

Sachverständigengutachten des Umweltbundesamtes

Förderkennzeichen 360 01 057

Scaling unter REACH

Entwicklung einer Handlungsempfehlung zur Bestimmung der sicheren Verwendungsbedingungen von Chemikalien durch Scaling

17. März 2011

von

Prof. Dr. Dirk Bunke (Diplom-Chemiker)

Dipl.-Geoökologin Rita Groß

Steffen Vogel

Öko-Institut e.V., Geschäftsstelle Freiburg, Postfach 1771, 79017 Freiburg

IM AUFTRAG

DES UMWELTBUNDESAMTES

März 2011

Kurzbeschreibung

Scaling bedeutet: maßstabsgerechte Veränderung. Bei REACH bedeutet Scaling: durch einfaches Rechnen prüfen, ob Chemikalien sicher verwendet werden auch wenn einzelne Anwendungsbedingungen von den Vorgaben im Expositionsszenario abweichen.

Scaling bietet nachgeschalteten Anwendern in ausgewählten Fällen die Möglichkeit, ohne großen Aufwand zu zeigen, dass ihre individuellen Einsatzbedingungen durch ein Expositionsszenario abgedeckt sind.

In diesem Bericht stellen wir die rechtlichen Verpflichtungen nachgeschalteter Anwender dar, ihre Verwendungen zu überprüfen. Wir definieren den Begriff des „Scalings“ mit Bezug auf REACH und beschreiben Ziel und Ergebnisse des Scalings. Derzeit verfügbare Instrumente, die das Scaling erleichtern, charakterisieren wir anhand von Leitfragen. Für Scaling-Hilfen leiten wir Weiterentwicklungsbedarf und eine harmonisierte Begrifflichkeit ab.

Unter Nutzung der Ergebnisse zu bestehenden Instrumenten erstellen wir eine Handlungsanleitung. In ihr zeigen drei Beispiele aus unterschiedlichen Branchen, wie das Scaling funktioniert. In fünf Schritten.

Die Handlungsanleitung richtet sich an Personen, die in Europa industriell oder gewerblich mit Chemikalien umgehen – an nachgeschaltete Anwender im Sinne von REACH. Außerdem sprechen wir Stoffhersteller und Formulierer an, die für ihre Kunden Scaling-Hilfen entwickeln möchten. Der Bericht enthält ein Tabellen-Kalkulationsblatt zum umweltbezogenen Scaling (REACH Scale Umwelt). Er enthält außerdem eine Formatvorlage, mit der produktspezifische Scaling-Hilfen erstellt werden können.

In dem Bericht geht es ausschließlich um umwelt-bezogenes Scaling. Auch im Arbeits- und Verbraucherschutz ist Scaling möglich. Hinweise auf Literatur hierzu finden Sie im Kapitel 7 dieses Berichtes.

Abstract

Scaling in the context of REACH means: use of simple mathematics to check, whether chemicals are used in a safe way. Even in case if certain conditions of use deviate from the exposure scenario.

In specific cases, scaling offers downstream users the opportunity to demonstrate coverage by an exposure scenario for their individual conditions of use.

In this report we describe the duty of downstream users to check their conditions of use. We give a definition of scaling related to REACH. We describe objectives and results of scaling. We characterise available scaling tools in a structured way. We describe options for further development and harmonisation of scaling tools.

Under use of the experience with existing tools, we develop a guidance document on scaling. Three examples in this guidance make clear how scaling works. In five steps. The guidance is addressed to persons using substances in industrial or professional applications - downstream users according to REACH. In addition, the guidance supports producers of substances and formulators who want to develop scaling tools for their customers.

The report includes a calculation table for scaling related to the environment (REACH Scale Environment). In addition, it includes a template to generate product-specific scaling tools.

This report focuses on scaling related to environmental exposure assessment. Scaling is possible related to workers and consumer exposure, too. References for this are given in chapter 7.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Abkürzungen

1	Scaling: Definition, Ziele und Ergebnisse, Zielgruppen	1
2	Zusammenstellung verfügbarer Ansätze	4
3	Beschreibung und Prüfung der einzelnen Konzepte	6
3.1	Die ECHA Formel zum Umweltscaling	8
3.2	Der ES-Modifizier	12
3.3	Das Tabellen-Kalkulationsblatt der Textilveredler	16
3.4	Scalinghilfe für Galvanikprozesse (ZVO)	19
3.5	Scaling-Formel für Abwasserbelastung durch Lösemittel	22
3.6	Das Tabellen-Kalkulationsblatt REACH Scale Umwelt	26
3.7	Die REACH Arbeitshilfe Abwasser des Verbandes TEGEWA	29
4	Erforderliche Parameter und bestehende Eigenentwicklungen	33
4.1	Obergrenzen für mögliche Eingabewerte	34
4.2	Verwendung einheitlicher Parameter	36
4.3	Mindestanforderungen an Scaling-Instrumente	37
4.3.1	Inhaltliche Richtigkeit der zugrundeliegenden Formeln und Annahmen	37
4.3.2	Verständlichkeit des Instrumentes bezogen auf die Zielgruppe	37
4.3.3	Eindeutige Kennzeichnung von Obergrenzen für das Scaling ...	37
4.3.4	Unterstützung der Anwender durch Beispiele und Hintergrund-Informationen	38
4.4	Weiterentwicklungsbedarf und -möglichkeiten	38
5	Die Handlungsanleitung zum Scaling	39
6	Durchführung des Scalings für 3 Branchen mit Ergebnisdokumentation	39
6.1	Scaling-Beispiel Galvanik	41
6.2	Scaling Beispiel Textilveredlung	43
6.3	Scaling Beispiel Lederherstellung	48
7	Literatur zum Thema Scaling	51

8	Anhang	52
8.1	Ergänzende Informationen zum Scaling	52
8.1.1	Hintergrund: REACH und Scaling	52
8.2	Expositionsabschätzungsinstrumente und das Scaling- Instrument ScIDeEx	55
8.2.1	ECETOC TRA version 2	55
8.2.2	Der ES-Modifier	57
8.2.3	Emissionsabschätzungsmodule aus dem Matrix-Projekt des Umweltbundesamtes	60
8.2.4	ScIDeEx	61
8.3	Die Handlungsanleitung zum Scaling	66

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1:	Die Struktur des ES-Modifiers	13
Abb. 2:	Struktur des Tabellen-Kalkulationsblattes der Textilveredler	16
Abb. 3:	Der Aufbau des Tabellen-Kalkulationsblattes REACH Scale Umwelt	26
Abb. 4:	Aufbau der REACH Arbeitshilfe Abwasser des Verbandes TEGEWA	30
Abb. 5:	Nachgeschaltete Anwender und Überprüfung ihrer Verwendungsbedingungen	5
Abb. 6:	Eingangsseite des Emissionsabschätzungsinstrumentes aus dem Matrix-Projekt	
Abb. 7:	Das Scaling-Instrument ScIDeEx (Scaling of inhalative and dermal exposure).	

Tabellenverzeichnis

Tab. 1:Öffentlich verfügbare Scaling-Instrumente 5

Tab. 2:Scaling-Instrumente mit Bezug zur Umweltexpositionsabschätzung 6

Tab. 3:Beispielausführung eines umweltbezogenen Scalings unter Nutzung der Scaling-Formel (ECHA, 2008). 9

Tab. 4:..... Profil: Eigenschaften der ECHA Formel zum Umweltscaling 11

Tab. 5:Profil: Eigenschaften des ES-Modifiers 14

Tab. 6:Profil: Eigenschaften des Tabellen-Kalkulationsblattes der Textilveredler 1

Tab. 7:.....Maximale Einsatzmengen in Abhängigkeit von der Vorfluter-Größe 20

Tab. 8:Maximale Einsatzmengen und die PNEC-Wert der Stoffe 20

Tab. 9:....Einsatzmengen und Eleminationsgrad der Stoffe in der Kläranlage 20

Tab. 10:Profil: Eigenschaften der Scaling-Tabellen für Organika in der Galvanik 2

Tab. 11:Die Scaling-Formel zur Belastung im Abwasser durch Acetonitril. Quelle: REACH

Tab. 12:Auszug aus dem Expositionsszenario mit Zusatzinformationen zur Scaling-Formel

Tab. 13:Profil: Eigenschaften der Scaling-Formel für Abwasserbelastungen durch Lös

