprüft werden.

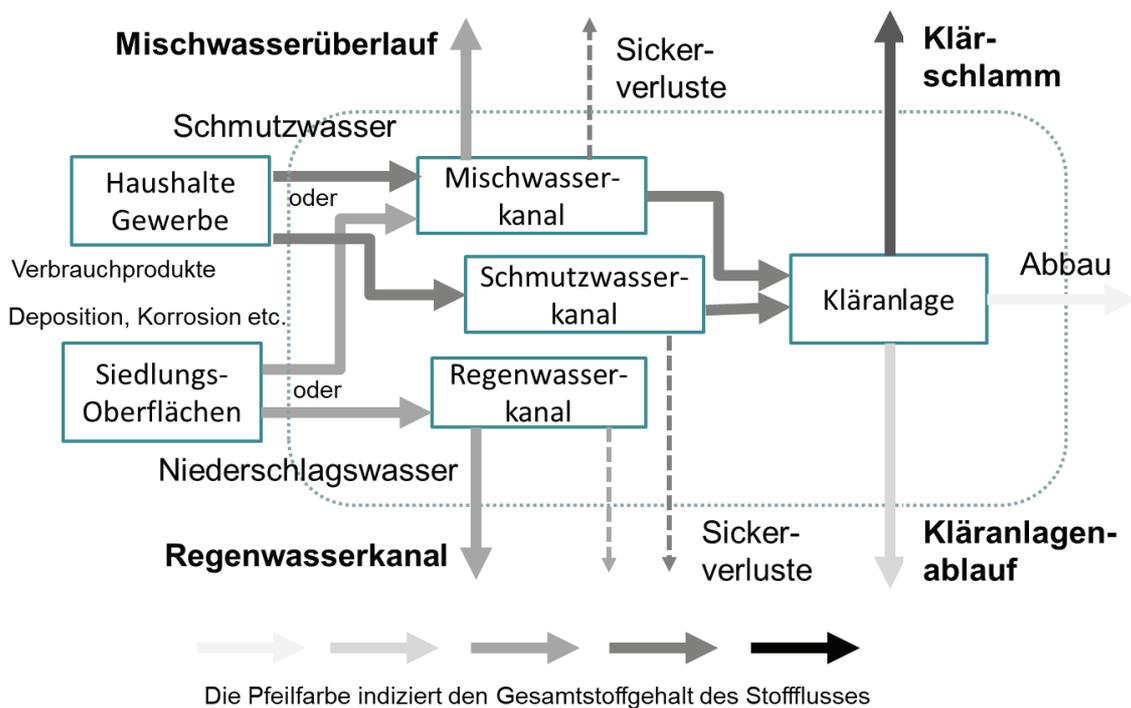
Im Vergleich der Kanalsysteme wird durch die Auswertungen verdeutlicht, dass für adsorbierbare und/oder abbaubare Stoffe die zum Teil oder überwiegend über Niederschlagswasser in die Siedlungswasserwirtschaft gelangen, das Mischsystem für den Gewässerschutz einen Vorteil hat, da der Stoffeintrag über Mischwasserüberlauf gegenüber dem Regenwasserkanal deutlich verringert ist und es zu einem verstärkten Abbau auf der Kläranlage (abbaubare Stoffe) oder einer verstärkten Verlagerung in den Klärschlamm (adsorbierbare Stoffe) kommt. Für schlecht abbaubare und schlecht adsorbierbare Stoffe ist das Kanalsystem von geringerer Bedeutung, da bei einem Mischsystem eine Verlagerung in die Kläranlage zu einem Austrag über den Ablauf führt. Im Falle der Stoffe, die überwiegend über das Schmutzwasser eingetragen werden bestätigt sich der Vorteil des Trennsystems, wo Austräge von Schmutzwasser über den Mischwasserüberlauf weitgehend vermieden werden können.

### 3.3 SimplEstFATE

#### 3.3.1 Modellerläuterung

SimplEstFATE folgt einem konzeptionellen Modell, wie es in Abbildung 14 dargestellt ist. Stoffe werden über Schmutzwasser und Niederschlagswasser in die Siedlungswasserwirtschaft eingetragen und verlassen in Abhängigkeit, des Eintragspfades, des Kanalsystems und ihrer Adsorbier- und Abbaubarkeit die Siedlungswasserwirtschaft über unterschiedliche Austragspfade (Regenwasserkanal, Mischwasserüberlauf, Klärschlamm, Kläranlagenablauf) oder werden auf der Kläranlage ab- bzw. umgebaut.

Abbildung 14: Konzeptionelles Stoffflussmodell von Stoffeinträgen in die Siedlungswasserwirtschaft und der Austragspfade aus der Siedlungswasserwirtschaft.



Die Pfeilfarbe zeigt die Gesamtkonzentration von Stoffen in der Wassermatrix an (Kläranlagenablauf < Niederschlagswasser < Mischwasser < Schmutzwasser < Klärschlamm).

Soll SimpleEstFATE in Zukunft zur Einschätzung der Hauptaustragspfade von Stoffen aus der Siedlungswasserwirtschaft angewendet werden, ist dies über drei Schritte möglich:  
(i) Ermittlung der Basisinformationen, (ii) Zuteilung des Stoffes zu einer Kategorie und  
(iii) Ermittlung der Hauptaustragspfade.

#### **Ad (i): Ermittlung der Basisdaten**

1. Ermittlung der Einsatzbereiche eines Stoffes: Dazu sind folgende Fragen zu beantworten:  
Wird der Stoff vor allem in Haushalten und Industrie eingesetzt und gelangt damit in das Schmutzwasser? Handelt es sich bei dem Stoff um ein Pharmazeutikum?  
Wird er vor allem auf städtischen Flächen (Verkehrswege, Dächer/Fassanden) eingesetzt oder gelangt er über Depositionen aus der Luft oder über den Verkehr auf städtische Flächen und gelangt so mit dem Niederschlagsabfluss in die Kanalisation?  
Kann keine der beiden Eintragswege in die Kanalisation als dominant angesehen werden und ist ein Eintrag über beide Wege zu erwarten?
2. Adsorption eines Stoffes: Zwar wäre theoretisch der  $K_d$  Wert für die Charakterisierung der Adsorption eines Stoffes bei der Abwasserreinigung an den Klärschlamm am geeignetsten, praktisch ist allerdings der  $K_{OC}$  bzw.  $\log K_{OC}$  für wesentlich mehr Stoffe verfügbar und hat sich für eine Kategorisierung als geeignet erwiesen. Daher stützt sich SimpleEstFATE vor allem auf den  $K_{OC}$ . Daten zu  $\log K_{OC}$  sind für viele Stoffe in Datenbanken wie z.B. ECHA oder Norman (Kap. 2.1) zu finden.
3. Abbaubarkeit eines Stoffes: Zur Abbaubarkeit von Stoffen werden einerseits  $DT_{50}$ -Werte vorhergesagt oder gemessen und es liegen v.a. in der ECHA-Datenbank Informationen zur Halbwertszeit bzw.  $DT_{50}$  (nach OECD-Simulationstests) vor. Diese Daten beziehen sich in der Regel auf den Abbau in bestimmten Umweltmatrizes (Wasser, Sediment, Boden). Es hat sich gezeigt, dass diese Angaben ungeeignet für eine Abschätzung des Abbaus in Kläranlagen und damit auch für die Nutzung in SimpleEstFATE sind. Besser eignen sich die Angaben zur biologischen Abbaubarkeit aus OECD-Screeningtests. Diese sind für eine Reihe von Stoffen in der ECHA Datenbank (ECHA Chemicals Database, ECHACHEM) im Bereich Umweltverhalten und Pfade (*Environmental fate and pathways*)/Subbereich Biologischer Abbau (*biodegradation*)/Biologischer Abbau im Wasser: Screeningtests (*biodegradation in water: screening tests*) zu finden. Allerdings ist die Verfügbarkeit dieser Informationen deutlich seltener als jene zu  $DT_{50}$  und vor allem fehlen sie vielfach bei Pharmazeutika. Zudem konnte im Rahmen dieser Studie gezeigt werden, dass auch diese Daten im Vergleich zum tatsächlichen Abbau auf Kläranlagen teilweise zu Fehlbefunden führen.

Eine deutliche Verbesserung der Zuordnung wäre daher mit Abbauversuchen unter Bedingungen einer schwach belasteten Belebungsanlage zu erwarten.

#### **Ad (ii): Zuteilung des Stoffes zu einer Kategorie**

1. Herkunftsbereich eines Stoffes: Anhand der in (i) erhobenen Informationen wird der Stoff in drei unterschiedliche Kategorien eingeteilt „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“, „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“, oder wenn keine eindeutige Zuordnung möglich ist „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“
2. Adsorption eines Stoffes: Im Zuge der Untersuchungen zu diesem Projekt konnte gezeigt werden, dass Stoffe entweder zu einem großen Anteil oder nur zu einem geringen Anteil an den Schlamm adsorbiert aus dem Abwasser entfernt werden. Eine mittlere Entfernung tritt nur selten auf und kann nicht über den  $K_{OC}$  Wert abgebildet werden. Es wurden in SimplestFATE daher nur zwei Kategorien für die Adsorption ausgewiesen. Als Grenze wurde ein  $\log K_{OC}$  von 3,3 gewählt:  $\log K_{OC} > 3,3 =$  „gut adsorbierbar“;  $\log K_{OC} \leq 3,3 =$  „schlecht adsorbierbar“. Speziell im Bereich um  $\log K_{OC}$  von 3,3 ist damit eine gewisse Unschärfe gegeben. Bei Pharmazeutika funktioniert die Einstufung über den KOC nicht. Aufgrund der derzeitig vorliegenden Daten sollten Pharmazeutika vorläufig generell der Kategorie „schlecht adsorbierbar“ zugeordnet werden.
3. Abbaubarkeit eines Stoffes: Ergebnisse der OECD-Screeningtests weisen für Stoffe vier Kategorien aus: Leicht biologisch abbaubar (readily biodegradable) unter Einhaltung des 10d-Fensters, leicht biologisch abbaubar (readily biodegradable), 10d-Fenster wird nicht erfüllt, inhärent biologisch abbaubar (inherently biodegradable) und nicht biologisch abbaubar (no biodegradation). Diese Kategorien entsprechen als Abbaurate  $k_{bio}$  etwa den Werten von 1 pro Stunde; 0,3 pro Stunde, 0,1 pro Stunde und 0. Für SimplestFATE werden die Bewertungen „leicht biologisch abbaubar“ und „biologisch abbaubar“ zur Kategorie „gut auf der KA abbaubar“ zusammengefasst, die Bewertung „inhärent biologisch abbaubar“ wird zur Kategorie „mittel auf der KA abbaubar“ und die Bewertung „nicht biologisch abbaubar“ zur Kategorie „schlecht auf der KA abbaubar“. Sind Abbauversuche unter Bedingungen einer schwach belasteten Belebungsanlage verfügbar oder können diese durchgeführt werden, werden Abbauraten von  $> 80\%$  als „gut auf der KA abbaubar“ kategorisiert, Abbauraten von  $20 - 80\%$  als „mittel auf der KA abbaubar“ und Abbauraten von  $< 20\%$  als „schlecht auf der KA abbaubar“.

4. Flüchtige organische Verbindungen: Für VOC kann die Entfernung über Strippung (Verflüchtigung) neben der Adsorption und der Abbaubarkeit ein maßgeblicher Entfernungspfad sein. Daher sollte das Modell SimplEstFATE nicht für VOC angewendet werden, es sei denn, es liegen Literaturdaten vor, die belegen, dass die Strippung keinen maßgeblichen Beitrag liefert.

#### **Ad (iii): Ermittlung der Hauptaustragspfade**

Zur Ermittlung der Hauptaustragspfade wird ein Stoff über jedes Einzelkriterium bewertet und aus den Kategorien für die drei Einzelkriterien (Herkunftsbereich 3 Einzelkriterien, Adsorbierbarkeit 2 Einzelkriterien und 3 Einzelkriterien Abbaubarkeit) wird der Stoff einer der 18 möglichen Kategorien zugeordnet. Darauf aufbauend kann die Ermittlung des Hauptaustragspfades in Abhängigkeit des dominanten Kanalsystems für ein Trennsystem oder ein Mischsystem durchgeführt werden. Im Falle eines Mischsystems kann die Ermittlung des Hauptaustragspfades über die Tabelle 10, im Falle eines Trennsystems über die Tabelle 11 erfolgen. Semiquantitative Zuordnung zu Hauptaustragspfaden sind auch über Abbildung 10 bis Abbildung 12 dieses Berichts möglich. Die Zellen der Tabelle geben für jede Kategorie die zu erwartende Reihung der Relevanz der Austragspfade an. So bedeutet z.B. der Zelleintrag in der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schutzwasser“ (1. Spalte) und „schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ (5. Zeile) „**Klärschlamm** > KA-Ablauf, Mischwasserü. und Regenwasserkanal“, dass die größten Austragsfrachten des untersuchten Stoffes über den Klärschlamm, gefolgt vom Kläranlagenablauf sowie Mischwasserüberlauf und Regenwasserkanal (die letzten beiden etwa im selben Ausmaß) zu erwarten sind. Sind ein Austragspfad oder mehrere Austragspfade fett gedruckt, so weist das in Hinblick auf die emittierten Frachten auf eine deutliche Dominanz dieses bzw. dieser Pfade gegenüber den anderen Pfaden hin.

### **3.3.2 Modellanwendung**

Im Zuge des gegenständlichen Projektes wurden Daten für 274 organische Spurenstoffe gesammelt. Für 95 dieser Einzelsubstanzen lagen Literaturwerte zur Entfernung über die zwei relevanten Entfernungsmechanismen Adsorption und Abbau auf der Kläranlage aus der Studie von Margot et al. (2015) als Benchmarkdatensatz vor, um die Nutzung von  $K_{ow}$ ,  $K_{oc}$ ,  $DT_{50}$  und  $k_{bio}$  als geeignete Indikatoren zu prüfen und zu justieren. Für insgesamt 63 Substanzen konnte zudem eine Stoffbilanz der Siedlungswasserwirtschaft mit allen Austragspfaden berechnet, so Aussagen über die erwartbaren Hauptaustragspfade geprüft und für diese die Anwendung von SimplEstFATE festgelegt werden. Ursprünglich

waren für die Anwendung von SimplestFATE neben den Informationen über den Einsatzbereich eines Stoffes für die Kategorisierung der Adsorbierbarkeit  $K_{OC}$  oder  $K_d$  vorgesehen. Aufgrund der Datenverfügbarkeit wurde letztendlich  $K_{OC}$  vorgezogen. Für den Abbau war ursprünglich  $DT_{50}$  vorgesehen. Die verfügbaren Daten erwiesen sich allerdings als nicht geeignet. Alternativ wurde daher auf  $k_{bio}$ , abgeleitet aus OECD Screeningtests, umgestiegen. OECD Screeningtests waren allerdings nur in geringerem Umfang verfügbar, als die Daten zu  $DT_{50}$ . So wären für eine Kategorisierung über  $K_{OC}$  und  $DT_{50}$  aus OECD Simulationsversuchen für 246 Stoffe die erforderlichen Informationen vorhanden gewesen, während das bei der Nutzung einer Kategorisierung über OECD Screeningtests nur für 96 Stoffe der Fall ist.

Im Folgenden wird SimplestFATE nun auf die 96 Stoffe angewandt, für die die erforderlichen Informationen vorhanden sind. Das heißt die Stoffe werden anhand der Basisdaten den 18 Kategorien zugeordnet und je nach dominantem Kanalsystem die Hauptaustragspfade dargestellt. Zudem wird angegeben und diskutiert, ob die Anwendung der SimplestFATE-Kriterien zu einer Änderung der Kategorisierung gegenüber jener Kategorisierung führt, bei der anhand von Kläranlagendaten Stoffbilanzen für die Siedlungswasserwirtschaft berechnet und so Hauptaustragspfade identifiziert werden konnten (siehe Kapitel 3.2.3). In diesen Vergleich konnten allerdings nur 27 Stoffe aufgenommen werden, für die sowohl für die Kategorisierung nach SimplestFATE als auch für die Durchführung der Stoffbilanzierung alle erforderlichen Daten vorhanden waren.

### **Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar“:**

Die über SimplestFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von  $\log K_{OC}$  in Tabelle 12 zusammengestellt. Während Bis(2-ethylhexyl)phthalat und Triphenylphosphat über SimplestFATE bzw. den OECD-Screeningtest als gut auf der Kläranlage abbaubar charakterisiert wurden, wurde in Kapitel 3.2.3 bei der Kategorisierung über Kläranlagendaten eine mittlere Abbaubarkeit festgestellt, wobei allerdings auch diese auf einer Entfernung auf der Kläranlage von über 50% beruht. Hier liegt also eine gewisse Unschärfe der Einstufung der Abbaubarkeit nach SimplestFATE im Vergleich zu Kläranlagendaten vor, wie sie auch in Kapitel 3.2.2 beschrieben wurde.

Dominiert das **Mischsystem** in einem Kläranlageneinzugsgebiet ist als Hauptaustragspfad für die Stoffe dieser Kategorie der **Mischwasserüberlauf** zu erwarten (Tabelle 10).

Eventuell kommt noch dem Klärschlamm eine gewisse Bedeutung zu, während der Kläranlagenablauf und Regenwasserkanal voraussichtlich keine Rolle spielen.

Dominiert das **Trennsystem** (siehe Tabelle 11) kann der Regenwasserkanal im Fall von Fehlan schlüssen oder einem gewissen Austrag über städtische Flächen gegenüber dem Mischwasserüberlauf an Bedeutung gewinnen. Eventuell kommt noch dem Klärschlamm eine gewisse Bedeutung zu, während der Kläranlagenablauf bei funktionierender Abwasserreinigung keine Rolle spielt.

Tabelle 12: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte. *Kursiv geschriebene Stoffe wurden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.*

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
<b>Benzolsulfonsäure</b>	Desinfektionsmittel	readily biodegradable	4.2
<i>Triphenylphosphat</i>	<i>Flammschutzmittel</i>	<i>readily biodegradable</i>	<i>3.7</i>
<b>Diphenylcarbonat</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable	3.6
<b>2-Ethylhexyldiphenylphosphat</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable	3.4
<b>Triclocarban</b>	Pflegeprodukte	readily biodegradable	3.6
<b>Palmitinsäure</b>	Tenside	readily biodegradable	3.5
<i>Bis(2-ethylhexyl)phthalat</i>	<i>Weichmacher</i>	<i>readily biodegradable</i>	<i>4.9</i>

### **Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“:**

Die über SimplEstFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Sreeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 13 zusammengestellt. Für Ethinyl-estradiol (EE2) wurde in Kapitel 3.2.3 bei der Kategorisierung über Kläranlagendaten eine mittlere Abbaubarkeit mit einem Abbau von ca. 50% festgestellt. Hier spielt auch das Schlammalter eine Rolle. Es zeigt sich daher wiederum eine gewisse Unschärfe der

Einstufung nach SimplEstFATE, die auf den Problemen mit der Kategorisierung der Abbaubarkeit beruht, wie sie in Kapitel 3.2.2 besprochen wurde.

Dominiert das **Mischsystem** ist eine klare Dominanz des **Mischwasserüberlaufs** als Hauptaustragspfad für die Stoffe dieser Kategorie zu erwarten. Eventuell kommt noch dem Kläranlagenablauf eine gewisse Bedeutung zu, während der Klärschlamm und Regenwasserkanal voraussichtlich keine Rolle spielen.

Dominiert das **Trennsystem** kann der Regenwasserkanal im Fall von Fehllanschlüssen oder einem gewissen Austrag über städtische Flächen gegenüber dem Mischwasserüberlauf an Bedeutung gewinnen und dieser wiederum an Bedeutung verlieren. Eventuell kommt noch dem Kläranlagenablauf eine gewisse Bedeutung zu, während der Austrag über Klärschlamm keine Rolle spielt.

Tabelle 13: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte. *Kursiv geschriebene Stoffe wurden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.*

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
<b>Triisobutylphosphat</b>	Flammschutzmittel	readily biodegradable	2.9
<b>Phenol</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable	1.4
<b>2,3,6-Trimethylphenol</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable	3.2
<b>Methylparaben</b>	Konservierungsmittel	readily biodegradable	1.9
<b>Ethylparaben</b>	Konservierungsmittel	readily biodegradable	2.2
<b>Estradiol (E2)</b>	Hormone	readily biodegradable, failing 10 day window biodegradable to a certain extent	4.9
<i><b>Ethinylestradiol (EE2)</b></i>	<i>Pharmazeutika (Kontrazeptiv)</i>	<i>readily biodegradable, failing 10 day window biodegradable to a certain extent</i>	5.2
<b>Erythromycin</b>	Pharmazeutika	readily biodegradable, failing 10 day window biodegradable to a certain extent	2.8
<b>Salicylsäure</b>	Pharmazeutika	readily biodegradable	1.6

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
Coffein	Psychotrope Substanzen	readily biodegradable	1.8
4-tert-Butylbenzaldehyd	Pflegeprodukte	readily biodegradable	2.4
Laurinsäure	Tenside	readily biodegradable	3.0

**Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar“:**

Die über SimplEstFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 14 zusammengestellt.

Tabelle 14: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte.

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
4-Nonylphenol	Industriechemikalien	inherently biodegradable, fulfilling specific criteria	4.0
Triclosan	Pflegeprodukte	inherently biodegradable	3.9
Permethrin	Pharmazeutika (Insektizid)	inherently biodegradable	4.8

Dominiert das **Mischsystem** ist eine klare Dominanz des **Klärschlamm**s als Hauptaustragspfad für die Stoffe dieser Kategorie zu erwarten. Daneben können auch dem Kläranlagenablauf und dem Mischwasserüberlauf eine gewisse Bedeutung zukommen, während der Regenwasserkanal voraussichtlich keine Rolle spielt.

Dominiert das **Trennsystem** ist ebenfalls eine klare Dominanz des **Klärschlamm**s als Hauptaustragspfad zu erwarten. Daneben können auch dem Kläranlagenablauf und dem Regenwasserkanal eine gewisse Bedeutung zukommen, während der Mischwasserüberlauf voraussichtlich keine Rolle spielt.

**Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „mittel in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“:**

Die über SimpleEstFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 15 zusammengestellt. Entgegen den Benchmark-Informationen aus Kläranlagendaten, die eine gute Abbaubarkeit anzeigen, wird Ibuprofen über den OECD-Screeningtest als mittel abbaubar eingestuft. Allerdings liegt die Einstufung nach Kläranlagendaten nahe an der Kategoriegrenze, sodass diese Unterschiede in der Kategorisierung aus der Unschärfe der Methode heraus erwartbar sind.

Dominiert das **Mischsystem** ist eine Dominanz des **Kläranlagenablaufes** als Hauptaustragspfad für die Stoffe dieser Kategorie zu erwarten. Daneben können auch dem Klärschlamm und dem Mischwasserüberlauf eine gewisse Bedeutung zukommen, während der Regenwasserkanal voraussichtlich keine Rolle spielt.

Dominiert das **Trennsystem** ist ebenfalls eine Dominanz des **Kläranlagenablaufes** als Hauptaustragspfad zu erwarten. Daneben können auch dem Klärschlamm und dem Regenwasserkanal vor allem bei Fehllanschlüssen eine gewisse Bedeutung zukommen, während der Mischwasserüberlauf voraussichtlich nur eine sehr geringe Rolle spielt.