Tab. 14:Profil: Eigenschaften des Tabellen-Kalkulationsblattes REACH Scale Umwelt

Tab. 15:Profil: Eigenschaften der REACH Arbeitshilfe Abwasser des Verbandes TEGEWA

Tab. 16:Veränderbare Größen, die in den Scaling-Instrumenten genannt werden34

Tab. 17:Eingabe-Obergrenzen für veränderbare Größen in Scaling-Instrumenten35

Tab. 18:..Einheitliche Bezeichnungen für Eingabe-Größen in Scaling-Hilfen 36

Tab. 19:Die Abhängigkeit der Expositionshöhe von der Dauer der Tätigkeit (DOA, „Da

Abkürzungen

CLP	Regulation on Classification, Labelling and Packaging
CSA	Stoffsicherheitsbeurteilung („Chemical Safety Assessment“)
CSR	Stoffsicherheitsbericht („Chemical Safety Report“)
DNEL	Derived No-Effect Level
ECETOC TRA	Instrument zur Expositionsabschätzung (ECETOC Targeted Risk Assessment)
ECHA	Europäische Chemikalienagentur (European Chemicals Agency)
ES	Expositionsszenario
eSDB	erweitertes Sicherheitsdatenblatt
OC	Operational conditions = Anwendungsbedingungen
PEC	Vorhergesagte Konzentration in der Umwelt („Predicted Environmental Concentration“)
PNEC	Predicted No-Effect Concentration
RCR	Risikoquotient aus Exposition und wirkungsbezogenem Grenzwert („Risk Characterisation Ratio“)
RMM	Risikomanagement-Maßnahmen
REACH	Europäische Verordnung zur Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung von Chemikalien
SDB	Sicherheitsdatenblatt
SDS	Sicherheitsdatenblatt („Safety Data Sheet“)
ScIDeEX	Scaling-Instrument für inhalative und dermale Expositionen
ZVO	Zentralverband der Oberflächentechnik

1 Scaling: Definition, Ziele und Ergebnisse, Zielgruppen

Definition

Das aus dem Englischen stammende Wort „scale“ bedeutet Maßstab. Als „scale up“ wird ein maßstabsgerechtes Erhöhen, als „scale down“ ein maßstabsgerechtes Verkleinern bezeichnet.

Im ECHA Leitfaden für nachgeschaltete Anwender¹ wird „Scaling“ mit Skalierung übersetzt (Kap. 5.2.5, S. 58). Skalierung ist ein ursprünglich aus der Mathematik stammender Begriff, der „Größenänderung“ bedeutet. Der Begriff wird inzwischen in verschiedenen Bereichen der Technik verwendet, z.B. in der Verfahrenstechnik, wenn Anlagen aus dem Labormaßstab auf den Technikumsmaßstab übertragen werden sollen.

Unter REACH wird unter Skalierung verstanden, eine vorgegebene Expositionsabschätzung bezogen auf bestimmte Größen zu verändern. Die vorgegebene Expositionsabschätzung ist im Expositionsszenario des Lieferanten enthalten. Die Veränderung wird vom nachgeschalteten Anwender vorgenommen. Voraussetzung hierfür ist, dass dem nachgeschalteten Anwender Hinweise zum Scaling gegeben werden. Diese Hinweise („Scaling-Hilfen“, „Scaling-Instrumente“) erklären, welche Größen der Expositionsabschätzung veränderbar sind (z.B. die Anwendungsmenge) und wie die Veränderung vorgenommen werden kann.

Scaling wird in den ECHA Leitlinien an einer Stelle definiert: im Anhang G-1 („Methodology on Scaling“) von Teil G der Leitlinien zu den Informationsanforderungen und der Stoffsicherheitsbeurteilung. Teil G behandelt die Erweiterungen des Sicherheitsdatenblattes unter REACH („Extending the SDS“²).

„Scaling bedeutet in diesem Zusammenhang die Nutzung von einfachen Gleichungen im Expositionsszenario, mit denen der nachgeschaltete Anwender zeigen kann, dass er innerhalb der Bedingungen des Expositionsszenarios arbeitet, das ihm der Registrant zur Verfügung gestellt hat“.³

¹ http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/du_de.pdf?vers=29_01_08

² http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/information_requirements_part_g_en.pdf?vers=20_08_08).

³ „Scaling in this context means the use of simple equations in the exposure scenario (ES) by which the downstream user (DU) can demonstrate that he operates

Ziel des Scalings

Ziel des Scalings ist die einfache Überprüfung, ob eine eigene Verwendung von Stoffen bzw. Gemischen sicher ist, auch wenn einzelne Verwendungsbedingungen von den Angaben im Expositionsszenario abweichen.

Scaling soll zum einen sicherstellen, dass es bei den eigenen Verwendungen nicht zu problematischen Belastungen von Mensch und Umwelt kommt (und dass die vorgegebenen Wirkschwellen nicht überschritten werden). Zum anderen soll Scaling dem nachgeschalteten Anwender ermöglichen, auf eigene aufwendige Stoffsicherheitsbeurteilungen zu verzichten.

Scaling wird nicht gesetzlich vorgeschrieben (d.h. es muss nicht durchgeführt werden), ist aber für nachgeschaltete Anwender in vielen Fällen eine interessante Möglichkeit, Übereinstimmung mit einem vorgegebenen Expositionsszenario zu erreichen. REACH Artikel 37.4 verpflichtet einen nachgeschalteten Anwender, eigene Stoffsicherheitsbeurteilungen für jede Verwendung eines Stoffes als solchem oder in einem Gemisch durchzuführen, die abweicht von den Bedingungen, welche sein Lieferant im Expositionsszenario mitteilt (und für Verwendungen, von denen sein Lieferant abrät).

Ergebnis des Scalings

Ergebnis des Scalings ist die Aussage, ob eine Verwendung fortgesetzt werden kann oder nicht, wenn einzelne Anwendungsbedingungen vom Expositionsszenario abweichen.

Je nach Struktur der Scaling-Hilfe kann diese Aussage in unterschiedlicher Gestalt erfolgen. Zwei Beispiele:

- Es kann das Verhältnis zwischen zu erwarteter Exposition (PEC) und zugehörigem Wirkschwellenwert (PNEC) angegeben werden (Risikoquotient, PEC/PNEC). Wenn der Wert des Risikoquotienten kleiner als 1 ist, wird die Verwendung als sicher eingestuft und kann fortgeführt werden.

within the conditions of the ES provided by the registrant." (ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment, Part G, Extending the SDS, p. 18ff

- Es kann eine maximale Einsatzmenge berechnet werden. Die Verwendung des Anwenders ist sicher, wenn seine Einsatzmenge den berechneten Wert nicht übersteigt.

Zielgruppen des Scalings

Die Zielgruppe für das Scaling sind nachgeschaltete Anwender, die selber mit Stoffen und Gemischen umgehen und bei denen es zu Expositionen von Mensch und Umwelt kommen kann. Dies ist bei Formulierern der Fall, die aus Stoffen Gemische herstellen, und bei den nachgeschalteten Anwendern, die letztlich die Stoffe und Gemische in unterschiedlichen Prozessen einsetzen⁴.

Je nach Rolle und Erfahrungshintergrund können drei Gruppen von Nutzern unterschieden werden:

- Nachgeschaltete Anwender mit einem umfangreichen Erfahrungshintergrund bei der umweltbezogenen Expositionsabschätzung und Kenntnis von Expositionsabschätzungsinstrumenten wie EUSES oder ECETOC TRA. Diese Nutzergruppe umfasst nicht nur nachgeschaltete Anwender, sondern auch Stoffhersteller bzw. Importeure. Dies trifft für viele Hersteller von Gemischen zu, die nicht alle, aber einen Teil ihrer Rohstoffe selber herstellen.
- Nachgeschaltete Anwender, die selber keine eigenen Registrierungen durchführen, aber bereits Erfahrungen mit der umweltbezogenen Expositionsabschätzung haben und auch selber Sicherheitsdatenblätter mit Expositionsszenarien erstellen. Dies trifft für viele Formulierer zu.
- Nachgeschaltete Anwender, die Chemikalien letztlich in unterschiedlichen Prozessen einsetzen – in industriellen oder gewerblichen Verwendungen. Sie haben in den meisten Fällen wenig

⁴ REACH versteht unter nachgeschaltetem Anwender eine natürliche oder juristische Person mit Sitz in der Gemeinschaft, die im Rahmen ihrer industriellen oder gewerblichen Tätigkeit einen Stoff als solchen oder in einem Gemisch verwendet, mit Ausnahme des Herstellers oder Importeurs. Händler und Verbraucher sind keine nachgeschalteten Anwender (REACH Art. 3.14). Händler, die Stoffe umfüllen oder umpacken, sind nachgeschaltete Anwender. Es ist unwahrscheinlich, dass es bei diesen Vorgängen zu Expositionen kommt, für die mit Scaling-Regeln eigene Abschätzungen vorgenommen werden.

bis keine Erfahrung mit der umweltbezogener Expositionsabschätzung.