Tabelle 15: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „mittel in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimpleEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte. *Kursiv geschriebene Stoffe wurden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.*

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
<b>Tris(2-chlorisopropyl)phosphat</b>	Flammschutzmittel	inherently biodegradable	2.4
<b>Estron (E1)</b>	Hormone	inherently biodegradable	5.0
<b>4-Aminophenol</b>	Industriechemikalien	not readily biodegradable, but inherently, fulfilling specific criteria	1.3
<b>4-Nitrotoluol</b>	Industriechemikalien	inherently biodegradable	2.6

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
Ethylendiamintetra-essigsäure	Komplexbildner	inherently biodegradable, fulfilling specific criteria	2.5
Amidotrizoesäure	Kontrastmittel	not readily biodegradable; moderately/partly biodegradable	2.5
Amoxicillin	Pharmazeutika	inherently biodegradable	2.4
Ibuprofen	Pharmazeutika	not readily biodegradable; moderately/partly biodegradable	2.1
Furosemid	Pharmazeutika	moderately/partly biodegradable	1.9

**Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar“:**

Die über SimplEstFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 16 zusammengestellt. Es wurden keine Abweichungen von der Kategorisierung über Kläranlagendaten festgestellt.

Tabelle 16: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte.

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
Benzyl-2-naphthylether	Industriechemikalien	not readily biodegradable	4.0
Butylhydroxytoluol	Industriechemikalien	not readily biodegradable	4.0
1,5,9-Cyclododecatrien	Industriechemikalien	not readily biodegradable; under test conditions no biodegradation observed	3.7
Dodecamethylcyclohexasiloxan	Pflegeprodukte und Industriechemikalien	not readily biodegradable	5.9
Octamethylcyclotetrasiloxan	Pflegeprodukte und Industriechemikalien	not readily biodegradable	4.9
Decamethylcyclopentasiloxan	Industriechemikalien	not readily biodegradable	5.2

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
Galaxolid	Pflegeprodukte	not readily biodegradable; under test conditions no biodegradation observed	4.5
Tonalid	Pflegeprodukte	inherently biodegradable, not fulfilling specific criteria	3.5
Chlorhexidin	Pharmazeutika	not readily biodegradable	4.6
Avobenzon	UV-Filter	not inherently biodegradable	3.7

Bei den Stoffen dieser Kategorie dominiert als Austragspfad im **Mischsystem** und im **Trennsystem** ganz klar der **Klärschlamm**. Daneben können im Mischsystem dem Mischwasserüberlauf und im Trennsystem dem Regenwasserkanal eine geringe Bedeutung zukommen, während der Kläranlagenablauf zumeist keine Rolle spielt.

**Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“:**

Die über SimpleEstFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 17 zusammengestellt. Es wurden keine Abweichungen von der Kategorisierung über Kläranlagendaten festgestellt.

Tabelle 17: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimpleEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte.

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
Tris(1,3-dichlorisopropyl)phosphat	Flammschutzmittel	not readily biodegradable; under test conditions no biodegradation observed	2.9
Cobalt(II)-acetat	Industriechemikalien	not readily biodegradable; under test conditions no biodegradation observed	0.0
1-Octanthiol	Industriechemikalien	not readily biodegradable	2.5

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
Trimethoxyphenylsilan	Industriechemikalien	not readily biodegradable	1.1
Cumolhydroperoxid	Industriechemikalien	not readily biodegradable	1.6
p-Phenylendiamin	Industriechemikalien	not readily biodegradable	1.7
Benzisothiazolinon	Konservierungsmittel	not readily biodegradable	1.6
Diclofenac	Pharmazeutika	not readily biodegradable	3.1
Candesartan	Pharmazeutika	not readily biodegradable	2.5
1,5-Naphthylendiamin	Pharmazeutika und Biozide	not readily biodegradable	2.0
Acesulfam	Süßungsmittel	under test conditions no biodegradation observed	1.4
Sucralose	Süßungsmittel	not readily biodegradable	1.4

Bei den dieser Kategorie zugeordneten Stoffen dominiert im **Mischsystem** und im **Trennsystem** ganz klar der **Kläranlagenablauf** als Hauptaustragspfad. Daneben können im Mischsystem dem Mischwasserüberlauf und im Trennsystem dem Regenwasserkanal eine gewisse Rolle zukommen, wogegen dem Klärschlamm in beiden Systemen zumeist nur eine geringe Bedeutung zukommen.

#### **Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar“:**

Dieser Kategorie wurde über SimplEstFATE nur 4-tert-Octylphenol zugeordnet. Gemeinsam mit der Verwendungsgruppe ist die Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie der Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 18 dargestellt.

Dominiert das **Mischsystem** in einem Kläranlageneinzugsgebiet ist als Hauptaustragspfad für die Stoffe dieser Kategorie der **Mischwasserüberlauf** zu erwarten. Eventuell kommt noch dem Regenwasserkanal eine gewisse Bedeutung zu, während der Klärschlamm und der Kläranlagenablauf voraussichtlich nur eine geringe bzw. keine Rolle spielen.

Dominiert das **Trennsystem** wird der **Regenwasserkanal** gegenüber dem Mischwasserüberlauf dominieren, während Klärschlamm nur eine geringe und der Kläranlagenablauf bei funktionierender Abwasserreinigung keine Rolle spielt.

Tabelle 18: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte.

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
<b>4-tert-Octylphenol</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable, failing 10 day window	3.5

**Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“:**

Die über SimplEstFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 19 zusammengestellt. Entgegen den Benchmark-Informationen aus Kläranlagendaten, die eine schlechte Abbaubarkeit anzeigen, wird Mecoprop über den OECD-Screeningtest als gut abbaubar eingestuft. Da die Einstufung nach Kläranlagendaten sehr deutlich ausfällt, dürfte hier die Einstufung aufgrund des OECD-Screeningtests für Kläranlagen zu einer falschen Einschätzung führen.

Tabelle 19: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte. *Kursiv geschriebene Stoffe werden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.*

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
<b>4-tert-Butylphenol</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable, failing 10 day window	3.1
<i>Mecoprop</i>	<i>Pestizide</i>	<i>readily biodegradable</i>	<i>1.3</i>
<b>Nicotin</b>	Psychotrope Substanzen	readily biodegradable	2.0

Dominiert das **Mischsystem** ist eine klare Dominanz des **Mischwasserüberlaufs** als Hauptaustragspfad für Stoffe dieser Kategorie zu erwarten, während die anderen Austragspfade voraussichtlich eine untergeordnete Rolle spielen.

Dominiert das **Trennsystem** ist eine klare Dominanz des **Regenwasserkanals** als Hauptaustragspfad zu erwarten, während wiederum den anderen Austragspfaden nur eine untergeordnete Rolle zukommt.

**Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar“:**

Dieser Kategorie wurde über SimplEstFATE nur Pentachlorophenol zugeordnet. Gemeinsam mit der Verwendungsgruppe ist die Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie der Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>oc</sub> in Tabelle 20 dargestellt.

Tabelle 20: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>oc</sub>-Werte.

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>oc</sub>
Pentachlorophenol	Pestizide	inherently biodegradable	4.3

Dominiert das **Mischsystem** in einem Kläranlageneinzugsgebiet ist für einen Stoff dieser Kategorie eine Dominanz des Hauptaustragspfad **Mischwasserüberlauf** zu erwarten. Daneben sind die anderen Austragspfade von geringerer Bedeutung.

Bei Dominanz des **Trennsystems** kann der **Regenwasserkanal** als dominanter Hauptaustragspfad angenommen werden. Daneben sind die anderen Austragspfade von geringerer Bedeutung.

**Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „mittel in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“:**

Dieser Kategorie konnten über die Kriterien von SimplEstFATE keine Stoffe zugeordnet werden.

Dominiert das **Mischsystem** ist der **Kläranlagenablauf** für Stoffe dieser Kategorie als Hauptaustragspfad zu erwarten. Daneben kommt auch dem **Mischwasserüberlauf**

relevante Bedeutung zu, während der Klärschlamm und Regenwasserkanal voraussichtlich nur eine geringe Rolle spielen.

Dominiert das **Trennsystem** wird der **Regenwasserkanal** vielfach der Hauptaustragspfad sein. Daneben kann aber auch dem **Kläranlagenablauf** relevante Bedeutung zu kommen, während dem Austrag über Klärschlamm und den Mischwasserüberlauf voraussichtlich nur eine geringe Rolle zukommt.

**Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar“:**

Die über SimplEstFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 21 zusammengestellt.

Tabelle 21: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte.

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
<b>Chlorothalonil</b>	Biozide	under test conditions no biodegradation observed	3.4
<b>Fipronil</b>	Biozide	not readily biodegradable	3.5
<b>Propargit</b>	Biozide	not readily biodegradable	3.8
<b>N-(1,3-dimethylbutyl)-N'-phenyl-p-phenylenediamin</b>	Industriechemikalien	not readily biodegradable	4.0
<b>Chlorpyrifos</b>	Pestizide	under test conditions no biodegradation observed	3.7
<b>Quinoxifen</b>	Pestizide	not readily biodegradable	4.4

Für die Stoffe dieser Kategorie dominiert im **Mischsystem** der **Klärschlamm** als Hauptaustragspfad. Daneben kommt aber auch dem **Mischwasserüberlauf** eine relevante

Bedeutung zu, während der Kläranlagenablauf und Regenwasserkanal eine unbedeutende Rolle spielen.

Im **Trennsystem** dominiert der **Regenwasserkanal** vor dem **Klärschlamm** als Hauptaustragspfade. Daneben kommt dem Kläranlagenablauf und Mischwasserüberlauf eine unbedeutende Rolle zu.

**Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“:**

Die über SimplestFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 22 zusammengestellt. Entgegen den Benchmark-Informationen aus Kläranlagendaten, die einen mittlere Abbaubarkeit anzeigen, werden Carbendazim und Diuron über den OECD-Screeningtest als schlecht abbaubar eingestuft. Carbendazim und Diuron liegen allerdings auch bei Daten zum Abbau von Kläranlagen nur knapp an der Grenze des schlechten Abbaus entfernt, womit auch hier nicht ganz eindeutige Informationen vorliegen.

Bei Stoffen dieser Kategorie dominiert im **Mischsystem** der **Kläranlagenablauf** als Hauptaustragspfad. Daneben kommt aber auch dem **Mischwasserüberlauf** eine Bedeutung zu, während der Klärschlamm und Regenwasserkanal eine unbedeutende Rolle spielen.

Tabelle 22: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplestFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte. *Kursiv geschriebene Stoffe wurden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.*

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
<b>4-chloro-o-cresol</b>	Biozide	under test conditions no biodegradation observed	2.4
<b>Bromacil</b>	Biozide	not readily biodegradable	1.6
<i>Diuron</i>	<i>Herbizide</i>	<i>under test conditions no biodegradation observed</i>	<i>2.4</i>

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>oc</sub>
<i>Carbendazim</i>	<i>Pestizide</i>	<i>not inherently biodegradable</i>	2.4
<b>Thiram</b>	Pestizide	not readily biodegradable	2.8
<b>1,2-Dichlor-4-nitrobenzol</b>	Pestizide	not readily biodegradable	2.6
<b>Thiamethoxam</b>	Pestizide	not readily biodegradable	2.3

Im **Trennsystem** dominiert der **Regenwasserkanal** vor dem **Kläranlagenablauf** als Hauptaustragspfade. Daneben kommt dem Klärschlamm und Mischwasserüberlauf eine unbedeutende Rolle zu.

**Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar“:**

Dieser Kategorie wurde über SimplEstFATE nur Diisononylphthalat zugeordnet. Gemeinsam mit der Verwendungsgruppe ist die Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie der Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>oc</sub> in Tabelle 23 dargestellt.

Dominiert das **Mischsystem** in einem Kläranlageneinzugsgebiet ist für diese Stoffe als Hauptaustragspfad aus der Siedlungswasserwirtschaft der **Mischwasserüberlauf** zu erwarten. Eventuell kommt noch dem Klärschlamm eine gewisse Bedeutung zu, während der Kläranlagenablauf und Regenwasserkanal voraussichtlich keine Rolle spielen.

Tabelle 23: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>oc</sub>-Werte.

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logK <sub>OC</sub>
<b>Diisononylphthalat</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable	5.5

Dominiert das **Trennsystem** wird der **Regenwasserkanal** gegenüber dem Mischwasserüberlauf deutlich an Bedeutung gewinnen. Eventuell kommt noch dem Klärschlamm eine gewisse Bedeutung zu, während der Kläranlagenablauf bei funktionierender Abwasserreinigung keine Rolle spielt.

**Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“:**

Die über SimplestFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 24 zusammengestellt. Entgegen den Informationen aus Kläranlagendaten, die einen mittlere Abbaubarkeit anzeigen werden 5-Methyl-1H-benzotriazol, Dibutylphthalat und Tributylphosphat über den OECD-Screeningtest als gut abbaubar eingestuft. Dibutylphthalat und Tributylphosphat liegen mit deutlich über 50% Abbau auf der Kläranlage im oberen Bereich der mittleren Kategorie, mit Tendenz zu einem guten Abbau. Lediglich 5-Methyl-1H-benzotriazol liegt mit einem Abbau auf der Kläranlage bei ca. 1/3 recht weit vom guten Abbau auf der Kläranlage entfernt, dem die Zuordnung zu dieser Kategorie entsprechen würde und kann damit als problematisch bei der Einstufung für die SimplestFATE-Kriterien betrachtet werden.

Tabelle 24: Stoffe der Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplestFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte. *Kursiv geschriebene Stoffe wurden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.*

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logKOC
<b>Bisphenol A</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable	3.1
<i>Dibutylphthalat</i>	<i>Industriechemikalien</i>	<i>readily biodegradable</i>	<i>3.1</i>
<b>Diisobutylphthalat</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable	3.1
<b>Dimethylphthalat</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable	1.6
<i>Tributylphosphat</i>	<i>Industriechemikalien</i>	<i>readily biodegradable</i>	<i>3.2</i>
<b>2-Butin-1,4-diol</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable	0.0

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logKOC
<b>1,4-Butandiol</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable	0.0
<b>Dec-1-ene</b>	Industriechemikalien	readily biodegradable	3.2
<b>5-Methyl-1H-benzotriazol</b>	Korrosionsschutzmittel	readily biodegradable	1.8

Dominiert das **Mischsystem** ist eine klare Dominanz des **Mischwasserüberlaufs** als Hauptaustragspfad für die Stoffe dieser Kategorie zu erwarten, während die anderen Austragspfade voraussichtlich eine untergeordnete Rolle spielen.

Dominiert das **Trennsystem** kann der **Regenwasserkanal** gegenüber dem Mischwasserüberlauf an Bedeutung gewinnen und dieser wiederum an Bedeutung verlieren, während wiederum den anderen Austragspfaden nur eine untergeordnete Rolle zukommt.

**Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar“:**

Dieser Kategorie wurde über SimpleEstFATE nur Clorofen zugeordnet. Gemeinsam mit der Verwendungsgruppe ist die Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie der Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 25 dargestellt.

Tabelle 25: Stoffe der Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimpleEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte.

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logKOC
<b>Clorofen</b>	Industriechemikalien	inherently biodegradable, fulfilling specific criteria	3.4

Dominiert das **Mischsystem** in einem Kläranlageneinzugsgebiet ist für die Stoffe dieser Kategorie eine klare Dominanz des Hauptaustragspfad **Klärschlamm** zu erwarten.

Daneben kommen auch dem Mischwasserüberlauf und der Kläranlagenablauf eine gewisse Bedeutung zu, während der Regenwasserkanal voraussichtlich keine Rolle spielt.

Auch bei Dominanz des **Trennsystems** kann der **Klärschlamm** als dominanter Hauptaustragspfad angenommen werden. Hier können auch der Regenwasserkanal und der Kläranlagenablauf eine Rolle spielen, während der Mischwasserüberlauf in der Regel ohne relevante Bedeutung ist.

**Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „mittel in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“:**

Die über SimplestFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 26 zusammengestellt. Entgegen den Benchmark-Informationen aus Kläranlagendaten, die eine schlechte Abbaubarkeit anzeigen wird Naphtalin über den OECD-Screeningtest als mittel abbaubar eingestuft. Hier zeigt sich wiederum eine gewisse Unschärfe der Einstufung nach SimplestFATE, die auf den Problemen mit der Kategorisierung der Abbaubarkeit beruht, wie sie in Kapitel 3.2.2 besprochen wurde.

Dominiert das **Mischsystem** ist der **Kläranlagenablauf** als Hauptaustragspfad zu erwarten. Daneben kommt auch dem Mischwasserüberlauf Bedeutung zu, während der Klärschlamm und Regenwasserkanal voraussichtlich nur eine geringe Rolle spielen.

Tabelle 26: Stoffe der Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „mittel in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplestFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte. *Kursiv geschriebene Stoffe werden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.*

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logKOC
<b>(4-Nonylphenoxy)essigsäure</b>	Industriechemikalien	not readily biodegradable; moderately/partly biodegradable	3.3
<i>Naphthalin</i>	<i>Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte</i>	<i>inherently biodegradable</i>	<i>3.0</i>

Dominiert das **Trennsystem** wird der **Regenwasserkanal** vielfach der Hauptaustragspfad sein. Daneben kann aber auch dem Kläranlagenablauf eine Bedeutung zu kommen, während der Austrag über Klärschlamm und den Mischwasserüberlauf voraussichtlich nur eine geringe Rolle zukommt.

**Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar“:**

Die über SimplEstFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 27 zusammengestellt.

Tabelle 27: Stoffe der Kategorie Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte.

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logKOC
<b>Propiconazol</b>	Fungizide	not readily biodegradable	3.4
<b>Anthracen</b>	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	inherently biodegradable, not fulfilling specific criteria	4.3
<b>2,4,5-Trichloroanilin</b>	Industriechemikalien	not inherently biodegradable	5.6
<b>2,4,6-Tri-tert-butylphenol</b>	Industriechemikalien	not inherently biodegradable	5.3
<b>2,4-Di-tert-butylphenol</b>	Industriechemikalien	not inherently biodegradable	3.7
<b>Cyclododecan</b>	Industriechemikalien	not readily biodegradable	3.8

Bei Stoffen dieser Kategorie dominiert im **Mischsystem** der **Klärschlamm** als Hauptaustragspfad. Daneben kommt aber auch dem Mischwasserüberlauf eine relevante Bedeutung zu, während der Kläranlagenablauf und Regenwasserkanal eine unbedeutende Rolle spielen.

Bei diesen Stoffen dominiert im **Trennsystem Klärschlamm** und **Regenwasserkanal** als Hauptaustragspfade. Daneben kommt dem Kläranlagenablauf und Mischwasserüberlauf eine unbedeutende Rolle zu.

**Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“:**

Die über SimplEstFATE dieser Kategorie zugeordneten Stoffe sind gemeinsam mit ihrer Verwendungsgruppe, der Einstufung aus dem OECD-Screeningtest sowie dem Medianwert der erhobenen Einzelwerte von logK<sub>OC</sub> in Tabelle 28 zusammengestellt. Entgegen den Benchmark-Informationen aus Kläranlagendaten, die eine mittlere Abbaubarkeit anzeigen, wird Benzotriazol über den OECD-Screeningtest als schlecht abbaubar eingestuft. Benzotriazol liegt allerdings auch bei Daten zum Abbau von Kläranlagen nur knapp von der Grenze des schlechten Abbaus entfernt, womit auch hier nicht ganz eindeutige Informationen vorliegen.

Tabelle 28: Stoffe der Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ und „gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK<sub>OC</sub>-Werte. *Kursiv geschriebene Stoffe wurden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.*

Parametername	Verwendungsgruppe	OECD-Screeningtest	logKOC
<b>Methyl-1H-benzotriazol</b>	Industriechemikalien	not readily biodegradable; under test conditions no biodegradation observed	2.3
<b>1,2,4-Triazol</b>	Industriechemikalien	not readily biodegradable	0.8
<b>1,3-Dichlor-4-nitrobenzol</b>	Industriechemikalien	not readily biodegradable	2.5
<b>2-Chloranilin</b>	Industriechemikalien	not readily biodegradable	2.2
<b>3,5,5-Trimethyl-1-hexanol</b>	Industriechemikalien	not readily biodegradable	2.0
<i><b>Benzotriazol</b></i>	<i>Korrosionsschutzmittel</i>	<i>not biodegradable</i>	<i>1.9</i>

Hier dominiert im **Mischsystem** und im **Trennsystem** ganz klar der **Kläranlagenablauf** als Hauptaustragspfad. Daneben können im Mischsystem dem Mischwasserüberlauf und im Trennsystem dem Regenwasserkanal eine gewisse Rolle spielen. Dem Klärschlamm kommt in beiden Systemen zumeist nur eine geringe Bedeutung zu.

### **Zusammenfassung der Unterschiede zwischen Ansätzen zur Kategorisierung**

Eine Stoffbilanzierung der Eintrags- und Austragspfade der Siedlungswasserwirtschaft und eine Einstufung in Kategorien mit Hilfe von Kläranlagendaten konnte für insgesamt 63 Stoffe durchgeführt werden. Eine Kategorisierung nach SimplEstFATE über OECD-Screeningtests und  $\log K_{oc}$ -Werte war für insgesamt 96 Stoffe möglich. Vor allem aufgrund des Fehlens der OECD-Screeningwerte war die Übereinstimmung bei den Vertretern dieser beiden Stoffgruppen gering und es konnte nur für insgesamt 27 Stoffe eine Kategorisierung für beide Methoden durchgeführt werden. Während bei der Adsorption die Stoffe immer derselben Kategorie zugeordnet werden konnten, kam es beim Abbau in 11 Fällen (ca. 40%) zu Abweichungen bei der Charakterisierung. Dies entspricht etwa auch dem Übereinstimmungsgrad wie er in Kapitel 3.2.2 für alle Werte aus Margot et al. (2015) gefunden wurde. Bei genauerer Betrachtung sieht man, dass in 7 der 11 Fälle mit Abweichung, diese nur zwischen gut und mittel oder zwischen mittel und schlecht bestand und bei etwas anderer Festlegung der Grenzen auch eine Übereinstimmung hätte erreicht werden können. Eine deutlich falsche Zuordnung lag daher nur bei ca. 15% der Fälle vor. Ein Potential zur weiteren Verbesserung der Einstufung zu den Kategorien erscheint über Anpassung der Klassengrenzen möglich. Eine weitere Anpassung der Kategorisierung bei SimplEstFATE wurde jedoch nicht durchgeführt, da die Anzahl der dieser Betrachtung zugrunde liegenden Stoffe zu gering ist.

# 4 Zusammenfassung

Ziel des Projektes war es, einen Modellansatz für die Abschätzung des Hauptaustragspfades von Spurenstoffen aus der Siedlungswasserwirtschaft in Abhängigkeit der Einsatzbereiche und der chemisch-physikalischen Stoffeigenschaften zu entwickeln. Dazu wurden ein vorhandener Messdatensatz zu Konzentrationen von Spurenstoffen in den Ein- und Austragspfaden der Siedlungswasserwirtschaft und deren chemisch-physikalischen Eigenschaften erweitert und verbessert, für Stoffe mit ausreichendem Informationsstand mittlere Stoffbilanzen für die Siedlungswasserwirtschaft errechnet sowie das Model SimplEstFATE zur Abschätzung von Hauptaustragspfaden aus der Siedlungswasserwirtschaft entwickelt, erläutert und angewandt.

Zur Erhebung der chemisch-physikalischen Eigenschaften wurde auf etablierte Datenbanken wie NORMAN, ECHA, PUBCHEM und ChemSpider zugegriffen. Zur Erweiterung und Verbesserung des Messwertdatensatzes wurde eine gezielte und vertiefende Literaturrecherche durchgeführt und bei fehlenden Einzeldaten wurden die Autor:innen gebeten, diese zur Verfügung zu stellen. Insgesamt wurde so ein umfassender Datensatz mit Messwerten von 274 Stoffen aus 58 unterschiedlichen Studien zusammengetragen. Für 63 dieser Stoffe konnte über diese Daten eine Stoffbilanz der Siedlungswasserwirtschaft mit allen Austragspfaden berechnet und somit eine Basis geschaffen werden, Hauptaustragspfade als Grundlage für die Modellerstellung auf Datenbasis zu identifizieren. Zudem konnten diese Daten über die Stoffbilanz im Detail auf ihre Korrektheit und Nutzbarkeit geprüft werden.

Als Basis der Modellentwicklung von SimplEstFATE wurden Untersuchungen aus Kläranlagen als Benchmarkdaten herangezogen, welche für eine Vielzahl von Stoffen den Verbleib in der Kläranlage (Abbau, Adsorption am Klärschlamm oder Austrag mit dem Ablauf) darstellen. Diese Untersuchungsergebnisse wurden zum einen genutzt, um eine bestmögliche Kategorisierung der Stoffe in Hinblick auf Abbau und Adsorption zu erhalten und darauf aufbauend mit Hilfe der Stoffbilanzen der Siedlungswasserwirtschaft für die unterschiedlichen Kategorien Hauptaustragspfade zu ermitteln. Zum anderen wurden solche Untersuchungen als Benchmarkdatensatz dazu genutzt um geeignetere Eingangsgrößen für eine Einteilung der Abbaubarkeit und der Adsorbierbarkeit in Kategorien von gut bis schlecht in Fällen zu erhalten. Es wurde als wesentlicher

Entwicklungsschritt für SimpleEstFATE untersucht wie weit die Ergebnisse zu Untersuchungen auf Kläranlagen mit den Kenngrößen für die Adsorption wie  $K_{OC}$  oder  $K_{OW}$  und den Abbau  $DT_{50}$  oder  $k_{bio}$  korrelieren und versucht daraus möglichst sinnvolle Grenzen für die Einteilung von Kategorien im Modell zu finden.

In seinem aktuellen Entwicklungsstand arbeitet SimpleEstFATE nun mit 18 unterschiedlichen Kategorien von Stoffen und für jede Kategorie sind die Hauptaustragspfade bekannt. Um den/die Hauptaustragspfad/e eines Stoffes identifizieren zu können, ist es daher erforderlich den Stoff einer Kategorie zuzuordnen. Die Faktoren für die Kategorisierung sind der Einsatzbereich (3 Kategorien), die Adsorbierbarkeit (2 Kategorien) und die Abbaubarkeit (3 Kategorien) eines Stoffes. Zudem können die Hauptaustragspfade getrennt nach Kläranlageneinzugsgebieten ermittelt werden, wo das Misch- bzw. das Trennsystem überwiegt.

Für den Einsatzbereich eines Stoffes werden drei Kategorien unterschieden: (1) Einsatz überwiegend in Haushalten und Industrie mit Eintrag in den Schmutzwasserkanal, (2) Einsatz überwiegend auf städtischen Oberflächen oder Herkunft aus atmosphärischer Deposition und Verkehr und Eintrag mit dem Niederschlagsabfluss und (3) gemischter Einsatz mit Einträgen sowohl mit dem Schmutzwasser als auch mit dem Niederschlagsabfluss.

Für die Adsorbierbarkeit werden zwei Kategorien unterschieden: (1) gut adsorbierbar und (2) schlecht adsorbierbar. Als Kriterium hat sich der  $K_{OC}$  als geeignet erweisen. Die Grenze zwischen gut und schlecht adsorbierbar wird bei einem  $\log K_{OC}$  von 3,3 festgelegt. Allerdings wurde auch gezeigt, dass eine Kategorisierung über Adsorptionskennwerte für Pharmazeutika nicht funktioniert. Für Pharmazeutika, für die Daten vorlagen, war die Adsorption in der überwiegenden Zahl der Fälle schlecht, auch wenn der  $K_{OC}$  hoch war. Pharmazeutika werden daher bis auf weiteres der Kategorie „schlecht adsorbierbar“ zugeordnet.

Für die Abbaubarkeit werden drei Kategorien unterschieden: (1) gut auf der Kläranlage abbaubar, (2) mittel auf der Kläranlage abbaubar und (3) schlecht auf der Kläranlage abbaubar. Von den allgemein verfügbaren Daten erwiesen sich die Angaben aus den OECD Screeningtests mit qualitativen Angaben zur Abbaubarkeit eher geeignet um diese Einteilung vorzunehmen, als Angaben zur Halbwertszeit ( $DT_{50}$ ) aus OECD Simulationstests, die für unterschiedliche Umweltmedien durchgeführt werden. Allerdings ist die Verfügbarkeit der OECD Screeningtests nicht so umfangreich, wie es für die OECD

Simulationstests der Fall ist. Zudem zeigen auch die OECD-Screeningtests nur eine eingeschränkte Trefferquote bei der Abschätzung des Abbaus auf der Kläranlage. Für eine bessere Einschätzung eines neuen Stoffes in Hinblick auf die Abbaubarkeit auf der Kläranlage, wären daher gezielte Abbauversuche unter den Bedingungen einer schwachbelasteten biologischen Kläranlage vorteilhaft.

Mit SimplEstFATE liegt nun ein Instrument vor, mit dem aus Angaben zu dem Einsatzbereich, der Abbaubarkeit und der Adsorbierbarkeit eine grobe Abschätzung getroffen werden kann, über welchen Austragspfade ein Stoff die Siedlungswasserwirtschaft verlässt und wo daher am ehesten nach ihm zu suchen ist bzw. in welchem Austragspfad Maßnahmen zu einer (weiteren) Emissionsreduktion wirksam sein können. Über den  $K_{OC}$  lässt sich die Adsorbierbarkeit gut einschätzen. Eine Ausnahme stellen die Pharmazeutika dar. Warum dies der Fall ist, konnte nicht ermittelt werden. Allenfalls spielt eine vergleichsweise gute Löslichkeit der Pharmazeutika in diesem Zusammenhang eine Rolle. Der Abbau auf der Kläranlage ist für die Abschätzung der Hauptaustragspfade von großer Relevanz. Schlechte Eignung bzw. geringe Verfügbarkeit entsprechender Datensätze schränken die Anwendbarkeit des Modells ein. Gezielte Abbauversuche unter Kläranlagenbedingungen könnten hier eine Verbesserung bringen.

Eine erste Anwendung von SimplEstFATE für 96 Stoffe zeigt, dass je nach Einsatzbereich und chemisch-physikalischen Eigenschaften unterschiedliche Austragspfade die höchste Relevanz aufweisen (Tabelle 29). Von den untersuchten Stoffen wurden für Einzugsgebiete mit Mischkanalsystem 26 mal der Klärschlamm, 36 mal der Ablauf der Kläranlage sowie 47 mal der Mischwasserüberlauf als Hauptaustragspfad identifiziert und im Falle eines Trennkanalsystems 26 mal der Klärschlamm, 34 mal der Ablauf der Kläranlage sowie 36 mal der Regenwasserkanal. Das bedeutet, alle 4 Austragspfade können für die Emissionen von Spurenstoffen in die Umwelt je nach betrachtetem Stoff zu einem Hauptaustragspfad werden.

Eine Verbesserung von SimplEstFATE ist in erster Linie durch eine Verbesserung der Datenbasis möglich. Dabei würden zum einen Messdaten in den Austragspfaden (am besten unterschieden nach dominantem Kanalsystem) sowie die Abbaubarkeit unter Kläranlagenbedingungen benötigt werden.

Tabelle 29: Hauptaustragspfade für Stoffe aus der Siedlungswasserwirtschaft in Abhängigkeit der Zuordnung zu Stoffkategorien für ein Kläranlageneinzugsgebiet mit überwiegend Mischsystem (MS) oder Trennsystem (TS). Fettgedruckte Austragspfade konnten quantitative überprüft werden. Bei kursiv dargestellten Austragspfaden beruht die Zuordnung auf einem Expertjudgement. N zeigt die Anzahl der über SimplEstFATE bewerteten Stoffe je Kategorie.

Kategorie	Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser	Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser	Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser
<b>gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar</b>	<i>MS: Mischwasserüberlauf</i> <i>TS: Regenwasserkanal und Mischwasserüberlauf</i> N = 7	<i>MS: Mischwasserüberlauf</i> <i>TS: Regenwasserkanal</i> N = 1	<i>MS: Mischwasserüberlauf</i> <b>TS: Regenwasserkanal</b> N = 1
<b>gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar</b>	<b>MS: Mischwasserüberlauf</b> <i>TS: Regenwasserkanal</i> N = 12	<i>MS: Mischwasserüberlauf</i> <i>TS: Regenwasserkanal</i> N = 11	<b>MS: Mischwasserüberlauf</b> <b>TS: Regenwasserkanal</b> N = 3
<b>mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar</b>	<b>MS: Klärschlamm</b> <b>TS: Klärschlamm</b> N = 3	<b>MS: Klärschlamm</b> <i>TS: Klärschlamm</i> N = 2	<i>MS: Mischwasserüberlauf</i> <i>TS: Regenwasserkanal</i> N = 1
<b>mittel in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar</b>	<b>MS: KA-Ablauf</b> <b>TS: KA-Ablauf</b> N = 9	<b>MS: KA-Ablauf</b> <b>TS: KA-Ablauf und Regenwasserkanal</b> N = 9	<b>MS: KA-Ablauf und Mischwasserüberlauf</b> <b>TS: Regenwasserkanal</b> N = 0
<b>schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar</b>	<b>MS: Klärschlamm</b> <b>TS: Klärschlamm</b> N = 10	<b>MS: Klärschlamm</b> <b>TS: Klärschlamm &gt; Regenwasserkanal</b> N = 6	<b>MS: Klärschlamm &gt; Mischwasserüberlauf</b> <b>TS: Regenwasserkanal &gt; Klärschlamm</b> N = 6
<b>schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar</b>	<b>MS: KA-Ablauf</b> <b>TS: KA-Ablauf</b> N = 12	<b>MS: KA-Ablauf</b> <b>TS: KA-Ablauf &gt; Regenwasserkanal</b> N = 9	<b>MS: KA-Ablauf</b> <b>TS: Regenwasserkanal &gt; KA-Ablauf</b> N = 7

# Literaturverzeichnis

Aemig, Q., Hélias, A., Patureau, D., 2021. Impact assessment of a large panel of organic and inorganic micropollutants released by wastewater treatment plants at the scale of France. *Water Res.* 188, 116524. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.116524>

Alygizakis, N.A., Besselink, H., Paulus, G.K., Oswald, P., Hornstra, L.M., Oswaldova, M., Medema, G., Thomaidis, N.S., Behnisch, P.A., Slobodnik, J., 2019. Characterization of wastewater effluents in the Danube River Basin with chemical screening, in vitro bioassays and antibiotic resistant genes analysis. *Environ. Int.* 127, 420–429. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2019.03.060>

Amann, A., Clara, M., Gabriel, O., Hochedlinger, G., Humer, M., Humer, F., Kittlaus, S., Kulcsar, S., Scheffknecht, C., Trautvetter, H., Zessner, M., Zoboli, O., 2019. STOBIMO Spurenstoffe. Bundesministerium für Nachhaltigkeit und Tourismus, Wien. [https://info.bml.gv.at/dam/jcr:18f4cea9-a7b2-49f3-baf0-b47c64926a2e/STOBIMO%20Spurenstoffe\\_Endbericht.pdf](https://info.bml.gv.at/dam/jcr:18f4cea9-a7b2-49f3-baf0-b47c64926a2e/STOBIMO%20Spurenstoffe_Endbericht.pdf)

Becouze-Lareure, C., Dembélé, A., Coquery, M., Cren-Olivé, C., Bertrand-Krajewski, J.-L., 2019. Assessment of 34 dissolved and particulate organic and metallic micropollutants discharged at the outlet of two contrasted urban catchments. *Sci. Total Environ.* 651, 1810–1818. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.10.042>

Birch, H., Mikkelsen, P.S., Jensen, J.K., Lützhøft, H.-C.H., 2011. Micropollutants in stormwater runoff and combined sewer overflow in the Copenhagen area, Denmark. *Water Sci. Technol.* 64, 485–493. <https://doi.org/10.2166/wst.2011.687>

Braun, R., Hartmann, C., Kreuzinger, N., Lenz, K., Schaar, H., Scheffknecht, C., 2020. Untersuchung von Abwässern und Gewässern auf unterschiedliche toxikologische Endpunkte. Bundesministerium für Landwirtschaft, Regionen und Tourismus, Wien. [https://info.bml.gv.at/dam/jcr:e813d086-8b30-4d9d-bb03-2a1996aeb669/Projektbericht\\_Biologische\\_Wirktests.pdf](https://info.bml.gv.at/dam/jcr:e813d086-8b30-4d9d-bb03-2a1996aeb669/Projektbericht_Biologische_Wirktests.pdf)

Bressy, A., Gromaire, M.-C., Lorgeoux, C., Saad, M., Leroy, F., Chebbo, G., 2012. Towards the determination of an optimal scale for stormwater quality management:

Micropollutants in a small residential catchment. *Water Res.* 46, 6799–6810.

<https://doi.org/10.1016/j.watres.2011.12.017>

Burant, A., Selbig, W., Furlong, E.T., Higgins, C.P., 2018. Trace organic contaminants in urban runoff: Associations with urban land-use. *Environ. Pollut.* 242, 2068–2077.

<https://doi.org/10.1016/j.envpol.2018.06.066>

Çifci, D.İ., Kinacı, C., Arikan, O.A., 2013. Occurrence of Phthalates in Sewage Sludge from Three Wastewater Treatment Plants in Istanbul, Turkey. *CLEAN – Soil Air Water* 41, 851–855.

<https://doi.org/10.1002/clen.201200212>

Cincinelli, A., Martellini, T., Misuri, L., Lanciotti, E., Sweetman, A., Laschi, S., Palchetti, I., 2012. PBDEs in Italian sewage sludge and environmental risk of using sewage sludge for land application. *Environ. Pollut. Barking Essex* 1987 161, 229–234.

<https://doi.org/10.1016/j.envpol.2011.11.001>

Clara, M., 2003. Das Verhalten ausgewählter organischer Spurenstoffe bei der biologischen Abwasserreinigung. Technische Universität Wien, Dissertation.

Clara, M., Denner, M., Gans, O., Scharf, S., Windhofer, G., Zessner, M., 2009. Emissionen organischer und anorganischer Stoffe aus kommunalen Kläranlagen. Umweltbundesamt, Wien. <https://www.umweltbundesamt.at/fileadmin/site/publikationen/rep0247.pdf>

Clara, M., Gruber, G., Hohenblum, P., Hofer, T., Kittlaus, S., Lenz, K., Liebmann, B., Liedermann, M., Maier, R., Mallow, O., Pessenlehner, M., Pichler, M., Polgar, B., Rechberger, H., Scheffknecht, C., Spacek, S., Steidl, C., Zessner, M., 2020. TEMPEST-Erfassung von Emissionen ausgewählter Spurenstoffe aus Kanalsystemen und Handlungsoptionen. Endbericht. Bundesministerium für Landwirtschaft, Regionen und Tourismus, Wien. [https://info.bml.gv.at/dam/jcr:40ddc08c-188e-4540-87a4-664dca3e91a4/TEMPEST\\_Endbericht.pdf](https://info.bml.gv.at/dam/jcr:40ddc08c-188e-4540-87a4-664dca3e91a4/TEMPEST_Endbericht.pdf)

Clara, M., Gruber, G., Humer, F., Hofer, T., Kretschmer, F., Ertl, T., Scheffknecht, C., Weiss, S., 2014. Spurenstoffemissionen aus Siedlungsgebieten und von Verkehrsflächen. SCHTURM: Studie im Auftrag des Bundesministeriums für Land- und Forstwirtschaft, Umwelt und Wasserwirtschaft, Wien. <https://info.bml.gv.at/dam/jcr:260d1732-1bc0-413e-893d->

[f09273ceed7d/Spurenstoffemissionen%20aus%20Siedlungsgebieten%20und%20von%20Verkehrsmitteln%20in%20Siedlungsgebieten%20SCHTURM\\_Endbericht\\_Final\\_Cover%20Deckblatt.pdf](#)

Clara, M., Hartmann, C., Deutsch, K., 2019. Arzneimittelwirkstoffe und Hormone in Fließgewässern - GZÜV Sondermessprogramm 2017/2018. Bundesministerium für Nachhaltigkeit und Tourismus, Wien. [https://info.bml.gv.at/dam/jcr:6bab30a8-49b3-4d46-8658-696ffbf4f5a1/GZ%3%9CV\\_SP\\_Arzneimittel\\_Fliessgew%3%A4sser\\_Bericht\\_gsb.pdf](https://info.bml.gv.at/dam/jcr:6bab30a8-49b3-4d46-8658-696ffbf4f5a1/GZ%3%9CV_SP_Arzneimittel_Fliessgew%3%A4sser_Bericht_gsb.pdf)

Clara, M., Hartmann, C., Scheffknecht, C., 2016. Klärschlamm und Boden: Eintrag von Spurenstoffen auf landwirtschaftlich genutzte Böden. Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Umwelt und Wasserwirtschaft sowie Land Vorarlberg, Wien und Bregenz. <https://vorarlberg.at/documents/302033/472528/Eintrag+von+Spurenstoffen+auf+landwirtschaftlich+gen%3%BCtztte+B%3%B6den.pdf/9517b6c0-c879-adeb-d234-67ef1b906b59?t=1630929358338>

Clara, M., Lenz, K., Spira, Y., Weiß, S., Piberhofer, B., Minniberger, G., 2017. Emissionen ausgewählter prioritärer und sonstiger Stoffe aus kommunalen Kläranlagen. Bundesministerium für Land- und Forstwirtschaft, Umwelt und Wasserwirtschaft, Wien. [https://info.bml.gv.at/dam/jcr:b40e4cdf-f344-42a8-ab8e-ccd3358b3ebe/2017\\_Emissionen\\_kommunale\\_Kl%3%A4ranlagen.pdf](https://info.bml.gv.at/dam/jcr:b40e4cdf-f344-42a8-ab8e-ccd3358b3ebe/2017_Emissionen_kommunale_Kl%3%A4ranlagen.pdf)

Clara, M., Scheffknecht, C., Weiß, S., 2013. Eintrag von Arzneimittelwirkstoffen in die Umwelt.

Clara, M., Gans, O., Weiß, S., Windhofer, G., Stadlbauer, H., 2011. Eintrag von Arzneimittelwirkstoffen in die aquatische Umwelt – Untersuchungszeitraum April 2010. Amt der Steiermärkischen Landesregierung, Fachabteilung 17C - Technische Umweltkontrolle, Gewässeraufsicht (Hrsg.). Dokumentation der Gewässeraufsicht GA-02-2011, Graz

Comber, S., M. Gardner, P. Sörme und B. Ellor, 2019. The removal of pharmaceuticals during wastewater treatment: Can it be predicted accurately? Science of The Total Environment 676: 222-230. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.04.113>

Cristale, J., Lacorte, S., 2015. PBDEs versus NBFR in wastewater treatment plants: occurrence and partitioning in water and sludge. *AIMS Environ. Sci.* 533–546. [10.3934/environsci.2015.3.533](https://doi.org/10.3934/environsci.2015.3.533)

Dreier, H., 2024. Modellierung des Entferungsverhaltens von Spurenstoffen auf Kläranlagen. Technische Universität Wien, Bachelorarbeit.

EC (2003). Technical Guidance Document on Risk Assessment in Support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment for new Notified Substances and Commission Regulation (EC) No. 1488/94 on Risk Assessment for Existing Substances and Directive 98/8/EC of the European Parliament and of the Council Concerning the Placing of Biocidal Products on the Market.

Ekpeghere, K. I., Sim, W. J., Lee, H. J., & Oh, J. E. (2018). Occurrence and distribution of carbamazepine, nicotine, estrogenic compounds, and their transformation products in wastewater from various treatment plants and the aquatic environment. *Science of the Total Environment*, 640, 1015-1023. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.05.218>

Eljarrat, E., Marsh, G., Labandeira, A., Barceló, D., 2008. Effect of sewage sludges contaminated with polybrominated diphenylethers on agricultural soils. *Chemosphere* 71, 1079–1086. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2007.10.047>

Fairbairn, D.J., Elliott, S.M., Kiesling, R.L., Schoenfuss, H.L., Ferrey, M.L., Westerhoff, B.M., 2018. Contaminants of emerging concern in urban stormwater: Spatiotemporal patterns and removal by iron-enhanced sand filters (IESFs). *Water Res.* 145, 332–345. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2018.08.020>

Forti, G., 2024. Software-based evaluation of emerging pollutants' removal efficiency in wastewater treatment plants. Università di Trento. Master thesis.

Fu, L., Du, B., Wang, F., Lam, J.C.W., Zeng, L., Zeng, E.Y., 2017. Organophosphate Triesters and Diester Degradation Products in Municipal Sludge from Wastewater Treatment Plants in China: Spatial Patterns and Ecological Implications. *Environ. Sci. Technol.* 51, 13614–13623. <https://doi.org/10.1021/acs.est.7b04106>

Fuchs, S., S. Toshovski, M. Kaiser, F. Sacher und A. Thoma, 2020. Belastung der Umwelt mit Bioziden realistischer erfassen - Schwerpunkt Einträge über Kläranlagen [online].

Umweltbundesamt (Deutschland). Dessau-Roßlau. UBA-Texte. 169/2020.  
[umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/479/publikationen/texte\\_169-2020\\_belastung\\_der\\_umwelt\\_mit\\_bioziden\\_realistischer\\_erfassen\\_-\\_schwerpunkt\\_eintraege\\_ueber\\_klaeranlagen.pdf](https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/479/publikationen/texte_169-2020_belastung_der_umwelt_mit_bioziden_realistischer_erfassen_-_schwerpunkt_eintraege_ueber_klaeranlagen.pdf)

Gabet-Giraud, V., Miège, C., Choubert, J.M., Ruel, S.M., Coquery, M., 2010. Occurrence and removal of estrogens and beta blockers by various processes in wastewater treatment plants. *Sci. Total Environ.* 408, 4257–4269.  
<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2010.05.023>

Gasperi, J., Sebastian, C., Ruban, V., Delamain, M., Percot, S., Wiest, L., Mirande, C., Caupos, E., Demare, D., Kessoo, M.D.K., Saad, M., Schwartz, J.J., Dubois, P., Fratta, C., Wolff, H., Moilleron, R., Chebbo, G., Cren, C., Millet, M., Barraud, S., Gromaire, M.C., 2014. Micropollutants in urban stormwater: occurrence, concentrations, and atmospheric contributions for a wide range of contaminants in three French catchments. *Environ. Sci. Pollut. Res.* 21, 5267–5281. <https://doi.org/10.1007/s11356-013-2396-0>

Helsel DR (2006): Datenfälschung: Wie das Ersetzen von Werten für nicht nachgewiesene Stoffe Ergebnisse ruinieren kann und was man dagegen tun kann. *Chemosphere* 65:2434–2439. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2006.04.051>

Helsel DR (2011): *Statistics for Censored Environmental Data Using Minitab® and R*, 2nd edn. ISBN: 9781118162729. John Wiley & Sons, Inc, Hoboken, NJ, USA

Herrero, P., Borrull, F., Marcé, R.M., Pocurull, E., 2014. A pressurised hot water extraction and liquid chromatography–high resolution mass spectrometry method to determine polar benzotriazole, benzothiazole and benzenesulfonamide derivatives in sewage sludge. *J. Chromatogr. A* 1355, 53–60. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2014.05.086>

Hohenblum, P., Sattelberger, R., Scharf, S., 2000. Abwasser- und Klärschlammuntersuchungen in der Pilotkläranlage Entsorgungsbetriebe Simmering (EbS). Umweltbundesamt, Wien.