Je nach Nutzergruppe unterscheiden sich die Erwartungen an die Scaling-Instrumente und die Möglichkeiten ihrer Nutzung.

Praxistipp: Die in Expositionsszenarien und Sicherheitsdatenblättern angegebenen Maximaleinsatzmengen sollten nach Möglichkeit von Unternehmen nicht vollständig ausgenutzt werden. Vielleicht wird von einem anderen Unternehmen derselbe Stoff in denselben Vorfluter eingeleitet. Mehr Abstand von den Maximaleinsatzmengen bedeutet auch: mehr Sicherheit, dass es zu keinen problematischen Belastungen im Vorfluter kommt.

2 Zusammenstellung verfügbarer Ansätze

REACH-bezogene Scaling-Hilfsmittel sind in den letzten Jahren sowohl auf nationaler als auch auf europäischer Ebene entwickelt worden.

- Mit Unterstützung der dänischen Umweltschutzbehörde (Danish EPA) ist auf Initiative des dänischen Industrieverbandes hin der sog. ES-Modifier entwickelt worden, der seit Mai 2010 frei verfügbar ist.
- Von Unternehmen sind Scaling-Instrumente erarbeitet worden, die direkt Bezug nehmen auf Expositionsabschätzungsinstrumente wie ECETOC TRA und die in ihnen enthaltenen expositionsmodifizierenden Faktoren.
- In Deutschland sind von einzelnen Industrieverbänden im Rahmen der Erstellung von Expositionsszenarien auch Scaling-Hilfen entwickelt worden, z.B. von der Textilindustrie und der Lederindustrie.
- Vom Öko-Institut sind in Forschungsprojekten für das Umweltbundesamt Excel-basierte Scaling-Hilfen entwickelt worden (Umsetzungshilfen für ein erfolgreiches Risikomanagement im Rahmen von REACH, 2007 / Konkretisierung von Expositionsszenarien und/oder Expositions-kategorien für Textilhilfsmittel, 2004). Sie sind im Rahmen des Projektes „REACH Praxisführer zur Expositions-bewertung und zur Kommunikation in den Lieferketten“ zum Instrument „REACH Scale“ weiterentwickelt worden.

In der nachfolgenden Tabelle werden die derzeit verfügbaren Instrumente, der Verfasser und das Veröffentlichungsdatum genannt. Instrumente, die sich nicht auf die Umweltexposition beziehen, sind *kursiv*

gesetzt. Eine genauere Charakterisierung der einzelnen Instrumente geschieht im Kapitel 3. Hierbei erfolgt eine Schwerpunktsetzung auf umweltbezogene Instrumente.

Tab. 1: Öffentlich verfügbare Scaling-Instrumente

	Scaling-Instrumente	Veröffentlichung	Quelle
1	<i>ECHA Formel zum Scaling der Exposition des Verbrauchers</i>	2008	<i>ECHA Leitfaden Informationsanforderungen, Teil G</i>
2	ECHA Formel zum Scaling der Umweltexposition, Textilbereich	2008	ECHA Leitfaden Informationsanforderungen, Teil G
3	ECETOC TRA v2, exposure modifying factors	2009	ECETOC
4	ES-Modifier	2010	DHI
5	Textil Tabelle zum Scaling der Abwasserbelastung, Textil, v1 + v2	2004, 2007	Umweltbundesamt / Textilverband
6	Matrix Access-Instrument zur Expositionsabschätzung	2006	OECD Matrix Projekt, Umweltbundesamt
7	Scalinghilfe für Galvanikprozesse, ZVO	2007	Umweltbundesamt / ZVO
8	Scalingformel für Abwasserbelastung durch Lösemittel	April 2009	Merck AG, Beispiel in VCI 2010, REACH Praxisführer
9	<i>Formel zum Scaling der Exposition am Arbeitsplatz, Beispiel Lösemittel</i>	<i>Februar 2010</i>	<i>Merck AG, Beispiel für Schulungszwecke</i>
10	<i>Excel-Tabelle ScIdEEEx, inhalative und dermale Exposition</i>	<i>April 2010</i>	<i>VCI 2010, REACH Praxisführer</i>
11	REACH Scale, Umwelt	April 2010	Öko-Institut e.V., VCI 2010, REACH Praxisführer
12	Arbeitshilfe Abwasser,	August 2010	Lederverband / TEGEWA

Darüber hinaus gibt es noch firmeneigene Scaling-Instrumente, die bisher nicht veröffentlicht worden sind.

Im Rahmen dieses Projektes ist auch recherchiert worden, ob im Geltungsbereich der Biozid-, Pflanzenschutzmittel- und Arzneimittel-Gesetzgebungen vergleichbare Ansätze eines Scalings vorliegen. Es sind für die Veränderung einer vorgegebenen Expositionsbeurteilung durch den Anwender von Bioziden, Pflanzenschutzmitteln oder Arzneimitteln keine Beispiele gefunden worden.

Dies kann darin begründet sein, dass bei Bioziden, bei Pflanzenschutzmitteln und Arzneimitteln in der Regel die Anwendungsbedingungen sehr genau vorgegeben sind und vom Anwender auch eingehalten werden. Im Gegensatz hierzu ist bei vielen Produkten, die in der chemischen Industrie und in ihren Anwenderbranchen eingesetzt werden, die Bandbreite der Verwendungsbedingungen sehr hoch. Die gesamte Bandbreite wird in vielen Fällen durch die Expositionsbeurteilung

gen der Lieferanten nicht abgedeckt werden können. Daher ist es hier sinnvoll, zum einen Standardverwendungen in Expositionsszenarien zu beschreiben, zum anderen Hilfsmittel zur Anpassung dieser Szenarien zur Verfügung zu stellen – in Form von Scaling-Hilfen.

3 Beschreibung und Prüfung der einzelnen Konzepte

Die in Kapitel 2 kurz dargestellten Scaling-Hilfen unterscheiden sich erheblich hinsichtlich Zielsetzung, Nutzungsgruppe und Komplexität. Im Folgenden werden die einzelnen Scaling-Hilfen anhand von Leitfragen inhaltlich analysiert und bewertet.

Hierbei beschränken wir uns auf die folgenden Instrumente, die einen direkten Bezug zur Umweltextpositionsabschätzung aufweisen und die für nachgeschaltete Anwender entwickelt worden sind:

Tab. 2: Scaling-Instrumente mit Bezug zur Umweltextpositionsabschätzung

	Umweltbezogene Scaling-Ansätze bzw. -Instrumente für nachgeschaltete Anwender	Veröffentlichung	Quelle
1	ECHA Formel zum Scaling der Umweltextposition, Textilbereich	2008	ECHA Leitfaden Informationsanforderungen, Teil G
2	ES-Modifier	2010	DHI
3	Textil Tabelle zum Scaling der Abwasserbelastung, Textil, v1 + v2	2004, 2007	Umweltbundesamt / Textilverband
4	Scalinghilfe für Galvanikprozesse	2007	Umweltbundesamt / ZVO
5	Scalingformel für Abwasserbelastung durch Lösemittel	2009	Merck AG, Beispiel im VCI Praxisführer
6	REACH Scale, Umwelt	2010	Öko-Institut e.V.
7	Arbeitshilfe Abwasser	2010	Lederverband / TEGEWA

Nicht näher betrachtet werden Instrumente,

- die keinen Bezug zur Umweltextpositionsabschätzung aufweisen (in der Tabelle in Kap. 2 die Instrumente SciDeEx, die ECHA Tabellen).
- die vorrangig als Expositionsabschätzungsinstrumente für den Registranten entwickelt wurden und für nachgeschaltete Anwender ohne Kenntnisse der Expositionsabschätzung zu komplex sind ((ECETOC TRA version 2, Expositionsabschätzungshilfe aus dem OECD Matrixprojekt).

Für interessierte Leser geben wir eine Beschreibung der im Folgenden nicht näher betrachteten Expositionsabschätzungsinstrumente (ECETOC

TRA v2 und Matrix-Instrument) und eine vertiefte Darstellung des ES-Modifiers im Anhang dieses Berichtes.

Zur Charakterisierung der im Folgenden beschriebenen Instrumente werden folgende Leitfragen eingesetzt:

- Von welchem Akteur ist das Instrument entwickelt worden mit welcher Zielsetzung?
- Für welche Nutzergruppe ist das Instrument entwickelt worden?
- Welche Anwendungsbereiche werden angesprochen?
- Werden besondere Anwendungssituationen angesprochen, z.B. Direkteinleiter / Indirekteinleiter?
- Welche Umweltkompartimente werden abgedeckt?
- Welche Eingabeparameter sind erforderlich?
- In welcher Form geschieht die Ergebnisdarstellung?
- Wie hoch ist die Komplexität des Instrumentes?
- Existiert die Möglichkeit der direkten Übertragung auf andere Branchen?
- Existiert die Möglichkeit der Übertragbarkeit nach Anpassung?

Wichtige Bewertungskriterien sind:

- Inhaltliche Richtigkeit der zugrundeliegenden Formeln,
- Berücksichtigung von Obergrenzen für die expositionsbestimmenden Größen,
- Berücksichtigung von Auswirkungen auf andere Umweltkompartimente,
- Eignung des Instrumentes für die vorgesehene Nutzergruppe,
- besondere Stärken und Schwächen des Instrumentes, auch verglichen mit den anderen Instrumenten.

Auf der Grundlage dieser Charakterisierung werden für die einzelnen Instrumente **Weiterentwicklungsbedarf** und **-möglichkeiten** dargestellt.

Allen betrachteten Instrumenten zum umweltbezogenen Scaling greifen zurück auf Expositionsbeurteilungen und Risikobeschreibungen entsprechend den ECHA Leitlinien (Leitlinien zu den Informationsanforderungen und zur Stoffsicherheitsbeurteilung, Teil R.8 (PNEC-Ableitung), R. 16 (umweltbezogene Expositionsabschätzung) und Part G (Risikocharakterisierung)).

Hierbei wird zur Errechnung der zu erwartenden Umweltkonzentration die folgende Formel verwendet:

$$PEC_{\text{lokal}} = \frac{Q_{\text{Produkt}} \cdot C_{\text{Stoff}} \cdot (1 - F_{\text{fix}}) \cdot (1 - Red_{\text{min}}) \cdot (1 - F_{\text{Kl\u00e4ranlage}})}{Q_{\text{Wasser}} \cdot 10^{-6}}$$

Verwendete Abk\u00fcrzungen:

PEC _{lokal}	Die vorhergesagte lokale Umweltkonzentration. Sie wird angegeben in Mikrogramm/Liter [$\mu\text{g/l}$]
Q _{Produkt}	Die durchschnittliche Einsatzmenge des Stoffes / der Formulierung pro Tag. Sie wird angegeben in Kilogramm/Tag. [kg/d]
C _{Stoff}	Die Konzentration der Chemikalie in der Formulierung. (z.B. Konzentration 40%, Eingabewert bei der Berechnung: 0,4). Bei Stoffen wird i.d.R. eine Konzentration von 100% angenommen.
F _{fix}	Der sogenannte Auszehrgrad. Dies ist der Anteil des Einsatzstoffes, der am Substrat fixiert wird oder der im Prozess umgesetzt wird (und daher nicht ins Abwasser eingetragen wird). (Z.B. Auszehrung von 80%, Eingabewert bei der Berechnung: 0,8).
Red _{min}	Die Wirksamkeit zus\u00e4tzlicher Emissions-Minderungsma\u00dfnahmen. (Z.B. Minderung um 95%, Eingabewert bei der Berechnung: 0,95).
F _{Kl\u00e4ranlage}	Der Anteil des Stoffes, der in der Kl\u00e4ranlage durch unterschiedliche Vorg\u00e4nge aus dem Wasser „entfernt“ wird und daher nicht in den Vorfluter gelangt. (Z.B. Entfernung von 55%, Eingabewert bei der Berechnung: 0,55).
Q _{Wasser}	Die Wassermenge, in die letztlich die Restmengen des Einsatzstoffes freigesetzt werden. Sie setzt sich zusammen aus dem Volumenstrom der Kl\u00e4ranlage, welcher die aus dem Prozess in das Abwasser emittierte Menge des Stoffes aufnimmt und dem Volumenstrom des Vorfluters (mittlerer Niedrigwasserabfluss). Diese Werte werden angegeben in Kubikmeter/Tag (Einheit: [m^3/d]). Bei den Expositionsabsch\u00e4tzungen wird als Standardwert davon ausgegangen, dass die die Kl\u00e4ranlage passierende Abwassermenge bei 2.000 Kubikmeter / Tag liegt und im Vorfluter eine Verd\u00fcnnung um den Faktor 10 erfolgt (auf 20.000 Kubikmeter/Tag).
10 ⁻⁶	Dieser Wert ist lediglich ein Umrechnungsfaktor. Die vorhergesagte lokale Umweltkonzentration wird in der Einheit „Mikrogramm/Liter“ angegeben. Die vorherigen Eingaben erfolgten so, dass ohne den Umrechnungsfaktor der errechnete Wert die Einheit „Kilogramm/Kubikmeter“ h\u00e4tte.

In einigen Scaling-Instrumenten werden eine vollst\u00e4ndige Expositionsbeurteilung und Risikocharakterisierung durchgef\u00fchrt (z.B. im ES Modifier, siehe Kapitel 3.1). In anderen Scaling-Instrumenten wird keine eigene Expositionsbeurteilung vorgenommen, sondern einzelne Gr\u00f6\u00dfen aus einer bereits durchgef\u00fchrten Expositionsbewertung herausgenommen und im Scaling-Instrument eingesetzt (z.B. in der ECHA Formel zum umweltbezogenen Scaling, siehe Kapitel 3.1).

3.1 Die ECHA Formel zum Umweltscaling

Im ECHA Leitfaden zu den Informationsanforderungen und zur Stoffsicherheitsbeurteilung werden Im Teil G zum erweiterten Sicherheitsdatenblatt Beispiele f\u00fcr Scaling gegeben (ECHA Leitlinie zu den Infor-

mationsanforderungen und zur Stoffsicherheitsbeurteilung, Part G (Extending the Safety Data Sheet), ECHA 2008). Die nachfolgend gezeigte Formel stammt aus dem Beispiel, das sich mit dem umweltbezogenen Scaling befasst:

$$RCR_{Aktual} = RCR_{ES} \cdot \frac{M_{Actual}}{M_{ES}} \cdot \frac{f_{water,Actual}}{f_{water,ES}} \cdot \frac{(1 - f_{abatement,Actual})}{(1 - f_{abatement,ES})} \cdot \frac{T_{emission,ES}}{T_{emission,Actual}}$$

Verwendete Abkürzungen:

RCR	Risikoquotient (Risk Characterisation Ratio). Verhältnis zwischen der vorhergesagten Expositionshöhe und der Exposition, bei der keine schädlichen Auswirkungen zu erwarten sind. Die Verwendung gilt als sicher, wenn der RCR kleiner als 1 ist.
M	Die durchschnittliche Einsatzmenge der Formulierung pro Jahr ⁵ .
C	Konzentration des Stoffes in der Formulierung.
f	Freisetzungsfaktor (der Anteil des Stoffes, der nicht im Prozess verbleibt, sondern in das Prozessabwasser gelangt).
f _{abatement}	Anteil des Stoffes, der durch zusätzliche Emissionsminderungsmaßnahmen aus dem Prozess-Abwasser entfernt wird.
T _{emission}	Anzahl an Tagen pro Jahr, an denen eine Verwendung des Stoffes erfolgt
Zusatz „Actual“	Die Größen beziehen sich auf die tatsächliche Situation beim nachgeschalteten Anwender.
Zusatz „ES“	Die Werte beziehen sich auf die Angaben im Expositionsszenario (ES).