Iancu, V. I., Radu, G. L., & Scutariu, R. (2019). A new analytical method for the determination of beta-blockers and one metabolite in the influents and effluents of three urban wastewater treatment plants. *Analytical Methods*, 11(36), 4668-4680.  
<https://doi.org/10.1039/C9AY01597C>

Jones, V., Gardner, M., Ellor, B., 2014. Concentrations of trace substances in sewage sludge from 28 wastewater treatment works in the UK. *Chemosphere* 111, 478–484. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2014.04.025>

Joss, A., S. Zabczynski, A. Gobel, B. Hoffmann, D. Löffler, C. S. McArdell, T. A. Ternes, A. Thomsen, und H. Siegrist. 2006. Biological degradation of pharmaceuticals in municipal wastewater treatment: proposing a classification scheme. *Water Res* 40. 1686-1696. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2006.02.014>

Kay, P., Hughes, S.R., Ault, J.R., Ashcroft, A.E., Brown, L.E., 2017. Widespread, routine occurrence of pharmaceuticals in sewage effluent, combined sewer overflows and receiving waters. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2016.10.087>

KEHOP, 2021. Strategic Assessments supporting the long term conservation of natural values of community interest as well as the national implementation of the EU Biodiversity Strategy to 2020. <https://termeszetem.hu/en/project/the-project>

Kim, M., Guerra, P., Theocharides, M., Barclay, K., Smyth, S.A., Alaei, M., 2013. Parameters affecting the occurrence and removal of polybrominated diphenyl ethers in twenty Canadian wastewater treatment plants. *Water Res.* 47, 2213–2221. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2013.01.031>

Kittlaus, S., Clement, A., Kardos, M. K., Dudás, K. M., Weber, N., Zoboli, O., & Zessner, M., 2024. Inventory of hazardous substance concentrations in different environmental compartments in the Danube river basin (2.0.0) [Data set]. TU Wien. <https://doi.org/10.48436/q5rca-4tz18>

Knoth, W., Mann, W., Meyer, R., Nebhuth, J., 2007. Polybrominated diphenyl ether in sewage sludge in Germany. *Chemosphere, Halogenated Persistent Organic Pollutants Dioxin* 2004 67, 1831–1837. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2006.05.113>

Lakshminarasimman, Narasimman, Oscar Quiñones, Brett J. Vanderford, Pablo Campo-Moreno, Eric V. Dickenson, und Drew C. McAvoy, 2018. „Biotransformation and sorption of trace organic compounds in biological nutrient removal treatment systems“. *Sci. Total Environ.* 640–641, 62–72. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.05.145>

Lambert, B., Fuchs, S., Toshovski, S., Sacher, F., Thoma, A., 2014. Entwicklung eines Bilanzierungsinstrumentes für den Eintrag von Schadstoffen aus kommunalen Kläranlagen in Gewässer 207.

Launay, M.A., 2017. Organic micropollutants in urban wastewater systems during dry and wet weather - Occurrence, spatio-temporal distribution and emissions to surface waters (Dissertation). Universität Stuttgart, Germany.

Lautz, L. S., J. Struijs, T. M. Nolte, A. M. Breure, E. van der Grinten, D. van de Meent und R. van Zelm (2017). Evaluation of SimpleTreat 4.0: Simulations of pharmaceutical removal in wastewater treatment plant facilities. *Chemosphere* 168: 870-876.  
<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2016.10.123>

Law, R.J., Allchin, C.R., de Boer, J., Covaci, A., Herzke, D., Lepom, P., Morris, S., Tronczynski, J., de Wit, C.A., 2006. Levels and trends of brominated flame retardants in the European environment. *Chemosphere, Brominated Flame Retardants (BFRs) in the Environment* 64, 187–208. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2005.12.007>

Lee L (2020): NADA: Nondetects and Data Analysis for Environmental Data: R package.  
<https://CRAN.R-project.org/package=NADA>

Lee, Y.-S., Lee, S., Lim, J.-E., Moon, H.-B., 2019. Occurrence and emission of phthalates and non-phthalate plasticizers in sludge from wastewater treatment plants in Korea. *Sci. Total Environ.* 692, 354–360. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.07.301>

Lenka, S. P., Kah, M., & Padhye, L. P. (2021). A review of the occurrence, transformation, and removal of poly-and perfluoroalkyl substances (PFAS) in wastewater treatment plants. *Water research*, 199, 117187. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2021.117187>

Liska I, Wagner F, Sengl M, Deutsch K, Slobodník J, Paunovic M., 2021. Joint Danube survey 4 scientific report: a shared analysis of the Danube river. JDS4, Wien

Liu, W. R., Yang, Y. Y., Liu, Y. S., Zhang, L. J., Zhao, J. L., Zhang, Q. Q., ... & Ying, G. G. (2017). Biocides in wastewater treatment plants: Mass balance analysis and pollution load estimation. *Journal of hazardous materials*, 329, 310-320.  
<https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2017.01.057>

Loos, R., Carvalho, R., António, D.C., Comero, S., Locoro, G., Tavazzi, S., Paracchini, B., Ghiani, M., Lettieri, T., Blaha, L., Jarosova, B., Voorspoels, S., Servaes, K., Haglund, P., Fick, J., Lindberg, R.H., Schwesig, D., Gawlik, B.M., 2013. EU-wide monitoring survey on emerging polar organic contaminants in wastewater treatment plant effluents. *Water Res.* 47, 6475–6487. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2013.08.024>

Mailler, R., Gasperi, J., Chebbo, G., Rocher, V., 2014. Priority and emerging pollutants in sewage sludge and fate during sludge treatment. *Waste Manag.* 34, 1217–1226. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2014.03.028>

Margot, J., Rossi, L., Barry, D. A., Holliger, C., 2015. A review of the fate of micropollutants in wastewater treatment plants. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Water*, 2(5), 457-487. <https://doi.org/10.1002/wat2.1090>

Martín, J., Camacho-Munoz, D., Santos, J.L., Aparicio, I., Alonso, E., 2012. Occurrence of pharmaceutical compounds in wastewater and sludge from wastewater treatment plants: Removal and ecotoxicological impact of wastewater discharges and sludge disposal. *J. Hazard. Mater.* 40–47. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2012.04.068>

Masoner, J.R., Kolpin, D.W., Cozzarelli, I.M., Barber, L.B., Burden, D.S., Foreman, W.T., Forshay, K.J., Furlong, E.T., Groves, J.F., Hladik, M.L., Hopton, M.E., Jaeschke, J.B., Keefe, S.H., Krabbenhoft, D.P., Lowrance, R., Romanok, K.M., Rus, D.L., Selbig, W.R., Williams, B.H., Bradley, P.M., 2019. Urban Stormwater: An Overlooked Pathway of Extensive Mixed Contaminants to Surface and Groundwaters in the United States. *Environ. Sci. Technol.* 53, 10070–10081. <https://doi.org/10.1021/acs.est.9b02867>

Nickel, Jan Philip; Sacher, Frank; Fuchs, Stephan, 2021. Dataset of micropollutant concentrations and standard water quality parameters in wastewater treatment plants, combined sewer overflows, and stormwater outfalls in Germany. Karlsruhe Institute of Technology (KIT). <https://dx.doi.org/10.35097/449>

OECD, 2006. Guidelines for the testing of chemicals. Revised introduction to the OECD guidelines for the testing of chemicals, Section 3. Part 1: principles and strategies related to the testing of degradation of organic chemicals. Adopted: 23 March 2006. <https://doi.org/10.1787/9789264030213-en>

Paun, I., Pirvu, F., Iancu, V. I., & Chiriac, F. L. (2022). Occurrence and transport of isothiazolinone-type biocides from commercial products to aquatic environment and environmental risk assessment. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 19(13), 7777. <https://doi.org/10.3390/ijerph19137777>

Poseideon, 2004. Assessment of Technologies for the Removal of Pharmaceuticals and Personal Care Products in Sewage and Drinking Water Facilities to Improve the Indirect Potable Water Reuse. Final report Poseidon-Projekt. Contract No. EVK1-CT-2000-00047.

Pistocchi, A., N. A. Alygizakis, W. Brack, A. Boxall, I. T. Cousins, J. E. Drewes, S. Finckh, T. Gallé, M. A. Launay, M. S. McLachlan, M. Petrovic, T. Schulze, J. Slobodnik, T. Ternes, A. Van Wezel, P. Verlicchi und C. Whalley, 2022. European scale assessment of the potential of ozonation and activated carbon treatment to reduce micropollutant emissions with wastewater. *Sci. Total Environ.* 848: 157124. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.157124>

Regnery, J., Püttmann, W., 2010. Seasonal fluctuations of organophosphate concentrations in precipitation and storm water runoff. *Chemosphere* 78, 958–964. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2009.12.027>

Rogers, H., 1996. Sources, behaviour and fate of organic contaminants during sewage treatment and in sewage sludges. *Sci. Total Environ.* 185, 3-26. [https://doi.org/10.1016/0048-9697\(96\)05039-5](https://doi.org/10.1016/0048-9697(96)05039-5)

Sacher, F., Thoma, A., Lehmann, M., Scherer, I., Stier, K., 2014. Spurenstoffinventar der Fließgewässer in Baden-Württemberg, Stand: August 2014. ed. LUBW, Karlsruhe.

Sadaria, A. M., Sutton, R., Moran, K. D., Teerlink, J., Brown, J. V., & Halden, R. U. (2017). Passage of fiproles and imidacloprid from urban pest control uses through wastewater treatment plants in northern California, USA. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 36(6), 1473-1482. <https://doi.org/10.1002/etc.3673>

Samaras, V.G., Stasinakis, A.S., Mamais, D., Thomaidis, N.S., Lekkas, T.D., 2013. Fate of selected pharmaceuticals and synthetic endocrine disrupting compounds during wastewater treatment and sludge anaerobic digestion. *J. Hazard. Mater.* 244–245, 259–267. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2012.11.039>

Song, M., Chu, S., Letcher, R. J., & Seth, R. (2006). Fate, partitioning, and mass loading of polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) during the treatment processing of municipal sewage. *Environmental science & technology*, 40(20), 6241-6246.

<https://doi.org/10.1021/es060570k>

Stasinakis, A.S., Thomaidis, N.S., Arvaniti, O.S., Asimakopoulos, A.G., Samaras, V.G., Ajibola, A., Mamais, D., Lekkas, T.D., 2013. Contribution of primary and secondary treatment on the removal of benzothiazoles, benzotriazoles, endocrine disruptors, pharmaceuticals and perfluorinated compounds in a sewage treatment plant. *Sci. Total Environ.* 463–464, 1067–1075. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2013.06.087>

Stenzel, F., Jung, R., Wiesgickl, S., Dexheimer, K., Eißing, M., Mundt, M., 2019. Arzneimittelrückstände in Rezyklaten der Phosphorrückgewinnung aus Klärschlämmen (TEXTE No. 31/2019). Fraunhofer-Institut für Umwelt-, Sicherheits-, und Energietechnik UMSICHT, WESSLING GmbH, im Auftrag des Umweltbundesamtes Deutschland, Dessau-Roßlau.

Stiborova, H., Vrkoslavova, J., Lovecka, P., Pulkrabova, J., Hradkova, P., Hajslova, J., Demnerova, K., 2015. Aerobic biodegradation of selected polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) in wastewater sewage sludge. *Chemosphere* 118, 315–321.

<https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2014.09.048>

Struijs, J. (2014). SimpleTreat 4.0: a model to predict fate and emission of chemicals in wastewater treatment plants: Background report describing the equations. RIVM Report 601353005. RIVM, Bilthoven The Netherlands. <https://www.rivm.nl/en/soil-andwater/simpletreat>

Struijs, J. (2015). Application of SimpleTreat 4.0 in European substance regulations. Umweltbundesamt. <https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/application-of-simpletreat-40-in-european-substance>

Tran, N.H., Reinhard, M., Khan, E., Chen, H., Nguyen, V.T., Li, Y., Goh, S.G., Nguyen, Q.B., Saeidi, N., Gin, K.Y.-H., 2019. Emerging contaminants in wastewater, stormwater runoff, and surface water: Application as chemical markers for diffuse sources. *Sci. Total Environ.* 676, 252–267. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.04.160>

US-EPA. (2000). Interim Guidance for Using Ready and Inherent Biodegradability Tests to Derive Input Data for Multimedia Models and Wastewater Treatment Plant (WWT) Models. <https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/interim-guidance-using-ready-and-inherent-biodegradability-tests-derive-input>. Zugriff am 31.03.2024

Verovšek, T., Heath, D., & Heath, E. (2022). Occurrence, fate and determination of tobacco (nicotine) and alcohol (ethanol) residues in waste-and environmental waters. *Trends in Environmental Analytical Chemistry*, 34, e00164. <https://doi.org/10.1016/j.teac.2022.e00164>

Voulvoulis, N., Scrimshaw, M. D., & Lester, J. N. (2004). Removal of Organotins during Sewage Treatment: A Case Study. *Environmental Technology*, 25(6), 733–740. <https://doi.org/10.1080/09593330.2004.9619363>

Wang, Y., Kannan, P., Halden, R.U., Kannan, K., 2019. A nationwide survey of 31 organophosphate esters in sewage sludge from the United States. *Sci. Total Environ.* 655, 446–453. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.11.224>

Wechner, S., 2014. Arzneimittelwirkstoffe im Abwasser. <https://epub.boku.ac.at/obvbokhs/download/pdf/1031479>

Wellbrock, K., Knobloch, J. K.-M., Heim, M.; Grottker, M., 2019. Spurenstoffe und Multiresistente Bakterien in den Entwässerungssystemen Schleswig-Holsteins - Ableitung von Kennwerten zur Quantifizierung der Herkunft, der Ausbreitung und des Rückhaltes. Abschlussbericht eines Forschungsvorhabens, gerichtet an das Ministerium für Energiewende, Landwirtschaft, Umwelt, Natur und Digitalisierung des Landes Schleswig-Holstein, Lübeck/ Kiel, 2019.

Wick, A., Fink, G., Ternes, T.A., 2010. Comparison of electrospray ionization and atmospheric pressure chemical ionization for multi-residue analysis of biocides, UV-filters and benzothiazoles in aqueous matrices and activated sludge by liquid chromatography–tandem mass spectrometry. *J. Chromatogr. A* 1217, 2088–2103. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2010.01.079>

Wicke, D., Matzinger, A., Rouault, P., 2015. Relevanz organischer Spurenstoffe im Regenwasserabfluss Berlins. Kompetenzzentrum Wasser Berlin, Berlin. <https://www.kompetenz->

[wasser.de/media/pages/forschung/publikationen/801/c3c6db2f91-1702634139/Wicke-2015-801.pdf](https://wasser.de/media/pages/forschung/publikationen/801/c3c6db2f91-1702634139/Wicke-2015-801.pdf)

Xu, L., Hu, Q., Liu, J., Liu, S., Liu, C., Deng, Q., Zeng, X., Yu, Z., 2019. Occurrence of organophosphate esters and their diesters degradation products in industrial wastewater treatment plants in China: Implication for the usage and potential degradation during production processing. *Environ. Pollut.* 250, 559–566.

<https://doi.org/10.1016/j.envpol.2019.04.058>

Yu, Y., Huang, Q., Cui, J., Zhang, K., Tang, C., Peng, X., 2011. Determination of pharmaceuticals, steroid hormones, and endocrine-disrupting personal care products in sewage sludge by ultra-high-performance liquid chromatography–tandem mass spectrometry. *Anal. Bioanal. Chem.* 399, 891–902. <https://doi.org/10.1007/s00216-010-4295-2>

Zessner, M., Schaar, H., Zoboli, O., Kreuzinger, N., Kittlaus, S., Muschalla, D., Polgar, B., Gruber, G., Reinstaller, S., Camhy, D., Sommer, R., Reiter, M., Cervero-Aragó, S., Holzhammer, E., Farnleitner, A., Steinbacher, S., Mayer, R., Ertl, T., de Vito-Francesco, E., Allabashi, R., Pressl, A., Kretschmer, F., Steidl, C., Lenz, K., Jimenez, E.S. und Hohenblum, P. (2022). Zukünftige stoffliche und mikrobiologische Herausforderungen für die kommunale Siedlungswasserwirtschaft. Projektendbericht im Auftrag des Bundesministeriums für Landwirtschaft, Regionen und Tourismus, Stubenring 1, 1010 Wien.

[https://info.bml.gv.at/dam/jcr:03a600c0-5773-4ef4-9877-9429f0292dbf/Endbericht\\_Siwawi%2020220822.pdf](https://info.bml.gv.at/dam/jcr:03a600c0-5773-4ef4-9877-9429f0292dbf/Endbericht_Siwawi%2020220822.pdf)

Zgheib, S., Moilleron, R., Saad, M., Chebbo, G., 2011. Partition of pollution between dissolved and particulate phases: What about emerging substances in urban stormwater catchments? *Water Res.* 45, 913–925. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2010.09.032>

# Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Definition
Abk.	Abkürzung
BG	Bestimmungsgrenze
BSB5	Biochemischer Sauerstoffbedarf
CAS Nummer	Registriernummer Stoffeintrag in die Datenbank des Chemical Abstract Service
ChemSpider	Datenbank chemischer Verbindungen der britischen Royal Society of Chemistry
DOC	Dissolved organic carbon / gelöster organischer Kohlenstoff
DT50	Halbwertszeit (dissipation time) für biologischen Abbau
ECHA	Europäische Chemikalienagentur
EW	Einwohnerwert
foc	Anteil an organischem Kohlenstoff im Adsorbens
KA	Kläranlage
Kd	Spezifischer Adsorptionskoeffizient, Verteilungskoeffizient zwischen Wasser und Adsorbens
Koc	Verteilungskoeffizient zwischen Wasser und organischem Kohlenstoff im Adsorbens
Kow	Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizient
kbio	Abbaukonstante für biologische Abbaubarkeit
Kp	Feststoff/Wasser-Verteilungskoeffizient
N	Number/Anzahl
NORMAN	Network of reference laboratories, research centres and related organisations for monitoring of emerging environmental substances
OECD	Organisation für wirtschaftliche Zusammenarbeit und Entwicklung
P	Phosphor
pKa	Säuredissoziationskonstante
PUBCHEM	Datenbank chemischer Verbindungen des nationalen Zentrums für Biotechnologische Information der USA

<b>REACH</b>	Registrierung, Evaluierung und Autorisierung von Chemikalien
<b>ROS</b>	Regression on order statistics
<b>SimplEstFATE</b>	Simple Estimation of the Fate of organic trace compounds in sanitary engineering
<b>SiWaWi</b>	Akronym für das Projekt Zukünftige stoffliche und mikrobiologische Herausforderungen für die kommunale Siedlungswasserwirtschaft
<b>VOC</b>	Flüchtige organische Verbindungen / volatile organic compounds

# Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Mittlere Jahreswasserbilanz des Einzugsgebietes der Kläranlage Tulln (städtisches Gebiet mit überwiegend Mischkanalisation) bezogen auf Einwohnerwerte (EW), Quelle: Clara et al. (2014). Die Abweichung in der Wasserbilanz von $2 \text{ m}^3/(\text{EW} \cdot \text{a})$ lässt sich durch Sickerwasserverluste erklären. Aufgrund der großen Unsicherheiten in diesem Bereich werden diese in der weiteren Auswertung nicht berücksichtigt. ....	10
Abbildung 2: Mittlere Jahreswasserbilanz des Einzugsgebietes der Kläranlage Klosterneuburg (städtisches Gebiet mit überwiegend Trennkanalisation) bezogen auf Einwohnerwerte (EW), Quelle: Clara et al. (2014). Die Abweichung in der Wasserbilanz von $10 \text{ m}^3/(\text{EW} \cdot \text{a})$ lässt sich durch Sickerwasserverluste erklären. Aufgrund der großen Unsicherheiten in diesem Bereich werden diese in der weiteren Auswertung nicht berücksichtigt. ....	11
Abbildung 3: Anteil des Austrages aus Siedlungsgebieten über vier verschiedene Pfade für Stoffe, die hauptsächlich über das Schmutzwasser in das System gelangen. Oben: Auswertung am Beispiel eines Mischsystems; unten: Auswertung am Beispiel eines Trennsystems. N: Stoffanzahl in jeder Kategorie. Hinweis: die Kategorisierung beruht auf dem im SIWAWI-Projekt entwickelten Ansatz, der mit Information aus Benchmarkdaten kombiniert wurde. Das optimierte Ergebnis nach Anpassung der Kategorien ist in Abbildung 11 und Tabelle 9 dargestellt. ....	30
Abbildung 4: Anteil des Austrages aus Siedlungsgebieten über vier verschiedene Pfade für Stoffe, die hauptsächlich über das Niederschlagswasser in das System gelangen. Oben: Auswertung am Beispiel eines Mischsystems; unten: Auswertung am Beispiel eines Trennsystems. Hinweis: die Kategorisierung beruht auf dem im SIWAWI-Projekt entwickelten Ansatz, der mit Information aus Benchmarkdaten kombiniert wurde. Das optimierte Ergebnis nach Anpassung der Kategorien ist in Abbildung 12 und Tabelle 9 dargestellt.....	31
Abbildung 5: Anteil des Austrages aus Siedlungsgebieten über vier verschiedene Pfade für Stoffe, die über gemischte Einträge in das System gelangen. Oben: Auswertung am Beispiel eines Mischsystems; unten: Auswertung am Beispiel eines Trennsystems. N: Stoffanzahl in jeder Kategorie. Hinweis: die Kategorisierung beruht auf dem im SIWAWI-Projekt entwickelten Ansatz, der mit Information aus Benchmarkdaten kombiniert wurde. Das optimierte Ergebnis nach Anpassung der Kategorien ist in Abbildung 13 und Tabelle 9 dargestellt.....	32

Abbildung 6: Darstellung des Zusammenhangs zwischen der adsorptiven Entfernung auf Kläranlagen (Benchmarkdatensatz nach Margot et al., 2015) mit den Medianwerten von $\log K_{ow}$ (links) und $\log K_{oc}$ (rechts) gemäß Ansatz 2.....	37
Abbildung 7: Darstellung des Zusammenhangs zwischen der adsorptiven Entfernung auf Kläranlagen (Benchmarkdatensatz nach Margot et al., 2015) mit den Medianwerten von $\log K_{ow}$ (links) und $\log K_{oc}$ (rechts) gemäß Ansatz 3.....	38
Abbildung 8: Zusammenhang zwischen dem biologischen Abbau aus dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015) und den Halbwertszeiten ( $DT_{50}$ ) aus OECD-Simulationstests und Vorhersagen (SiWaWi-Ansatz) als Medianwerte (links) sowie als Einzelwerte (rechts). .....	40
Abbildung 9: Zusammenhang zwischen dem biologischen Abbau aus dem Benchmarkdaten (Margot et al., 2015) und den aus den OECD-Screeningtests gemäß TGD-Ansatz abgeleiteten Abbaukonstanten $0/0,1/0,3/1 [h^{-1}]$ (links) bzw. den daraus berechneten Halbwertszeiten (rechts). .....	41
Abbildung 10: Zusammenhang zwischen der Abbaukonstante und dem mittels SimpleTreat modellierten biologischen Abbau bei unterschiedlichen Eingangswerten für die Abbaukonstante $k_{bio}$ (verändert nach Dreier, 2024). Schwarz umrandete Symbole für Bisphenol A, Ibuprofen und Benzotriazol markieren die Eingabewerte aus OECD-Screeningtests, die auch bei Anwendung des SimpleEstFATE-Modells zu Einsatz kommen würden. ....	42
Abbildung 11: Anteil des Austrages aus Siedlungsgebieten über vier verschiedene Pfade für Stoffe, die hauptsächlich über das Schmutzwasser in das System gelangen. Optimierte Auswertung nach Anpassung der Kategorien (Tabelle 9). Oben: Auswertung am Beispiel eines Mischsystems; unten: Auswertung am Beispiel eines Trennsystems. N: Stoffanzahl in jeder Kategorie. ....	47
Abbildung 12: Anteil des Austrages aus Siedlungsgebieten über vier verschiedene Pfade für Stoffe, die hauptsächlich über das Niederschlagswasser in das System gelangen. Optimierte Auswertung nach Anpassung der Kategorien (Tabelle 9). Oben: Auswertung am Beispiel eines Mischsystems; unten: Auswertung am Beispiel eines Trennsystems.....	48
Abbildung 13: Anteil des Austrages aus Siedlungsgebieten über vier verschiedene Pfade für Stoffe, die über gemischte Einträge in das System gelangen. Optimierte Auswertung nach Anpassung der Kategorien (Tabelle 9). Oben: Auswertung am Beispiel eines Mischsystems; unten: Auswertung am Beispiel eines Trennsystems. N: Stoffanzahl in jeder Kategorie. ....	49
Abbildung 14: Konzeptionelles Stoffflussmodell von Stoffeinträgen in die Siedlungswasserwirtschaft und der Austragspfade aus der Siedlungswasserwirtschaft. ....	53

# Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Ausgewählte Stoffe für die quantitative Bewertung durch Bilanzierung und deren Kategorisierung. ....	13
Tabelle 2: Erste über Literatur erhobene Ansätze für die Kategorisierung einer Substanz in gut, mittel und schlecht adsorbierbar anhand der Kriterien $\log K_{ow}$ , $\log K_{oc}$ . ....	20
Tabelle 3: Untersuchte Ansätze für die Kategorisierung einer Substanz in gut, mittel und schlecht abbaubar anhand von $DT_{50}$ -Werten und Ergebnissen aus Screening Tests ( <i>Ready</i> bzw. <i>Inherent Tests</i> ). ....	25
Tabelle 4: Einstufung der biologischen Abbaubarkeit nach Herleitung der Halbwertszeiten nach dem Technical Guidance Document (EC, 2003) und der US-EPA (2000). ....	25
Tabelle 5: Dominanz der Austragspfade für Stoffe aus der Siedlungswasserwirtschaft in Abhängigkeit der Zuordnung zu Stoffkategorien für ein Kläranlageneinzugsgebiet mit überwiegend Mischsystem (KA = Kläranlage, Mischwasserü. = Mischwasserüberlauf). ....	33
Tabelle 6: Dominanz der Austragspfade für Stoffe aus der Siedlungswasserwirtschaft in Abhängigkeit der Zuordnung zu Stoffkategorien für eine Kläranlageneinzugsgebiet mit überwiegend Trennsystem (KA = Kläranlage, Mischwasserü. = Mischwasserüberlauf).....	34
Tabelle 7: Übereinstimmung der Einstufung in gut, mittel und schlecht adsorbierbar anhand von Ansatz 1 und 2 mit dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015). ....	36
Tabelle 8: Übereinstimmung der Einstufung in gut und schlecht adsorbierbar anhand von Ansatz 3 mit dem Benchmarkdatensatz (Margot et al., 2015). ....	39
Tabelle 9: Ausgewählte Stoffe für die quantitative Ermittlung des Austrags über verschiedene Pfade und deren Kategorisierung nach angepasster Zuordnung. ....	44
Tabelle 10: Dominanz der Austragspfade für Stoffe aus der Siedlungswasserwirtschaft in Abhängigkeit der Zuordnung zu Stoffkategorien für ein Kläranlageneinzugsgebiet mit überwiegend Mischsystem (KA = Kläranlage, Mischwasserü. = Mischwasserüberlauf) mit der neuen Kategorisierung betreffend die Adsorbierbarkeit. ....	50
Tabelle 11: Dominanz der Austragspfade für Stoffe aus der Siedlungswasserwirtschaft in Abhängigkeit der Zuordnung zu Stoffkategorien für eine Kläranlageneinzugsgebiet mit überwiegend Trennsystem (KA = Kläranlage, Mischwasserü. = Mischwasserüberlauf) mit der neuen Kategorisierung betreffend die Adsorbierbarkeit. ....	51
Tabelle 12: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der $\log K_{oc}$ -Werte. <i>Kursiv geschriebene Stoffe wurden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.</i> ....	58

Tabelle 13: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. <i>Kursiv geschriebene Stoffe wurden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.</i> .....	59
Tabelle 14: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. ....	60
Tabelle 15: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „mittel in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. <i>Kursiv geschriebene Stoffe wurden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.</i> .....	61
Tabelle 16: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. ....	62
Tabelle 17: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Schmutzwasser“ und „schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. ....	63
Tabelle 18: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. ....	65
Tabelle 19: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. <i>Kursiv geschriebene Stoffe werden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.</i> .....	65
Tabelle 20: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. ....	66
Tabelle 21: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. ....	67
Tabelle 22: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. <i>Kursiv geschriebene Stoffe wurden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.</i> .....	68
Tabelle 23: Stoffe der Kategorie „Überwiegend Eintrag über Niederschlagswasser“ und „gut in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. ....	69

Tabelle 24: Stoffe der Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. <i>Kursiv geschriebene Stoffe wurden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.</i> .....	70
Tabelle 25: Stoffe der Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „mittel in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte.....	71
Tabelle 26: Stoffe der Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „mittel in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. <i>Kursiv geschriebene Stoffe werden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.</i> .....	72
Tabelle 27: Stoffe der Kategorie Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „schlecht in KA abbaubar, gut adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte...	73
Tabelle 28: Stoffe der Kategorie „Gemischter Eintrag über Schmutz- und Niederschlagswasser“ und „schlecht in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ und „gut in KA abbaubar, schlecht adsorbierbar“ nach SimplEstFATE, mit Einstufung nach OECD-Screeningtest und Median der logK <sub>OC</sub> -Werte. <i>Kursiv geschriebene Stoffe wurden gegenüber der Kategorisierung über Kläranlagendaten abweichend zugeordnet.</i> .....	74
Tabelle 29: Hauptaustragspfade für Stoffe aus der Siedlungswasserwirtschaft in Abhängigkeit der Zuordnung zu Stoffkategorien für ein Kläranlageneinzugsgebiet mit überwiegend Mischsystem (MS) oder Trennsystem (TS). Fettgedruckte Austragspfade konnten quantitative überprüft werden. Bei kursiv dargestellten Austragspfaden beruht die Zuordnung auf einem Expertjudgement. N zeigt die Anzahl der über SimplEstFATE bewerteten Stoffe je Kategorie. ....	79

# Verzeichnis für Tabellen im Anhang

Tabelle A 1: Liste aller in der Studie berücksichtigten Spurenstoffe. ....	100
Tabelle A 2: Konzentrationen der für die quantitative Bewertung durch Bilanzierung ausgewählten Stoffe im Schmutzwasser.....	118
Tabelle A 3: Konzentrationen der für die quantitative Bewertung durch Bilanzierung ausgewählten Stoffe im Niederschlagswasser (= Regenwasserkanal).....	123
Tabelle A 4: Konzentrationen der für die quantitative Bewertung durch Bilanzierung ausgewählten Stoffe im Mischwasserüberlauf. ....	129
Tabelle A 5: Konzentrationen der für die quantitative Bewertung durch Bilanzierung ausgewählten Stoffe im Kläranlagenablauf. ....	134
Tabelle A 6: Konzentrationen der für die quantitative Bewertung durch Bilanzierung ausgewählten Stoffe im Klärschlamm.....	140
Tabelle A 7: Bilanzen im Mischsystem.....	145
Tabelle A 8: Bilanzen im Trennsystem. ....	150
Tabelle A 9: Literaturangaben zur Entfernung über die zwei Pfade „biologischen Abbau“ und „Adsorption“ (N = 95) verändert nach Margot et al. (2015).....	155

# Anhang

Tabelle A 1: Liste aller in der Studie berücksichtigten Spurenstoffe.

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
(4-Nonylphenoxy)essigsäure	3115-49-9	NPXA	Industriechemikalien		
(Benzothiazol-2-ylthio)methylthiocyanat	21564-17-0	TCMTB	Industriechemikalien		
1,2,3-Propantriol, Homopolymer, Diisooctadecanoat	109925-03-3	EHDPP	Industriechemikalien		
1,2,4-Triazol	288-88-0		Industriechemikalien		
1,2,5,6,9,10-Hexabromcyclododecan	3194-55-6	HBCD	Industriechemikalien		
1,2-Dichlor-4-nitrobenzol	99-54-7		Pestizide		
1,2-Dichlorethan (VOC)*	107-06-2		Industriechemikalien		
1,3,5-Estratriene-3,17-alpha-diol	57-91-0	17α-E2	Hormone		
1,3-Dichlor-4-nitrobenzol	611-06-3		Industriechemikalien		
1,4-Butandiol	110-63-4	BD	Industriechemikalien		
1,5,9-Cyclododecatrien	4904-61-4		Industriechemikalien		

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
1,5-Naphthylendiamin	2243-62-1		Pharmazeutika und Biozide		
1-Octanthiol	111-88-6		Industriechemikalien		
2,2',3,4,4',5,5'-heptachlorobiphenyl	35065-29-3	PCB 180	Industriechemikalien		
2,2',3,4,4',5'-hexachlorobiphenyl	35065-28-2	PCB 138	Industriechemikalien		
2,2',4,4',5,5'-Hexabromodiphenyl ether	68631-49-2	BDE-153	Flammschutzmittel	x	
2,2',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl	35065-27-1	PCB 153	Industriechemikalien		
2,2',4,4',5,6'-Hexabromodiphenyl ether	207122-15-4	BDE-154	Flammschutzmittel	x	
2,2',4,4',5-Pentabromodiphenyl ether	60348-60-9	BDE-99	Flammschutzmittel	x	x
2,2',4,4',6-Pentabromodiphenyl ether	189084-64-8	BDE-100	Flammschutzmittel	x	
2,2',4,4'-Tetrabromodiphenyl ether	5436-43-1	BDE-47	Flammschutzmittel	x	x
2,3,6-Trimethylphenol	2416-94-6		Industriechemikalien		
2,4,5-Trichloroanilin	636-30-6		Industriechemikalien		
2,4,6-Tri-tert-butylphenol	732-26-3		Industriechemikalien		
2,4-Dichlorphenoxyessigsäure	94-75-7	2,4-D	Biozide		
2,4-Di-tert-butylphenol	96-76-4		Industriechemikalien		
2-Butin-1,4-diol	110-65-6		Industriechemikalien		

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
2-Chloranilin	95-51-2		Industriechemikalien		
2-Ethylhexyldiphenylphosphat	1241-94-7		Industriechemikalien		
2-Ethylidene-1,5-dimethyl-3,3-diphenylpyrrolidin	30223-73-5	EDDP	Pharmazeutika		
2-Hydroxybenzothiazol	934-34-9	OHBT	Korrosionsschutzmittel		x
2-Methylthiobenzthiazol	615-22-5	MTBT	Korrosionsschutzmittel		x
2-Phenylphenol	90-43-7		Pestizide		
3,5,5-Trimethyl-1-hexanol	3452-97-9		Industriechemikalien		
4,4'-Methylenbis(2-chloranilin)	101-14-4	MOCA	Industriechemikalien		
4-Acetamidoantipyrine	83-15-8		Pharmazeutika		
4-Aminophenol	123-30-8		Industriechemikalien		
4-chloro-o-cresol	1570-64-5		Biozide		
4-Formylaminoantipyrin	1672-58-8		Pharmazeutika		
4-Nitrotoluol	99-99-0		Industriechemikalien		
4-Nonylphenol	84852-15-3	4NP	Industriechemikalien	x	
4-tert-Butylbenzaldehyd	939-97-9		Pflegeprodukte		
4-tert-Butylphenol	98-54-4		Industriechemikalien		

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
4-tert-Octylphenol	140-66-9	4-tert-OP	Industriechemikalien	x	
5-Amino-4-chloropyridazin-3(2H)-one	5339-19-1		Herbizide		
5-chloro-2-(4-chlorphenoxy)phenol	3380-30-1	DCPP	Desinfektionsmittel	x	
5-Methyl-1H-benzotriazol	136-85-6		Korrosionsschutzmittel	x	x
Acenaphthen	83-32-9	ACN	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	x	x
Acenaphthylen	208-96-8	ACY	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	x	
Acesulfam	55589-62-3	ACE-K	Süßungsmittel		x
Acetamidrid	135410-20-7 / 160430-64-8		Pestizide		
Acetochlor	34256-82-1		Biozide		
Aclonifen	74070-46-5		Herbizide		
Alachlor	15972-60-8		Pestizide		
Aldrin	309-00-2		Pestizide		x
Alfuzosin	81403-80-7		Pharmazeutika		
Aliskiren	173334-57-1		Pharmazeutika		

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Alkohol-Ethoxylate	68213-23-0	AE	Tenside		x
Alkohol-Ethoxylate	68439-46-3	AE	Tenside		x
Alkylbenzolsulfonate	68411-30-3	LAS	Tenside		x
Alkylbenzoldimethylammoniumchloride	85409-22-9	BACs	Tenside		x
Alkylethersulfate	68081-91-4	AES	Tenside		x
Alkyltrimethylammoniumchloride	68002-61-9	ATAC	Tenside		x
Amidinourea	141-83-3		Industriechemikalien		
Amidotrizoesäure	117-96-4		Kontrastmittel		x
Amisulprid	71675-85-9		Pharmazeutika		
Amoxicillin	26787-78-0		Pharmazeutika		
Anthracen	120-12-7	ANT	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	x	x
Atorvastatin	134523-00-5		Pharmazeutika		
Atrazin	1912-24-9		Herbizide	x	x
Atrazine-2-hydroxy	2163-68-0		Pestizide		
Avobenzon	70356-09-1		UV-Filter		

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Azinphosethyl	2642-71-9		Pestizide		
Azithromycin	83905-01-5		Pharmazeutika		x
Benzisothiazolinon	2634-33-5	BIT	Konservierungsmittel	x	
Benzo[a]anthracen	56-55-3	BaA	Verbrennungsprodukte	x	
Benzo[a]pyren	50-32-8	BaP	Verbrennungsprodukte	x	x
Benzo[b]fluoranthren	205-99-2	BbF	Verbrennungsprodukte	x	x
Benzo[ghi]perylen	191-24-2	BghiP	Verbrennungsprodukte	x	x
Benzo[j]fluoranthren	205-82-3	BjF	Verbrennungsprodukte		
Benzo[k]fluoranthren	207-08-9	BkF	Verbrennungsprodukte	x	x
Benzol (VOC)*	71-43-2		Industriechemikalien		
Benzolsulfonsäure	85536-14-7		Desinfektionsmittel		
Benzotriazol	95-14-7	BTZ	Korrosionsschutzmittel	x	x
Benzy-2-naphthylether	613-62-7		Industriechemikalien		
Bifenox	42576-02-3		Herbizide		
Bis(2-ethylhexyl)phthalat	117-81-7	DEHP	Weichmacher	x	x
Bis(pentabromophenyl)ether	1163-19-5	BDE-209	Flammenschutzmittel		x

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Bisoprolol	66722-44-9		Pharmazeutika	x	
Bisphenol A	80-05-7	BPA	Industriechemikalien	x	x
Bromacil	314-40-9		Biozide		
Butylhydroxytoluol	128-37-0		Industriechemikalien		
C10-C13-Chloralkane	85535-84-8		Industriechemikalien		x
Candesartan	139481-59-7		Pharmazeutika		
Canrenon	976-71-6		Pharmazeutika		
Carbamazepin	298-46-4	CBZ	Pharmazeutika	x	x
Carbendazim	10605-21-7	CBDZ	Pestizide	x	x
Chlorfenvinphos	470-90-6		Pestizide		
Chlorhexidin	55-56-1		Pharmazeutika		
Chloridazonmethyl-desphenyl	17254-80-7		Pestizide		
Chloroform (VOC)*	67-66-3		Industriechemikalien		
Chlorothalonil	1897-45-6		Biozide		
Chlorpyrifos	2921-88-2		Pestizide		
Chlorpyrifos-Methyl	5598-13-0		Biozide		

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Chrysen	218-01-9	CHR	Verbrennungsprodukte	x	
Ciprofloxacin	85721-33-1		Pharmazeutika		x
Citalopram	59729-33-8		Pharmazeutika		
Clarithromycin	81103-11-9		Pharmazeutika	x	x
Clorofen	120-32-1		Industriechemikalien		
Clothianidin	210880-92-5		Pestizide		
Clozapin	5786-21-0		Pharmazeutika		
Cobalt(II)-acetat	71-48-7		Industriechemikalien		
Codein	76-57-3		Pharmazeutika		
Coffein	58-08-2	CAF	Psychotrope Substanzen	x	x
Cumolhydroperoxid	80-15-9		Industriechemikalien		
Cyanursäure	108-80-5		Industriechemikalien		
Cybutryn	28159-98-0		Biozide	x	
Cyclamat	139-05-9		Süßungsmittel		x
Cyclododecan	294-62-2		Industriechemikalien		
Cypermethrin	52315-07-8	CP	Insektizide	x	

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Dec-1-ene	872-05-9		Industriechemikalien		
Decamethylcyclopentasiloxan	541-02-6		Industriechemikalien		
Deltamethrin	52918-63-5		Pestizide		
Desethylterbutylazin	30125-63-4		Pestizide		
Dialifos	10311-84-9		Pestizide		
Dialkyldimethylammoniumchloride	92129-33-4	DDAC	Tenside		x
Diazinon	333-41-5		Biozide		x
Dibenz[a,h]anthracen	53-70-3	DahA	Verbrennungsprodukte	x	
Dibutylphthalat	84-74-2	DBP	Industriechemikalien	x	x
Dibutyltin	1002-53-5	DBT	Industriechemikalien	x	
Dichlormethan (VOC)*	75-09-2		Industriechemikalien		
Dichlorvos	62-73-7		Pestizide		
Diclofenac	15307-86-5	DCF	Pharmazeutika	x	x
Dicofol	115-32-2		Pestizide		
Dieldrin	60-57-1		Pestizide		x
Diethyltoluamid	134-62-3	DEET	Insektenabwehrmittel	x	x

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Diflufenican	83164-33-4		Herbizide		
Dihydroxycarbazepin	35079-97-1		Pharmazeutika		
Diisobutylphthalat	84-69-5	DIBP	Industriechemikalien		
Diisodecylphthalat	26761-40-0	DIDP	Industriechemikalien		
Diisononylphthalat	28553-12-0	DINP	Industriechemikalien		
Dimethylphthalat	131-11-3	DMP	Industriechemikalien		x
Diphenhydramin	58-73-1		Pharmazeutika		
Diphenylcarbonat	102-09-0		Industriechemikalien		
Diuron	330-54-1	Diu	Herbizide	x	x
Dodecamethylcyclohexasiloxan	540-97-6		Pflegeprodukte und Industriechemikalien		
Duloxetine	116539-59-4		Pharmazeutika		
Endosulphan	115-29-7		Pestizide		x
Endrin	72-20-8		Pestizide		x
Erythromycin	114-07-8		Pharmazeutika		x
Esfenvalerat	66230-04-4		Pestizide		
Estradiol	50-28-2	E2	Hormone	x	x

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
<b>Estron</b>	53-16-7	E1	Hormone	x	x
<b>Ethinylestradiol</b>	57-63-6	EE2	Pharmazeutika (Kontrazeptiv)	x	x
<b>Ethylendiamintetraessigsäure</b>	60-00-4	EDTA	Komplexbildner		x
<b>Ethylparaben</b>	120-47-8		Konservierungsmittel		x
<b>Fenthion</b>	55-38-9		Biozide		
<b>Fettalkoholsulfate</b>	68955-20-4	AS	Tenside		x
<b>Fipronil</b>	120068-37-3		Biozide		
<b>Fluoranthen</b>	206-44-0	Fluo	Verbrennungsprodukte	x	x
<b>Fluoren</b>	86-73-7	FL	Verbrennungsprodukte	x	x
<b>Furosemid</b>	54-31-9		Pharmazeutika		
<b>Gabapentin</b>	60142-96-3		Pharmazeutika		
<b>Gadolinium</b>	7440-54-2		Kontrastmittel		
<b>Galaxolid</b>	1222-05-5	HHCB	Pflegeprodukte		x
<b>Gliclazid</b>	21187-98-4		Pharmazeutika		
<b>Glyphosat</b>	1071-83-6		Herbizide		
<b>Guaifenesin</b>	93-14-1		Pharmazeutika		

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Heptachlor	76-44-8		Biozide		x
Heptachlorepoxid	1024-57-3		Biozide		
Hexachlorbenzol	118-74-1		Pestizide		x
Hexachlorbutadien	87-68-3		Industriechemikalien		
Hexachlorocyclohexan	608-73-1	HCH	Insektizide		x
Hexaflumuron	86479-06-3		Pestizide		
Hydrochlorothiazid	58-93-5	HCT	Pharmazeutika		x
Ibuprofen	15687-27-1	IBU	Pharmazeutika	x	x
Imidacloprid	138261-41-3		Pharmazeutika und Pestizide (Insektizid)	x	
Indeno[1,2,3-cd]pyren	193-39-5	I123cdP	Verbrennungsprodukte	x	x
lomeprol	78649-41-9		Pharmazeutika		x
Irbesartan	138402-11-6		Pharmazeutika		x
Isoproturon	34123-59-6	ISO	Herbizide		x
Laurinsäure	143-07-7		Tenside		x
Lindan	58-89-9		Pestizide		x
Mecoprop	93-65-2	MCPP	Pestizide	x	x

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Metazachlor	67129-08-2		Biozide		
Metconazol	125116-23-6		Biozide		
Metformin	657-24-9		Pharmazeutika		x
Methidathion	950-37-8		Biozide		
Methyl-1H-benzotriazol	29385-43-1		Industriechemikalien		
Methylglycindiessigsäure-Trinatriumsalz	164462-16-2	MGDA	Komplexbildner		
Methylparaben	99-76-3	MEP	Konservierungsmittel		x
Metolachlor	51218-45-2	Meto	Biozide	x	
Metolachlor ESA	171118-09-5	Met-ESA	Herbizide		
Metoprolol	37350-58-6	MET	Pharmazeutika	x	x
N-(1,3-dimethylbutyl)-N'-phenyl-p-phenylenediamin	793-24-8	6PPD	Industriechemikalien		
N,N'-Dimethylsulfamid	3984-14-3	DMS	Pestizide		
Naphthalin	91-20-3	NAP	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	x	x
Nicosulfuron	111991-09-4		Herbizide		

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Nicotin	54-11-5	NIC	Psychotrope Substanzen	x	
Nitriolriessigsäure	139-13-9	NTA	Komplexbildner		x
Nonoxinol	104-35-8	NP1EO	Industriechemikalien		
Octamethylcyclotetrasiloxan	556-67-2	OMCTS	Pflegeprodukte und Industriechemikalien		
Octinoxat	5466-77-3		UV-Filter		x
Östriol (E3)	50-27-1	E3	Hormone		x
Oxazepam	604-75-1		Pharmazeutika		x
Oxcarbazepin	28721-07-5		Pharmazeutika		
Palmitinsäure	57-10-3		Tenside		x
Paracetamol	103-90-2		Pharmazeutika		x
Parathion	56-38-2		Biozide		
Paraxanthine	611-59-6		Pharmazeutika		
Pentachlorbenzol	608-93-5		Industriechemikalien		
Pentachlorophenol	87-86-5		Pestizide		
Pentoxifyllin	6493-05-6		Pharmazeutika		
Perfluorhexansäure	307-24-4	PFHxA	Industriechemikalien	x	