In der Scaling-Formel wird der Risikoquotient unter Standardbedingungen nicht berechnet, sondern aus dem Expositionsszenario übernommen. In der folgenden Tabelle aus dem ECHA-Leitfaden wird an einem Beispiel die Benutzung der Formel gezeigt.

(Hinweis: In der Beispieltabelle wird bei der Berechnung des Risikoquotienten („Safety Ratio“, 4. Spalte) in der zweiten Zeile für die Einsatzmenge laut Expositionsszenario (M_{ES}) ein Wert von 1.000 kg verwendet. In der Zelle links davon wird fehlerhafter Weise für diese Größe ein Wert von 10.000 kg angegeben).

Tab. 3: Beispielausführung eines umweltbezogenen Scalings unter Nutzung der Scaling-Formel. Quelle: ECHA Leitlinie zu den Informationsanforderungen und zur Stoffsicherheitsbeurteilung, Part G (Extending the Safety Data Sheet), ECHA 2008). Auszug aus der Tabelle.

Parameter	Actual	ES	Safety Ratio	Comment
-----------	--------	----	--------------	---------

⁵ Hinweis: Im ECHA Leitfaden, Teil G wird an dieser Stelle „Einsatzmenge pro Tag“ als Erläuterung angegeben. Es muss allerdings „Einsatzmenge pro Jahr“ heißen – ansonsten müsste der letzte Teil der Formel (Verwendungstage / Jahr) entfallen.

M (kg)	750	10000	$M_{\text{Actual}} / M_{\text{ES}}$ $= 750 / 1000 = 0.75$	
C (-)	0.1	0.1	$C_{\text{Actual}} / C_{\text{ES}}$ $= 0.1 / 0.1 = 1$	In the standard evaluation the pure substance (100%) is evaluated. The specific product contains 20% of the risk determining substance.
$f_{\text{water}} (-)$	0.35	0.3	$f_{\text{water,Actual}} / f_{\text{water,ES}}$ $= 0.35 / 0.3 = 1.16$	
RCR	RCR_{Actual}	0.3	$RCR_{\text{Actual}} =$ $RCR_{\text{ES}} \cdot 0.3 \cdot 0.75 \cdot 1.16 \cdot 0.4 \cdot$ $1.33 = 0.14$	The calculated actual overall RCR_{Actual} is below 1. Hence, the specific conditions of use are considered safe.

Zusätzliche Hinweise zur Tabelle:

1. In der Formel wird die Einsatzmenge in Kilogramm/Tag angegeben, gerechnet wird allerdings mit Einsatzmenge/Jahr (und der Zahl der Einsatzstage/Jahr). Das sollte bei Benutzung der Formel richtiggestellt werden.
2. In der Zeile 3 der Tabelle wird angegeben, dass die Konzentration des Stoffes sowohl im Expositionsszenario als auch beim Anwender jeweils 10% beträgt ($C = 0.1$). Dies stimmt allerdings nicht mit den Angaben im Kommentarfeld überein. Bei der Berechnung des aktuellen Risikoquotienten in Zeile 7 ist wieder mit dem richtigen Verhältnis gerechnet worden.

Mit Hilfe der Scaling-Formel können folgende Größen skaliert werden: eingesetzte Menge, die Konzentration des Stoffes im Produkt, der Anteil der Einsatzmenge, der ins Prozessabwasser freigesetzt wird, die Wirksamkeit der betrieblichen Emissionsminderungsmaßnahme und die Dauer der Freisetzung (in Tagen/Jahr). Der Emissionsfaktor ins Abwasser muss auch Emissionen aus Reinigungs- und Wartungsprozessen mit berücksichtigen.

Berechnete Größe:

Berechnet wird der Risikoquotient unter den vom Anwender eingegebenen betrieblichen Bedingungen (RCR_{Actual}).

Ergebnis der Berechnung:

Falls der Risikoquotient kleiner als 1 ist, gilt die Verwendung als sicher (vom Expositionsszenario abgedeckt). Falls der Risikoquotient

größer als 1 ist, wird die Verwendung als nicht sicher bewertet (und nicht vom Expositionsszenario abgedeckt).

Zielgruppe der Scaling-Hilfe:

Im Beispiel ist der Anwender ein Textilveredler, also der letztlichen Anwender des Produktes. Die Scaling-Formel ist allerdings auch für Formulierer interessant, da es möglich ist, die Konzentration des Stoffes im Gemisch zu verändern.

Inhaltliche Grundlage:

Zur Bestimmung der Risikoquotienten im Expositionsszenario wird in der Regel eine Modellierung der Abwasserbelastung entsprechend den ECHA Leitlinien zur umweltbezogenen Expositionsabschätzung (Teil R.16) durchgeführt.

Besonderheiten:

Als Scaling-Parameter wird die Einsatzdauer in Arbeitstagen/Jahr angegeben. Eine Alternative wäre die Einsatzmenge/Tag. Eine Veränderung des Volumenstroms des Vorfluters ist nicht möglich, obwohl diese Größe bei den Kunden eine erhebliche Bandbreite aufweisen wird. Eine Veränderung der Abbauleistung in der kommunalen oder betrieblichen Kläranlage ist nicht möglich (was in den meisten Fällen auch sinnvoll ist).

Für die fünf Einflussgrößen werden Quotienten gebildet und dann multipliziert. Es gibt keine Rechnerunterstützung bei der Durchführung der Einzelschritte und der Verknüpfung. Dadurch ist die Gefahr des Auftretens von Rechenfehlern erfahrungsgemäß hoch.

Tab. 4: Profil: Eigenschaften der ECHA Formel zum Umweltscaling

Die ECHA Formel zum Umweltscaling	
1	Von welchem Akteur ist das Instrument entwickelt worden mit welcher Zielsetzung?
	Die Formel wurde im Rahmen des REACH Implementierungsprojektes RIP 3.2 von Behörden und Unternehmen entwickelt. Zielsetzung ist die Verdeutlichung des Scalings an einem Beispiel, das von Registranten übernommen werden kann.
2	Für welche Nutzergruppe ist das Instrument entwickelt worden?
	Für Registrierer, Formulierer und End-Anwender.
3	Welche Anwendungsbereiche werden angesprochen?
	Textilveredlung
4	Werden besondere Anwendungssituationen angesprochen?
	Umweltoffene Anwendung
5	Welche Umweltkompartimente werden abgedeckt?
	Oberflächenwasser (Süßwasser)

Die ECHA Formel zum Umweltscaling	
6	Welche Eingabeparameter sind erforderlich?
	Konzentration des Stoffes im Produkt, Freisetzungsgrad, Wirksamkeit der betrieblichen Emissionsminderungsmaßnahme, Dauer der Freisetzung (in Tagen/Jahr), Einsatzmenge (bei diesen Parametern jeweils die Standardannahme des Registranten und die unternehmensspezifischen Werte), Risikoquotient aus der Stoffsicherheitsbeurteilung
7	In welcher Form geschieht die Ergebnisdarstellung?
	Es wird der Risikoquotient für die Situation des Anwenders berechnet.
8	Komplexität des Instrumentes
	Mittlerer Komplexitätsgrad (Bildung mehrerer Quotienten erforderlich und anschließende Verknüpfung). Hohe Fehler-Wahrscheinlichkeit.
9	Möglichkeit der direkten Übertragung auf andere Branchen
	Die Formel kann direkt übertragen werden auf strukturell ähnliche Anwendungen.
10	Möglichkeit der Übertragbarkeit nach Anpassung
	Die Formel ist direkt übertragbar.
11	Inhaltliche Richtigkeit der zugrundeliegenden Formeln
	Die linearen Abhängigkeiten werden richtig wiedergegeben. Der Risikoquotient unter Standardbedingungen wird nicht im Instrument selbst berechnet. Er wird aus einer vorliegenden Berechnung übernommen.
12	Berücksichtigung von Obergrenzen für die expositionsbestimmenden Größen
	Es werden keine Obergrenzen berücksichtigt.
13	Berücksichtigung von Auswirkungen auf andere Umweltkompartimente
	Keine Berücksichtigung.
14	Eignung des Instrumentes für die vorgesehene Nutzergruppe
	Das Instrument ist geeignet, allerdings ist die Wahrscheinlichkeit groß, dass Fehler bei den Berechnungen gemacht werden.
15	Besondere Stärken und Schwächen des Instrumentes, auch im Vergleich
	Vorteil: Direkte Nachvollziehbarkeit der Berechnung. Nachteil: keine Rechnerunterstützung, daher Fehlerwahrscheinlichkeit hoch.
16	Weiterentwicklungsbedarf / -möglichkeiten
	Einbezug des Volumenstroms des Vorfluters am Standort als variable Größe (mittlerer Niedrigwasserabfluss). Umsetzung in Tabellen-Kalkulationsblatt (siehe Instrumente 3,6,7).