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Perfluorooctansäure	335-67-1	PFOA	Industriechemikalien	x	x
Perfluorooctansulfonsäure	1763-23-1	PFOS	Industriechemikalien	x	x
Permethrin	52645-53-1		Pharmazeutika (Insektizid)	x	
Phenanthren	85-01-8	PHE	Industriechemikalien und Verbrennungsprodukte	x	x
Phenol	108-95-2		Industriechemikalien		
Phenoxymethylpenicillin	87-08-1		Pharmazeutika		
p-octylphenol	1806-26-4	p-OP	Industriechemikalien		
p-Phenylendiamin	106-50-3		Industriechemikalien		
Primidon	125-33-7		Pharmazeutika		
Propargit	2312-35-8		Biozide		
Propiconazol	60207-90-1	PBZ	Fungizide		
Prothipendyl	303-69-5		Pharmazeutika		
Pyren	129-00-0	PYR	Verbrennungsprodukte	x	x
Quetiapin	111974-69-7		Pharmazeutika		
Quinoxifen	124495-18-7		Pestizide		

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Repaglinid	135062-02-1		Pharmazeutika		
Risperidon	106266-06-2		Pharmazeutika		
Salicylsäure	69-72-7		Pharmazeutika		x
Sebuthylazin	7286-69-3		Pestizide		
<b>Sekundäre Alkansulfonate</b>					
	97489-15-1	SAS	Tenside		x
Simazin	122-34-9		Pestizide		
Sitagliptin	486460-32-6		Pharmazeutika		
Sotalol	3930-20-9		Pharmazeutika		x
Sucralose	56038-13-2	SUC	Süßungsmittel		x
Sulfotep	3689-24-5	TEDP	Biozide		
Tebuconazol	107534-96-3	TCZ	Fungizide		
Tefluthrin	79538-32-2		Biozide		
Temazepam	846-50-4		Pharmazeutika		
Terbutalin	23031-25-6		Pharmazeutika		
Terbuthylazin	5915-41-3	TAZ	Herbizide		x
Terbutryn	886-50-0	TBY	Herbizide		x

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Terbutryn-Sulfoxid	82985-33-9	TerSo	Biozide		
Tetrabutyltin	1461-25-2	TBT	Biozide		
Tetrachlorethen (VOC)*	127-18-4		Industriechemikalien		
Tetrachlormethan (VOC)*	56-23-5		Biozide		
Tetranatrium-N,N-bis(carboxylatomethyl)-L-glutamat	51981-21-6	GLDA	Komplexbildner		
Thiacloprid	111988-49-9		Pestizide		
Thiamethoxam	153719-23-4		Pestizide		
Thiram	137-26-8		Pestizide		
Tonalid	21145-77-7	AHTN	Pflegeprodukte		x
Tributylphosphat	126-73-8	TBP	Industriechemikalien	x	x
Tributyltin	688-73-3	TBT	Biozide	x	
Trichlorethen (VOC)*	79-01-6		Industriechemikalien		
Trichlorfon	52-68-6		Biozide		
Triclocarban	101-20-2		Pflegeprodukte		x
Triclosan	3380-34-5	TCS	Pflegeprodukte	x	x
Trifluralin	1582-09-8		Herbizide		

Stoffname	CAS Nummer	Abkürzung	Verwendungsgruppe	Quantitative Ermittlung des Austrags	Vergleich mit Daten über Entfernung in der KA aus Margot et al. (2015)
Triisobutylphosphat	126-71-6	TIBP	Flammschutzmittel	x	x
Trimethoxyphenylsilan	2996-92-1		Industriechemikalien		
Triphenylphosphat	115-86-6	TPHP	Flammschutzmittel	x	x
Tri-p-Tolylphosphat	78-32-0		Industriechemikalien		
Tris(1,3-dichlorisopropyl)phosphat	13674-87-8	TDCPP	Flammschutzmittel	x	x
Tris(2-butoxyethyl)phosphat	78-51-3	TBEP	Flammschutzmittel	x	x
Tris(2-chlorisopropyl)phosphat	13674-84-5	TCPP	Flammschutzmittel	x	x
Venlafaxin	99300-78-4		Pharmazeutika		x
Verapamil	52-53-9		Pharmazeutika		
Zidovudin	30516-87-1		Pharmazeutika		
$\alpha$ -Hexabromocyclododecan	134237-50-6	$\alpha$ -HBCD	Industriechemikalien		
$\beta$ -Hexabromocyclododecan	134237-51-7	$\beta$ -HBCD	Industriechemikalien		
$\gamma$ -Hexabromocyclododecan	134237-52-8	$\gamma$ -HBCD	Industriechemikalien		

\* VOC: das SimplEstFATE Modell wurde für diese flüchtigen organischen Verbindungen nicht angewendet

Tabelle A 2: Konzentrationen der für die quantitative Bewertung durch Bilanzierung ausgewählten Stoffe im Schmutzwasser.

Schmutzwasser Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Acenaphthen</b>	0,004	0,008	0,013	0,116	0,02	0,033	0,49	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>Acenaphthylen</b>	0,002	0,003	0,004	0,005	0,006	0,008	0,43	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>Anthracen</b>	0,0007	0,002	0,005	0,1	0,013	0,03	0,61	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>Atrazin</b>	2*10 <sup>-6</sup>	1,3*10 <sup>-5</sup>	0,0001	0,007	0,0009	0,006	0,93	164	164 Einzelwerte	[9], [19]
<b>BDE-47</b>	0,002	0,013	0,021	0,022	0,034	0,038	0,06	31	31 Einzelwerte	[14], [20], [40]
<b>BDE-99</b>	0,003	0,014	0,025	0,026	0,038	0,048	0,06	36	36 Einzelwerte	[14], [20], [40]
<b>BDE-100</b>	0,001	0,003	0,005	0,005	0,007	0,009	0,06	36	36 Einzelwerte	[14], [20], [40]
<b>BDE-153</b>	0,001	0,001	0,002	0,003	0,004	0,005	0,06	39	39 Einzelwerte	[14], [20], [40]
<b>BDE-154</b>	0,001	0,001	0,002	0,002	0,003	0,004	0,06	39	39 Einzelwerte	[14], [20], [40]
<b>Benzisothiazolinon</b>	0,042	0,064	0,18	0,275	0,435	0,615	0,26	46	46 Einzelwerte	[9]
<b>Benzo[a]anthracen</b>	0,002	0,004	0,009	0,07	0,019	0,04	0,49	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>Benzo[a]pyren</b>	0,0004	0,0013	0,004	0,055	0,012	0,033	0,52	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]

Schmutzwasser Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>BbF</b>	0,002	0,004	0,007	0,042	0,013	0,026	0,58	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>BghiP</b>	0,0005	0,001	0,004	0,05	0,009	0,019	0,57	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>BkF</b>	0,001	0,002	0,004	0,011	0,008	0,013	0,65	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>Benzotriazol</b>	0,214	0,347	0,488	6,45	5,9	23,03	0	8	6 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[6], [12], [25]
<b>Bisoprolol</b>	0,12	0,12	0,18	0,165	0,17	0,196	0	5	5 Einzelwerte	[5], [7], [58]
<b>Bisphenol A</b>	0,030	0,140	0,270	1,99	0,493	3,53	0,07	120	10 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[3], [6], [8], [19], [25]
<b>Carbamazepin</b>	0,015	0,02	0,38	0,50	0,95	1,32	0,19	89	89 Einzelwerte	[5], [7], [8], [12], [13], [19]
<b>Carbendazim</b>	0,0002	0,001	0,004	0,485	0,029	0,07	0,69	150	148 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[6], [9], [12], [19], [25]
<b>Chrysen</b>	0,001	0,003	0,01	0,164	0,028	0,06	0,46	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>Clarithromycin</b>	0,006	0,02	0,23	0,572	0,81	1,3	0,30	115	115 Einzelwerte	[5], [7], [12], [13], [19]
<b>Coffein</b>	0,454	1,94	39,6	51,1	66,75	112	0,05	108	108 Einzelwerte	[12], [19], [37]
<b>Cybutryn</b>	-	-	0,001	0,001	-	-	0,99	170	170 Einzelwerte	[9], [12], [19]

Schmutzwasser Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Cypermethrin</b>	0,002	0,003	0,006	0,009	0,01	0,019	0,90	167	166 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[6], [9], [20]
<b>Daha</b>	3,1*10 <sup>-5</sup>	9,9*10 <sup>-5</sup>	0,0004	0,013	0,002	0,005	0,84	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>DEHP</b>	0,884	1,77	7,6	12,6	18	30,04	0,25	175	174 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [9], [12], [19], [25]
<b>Dibutylphthalat</b>	0,185	0,304	0,6	0,912	1,1	1,7	0,46	101	101 Einzelwerte	[3], [19]
<b>Dibutyltin</b>	0,007	0,009	0,011	0,011	0,013	0,014	0	2	2 aggreg. Werte	[1], [3]
<b>DCPP</b>	-	-	0,025	0,025	-	-	0,96	46	46 Einzelwerte	[9]
<b>Diclofenac</b>	1,01	1,1	2,34	3,07	4,06	5,95	0	32	32 Einzelwerte	[5], [7], [8], [12], [13]
<b>Diethyltoluamid</b>	0,17	0,318	0,57	0,927	1,25	1,75	0,02	46	46 Einzelwerte	[9]
<b>Diuron</b>	0,002	0,002	0,004	0,012	0,013	0,029	0,63	73	73 Einzelwerte	[9], [12]
<b>Estradiol</b>	0,001	0,003	0,011	0,209	0,036	0,099	0,93	102	102 Einzelwerte	[3], [19]
<b>Estron</b>	0,0008	0,002	0,005	0,019	0,019	0,03	0,55	102	102 Einzelwerte	[3], [19]
<b>Ethinylestradiol</b>	0,009	0,009	0,014	0,015	0,021	0,023	0,96	102	102 Einzelwerte	[3], [19]
<b>Fluoranthen</b>	0,005	0,01	0,025	0,053	0,051	0,098	0,34	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>Fluoren</b>	0,006	0,009	0,013	0,018	0,019	0,03	0,46	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]

Schmutzwasser Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Ibuprofen</b>	0,106	0,75	5,92	39,8	10,9	19,5	0,15	117	117 Einzelwerte	[5], [7], [12], [13], [19]
<b>Imidacloprid</b>	0,006	0,009	0,017	0,025	0,037	0,051	0,31	52	52 Einzelwerte	[9], [12]
<b>I123cdP</b>	0,0008	0,002	0,004	0,021	0,008	0,017	0,57	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>Mecoprop</b>	-	-	0,003	0,005	-	-	0,87	7	6 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[12], [25]
<b>1H-5MeBTA</b>	0,107	0,199	0,606	1,74	3,66	4,14	0,13	8	6 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[6], [12], [25]
<b>Metolachlor</b>	4,2*10 <sup>-7</sup>	6,8*10 <sup>-6</sup>	0,0002	5,33	0,004	0,038	0,78	117	117 Einzelwerte	[8], [12], [19]
<b>Metoprolol</b>	0,14	0,22	0,37	0,37	0,48	0,57	0	18	18 Einzelwerte	[5], [7], [12], [13], [58]
<b>Naphthalin</b>	0,002	0,008	0,03	2,06	0,06	0,26	0,41	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>Nicotin</b>	0,025	0,025	0,025	0,025	0,025	0,025	0,83	6	6 Einzelwerte	[12]
<b>4-Nonylphenol</b>	0,178	0,220	0,280	0,377	0,400	0,624	0,01	79	79 Einzelwerte	[9], [18]
<b>PFHxA</b>	0,001	0,002	0,003	0,005	0,006	0,01	0,93	84	84 Einzelwerte	[8], [9], [20]
<b>PFOS</b>	0,0003	0,0008	0,004	0,011	0,009	0,023	0,69	92	92 Einzelwerte	[3], [8], [9], [14], [20]
<b>PFOA</b>	0,0006	0,001	0,004	0,008	0,007	0,02	0,68	92	92 Einzelwerte	[3], [8], [9], [14], [20]

Schmutzwasser Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Permethrin</b>	0,041	0,108	0,145	0,165	0,18	0,239	0,13	52	52 Einzelwerte	[9], [12]
<b>Phenanthren</b>	0,007	0,02	0,05	1,29	0,085	0,18	0,21	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>Pyren</b>	0,004	0,009	0,027	0,34	0,06	0,099	0,34	191	190 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [8], [9], [14], [20], [25]
<b>4-tert-OP</b>	0,0007	0,002	0,006	0,021	0,017	0,052	0,88	199	197 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[6], [8], [9], [12], [18], [19], [25]
<b>Tributylphosphat</b>	0,14	0,14	0,14	0,14	0,14	0,14	0	1	1 aggreg. Wert	[25]
<b>Tributyltin</b>	0,001	0,001	0,002	0,001	0,002	0,002	0	4	4 Einzelwerte	[1]
<b>Triclosan</b>	0,156	0,235	0,38	0,381	0,48	0,532	0,02	47	46 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[9], [25]
<b>Triphenylphosphat</b>	0,027	0,173	0,34	0,255	0,354	0,372	0,38	8	6 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[6], [12], [25]
<b>TBEP</b>	9,94	11,7	14,5	14,5	17,4	19,1	0	2	2 aggreg. Werte	[6], [25]
<b>TCPP</b>	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	0	1	1 aggreg. Wert	[25]
<b>TDCPP</b>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0	1	1 aggreg. Wert	[25]
<b>TIBP</b>	0,262	0,262	0,262	0,262	0,262	0,262	0	1	1 aggreg. Wert	[25]

Tabelle A 3: Konzentrationen der für die quantitative Bewertung durch Bilanzierung ausgewählten Stoffe im Niederschlagswasser (= Regenwasserkanal).

Niederschlagswasser / Regenwasserkanal Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Acenaphthen</b>	0,001	0,002	0,004	0,015	0,011	0,032	0,22	170	169 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
<b>Acenaphthylen</b>	0,001	0,003	0,008	0,014	0,017	0,041	0,25	170	169 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
<b>Anthracen</b>	0,001	0,003	0,009	0,017	0,021	0,049	0,28	170	169 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
<b>Atrazin</b>	0,0005	0,002	0,008	0,06	0,04	0,166	0,47	93	93 Einzelwerte	[9], [28], [31]
<b>BDE-47</b>	$6,1 \cdot 10^{-8}$	$4,4 \cdot 10^{-7}$	$4,4 \cdot 10^{-6}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$6,8 \cdot 10^{-5}$	$5,4 \cdot 10^{-4}$	0,93	59	59 Einzelwerte	[4], [28]
<b>BDE-99</b>	$2,1 \cdot 10^{-6}$	$8,7 \cdot 10^{-6}$	$4,4 \cdot 10^{-5}$	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$3,2 \cdot 10^{-4}$	$1,4 \cdot 10^{-3}$	0,95	59	59 Einzelwerte	[4], [28]
<b>BDE-100</b>	$2,8 \cdot 10^{-8}$	$2,0 \cdot 10^{-7}$	$2,2 \cdot 10^{-6}$	$3,4 \cdot 10^{-4}$	$2,7 \cdot 10^{-5}$	$4,8 \cdot 10^{-4}$	0,88	59	59 Einzelwerte	[4], [28]
<b>BDE-153</b>	$2,4 \cdot 10^{-7}$	$1,1 \cdot 10^{-6}$	$7,7 \cdot 10^{-6}$	$1,9 \cdot 10^{-4}$	$4,6 \cdot 10^{-5}$	$4,5 \cdot 10^{-4}$	0,8	59	59 Einzelwerte	[4], [28]
<b>BDE-154</b>	$1,8 \cdot 10^{-6}$	$5,4 \cdot 10^{-6}$	$2,0 \cdot 10^{-5}$	$1,6 \cdot 10^{-4}$	$8,4 \cdot 10^{-5}$	$3,7 \cdot 10^{-4}$	0,88	59	59 Einzelwerte	[4], [28]
<b>Benzisothiazolinon</b>	$6,2 \cdot 10^{-7}$	$4,3 \cdot 10^{-6}$	$4,2 \cdot 10^{-5}$	0,003	0,0004	0,003	0,93	41	40 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[9], [10]
<b>Benzo[a]anthracen</b>	0,003	0,006	0,014	0,050	0,045	0,158	0,07	170	169 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]

Niederschlagswasser / Regenwasserkanal Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Benzo[a]pyren</b>	0,003	0,007	0,016	0,053	0,05	0,151	0,12	170	169 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
<b>BbF</b>	0,002	0,003	0,034	0,049	0,068	0,11	0,52	170	169 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
<b>BghiP</b>	0,003	0,01	0,025	0,079	0,072	0,21	0,07	170	169 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
<b>BkF</b>	0,001	0,002	0,016	0,019	0,024	0,051	0,64	170	169 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
<b>Benzotriazol</b>	0,17	0,241	0,36	0,311	0,405	0,432	0	3	3 aggreg. Werte	[10], [35]
<b>Bisoprolol</b>	-	-	0,0005	0,0012	-	-	0,75	4	4 Einzelwerte	[4]
<b>Bisphenol A</b>	0,032	0,061	0,173	0,347	0,385	0,771	0,29	99	94 Einzelwerte 5 aggreg. Werte	[3], [4], [10], [28], [29], [30], [31]
<b>Carbamazepin</b>	0,0000	0,0001	0,0003	0,002	0,001	0,006	0,91	53	53 Einzelwerte	[4], [28]
<b>Carbendazim</b>	0,001	0,005	0,025	0,699	0,487	2,77	0,34	110	109 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [28], [31]
<b>Chrysen</b>	0,002	0,006	0,021	0,062	0,066	0,192	0,07	205	205 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
<b>Clarithromycin</b>	-	-	0,0025	0,012	-	-	0,75	4	4 Einzelwerte	[4]

Niederschlagswasser / Regenwasserkanal Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Coffein</b>	0,061	0,195	0,653	1,81	1,60	3,62	0,05	78	77 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[4], [10], [28], [31]
<b>Cybutryn</b>	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,95	21	20 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[9], [10]
<b>Cypermethrin</b>	-	-	0,0025	0,0026	-	-	0,95	20	20 Einzelwerte	[9]
<b>Daha</b>	0,001	0,002	0,008	0,018	0,02	0,049	0,31	170	169 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
<b>DEHP</b>	0,179	0,381	0,91	1,81	1,93	3,98	0,48	116	24 Einzelwerte 92 aggreg. Werte	[3], [4], [9], [10], [28], [31]
<b>Dibutylphthalat</b>	0,045	0,091	0,201	0,468	0,481	1,28	0,68	62	61 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [10], [28]
<b>Dibutyltin</b>	0,0002	0,0004	0,002	0,015	0,013	0,04	0,29	21	2 Einzelwerte 19 aggreg. Werte	[3], [4], [33], [34]
<b>DCPP</b>	-	-	0,005	0,005	-	-	1	20	20 Einzelwerte	[9]
<b>Diclofenac</b>	0,001	0,002	0,006	0,01	0,014	0,022	0,25	4	4 Einzelwerte	[4]
<b>Diethyltoluamid</b>	0,014	0,037	0,12	0,223	0,235	0,475	0,13	96	95 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[4], [9], [10], [28], [31]
<b>Diuron</b>	0,002	0,004	0,024	0,089	0,055	0,264	0,34	113	113 Einzelwerte	[3], [4], [9], [28], [31]

Niederschlagswasser / Regenwasserkanal Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Estradiol</b>	-	-	0,0001	0,0001	-	-	1	13	13 Einzelwerte	[3]
<b>Estron</b>	0,0001	0,0001	0,0001	0,0002	0,0006	0,0009	0,95	62	62 Einzelwerte	[3], [28]
<b>Ethinylestradiol</b>	-	-	0,0001	0,0001	-	-	1	13	13 Einzelwerte	[3]
<b>Fluoranthen</b>	0,005	0,014	0,039	0,14	0,126	0,408	0,08	185	184 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
<b>Fluoren</b>	0,002	0,002	0,004	0,013	0,009	0,025	0,16	185	184 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
<b>Ibuprofen</b>	0,12	0,12	0,12	0,12	0,12	0,12	0,75	4	4 Einzelwerte	[4]
<b>Imidacloprid</b>	0,001	0,003	0,009	0,026	0,023	0,072	0,53	94	94 Einzelwerte	[9], [28], [31]
<b>I123cdP</b>	0,002	0,008	0,022	0,069	0,061	0,195	0,12	170	169 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
<b>Mecoprop</b>	0,017	0,028	0,056	0,109	0,139	0,242	0,73	15	14 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[4], [10]
<b>1H-5MeBTA</b>	0,055	0,01	0,191	0,307	0,387	0,812	0,68	73	73 Einzelwerte	[28], [31]
<b>Metolachlor</b>	0,0004	0,001	0,005	0,036	0,032	0,091	0,44	79	79 Einzelwerte	[3], [28], [31]
<b>Metoprolol</b>	0,0004	0,001	0,003	0,008	0,008	0,019	0,85	53	53 Einzelwerte	[4], [28]
<b>Naphthalin</b>	0,009	0,015	0,027	0,038	0,048	0,085	0,14	201	200 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]

Niederschlagswasser / Regenwasserkanal Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
Nicotin	0,054	0,157	0,533	1,73	1,91	4,88	0,01	74	73 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[10], [28], [31]
4-Nonylphenol	0,014	0,026	0,06	0,135	0,11	0,206	0,54	66	24 Einzelwerte 42 aggreg. Werte	[9], [31], [32]
PFHxA	0,0006	0,001	0,002	0,003	0,005	0,007	0,33	30	30 Einzelwerte	[4], [9]
PFOS	0,0006	0,001	0,002	0,004	0,004	0,01	0,31	45	45 Einzelwerte	[3], [4], [9], [10]
PFOA	0,001	0,002	0,002	0,005	0,007	0,01	0,31	45	45 Einzelwerte	[3], [4], [9], [10]
Permethrin	0,0002	0,0004	0,0009	0,002	0,002	0,005	0,97	90	90 Einzelwerte	[9], [28]
Phenanthren	0,006	0,012	0,022	0,069	0,059	0,179	0,14	206	205 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
Pyren	0,005	0,016	0,043	0,147	0,146	0,413	0,04	188	187 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [10], [19]
4-tert-OP	0,031	0,053	0,087	0,114	0,166	0,215	0,5	99	98 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[9], [10], [28], [31], [32], [33]
Tributylphosphat	0,016	0,033	0,065	0,342	0,129	0,277	0,42	76	73 Einzelwerte 3 aggreg. Werte	[10], [24], [28], [31]
Tributyltin	0,0001	0,0001	0,002	0,003	0,002	0,002	0,79	18	18 Einzelwerte	[3], [4], [33], [34]

Niederschlagswasser / Regenwasserkanal Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Triclosan</b>	2,8*10 <sup>-5</sup>	0,0001	0,0009	0,018	0,006	0,045	0,95	94	93 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[9], [28], [30], [31]
<b>Triphenylphosphat</b>	0,013	0,025	0,049	0,087	0,106	0,218	0,71	75	73 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[28], [31], [35]
<b>TBEP</b>	0,147	0,326	0,68	1,45	1,4	4,1	0,35	78	73 Einzelwerte 5 aggreg. Werte	[10], [24], [28], [31], [35]
<b>TCPP</b>	0,338	0,361	0,4	0,525	0,627	0,763	0	3	3 aggreg. Werte	[10], [35]
<b>TDCPP</b>	0,02	0,03	0,051	0,08	0,081	0,139	0,79	29	24 Einzelwerte 5 aggreg. Werte	[10], [24], [31], [35]
<b>TIBP</b>	0,061	0,062	0,063	0,074	0,082	0,093	0	3	3 aggreg. Werte	[10], [24]

Tabelle A 4: Konzentrationen der für die quantitative Bewertung durch Bilanzierung ausgewählten Stoffe im Mischwasserüberlauf.