3.2 Der ES-Modifier

Der ES-Modifier ist in erster Linie ein Expositionsabschätzungsinstrument. Er geht daher von der Zielsetzung her über das Scaling, die Veränderung einzelner Werte eines Expositionsszenarios, hinaus. Der ES-Modifier ermöglicht die direkte Berechnung von Risikoquotienten (RCR, risk characterisation ratio) für industrielle, gewerbliche und private Verwendungen von Stoffen.

Die folgende Abbildung zeigt einige Elemente der Struktur des ES Modifiers.

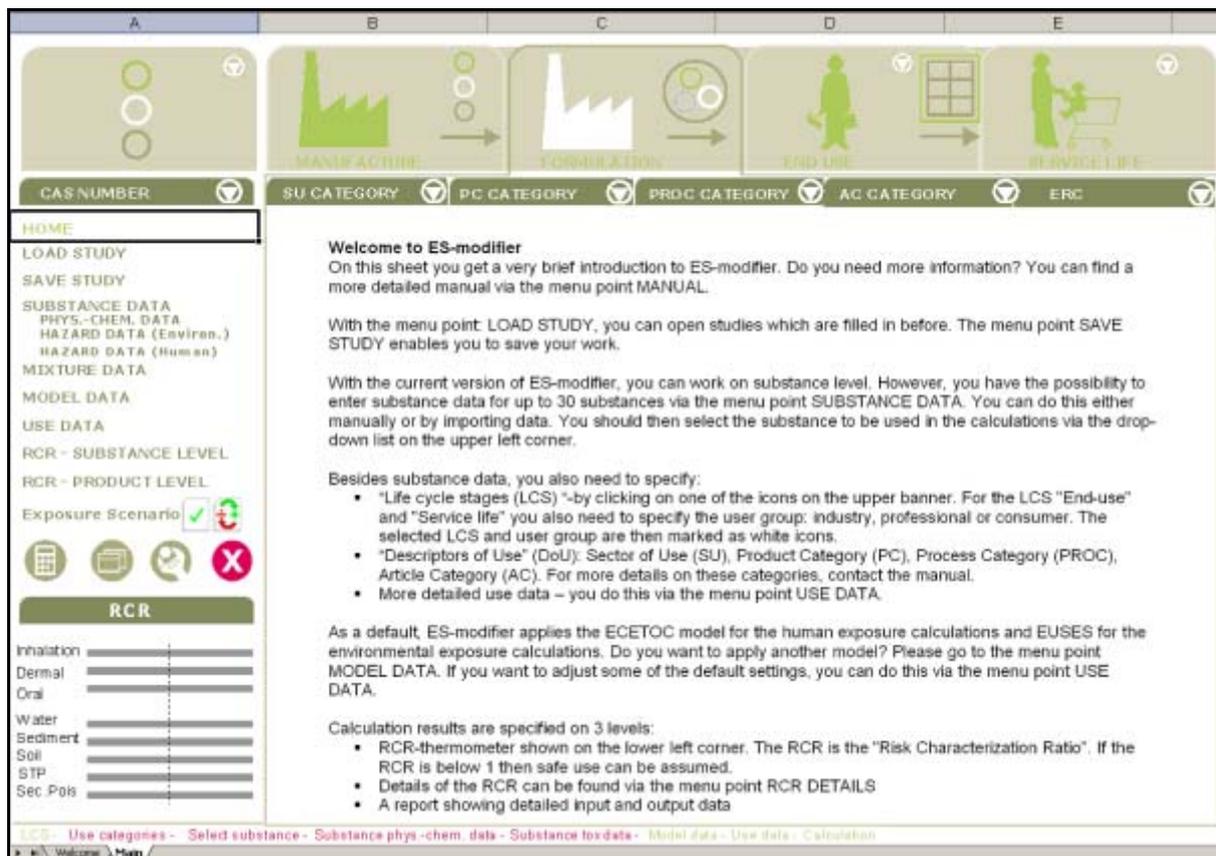


Abb. 1: Die Struktur des ES-Modifiers

Berechnete Größe

Mit Hilfe des ES Modifiers werden für die verschiedenen Schutzgüter die Risikoquotienten berechnet (RCRs, Risk Characterisation Ratios).

Ergebnis der Berechnung

Als Ergebnis werden die Risikoquotient in Form einer Skala angezeigt, die als „Thermometer“ bezeichnet wird. In Abb. 1 ist dieses „RCR-Thermometer“ in der unteren linken Ecke zu sehen. Das Thermometer (eine sehr leicht verständliche Ergebnisdarstellung!) gibt acht Informationen: die Werte für drei Belastungspfade des Menschen am Arbeitsplatz, für vier Umweltkompartimente und für die indirekte Belastung des Menschen über Umweltmedien und die Nahrungskette.

Zielgruppe des ES-Modifiers

Formulierer, die Stoffe in Gemischen einsetzen, und Registranten, die Stoffregistrierungen vornehmen. Für die meisten nachgeschalteten Anwender ist der ES-Modifier wahrscheinlich zu kompliziert.

Inhaltliche Grundlage

In den ES-Modifier wurden die heute gebräuchlichsten Expositionsabschätzungsinstrumente eingebaut: EUSES (Umweltexposition), ECETOC TRA version 2 (Umwelt-, Verbraucher-, Arbeitnehmerexposition), das niederländische Modell Stoffenmanager und das Einfache Maßnahmenkonzept Gefahrstoffe (EMKG) der Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin (BAuA) (beide Arbeitnehmerexposition) sowie ConsExpo (Verbraucherexposition). In dem Instrument werden vollständige Modellierungen der Umweltbelastung vorgenommen, entsprechend den ECHA Leitlinien im Kapitel R.16 (unter Nutzung des Expositionsabschätzungsinstrumentes EUSES).

Besonderheiten:

Der ES-Modifier ermöglicht vollständige Expositionsabschätzungen auf der Grundlage der derzeit gebräuchlichsten Expositionsabschätzungsinstrumente. Es können auch Expositionsszenarien für Gemische erstellt werden. Hierzu ist die DPD+-Methode zur Festlegung von Leitsubstanzen hinterlegt⁶.

Weitere Informationen zum ES Modifier geben wir im Kapitel 8.2.2.

Tab. 5: Profil: Eigenschaften des ES-Modifiers

Der ES-Modifier	
1	Von welchem Akteur ist das Instrument entwickelt worden mit welcher Zielsetzung?

⁶ Die DPD+-Methode ist ein methodischer Vorschlag, um für Gemische die risikobestimmenden Komponenten zu ermitteln. Er ist von CEFIC entwickelt und veröffentlicht worden (<http://cefic.org/templates/shwPublications.asp?HID=750>). Er basiert auf der Zubereitungsrichtlinie (DPD, „Dangerous Preparations Directive“) und bezieht zusätzlich für die Bewertung inhalativer Expositionen den Dampfdruck der Stoffe mit ein (daher das „+“ in DPD+). Eine Beschreibung der Methode und Empfehlungen zur Anwendung werden im Teil 3 des REACH Praxisführers zur Expositionsbewertung und zur Kommunikation in den Lieferketten gegeben (<http://www.vci.de/default~cmd~shd~docnr~125022~lastDokNr~102474.htm>). Der ES Modifier kann für Gemische die sogenannten Lead Substance Indicators (LSI) und damit die Leitsubstanz des Gemischs entsprechend der Methode DPD+ bestimmen, und macht diese in einer Tabelle kenntlich. Außerdem werden Stoffe, deren LSI mindestens 10% des LSI der Leitsubstanz ausmachen, mit einer anderen Farbe gekennzeichnet („sub lead substances“). Die RCR der Leitsubstanzen und der „sub lead substances“ je Expositionspfad werden aufsummiert, um mögliche additive Wirkungen zu bewerten.

Der ES-Modifier	
	Der ES-Modifier ist von europäischen Forschungsinstituten (DHI, TNO) entwickelt worden, um die Erarbeitung von Expositionsszenarien zu erleichtern.
2	Für welche Nutzergruppe ist das Instrument entwickelt worden?
	Registrierer, Formulierer, End-Anwender von Chemikalien
3	Welche Anwendungsbereiche werden angesprochen?
	Alle Anwendungsbereiche von Chemikalien.
4	Werden besondere Anwendungssituationen angesprochen?
	Nein, alle in den gebräuchlichen Expositionsabschätzungsinstrumenten erfassbaren Prozesse können abgebildet werden.
5	Welche Umweltkompartimente werden abgedeckt?
	Wasser (Süßwasser und Meereswasser), Sedimente (Süßwasser und Meereswasser), Boden, Luft, Klärschlamm-Mikroorganismen und Auswirkungen über die Umweltmedien (secondary poisoning).
6	Welche Eingabeparameter sind erforderlich?
	Sowohl Daten zu den Stoffeigenschaften (Molekulargewicht, Dampfdruck, Löslichkeit u.a.), als auch ökotoxikologische Wirkungsdaten und Angaben zu den Prozessen.
7	In welcher Form geschieht die Ergebnisdarstellung?
	Der Risikoquotient wird berechnet.
8	Komplexität des Instrumentes
	Die Komplexität ist hoch. Kenntnisse im Umgang mit Expositionsabschätzungs-Instrumenten sind Voraussetzung für eine sinnvolle Nutzung.
9	Möglichkeit der direkten Übertragung auf andere Branchen
	Eine Übertragung ist nicht erforderlich, da das Instrument von der Struktur her für alle Branchen anwendbar ist
10	Möglichkeit der Übertragbarkeit nach Anpassung
	Eine Anpassung ist nicht erforderlich, siehe vorheriger Eintrag bei 9.
11	Inhaltliche Richtigkeit der zugrundeliegenden Formeln
	Den Berechnungen für die Umweltexposition liegt EUSES zugrunde. Es wird das Use Descriptor System mit den Environmental Release Categories eingesetzt.
12	Berücksichtigung von Obergrenzen für die expositionsbestimmenden Größen
	Obergrenzen werden nicht berücksichtigt.
13	Berücksichtigung von Auswirkungen auf andere Umweltkompartimente
	Siehe Abschnitt 5, es werden alle in EUSES behandelten Umweltkompartimente abgebildet.
14	Eignung des Instrumentes für die vorgesehene Nutzergruppe
	Für Registranten wird das Instrument gut verständlich sein. Für nachgeschaltete Anwender ist es zu kompliziert (Ausnahme sind hier Formulierer, die selber auch Stoffe registrieren).
15	Besondere Stärken und Schwächen des Instrumentes, auch im Vergleich
	Der ES-Modifier ermöglicht eine schnelle und komfortable Anwendung der gebräuchlichsten Expositionsabschätzungsinstrumente. Das macht ihn attraktiv für erfahrene Nutzer.
16	Weiterentwicklungsbedarf / -möglichkeiten
	Eine interessante Weiterentwicklung wäre die Möglichkeit, als Registrant Voreinstellungen vorzunehmen und dem nachgeschalteten Anwender einen „vorbereiteten“ ES-Modifier zur Verfügung zu stellen. Der Anwender würde selber dann nur noch wenige Werte verändern. Berücksichtigung von Obergrenzen.

3.3 Das Tabellen-Kalkulationsblatt der Textilveredler

Das Tabellen-Kalkulationsblatt ist in einem Forschungsvorhaben des Umweltbundesamtes gemeinsam mit dem Verband der Textilveredler und dem Nordwestdeutschen Textilverband entwickelt worden. Die folgende Abbildung zeigt den Aufbau dieser Scalinghilfe.

Excel-Hilfe Expositionsabschätzung Abwasser, Produkt: Orange 703-R				MountainCHEM_1			
Stellgröße		Berechnung	Situation beim Anwender (Textilveredler)				
Nr.	Variable		Standard-Annahmen**		Eigene Situation		Dim
1a	Biologischer Abbau	F_{biol}	40%		40%		%
1b	Adsorptionsfaktor Klärschlamm	F_{ads}	0%		0%		%
2	Verlustanteil (Nicht am Substrat fixierter Anteil)	F_{nfix}	30%		30%		%
3	Gehalt Stoff in Formulierung	C_{stoff}	45%		45%		%
4	Zusätzliche Emissionsminderungs-Maßnahmen	Red_{min}	0%		90%		
5	Einsatzmenge Produkt pro Tag	Q_{THM}	122,0		85		kg/d
	Stoffeinsatzmenge pro Tag	Q_{stoff} $C_{stoff} \times Q_{THM}$	54,9				kg/d
6	Aufnehmende Wassermenge	Q_{wasser} $Q_{klär} + Q_{vorfl}$	20.000		8.000		m ³ /d
	Kläranlagenvolumen pro Tag	$Q_{klär}$	2.000		2.000		m ³ /d
	Vorflutervolumen pro Tag	Q_{vorfl}	18.000		6.000		m ³ /d
Resultierender PEC-Wert		s. u.	494	OK	86	OK	µg/l
PNEC-Wert zum Vergleich			500,0	500 µg		500	µg/l
sporadische Anwendung?		PNEC * 10	nein		PEC/PNEC = 1,0	PEC/PNEC = 0,2	

** : Von diesen Annahmen geht der Hersteller bzw. der Formulierer zur Beschreibung der Situation beim Veredler aus.

Abb. 2: Struktur des Tabellen-Kalkulationsblattes der Textilveredler

Im Tabellenblatt werden vom Lieferanten seine Annahmen zu den expositionsbestimmenden Größen eingetragen. Diese Größen werden in dem Tabellenblatt „Stellgrößen“ genannt. Sie werden in der linken Hälfte des Tabellenblattes aufgeführt.

Der nachgeschaltete Anwender gibt seine Werte in der rechten Hälfte der Tabelle ein. Hierfür ist eine Spalte „Eigene Situation“ vorgesehen. Die Scaling-Hilfe erfordert die Eingabe folgender Größen:

Der biologische Abbaugrad, der Adsorptionsfaktor im Klärschlamm, der nicht am Substrat fixierte Anteil (der sog. Verlustanteil, der im Abwasser verbleibt und in die bei Indirekteinleitern folgende kommunale Kläranlage eingetragen wird), der Gehalt des Stoffes in der Formulierung, die Einsatzmenge des Produktes pro Tag (aus diesen beiden Größen wird dann der Stoffeinsatz/Tag berechnet), der Volumenstrom der Kläranlage/Tag und der Volumenstrom des Vorfluters/Tag.

Der Lieferant gibt außerdem den PNEC-Wert (Süßwasser) des Stoffes ein, der für die Umweltexposition im Abwasser maßgebend ist.

Berechnete Größe

Im Tabellenblatt wird der Risikoquotient PEC/PNEC berechnet für Oberflächengewässer.

Ergebnis der Berechnung

Als Ergebnis wird direkt das PEC/PNEC-Verhältnis angegeben. Bei Werten über 1 erscheint der Warnhinweis (in roter Schriftfarbe), dass die Verwendung nicht abgedeckt ist.

Zielgruppe des Tabellen-Kalkulationsblattes

Das Kalkulationsblatt ist für Textilveredler als nachgeschaltete Anwender von Chemikalien entwickelt worden.

Inhaltliche Grundlage

In dem Tabellenblatt wird direkt eine Modellierung der Umweltbelastung vorgenommen. Daher ist auch die Eingabe des PNEC-Wertes für Oberflächengewässer (Süßwasser) erforderlich. Die Modellierung erfolgt entsprechend den Formeln im Leitfaden der ECHA zur umweltbezogenen Expositionsabschätzung (ECHA Leitlinien zu den Informationsanforderungen und zur Stoffsicherheitsbeurteilung, Teil R.16) (http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/information_requirements_r16_en.pdf?vers=27_05_10).

Allerdings wird für das Verhalten der Stoffe in der Kläranlage im Tabellenblatt nicht das Ergebnis einer Modellierung der unterschiedlichen Prozesse eingesetzt, die in einer Kläranlage stattfinden (biologischer Abbau, Adsorption am Klärschlamm, Freisetzung eines Teils des Stoffes in die Atmosphäre⁷). Stattdessen werden einzelne Faktoren für den biologischen Abbau und für die Adsorption am Klärschlamm verwendet. In der Berechnung werden diese Faktoren miteinander multipliziert. Dies führt zu Fehlberechnungen bei Stoffen, bei denen in der Kläranlage zusätzliche Prozesse ablaufen, z.B. Freisetzung in die Atmosphäre bei leicht flüchtigen Stoffen.