Mischwasserüberlauf Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Acenaphthen</b>	0,002	0,004	0,007	0,011	0,013	0,024	0,08	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
<b>Acenaphthylen</b>	0,005	0,01	0,015	0,016	0,02	0,026	0,08	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
<b>Anthracen</b>	0,002	0,003	0,006	0,009	0,009	0,018	0,1	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
<b>Atrazin</b>	$2,5 \cdot 10^{-7}$	$1,6 \cdot 10^{-6}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$	0,0007	$9,8 \cdot 10^{-5}$	0,0006	0,98	157	157 Einzelwerte	[9]
<b>BDE-47</b>	$4,7 \cdot 10^{-4}$	$4,7 \cdot 10^{-4}$	$5,5 \cdot 10^{-4}$	$5,5 \cdot 10^{-4}$	$5,9 \cdot 10^{-4}$	$6,2 \cdot 10^{-4}$	0	2	2 Einzelwerte	[4]
<b>BDE-99</b>	$4,6 \cdot 10^{-4}$	$6,8 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$1,4 \cdot 10^{-3}$	$1,7 \cdot 10^{-3}$	0	2	2 Einzelwerte	[4]
<b>BDE-100</b>	$8,7 \cdot 10^{-5}$	$1,3 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	$2,6 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$	0	2	2 Einzelwerte	[4]
<b>BDE-153</b>	$5 \cdot 10^{-5}$	$8,8 \cdot 10^{-5}$	$1,3 \cdot 10^{-4}$	$1,3 \cdot 10^{-4}$	$1,9 \cdot 10^{-4}$	$2,2 \cdot 10^{-4}$	0	2	2 Einzelwerte	[4]
<b>BDE-154</b>	$3,9 \cdot 10^{-5}$	$6,6 \cdot 10^{-5}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$	$1,6 \cdot 10^{-4}$	$1,8 \cdot 10^{-4}$	0	2	2 Einzelwerte	[4]
<b>Benzisothiazolinon</b>	0,0002	0,0007	0,002	0,012	0,008	0,032	0,82	27	27 Einzelwerte	[9]
<b>Benzo[a]anthracen</b>	0,004	0,01	0,019	0,031	0,037	0,071	0,04	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
<b>Benzo[a]pyren</b>	0,004	0,009	0,019	0,031	0,038	0,067	0,07	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]

Mischwasserüberlauf	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>BbF</b>	0,005	0,013	0,028	0,041	0,05	0,093	0,06	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
<b>BghiP</b>	0,004	0,01	0,022	0,034	0,04	0,074	0,02	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
<b>BkF</b>	0,003	0,006	0,013	0,02	0,023	0,043	0,02	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
<b>Benzotriazol</b>	0,395	0,618	1,1	1,49	2,18	2,75	0	146	145 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[9], [25]
<b>Bisoprolol</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>Bisphenol A</b>	0,125	0,223	0,285	0,288	0,380	0,434	0,83	12	11 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [25]
<b>Carbamazepin</b>	0,011	0,02	0,049	0,074	0,098	0,172	0,15	147	146 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[4], [9], [25]
<b>Carbendazim</b>	0,005	0,008	0,014	0,019	0,025	0,041	0,34	160	159 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[4], [9], [25]
<b>Chrysen</b>	0,007	0,019	0,037	0,052	0,063	0,11	0,02	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
<b>Clarithromycin</b>	-	-	0,094	0,094	-	-	0	1	1 Einzelwert	[4]
<b>Coffein</b>	9,23	9,52	10,01	10,02	10,51	10,80	0	2	1 Einzelwert 1 aggreg. Wert	[4], [25]
<b>Cybutryn</b>	-	-	0,0025	0,0025	-	-	1	27	27 Einzelwerte	[9]

Mischwasserüberlauf Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
Cypermethrin	3,8*10 <sup>-6</sup>	2,1*10 <sup>-5</sup>	0,0002	0,005	0,001	0,01	0,85	27	27 Einzelwerte	[9]
Daha	0,0009	0,002	0,004	0,007	0,008	0,014	0,18	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
DEHP	0,554	1	1,8	2,72	3,6	6,66	0,006	165	164 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
Dibutylphthalat	-	-	0,015	0,015	-	-	1	5	5 Einzelwerte	[3]
Dibutyltin	0,0005	0,0005	0,001	0,024	0,0305	0,047	0,45	11	11 Einzelwerte	[4], [29], [34]
DCPP	-	-	0,005	0,005	-	-	1	27	27 Einzelwerte	[9]
Diclofenac	0,076	0,115	0,2	0,251	0,33	0,47	0	151	150 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[4], [9], [25], [56]
Diethyltoluamid	0,018	0,036	0,068	0,239	0,16	0,4	0,03	29	28 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[4], [9], [25]
Diuron	0,002	0,005	0,01	0,02	0,026	0,044	0,52	160	160 Einzelwerte	[4], [9]
Estradiol	0,002	0,003	0,003	0,004	0,005	0,005	0,57	7	7 Einzelwerte	[3]
Estron	4,3*10 <sup>-5</sup>	8,4*10 <sup>-5</sup>	0,0006	0,004	0,007	0,013	0,43	7	7 Einzelwerte	[3]
Ethinylestradiol	-	-	0,0001	0,0001	-	-	1	11	11 Einzelwerte	[3]
Fluoranthen	0,019	0,037	0,06	0,09	0,105	0,18	0,06	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
Fluoren	0,003	0,004	0,007	0,009	0,011	0,017	0,06	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]

Mischwasserüberlauf	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Ibuprofen</b>	0,11	0,35	1,104	1,23	1,97	2,47	0	6	6 Einzelwerte	[4], [9], [25], [56]
<b>Imidacloprid</b>	-	-	0,005	0,005	-	-	1	27	27 Einzelwerte	[9]
<b>I123cdP</b>	0,003	0,008	0,02	0,032	0,042	0,071	0,04	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
<b>Mecoprop</b>	0,006	0,012	0,021	0,039	0,044	0,09	0,19	149	148 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[4], [9], [25]
<b>1H-5MeBTA</b>	0,053	0,11	0,19	0,234	0,36	0,43	0	146	145 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[9], [25]
<b>Metolachlor</b>	2,3*10 <sup>-5</sup>	0,0001	0,0009	0,032	0,006	0,03	0,77	145	145 Einzelwerte	[9]
<b>Metoprolol</b>	0,04	0,07	0,11	0,14	0,19	0,29	0,007	147	147 Einzelwerte	[4], [9], [25]
<b>Naphthalin</b>	0,008	0,013	0,021	0,029	0,03	0,051	0,23	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
<b>Nicotin</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>4-Nonylphenol</b>	0,019	0,0346	0,110	0,189	0,140	0,367	0,29	35	35 Einzelwerte	[9], [29]
<b>PFHxA</b>	0,001	0,002	0,003	0,003	0,004	0,005	0,17	29	29 Einzelwerte	[4], [9]
<b>PFOS</b>	0,001	0,001	0,003	0,003	0,003	0,004	0,25	40	40 Einzelwerte	[3], [4], [9]
<b>PFOA</b>	0,001	0,002	0,003	0,004	0,004	0,009	0,1	40	40 Einzelwerte	[3], [4], [9]
<b>Permethrin</b>	0,012	0,015	0,029	0,03	0,041	0,047	0,19	27	27 Einzelwerte	[9]

Mischwasserüberlauf Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
Phenanthren	0,015	0,025	0,045	0,06	0,073	0,12	0,01	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
Pyren	0,017	0,036	0,055	0,076	0,097	0,15	0,02	171	170 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[3], [4], [9], [25]
4-tert-OP	0,004	0,008	0,023	0,029	0,03	0,034	0,38	29	28 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[9], [25], [55]
Tributylphosphat	-	-	0,025	0,025	-	-	1	1	1 aggreg. Wert	[25]
Tributyltin	-	-	0,00005	0,0007	-	-	1	3	3 Einzelwerte	[4], [34]
Triclosan	0,005	0,009	0,0165	0,029	0,039	0,067	0,32	158	157 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[9], [25]
Triphenylphosphat	0,139	0,139	0,139	0,139	0,139	0,139	0	1	1 aggreg. Wert	[25]
TBEP	1,83	1,83	1,83	1,83	1,83	1,83	0	1	1 aggreg. Wert	[25]
TCPP	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	0	1	1 aggreg. Wert	[25]
TDCPP	0,122	0,122	0,122	0,122	0,122	0,122	0	1	1 aggreg. Wert	[25]
TIBP	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0,2	0	1	1 aggreg. Wert	[25]

Tabelle A 5: Konzentrationen der für die quantitative Bewertung durch Bilanzierung ausgewählten Stoffe im Kläranlagenablauf.

Kläranlagenablauf Stoff	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Acenaphthen</b>	0,0002	0,0005	0,001	0,004	0,002	0,005	0,49	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>Acenaphthylen</b>	0,0001	0,0002	0,0005	0,003	0,001	0,002	0,75	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>Anthracen</b>	-	-	0,0005	0,004	-	-	0,97	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>Atrazin</b>	1,2*10 <sup>-6</sup>	7,7*10 <sup>-6</sup>	6,4*10 <sup>-5</sup>	0,005	0,0005	0,004	0,94	1123	1223 Einzelwerte	[9], [19]
<b>BDE-47</b>	1,6*10 <sup>-5</sup>	5,3*10 <sup>-5</sup>	1,7*10 <sup>-4</sup>	1,2*10 <sup>-3</sup>	9,6*10 <sup>-4</sup>	4,6*10 <sup>-3</sup>	0,64	74	55 Einzelwerte 19 aggreg. Werte	[14], [15], [20], [40]
<b>BDE-99</b>	6*10 <sup>-6</sup>	2,1*10 <sup>-5</sup>	9,8*10 <sup>-5</sup>	9,8*10 <sup>-4</sup>	4,8*10 <sup>-4</sup>	2*10 <sup>-3</sup>	0,6	73	54 Einzelwerte 19 aggreg. Werte	[14], [15], [20], [40]
<b>BDE-100</b>	2*10 <sup>-6</sup>	7,5*10 <sup>-6</sup>	2,6*10 <sup>-5</sup>	2,1*10 <sup>-4</sup>	1,1*10 <sup>-4</sup>	7,2*10 <sup>-4</sup>	0,62	73	54 Einzelwerte 19 aggreg. Werte	[14], [15], [20], [40]
<b>BDE-153</b>	1,1*10 <sup>-6</sup>	3,2*10 <sup>-6</sup>	1,2*10 <sup>-5</sup>	8,9*10 <sup>-5</sup>	6*10 <sup>-5</sup>	1,7*10 <sup>-4</sup>	0,64	73	54 Einzelwerte 19 aggreg. Werte	[14], [15], [20], [40]
<b>BDE-154</b>	6,5*10 <sup>-7</sup>	2,2*10 <sup>-6</sup>	8,8*10 <sup>-6</sup>	7*10 <sup>-5</sup>	4,2*10 <sup>-5</sup>	2,4*10 <sup>-4</sup>	0,62	73	54 Einzelwerte 19 aggreg. Werte	[14], [15], [20], [40]

Kläranlagenablauf	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Benzisothiazolinon</b>	0,001	0,002	0,006	0,016	0,016	0,036	0,69	314	314 Einzelwerte	[9]
<b>Benzo[a]anthracen</b>	4,3*10 <sup>-6</sup>	1,6*10 <sup>-5</sup>	6,9*10 <sup>-5</sup>	0,001	0,0003	0,001	0,89	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>Benzo[a]pyren</b>	2,9*10 <sup>-5</sup>	7,1*10 <sup>-5</sup>	0,0002	0,0008	0,0006	0,001	0,75	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>BbF</b>	9,1*10 <sup>-6</sup>	2,9*10 <sup>-5</sup>	0,0001	0,0008	0,0004	0,001	0,89	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>BghiP</b>	2,6*10 <sup>-5</sup>	6,3*10 <sup>-5</sup>	0,0002	0,0005	0,0005	0,001	0,79	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>BkF</b>	3*10 <sup>-7</sup>	1,5*10 <sup>-6</sup>	9,1*10 <sup>-6</sup>	0,0003	5,5*10 <sup>-5</sup>	0,0003	0,89	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>Benzotriazol</b>	0,106	0,129	0,378	2,85	2,69	10,04	0	8	7 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[6], [12], [20]
<b>Bisoprolol</b>	0,05	0,07	0,08	0,12	0,14	0,21	0,06	18	17 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[7], [12], [22], [38], [58]
<b>Bisphenol A</b>	0,002	0,007	0,02	0,175	0,07	0,189	0,43	282	280 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[3], [6], [8], [13], [19], [20]

Kläranlagenablauf	P10	P25	Median	Mittelwert	P75	P90	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
Stoff	(µg/l)	(µg/l)	(µg/l)	(µg/l)	(µg/l)	(µg/l)				
<b>Carbamazepin</b>	0,134	0,17	0,32	0,458	0,653	0,78	0	36	36 Einzelwerte	[5], [7], [8], [12], [13], [19], [22], [38]
<b>Carbendazim</b>	0,002	0,0047	0,015	0,051	0,03	0,058	0,36	454	452 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[9], [12], [19], [21], [25]
<b>Chrysen</b>	4,5*10 <sup>-5</sup>	0,0001	0,0003	0,002	0,001	0,002	0,74	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>Clarithromycin</b>	0,004	0,01	0,06	0,212	0,23	0,57	0,27	272	272 Einzelwerte	[5], [7], [12], [13], [19], [22]
<b>Coffein</b>	0,002	0,012	0,046	3,04	0,175	0,992	0,35	255	255 Einzelwerte	[12], [19], [37]
<b>Cybutryn</b>	0,00003	0,00008	0,0003	0,0009	0,0008	0,002	0,97	1133	1131 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[6], [9], [12], [19], [20]
<b>Cypermethrin</b>	-	-	0,0025	0,0028	-	-	1	1125	1124 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[6], [9], [19], [20], [39]
<b>Daha</b>	-	-	1,7*10 <sup>-6</sup>	6,7*10 <sup>-5</sup>	-	-	0,99	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>DEHP</b>	0,216	0,54	1,3	2,64	2,5	5,4	0,17	1253	1253 Einzelwerte	[3], [9], [12], [19]
<b>Dibutylphthalat</b>	0,037	0,075	0,166	0,339	0,375	0,8	0,78	248	248 Einzelwerte	[3], [19]
<b>Dibutyltin</b>	3,3*10 <sup>-5</sup>	6,9*10 <sup>-5</sup>	0,0002	0,0004	0,0004	0,001	0,54	52	51 Einzelwerte	[14], [15], [20]

Kläranlagenablauf	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>DCPP</b>	-	-	0,005	0,005	-	-	1	314	314 Einzelwerte	[9]
<b>Diclofenac</b>	0,24	0,96	1,5	1,91	2,51	3,7	0	49	49 Einzelwerte	[5], [7], [8], [12], [13], [22], [38]
<b>Diethyltoluamid</b>	0,026	0,044	0,08	0,125	0,15	0,266	0,02	315	314 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[6], [9], [39]
<b>Diuron</b>	0,004	0,008	0,009	0,125	0,026	0,042	0,28	1003	1003 Einzelwerte	[9]
<b>Estradiol</b>	8,5*10 <sup>-6</sup>	3*10 <sup>-5</sup>	0,0001	0,001	0,0005	0,002	0,99	251	251 Einzelwerte	[3], [19]
<b>Estron</b>	5,7*10 <sup>-6</sup>	2,3*10 <sup>-5</sup>	0,0001	0,002	0,0006	0,003	0,95	260	260 Einzelwerte	[3], [13], [19]
<b>Ethinylestradiol</b>	1,3*10 <sup>-5</sup>	4,8*10 <sup>-5</sup>	0,0002	0,0019	0,0009	0,003	0,99	260	260 Einzelwerte	[3], [13], [19]
<b>Fluoranthen</b>	0,0005	0,001	0,002	0,006	0,004	0,007	0,35	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>Fluoren</b>	0,0006	0,001	0,004	0,008	0,003	0,004	0,32	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>Ibuprofen</b>	7,3*10 <sup>-5</sup>	0,0005	0,004	0,453	0,03	0,181	0,55	270	270 Einzelwerte	[5], [7], [12], [13], [19], [22], [38]
<b>Imidacloprid</b>	0,006	0,009	0,017	0,021	0,028	0,043	0,27	318	318 Einzelwerte	[9], [12], [19]

Kläranlagenablauf	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>I123cdP</b>	2*10 <sup>-5</sup>	4,9*10 <sup>-5</sup>	0,0001	0,0005	0,0004	0,0009	0,82	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>Mecoprop</b>	0,031	0,031	0,031	0,031	0,031	0,031	0,88	8	7 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[6], [12], [25]
<b>1H-5MeBTA</b>	0,165	0,241	0,412	0,879	1,175	1,92	0	8	6 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[6], [12], [20]
<b>Metolachlor</b>	5*10 <sup>-5</sup>	0,0003	0,002	0,306	0,02	0,071	0,65	150	150 Einzelwerte	[8], [12], [19]
<b>Metoprolol</b>	0,004	0,15	0,40	0,34	0,50	0,58	0,1	30	30 Einzelwerte	[5], [7], [12], [13], [22], [58]
<b>Naphthalin</b>	0,002	0,004	0,008	0,014	0,014	0,022	0,6	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
<b>Nicotin</b>	-	-	0,00018	0,00018	-	-	1	6	6 Einzelwerte	[12]
<b>4-Nonylphenol</b>	0,005	0,0129	0,044	0,114	0,068	0,2	0,42	1022	1022 Einzelwerte	[9], [18]
<b>PFHxA</b>	0,002	0,004	0,006	0,017	0,01	0,018	0,04	956	956 Einzelwerte	[8], [9], [20]
<b>PFOS</b>	0,0008	0,002	0,004	0,007	0,006	0,012	0,17	1076	1076 Einzelwerte	[3], [8], [9], [14], [15], [20]
<b>PFOA</b>	0,002	0,003	0,005	0,007	0,008	0,011	0,17	1076	1076 Einzelwerte	[3], [8], [9], [14], [15], [20]
<b>Permethrin</b>	-	-	0,011	0,011	-	-	1	316	316 Einzelwerte	[9], [12]

Kläranlagenablauf	P10 (µg/l)	P25 (µg/l)	Median (µg/l)	Mittelwert (µg/l)	P75 (µg/l)	P90 (µg/l)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
Phenanthren	0,002	0,003	0,004	0,024	0,007	0,012	0,21	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
Pyren	0,0004	0,001	0,002	0,007	0,003	0,006	0,37	1330	1330 Einzelwerte	[3], [8], [9], [13], [14], [15], [19], [20]
4-tert-OP	0,002	0,004	0,007	0,014	0,016	0,03	0,78	1303	1302 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[6], [8], [9], [12], [13], [18], [19]
Tributylphosphat	0,022	0,022	0,022	0,022	0,022	0,022	0	1	1 aggreg. Wert	[25]
Tributyltin	1,8*10 <sup>-6</sup>	4,2*10 <sup>-6</sup>	1,2*10 <sup>-5</sup>	4,2*10 <sup>-5</sup>	3,4*10 <sup>-5</sup>	0,00008	0,89	71	70 Einzelwerte 1 aggreg. Wert	[14], [15], [18], [20]
Triclosan	0,012	0,017	0,024	0,027	0,035	0,046	0,04	314	314 Einzelwerte	[9]
Triphenylphosphat	0,014	0,018	0,027	0,026	0,035	0,037	0,4	5	4 Einzelwerte 1 aggreg. Werte	[6], [12], [25]
TBEP	0,264	0,345	0,48	0,48	0,615	0,696	0	2	2 aggreg. Werte	[6], [25]
TCPP	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	2,7	0	1	1 aggreg. Wert	[25]
TDCPP	0,15	0,15	0,15	0,15	0,15	0,15	0,5	2	2 aggreg. Werte	[6], [25]
TIBP	-	-	0,025	0,025	-	-	0	1	1 aggreg. Wert	[25]

Tabelle A 6: Konzentrationen der für die quantitative Bewertung durch Bilanzierung ausgewählten Stoffe im Klärschlamm.

Klärschlamm Stoff	P10 (mg/kg TS)	P25 (mg/kg TS)	Median (mg/kg TS)	Mittelwert (mg/kg TS)	P75 (mg/kg TS)	P90 (mg/kg TS)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Acenaphthen</b>	-	-	0,02	0,02	-	-	0,94	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
<b>Acenaphthylen</b>	0,003	0,006	0,012	0,02	0,023	0,052	0,76	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
<b>Anthracen</b>	0,002	0,004	0,015	0,022	0,023	0,033	0,76	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
<b>Atrazin</b>	-	-	0,0025	0,0025	-	-	1	65	65 Einzelwerte	[9]
<b>BDE-47</b>	0,015	0,023	0,040	0,048	0,0558	0,093	0	40	39 Einzelwerte 1 aggreg. Werte	[16], [17], [26], [50], [51], [41], [42]
<b>BDE-99</b>	0,022	0,030	0,046	0,054	0,060	0,110	0	43	41 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[16], [17], [26], [50], [51], [41], [42]
<b>BDE-100</b>	0,005	0,006	0,008	0,011	0,013	0,019	0	38	36 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[16], [17], [26], [50], [41], [42]
<b>BDE-153</b>	0,003	0,004	0,006	0,007	0,011	0,013	0	38	36 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[16], [17], [26], [50], [41], [42]
<b>BDE-154</b>	0,002	0,003	0,004	0,006	0,007	0,012	0	38	36 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[16], [17], [26], [50], [41], [42]
<b>Benzisothiazolinon</b>	-	-	0,17	0,17	-	-	0	1	1 aggreg. Wert	[2]
<b>Benzo[a]-anthracen</b>	0,019	0,032	0,049	0,058	0,066	0,12	0,11	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]

Klärschlamm Stoff	P10 (mg/kg TS)	P25 (mg/kg TS)	Median (mg/kg TS)	Mittelwert (mg/kg TS)	P75 (mg/kg TS)	P90 (mg/kg TS)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
Benzo[a]pyren	0,02	0,03	0,049	0,067	0,072	0,151	0,1	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
BbF	0,025	0,046	0,065	0,082	0,091	0,163	0,06	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
BghiP	0,024	0,038	0,054	0,072	0,081	0,156	0,09	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
BkF	0,012	0,02	0,03	0,04	0,04	0,083	0,21	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
Benzotriazol	0,007	0,008	0,01	0,021	0,016	0,02	0	11	11 Einzelwerte	[43], [45]
Bisoprolol	-	-	0,0075	0,0075	-	-	0	4	4 Einzelwerte	[5], [7]
Bisphenol A	0,020	0,050	0,230	0,680	1,40	1,87	0	10	10 Einzelwerte	[8], [17], [44], [45], [46]
Carbamazepin	0,016	0,075	0,21	0,449	0,46	1,6	0,11	27	27 Einzelwerte	[5], [7], [8], [11], [23], [27]
Carbendazim			0,005	0,005			1	32	32 Einzelwerte	[9]
Chrysen	0,027	0,052	0,083	0,093	0,11	0,182	0,07	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
Clarithromycin	0,005	0,007	0,012	0,03	0,04	0,054	0,57	21	21 Einzelwerte	[5], [11], [23], [27]
Coffein	-	-	0,01	0,01	-	-	1	4	4 Einzelwerte	[37]
Cybutryn	-	-	0,005	0,005	-	-	1	65	65 Einzelwerte	[9]
Cypermethrin	-	-	0,025	0,025	-	-	1	65	65 Einzelwerte	[9]
DahA	0,003	0,005	0,009	0,014	0,017	0,031	0,83	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]

Klärschlamm Stoff	P10 (mg/kg TS)	P25 (mg/kg TS)	Median (mg/kg TS)	Mittelwert (mg/kg TS)	P75 (mg/kg TS)	P90 (mg/kg TS)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
DEHP	4,71	7,4	11	20,2	17	23,9	0	72	83 Einzelwerte 5 aggreg. Werte	[9], [17], [48], [49]
<b>Dibutylphthalat</b>	0,68	0,8	1	1	1,2	0,57	0	2	2 aggreg. Werte	[49]
<b>Dibutyltin</b>	0,02	0,025	0,038	0,066	0,063	0,14	0	6	6 Einzelwerte	[17], [47]
<b>DCPP</b>	-	-	0,05	0,05	-	-	1	32	32 Einzelwerte	[9]
<b>Diclofenac</b>	0,02	0,079	0,25	0,302	0,345	0,49	0,07	27	27 Einzelwerte	[5], [7], [8], [11], [23], [27]
<b>Diethyltolu- amid</b>	-	-	0,005	0,005	-	-	1	32	32 Einzelwerte	[9]
<b>Diuron</b>	0,001	0,002	0,003	0,005	0,006	0,01	0,89	65	65 Einzelwerte	[9]
<b>Estradiol</b>	0,0001	0,0004	0,003	0,05	0,01	0,03	0,71	17	17 Einzelwerte	[23]
<b>Estron</b>	0,002	0,002	0,002	0,004	0,002	0,01	0	5	5 Einzelwerte	[57]
<b>Ethinylestradiol</b>	-	-	0,00125	0,00125	-	-	1	17	17 Einzelwerte	[23]
<b>Fluoranthen</b>	0,052	0,085	0,13	0,147	0,185	0,261	0	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
<b>Fluoren</b>	0,001	0,002	0,009	0,012	0,013	0,03	0,81	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
<b>Ibuprofen</b>	0,057	0,081	0,22	0,177	0,26	0,3	0,14	7	7 Einzelwerte	[5], [7], [11], [27]
<b>Imidacloprid</b>	-	-	0,005	0,005	-	-	0,97	32	32 Einzelwerte	[9]
<b>I123cdP</b>	0,018	0,032	0,042	0,059	0,065	0,121	0,11	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]

Klärschlamm Stoff	P10 (mg/kg TS)	P25 (mg/kg TS)	Median (mg/kg TS)	Mittelwert (mg/kg TS)	P75 (mg/kg TS)	P90 (mg/kg TS)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
<b>Mecoprop</b>	-	-	0	0	-	-	1	1	1 aggreg. Wert	[2]
<b>1H-5MeBTA</b>	0,004	0,0076	0,017	0,016	0,023	0,027	0	10	10 Einzelwerte	[43]
<b>Metolachlor</b>	-	-	0,005	0,005	-	-	1	3	3 Einzelwerte	[8]
<b>Metoprolol</b>	0,05	0,12	0,18	0,28	0,40	0,55	0,08	24	24 Einzelwerte	[5], [7], [11], [23], [27]
<b>Naphthalin</b>	0,007	0,012	0,028	0,053	0,048	0,122	0,37	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
<b>Nicotin</b>	-	-	0,025	0,025	-	-	1	4	4 Einzelwerte	[36]
<b>4-Nonylphenol</b>	0,018	0,051	0,150	0,865	0,430	3,4	0,27	77	77 Einzelwerte	[9], [18]
<b>PFHxA</b>	0,0002	0,0004	0,0006	0,0008	0,0009	0,001	0,87	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
<b>PFOS</b>	0,004	0,007	0,013	0,022	0,025	0,058	0	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
<b>PFOA</b>	0,0003	0,0005	0,0007	0,0009	0,001	0,001	0,81	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
<b>Permethrin</b>	0,077	0,01	0,136	0,152	0,2	0,259	0,63	32	32 Einzelwerte	[9]
<b>Phenanthren</b>	0,031	0,042	0,058	0,074	0,086	0,121	0,03	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
<b>Pyren</b>	0,043	0,079	0,13	0,138	0,19	0,232	0,01	70	70 Einzelwerte	[8], [9], [17]
<b>4-tert-OP</b>	0,0007	0,002	0,009	0,060	0,037	0,183	0,83	80	80 Einzelwerte	[8], [9], [18]
<b>Tributyl- phosphat</b>	0,002	0,009	0,014	0,043	0,025	0,129	0,2	10	10 Einzelwerte	[47], [54]
<b>Tributyltin</b>	0,006	0,009	0,011	0,013	0,016	0,021	0	19	19 Einzelwerte	[17], [18], [46], [47]

Klärschlamm	P10 (mg/kg TS)	P25 (mg/kg TS)	Median (mg/kg TS)	Mittelwert (mg/kg TS)	P75 (mg/kg TS)	P90 (mg/kg TS)	Anteil < BG	Anzahl Werte (N)	Beschreibung Werte	Quellen
Triclosan	0,316	0,38	0,47	0,803	0,71	1,30	0	37	37 Einzelwerte	[9], [4], [45], [46]
Triphenyl- phosphat	0,005	0,007	0,012	0,013	0,014	0,019	0	7	7 Einzelwerte	[54]
TBEP	0,025	0,041	0,066	0,22	0,323	0,478	0	3	1 Einzelwerte 2 aggreg. Werte	[52], [53], [54]
TCPP	0,011	0,013	0,016	0,019	0,023	0,03	0	8	8 Einzelwerte	[54]
TDCPP	-	-	0,003	0,003	-	-	0	8	8 Einzelwerte	[54]
TIBP	0,002	0,006	0,012	0,012	0,018	0,021	0	2	2 aggreg. Werte	[52], [53]

[1] Clara et al. (2009); [2] Wick et al. (2010); [3] Clara et al. (2014); [4] Clara et al. (2020); [5] Clara et al. (2013); [6] Sacher et al. (2014); [7] Wechner (2014); [8] Kittlaus et al. (2024); [9] Nickel et al. (2021); [10] Wicke et al. (2015); [11] Clara et al. (2011); [12] Liska et al. (2021); [13] Braun et al. (2020); [14] Amann et al. (2019); [15] Clara et al. (2017); [16] Stiborova et al. (2015); [17] Clara et al. (2016); [18] Lambert et al. (2014); [19] KEHOP (2021); [20] Clara et al. (2016); [21] Alygizakis et al. (2019); [22] Clara et al. (2019); [23] Stenzel et al. (2019); [24] Regnery and Püttmann (2010); [25] Launay (2017); [26] Knoth et al. (2007); [27] Wellbrock et al. (2019); [28] Masoner et al. (2019); [29] Gasperi et al. (2014); [30] Tran et al. (2019); [31] Fairbairn et al. (2018); [32] Bressy et al. (2012); [33] Zgheib et al. (2011); [34] Birch et al. (2011); [35] Burant et al. (2018); [36] Hohenblum et al. (2000); [37] Martín et al. (2012); [38] Loos et al. (2013); [39] Aemig et al. (2021); [40] Kim et al. (2013); [41] Law et al. (2006); [42] Eljarrat et al. (2008); [43] Herrero et al. (2014); [44] Samaras et al. (2013); [45] Stasinakis et al. (2013); [46] Jones et al. (2014); [47] Mailler et al. (2014); [48] Lee et al. (2019); [49] Çifci et al. (2013); [50] Cincinelli et al. (2012); [51] Cristale and Lacorte, (2015); [52] Fu et al. (2017); [53] Wang et al. (2019); [54] Xu et al. (2019); [55] Becouze-Lareure et al. (2019); [56] Kay et al. (2017); [57] Yu et al. (2011); [58] Gabet-Giraud et al. (2010).

Tabelle A 7: Bilanzen im Mischsystem.

Bilanz im Mischsystem Stoff	Eintragspfade (% des Eintrags)		Austragspfade (% des Austrags über diese Pfade – ohne Abbau)			Klärschlamm (%)	Abbau / positiver Bilanzfehler (% des Austrags)	Negativer Bilanzfehler (% des Eintrags)
	Schmutzwasser (%)	Niederschlagswasser (%)	Niederschlagswasserkanal (%)	Mischwasserüberlauf (%)	Kläranlagenablauf (%)			
Acenaphthen	71	29	2	19	11	41	27	/
Acenaphthylen	30	70	5	27	6	30	32	/
Anthracen	34	66	5	26	5	34	30	/
Atrazin	1	99	7	36	1	8	1	/
BDE-47	100	0	0	5	1	73	21	/
BDE-99	100	0	0	5	1	67	27	/
BDE-100	100	0	0	5	1	61	33	/
BDE-153	100	0	0	5	1	88	6	/
BDE-154	99	1	0	6	1	76	17	/
Benzisothiazolinon	100	0	0	5	6	35	54	/
Benzo[a]anthracen	33	67	5	26	0	67	2	/
Benzo[a]pyren	17	83	5	28	1	66	/	- 10
BbF	15	85	6	32	1	46	15	/

Bilanz im Mischsystem Stoff	Eintragspfade (% des Eintrags)			Austragspfade (% des Austrags über diese Pfade – ohne Abbau)			Klärschlamm (%)	Abbau / positiver Bilanzfehler (% des Austrags)	Negativer Bilanzfehler (% des Eintrags)
	Schmutzwasser (%)	Niederschlagswasser (%)	Niederschlagswasserkanal (%)	Mischwasserüberlauf (%)	Kläranlagenablauf (%)				
BghiP	10	90	6	33	1	1	56	4	/
BKF	16	84	6	31	1	1	44	18	/
Benzotriazol	51	49	3	20	65	65	0	11	/
Bisoprolol	100	0	0	5	72	72	2	21	/
Bisphenol A	55	45	3	30	7	7	17	43	/
Carbamazepin	100	0	0	4	92	92	4	/	- 52
Carbendazim	12	88	6	20	68	68	5	1	/
Chrysen	26	74	4	24	1	1	71	/	- 18
Clarithromycin	99	1	0	6	42	42	2	50	/
Coffein	98	2	0	6	0	0	0	94	/
Cybutryn	7	93	7	34	3	3	13	43	/
Cypermethrin	65	35	2	10	27	27	61	/	- 48
Daha	4	96	7	35	0	0	30	28	/
DEHP	87	13	1	11	24	24	46	18	/
Dibutylphthalat	70	30	2	15	32	32	43	8	/

Bilanz im Mischsystem Stoff	Eintragspfade (% des Eintrags)			Austragspfade (% des Austrags über diese Pfade – ohne Abbau)			Abbau / positiver Bilanzfehler (% des Austrags)	Negativer Bilanzfehler (% des Eintrags)
	Schmutzwasser (%)	Niederschlagswasser (%)	Niederschlagswasserkanal (%)	Mischwasserüberlauf (%)	Kläranlagenablauf (%)	Klärschlamm (%)		
Dibutyltin	82	18	1	5	2	92	/	-13
DCPP	80	20	1	8	26	59	6	/
Diclofenac	100	0	0	4	92	4	/	-14
Diethyltoluamid	78	22	2	5	18	0	75	/
Diuron	10	90	6	15	44	3	32	/
Estradiol	100	0	0	14	2	9	75	/
Estron	97	3	0	6	4	15	75	/
Ethinylestradiol	99	1	0	6	2	3	89	/
Fluoranthen	33	67	5	26	4	64	1	/
Fluoren	70	30	2	19	34	20	25	/
Ibuprofen	97	3	0	6	0	1	93	/
Imidacloprid	58	42	2	15	78	5	/	-20
I123cdP	12	88	6	32	1	49	12	/
Mecoprop	4	96	7	14	67	0	12	/
1H-5MeBTA	71	29	2	14	79	1	4	/

Bilanz im Mischsystem Stoff	Eintragspfade (% des Eintrags)			Austragspfade (% des Austrags über diese Pfade – ohne Abbau)			Klärschlamm (%)	Abbau / positiver Bilanzfehler (% des Austrags)	Negativer Bilanzfehler (% des Eintrags)
	Schmutzwasser (%)	Niederschlagswasser (%)	Niederschlagswasserkanal (%)	Mischwasserüberlauf (%)	Kläranlagenablauf (%)				
Metolachlor	2	98	7	7	57	27	2	/	
Metoprolol	100	0	0	13	72	15	/	-24	
Naphthalin	46	54	4	22	19	16	39	/	
Nicotin	3	97	7	35	0	1	57	/	
4-Nonylphenol	78	22	2	16	20	16	46	/	
PFHxA	55	45	2	10	86	2	/	-96	
PFOS	61	39	2	11	48	39	/	-84	
PFOA	57	43	2	16	80	2	/	-68	
Permethrin	99	1	0	6	12	34	48	/	
Phenanthren	64	36	3	30	9	27	31	/	
Pyren	33	67	5	26	4	58	7	/	
4-tert-OP	5	95	7	10	10	3	70	/	
Tributylphosphat	62	38	3	17	16	2	62	/	
Tributyltin	44	56	4	1	0	95	/	-22	
Triclosan	100	0	0	6	10	46	38	/	

Bilanz im Mischsystem Stoff	Eintragspfade (% des Eintrags)			Austragspfade (% des Austrags über diese Pfade – ohne Abbau)			Abbau / positiver Bilanzfehler (% des Austrags)	Negativer Bilanzfehler (% des Eintrags)
	Schmutzwasser (%)	Niederschlagswasser (%)	Niederschlagswasserkanal (%)	Mischwasserüberlauf (%)	Kläranlagenablauf (%)	Klärschlamm (%)		
Triphenylphosphat	84	16	1	18	11	1	69	/
TBEP	94	6	0	8	5	0	87	/
TCPP	84	16	1	19	33	0	47	/
TDCPP	79	21	1	12	78	0	9	/
TIBP	76	24	2	13	12	1	72	/

Tabelle A 8: Bilanzen im Trennsystem.

Bilanz im Trennsystem Stoff	Eintragspfade (% des Eintrags)		Austragspfade (% des Austrages über diese Pfade – ohne Abbau)			Abbau / positives Bilanz- fehler (% des Austrags)	Negativer Bilanz- fehler (% des Eintrags)
	Schmutz- wasser (%)	Niederschlags- wasser (%)	Niederschlags- kanal (%)	Mischwasser- überlauf (%)	Kläranlagen- ablauf (%)		
Acenaphthen	68	32	23	4	7	32	/
Acenaphthylen	27	73	53	5	3	14	/
Anthracen	30	70	51	5	3	14	/
Atrazin	1	99	72	0	1	1	/
BDE-47	100	0	0	1	1	34	/
BDE-99	100	0	0	1	0	39	/
BDE-100	100	0	0	1	1	44	/
BDE-153	100	0	0	1	1	20	/
BDE-154	99	1	1	1	1	30	/
Benzisothiazolinon	100	0	0	1	4	64	/
Benzo[a]anthracen	30	70	51	5	0	/	-10
Benzo[a]pyren	15	85	49	5	1	/	-24
BbF	13	87	63	4	0	/	-5

Bilanz im Trennsystem Stoff	Eintragspfade (% des Eintrags)			Austragspfade (% des Austrages über diese Pfade – ohne Abbau)			Klär- schlamm (%)	Abbau / positives Bilanz- fehler (% des Austrags)	Negativer Bilanz- fehler (% des Eintrags)
	Schmutz- wasser (%)	Niederschlags- wasser (%)	Niederschlags- kanal (%)	Mischwasser- überlauf (%)	Kläranlagen- ablauf (%)				
BghiP	8	92	66	6	0	0	28	/	-15
BkF	14	86	62	6	0	0	34	/	-2
Benzotriazol	47	53	38	4	41	41	0	16	/
Bisoprolol	100	0	0	1	50	50	1	48	/
Bisphenol A	51	49	36	6	4	4	14	40	/
Carbamazepin	100	0	0	1	83	83	16	/	-14
Carbendazim	11	89	65	4	29	29	3	/	-12
Chrysen	23	77	44	4	1	1	51	/	-26
Clarithromycin	98	2	1	1	29	29	2	67	/
Coffein	98	2	2	1	0	0	0	97	/
Cybutryn	7	93	68	6	2	2	10	14	/
Cypermethrin	61	39	20	2	20	20	58	/	-41
Daha	3	97	70	6	0	0	23	1	/
DEHP	85	15	11	2	16	16	40	30	/
Dibutylphthalat	66	34	24	3	21	21	36	16	/

Bilanz im Trennsystem Stoff	Eintragspfade (% des Eintrags)			Austragspfade (% des Austrages über diese Pfade – ohne Abbau)				Abbau / positives Bilanzfehler (% des Austrags)	Negativer Bilanzfehler (% des Eintrags)
	Schmutzwasser (%)	Niederschlagswasser (%)	Niederschlagswasserkanal (%)	Mischwasserüberlauf (%)	Kläranlagenablauf (%)	Klärschlamm (%)			
Dibutyltin	79	21	15	1	1	83	/	-7	
DCPP	77	23	17	2	17	50	14	/	
Diclofenac	100	0	0	1	73	3	23	/	
Diethyltoluamid	76	24	17	1	12	0	70	/	
Diuron	9	91	66	3	26	2	3	/	
Estradiol	100	0	1	3	1	8	87	/	
Estron	96	4	3	1	2	13	81	/	
Ethinylestradiol	99	1	0	1	2	3	94	/	
Fluoranthen	30	70	51	5	2	42	/	-9	
Fluoren	67	33	24	4	22	16	34	/	
Ibuprofen	97	3	2	1	0	1	96	/	
Imidacloprid	54	46	32	4	60	4	/	-1	
I123cdP	11	89	64	6	0	30	/	-9	
Mecoprop	3	97	70	3	27	0	/	-12	
1H-5MeBTA	68	32	23	3	52	1	21	/	

Bilanz im Trennsystem Stoff	Eintragspfade (% des Eintrags)			Austragspfade (% des Austrages über diese Pfade – ohne Abbau)			Klärschlamm (%)	Abbau / positives Bilanzfehler (% des Austrags)	Negativer Bilanzfehler (% des Eintrags)
	Schmutzwasser (%)	Niederschlagswasser (%)	Niederschlagswasserkanal (%)	Mischwasserüberlauf (%)	Kläranlagenablauf (%)				
Metolachlor	2	98	71	6	14	9	14	19	-25
Metoprolol	100	0	0	3	62	16	62	19	/
Naphthalin	42	58	42	4	12	13	12	29	/
4-Nonylphenol	76	24	18	3	13	13	13	53	/
PFHxA	51	49	23	2	73	2	73	/	-50
PFOS	57	43	20	3	37	40	37	/	-52
PFOA	54	46	26	4	67	3	67	/	-28
Permethrin	99	1	1	1	8	30	8	60	/
Phenanthren	60	40	29	6	6	23	6	36	/
Pyren	29	71	51	5	2	42	2	/	-8
4-tert-OP	4	96	69	2	6	2	6	21	/
Tributylphosphat	59	41	30	3	10	2	10	55	/
Tributyltin	41	59	31	0	0	69	0	/	-38
Triclosan	100	0	0	1	8	40	8	51	/
Triphenylphosphat	82	18	13	4	7	1	7	75	/

Bilanz im Trennsystem Stoff	Eintragspfade (% des Eintrags)		Austragspfade (% des Austrages über diese Pfade – ohne Abbau)				Abbau / positives Bilanz-fehler (% des Austrags)	Negativer Bilanz-fehler (% des Eintrags)
	Schmutz-wasser (%)	Niederschlags-wasser (%)	Niederschlagswasser-kanal (%)	Mischwasser-überlauf (%)	Kläranlagen-ablauf (%)	Klär-schlamm (%)		
TBEP	93	7	5	1	3	0	91	/
TCPP	82	18	13	4	22	0	61	/
TDCPP	76	24	17	2	52	0	29	/
TIBP	73	27	19	3	8	1	69	/

Tabelle A 9: Literaturangaben zur Entfernung über die zwei Pfade „biologischen Abbau“ und „Adsorption“ (N = 95) verändert nach Margot et al. (2015).

<b>Stoff</b>	<b>Entfernung über biologischen Abbau [%]</b>	<b>Adsorptive Entfernung [%]</b>
Acenaphthene	3	81
Acesulfam	0	0
Aldrin	0	86
Alkohol-Ethoxylate	90	9
Alkohol-Ethoxylate	90	9
Alkylbenzolsulfonate	68	29
Alkylbenzoldimethylammoniumchloride	86	10
Alkylethersulfate	96	3
Alkyltrimethylammoniumchloride	86	10
Anthracene	1	88
Atrazine	22	1
Azithromycin	31	8
Benzo[a]pyrene	0	70
Benzo[b]fluoranthene	0	80
Benzo[ghi]perylene	0	80
Benzo[k]fluoranthene	0	90
Benzotriazole	26	0
Bis(2-ethylhexyl) phthalate	56	38
Bis(pentabromophenyl) ether	0	90
Bisphenol A	76	4
C10-13 Chloroalkanes	20	79
Caffeine	95	0
Carbamazepine	0	16
Carbendazim	29	2

Stoff	Entfernung über biologischen Abbau [%]	Adsorptive Entfernung [%]
Ciprofloxacin	14	55
Clarithromycin	23	10
Cyclamat	95	0
Dialkyldimethylammoniumchloride	24	71
Diatrizoate	29	0
Diazinon	38	2
Dibutyl phthalate	61	8
Diclofenac	16	4
Dieldrin	0	77
Dimethyl phthalate	59	3
Diuron	30	3
Edetic acid	0	0
Endosulphan	0	84
Endrin	0	81
Erythromycin	44	1
Estradiol	80	10
Estron	66	10
Ethinylestradiol	50	10
Ethylparaben	90	5
Fettalkoholsulfate	96	3
Fluoranthene	1	79
Fluorene	9	81
Galaxolid	9	65
Heptachlor	0	91
Hexachlorobenzene	0	90
Hexachlorocyclohexane	0	79
Hydrochlorothiazide	0	30
Ibuprofen	78	2

Stoff	Entfernung über biologischen Abbau [%]	Adsorptive Entfernung [%]
Indeno[1,2,3-cd]pyrene	0	80
lomeprol	34	0
Irbesartan	0	10
Isoproturon	34	8
Laurinsäure	79	20
Lindane	0	79
Mecoprop	20	5
Metformin	57	0
Methylparaben	90	5
Metoprolol	25	0
N,N-diethyl-m-toluamide	62	0
Naphthalin	6	48
Nitrilotriacetic acid	95	0
Oestriol	88	11
Oxazepam	0	13
Palmitinsäure	79	20
Paracetamol	100	0
Perfluorooctane sulfonic acid	0	1
Perfluorooctanoic acid	0	1
Phenanthrene	4	76
Pyrene	1	69
Salicylsäure	99	0
Sekundäre Alkansulfonate	83	16
Sotalol	19	3
Sucralose	0	0
Terbutylazine	17	7
Terbutryn	48	12
Tonalid	9	65

<b>Stoff</b>	<b>Entfernung über biologischen Abbau [%]</b>	<b>Adsorptive Entfernung [%]</b>
Tributyl phosphate	59	1
Triclocarban	9	81
Triclosan	32	59
Triisobutyl phosphate	85	1
Triphenyl phosphate	55	10
Tris(1,3-dichlorisopropyl)phosphate	0	1
Tris(1-chloro-2-propyl)phosphate	0	1
Tris(2-butoxyethyl)phosphate	86	2
Venlafaxine	40	0
2,2',4,4',5-Pentabromodiphenyl ether	0	93
2,2',4,4'-Tetrabromodiphenyl ether	0	91
2-ethylhexyl 4-methoxycinnamate	88	10
2-Hydroxybenzothiazole	59	1
2-methylthiobenzothiazole	0	0
5-Methyl-1H-benzotriazole	30	0

**Institut für Wassergüte und Ressourcenmanagement, TU Wien**

Karlsplatz 13

<https://www.tuwien.at/cee/iwr/wasser>