⁷ Eine solche Modellierung wird z.B. im umweltbezogenen Expositionsabschätzungsinstrument EUSES anhand des Berechnungsmoduls „SimpleTreat“ vorgenommen.

Bei einer Überarbeitung der Tabelle sollten deshalb die beiden genannten Faktoren ersetzt werden durch einen Faktor für die Stoffreduktion in der Kläranlage, der alle hierfür wichtigen Prozesse berücksichtigt.

Besonderheiten:

Das Tabellenblatt ermöglicht den direkten Vergleich zwischen den Annahmen, die der Registrierer bzw. Formulierer getroffen hat, und den tatsächlichen Anwendungsbedingungen beim Textilveredler. Allerdings hat sich im Praxistest mit Veredlern gezeigt, dass die Vielzahl der Eingabemöglichkeiten und der im Tabellenblatt enthaltenen Informationen viele Anwender überfordert.

Tab. 6: Profil: Eigenschaften des Tabellen-Kalkulationsblattes der Textilveredler

Das Tabellen-Kalkulationsblatt der Textilveredler	
1	Von welchem Akteur ist das Instrument entwickelt worden mit welcher Zielsetzung?
	Entwickler: Öko-Institut, gemeinsam mit dem Verband der Textilveredler und der Nordwestdeutschen Textilindustrie. Ziel: Unterstützung von Textilveredlern beim Risikomanagement und bei der Überprüfung von Expositionsszenarien.
2	Für welche Nutzergruppe ist das Instrument entwickelt worden?
	Nachgeschaltete Anwender, die die Stoffe und Gemische selber einsetzen
3	Welche Anwendungsbereiche werden angesprochen?
	Textilveredlung.
4	Werden besondere Anwendungssituationen angesprochen?
	Umweltoffene Verwendungen
5	Welche Umweltkompartimente werden abgedeckt?
	Oberflächenwasser (Süßwasser)
6	Welche Eingabeparameter sind erforderlich?
	Biologischer Abbaugrad, Adsorptionsfaktor im Klärschlamm, Freisetzungsgrad, Gehalt des Stoffes in der Formulierung, Einsatzmenge des Produktes pro Tag, Kläranlagenvolumen/Tag, Vorflutervolumen/Tag, PNEC-Wert(Süßwasser) des Stoffes.
7	In welcher Form geschieht die Ergebnisdarstellung?
	Der Risikoquotient PEC/PNEC wird berechnet.
8	Komplexität des Instrumentes
	Mittlere Komplexität. Es sind viele Eingaben erforderlich.
9	Möglichkeit der direkten Übertragung auf andere Branchen
	Übertragbar auf andere Branchen.
10	Möglichkeit der Übertragbarkeit nach Anpassung
	s.o., das Tabellenblatt kann auch in anderen Branchen genutzt werden, ggf. sind die Begrifflichkeiten an die Branche anzupassen (z.B. „Fixiergrad“).
11	Inhaltliche Richtigkeit der zugrundeliegenden Formeln
	Der Tabellen-Kalkulation liegen die Formeln aus der ECHA-Leitfaden zur umweltbezogenen Expositionsabschätzung zugrunde. Die Angaben zur Abbaubarkeit und zum Verhalten am Klärschlamm sollten durch die Ergebnisse einer Kläranlagen-Modellierung ersetzt werden.

Das Tabellen-Kalkulationsblatt der Textilveredler	
12	Berücksichtigung von Obergrenzen für die expositionsbestimmenden Größen
	Es werden keine Obergrenzen verwendet.
13	Berücksichtigung von Auswirkungen auf andere Umweltkompartimente
	Es werden keine anderen Umweltkompartimente berücksichtigt.
14	Eignung des Instrumentes für die vorgesehene Nutzergruppe
	Für die meisten nachgeschalteten Anwender wird das Instrument aufgrund der Vielzahl der Eingabemöglichkeiten schwierig zu nutzen sein.
15	Besondere Stärken und Schwächen des Instrumentes, auch im Vergleich
	Vorteilhaft: vergleichende Darstellung der Eingaben durch den Formulierer und durch den Anwender. Schwierig: Vielzahl an Eingabemöglichkeiten.
16	Weiterentwicklungsbedarf / -möglichkeiten
	Für nachgeschaltete Anwender kann eine Schwerpunktsetzung auf die Größen, die er verändern kann (siehe Instrument REACH Scale Umwelt). Berücksichtigung von Obergrenzen.

3.4 Scalinghilfe für Galvanikprozesse (ZVO)

Im Rahmen eines Forschungsvorhabens des Umweltbundesamtes sind gemeinsam mit dem Zentralverband für Oberflächentechnik (ZVO) Scalingtabellen entwickelt worden. Sie werden in den folgenden drei Tabellen wiedergegeben. Die Tabellen beziehen sich auf organische Prozesschemikalien.

Berechnete Größen

Die Tabellen zeigen, welche Menge einer Prozesschemikalie eingesetzt werden kann pro Tag, in Abhängigkeit von der Vorflutergröße (Tabelle 8), von der Giftigkeit des Stoffes für Wasserorganismen (Tabelle 9, PNEC-Wert) und von der Verringerung der Stofffreisetzung durch die Kläranlage (Tabelle 9).

Den Tabellen zugrunde liegt eine Expositionsabschätzung und Risikocharakterisierung, die mit dem Expositionsabschätzungsinstrument EUSES und den in diesem Instrument hinterlegten Formeln vorgenommen wurde. Diese Abschätzung wurde für einen Stoff durchgeführt unter folgenden Annahmen:

$PNEC_{aquatisch, \text{ Oberflächengewässer}}: 1 \text{ mg} / \text{l}$

Logarithmus des Verteilungskoeffizienten Octanol/Wasser (LogPow): < 4.5

Der Stoff ist in der Kläranlage biologisch abbaubar (eingeschränkte (inhärente) biologische Abbaubarkeit).

Der Volumenstrom des Vorfluters beträgt 20.000 Kubikmeter/Tag (mittlerer Niedrigwasserabfluss).

Unter diesen Annahmen ergibt sich für den Stoff eine mögliche maximale Einsatzmenge von 33 Gramm/Tag. Dieser Wert ist in den nachfolgenden drei Tabellen jeweils gelb hinterlegt.

Tab. 7: Maximale Einsatzmengen in Abhängigkeit von der Vorfluter-Größe

PNEC \geq 1 mg/l, LogP _{ow} < 4,5 mind. inhärent abbaubar Variation Vorfluter-Volumenstrom [m ³ /d]	\geq 5.000	\geq 20.000	\geq 50.000	\geq 100.000	\geq 200.000	\geq 500.000
Maximale Einsatzmenge [g/d]	8	33	82	165	330	820

Tab. 8: Maximale Einsatzmengen und die PNEC-Wert der Stoffe

LogP _{ow} < 4,5 mindestens inhärent abbaubar, Vorfluter-Volumenstrom \geq 20.000m ³ /d Variation PNEC [mg/l]	\geq 0,1	\geq 1	\geq 10	\geq 100
Maximale Einsatzmenge in [g/d]	3	33	330	3300

Tab. 9: Einsatzmengen und Eliminationsgrad⁸ der Stoffe in der Kläranlage

PNEC \geq 1 mg/l, Vorfluter-Volumenstrom \geq 20.000m ³ /d Abbaubarkeit und LogP _{ow} variabel Variation Eliminationsgrad [%]	\geq 40	\geq 60	\geq 80	\geq 90	\geq 95	\geq 99
Maximale Einsatzmenge in [g/d]	33	50	100	200	400	2000
Iterationsfaktor	1	1,5	3	6	12	60

Ergebnis der Anwendung

Als Ergebnis werden maximal mögliche Einsatzmengen in Kilogramm/Tag angegeben.

⁸ Die Verringerung des Stoffeintrages in den Vorfluter kann in der Kläranlage durch Behandlung mit Hilfe mechanischer Prozesse, durch biologischen Abbau, durch Adsorption an den Klärschlamm oder durch Verflüchtigung des Stoffes in die Luft erfolgen.

Zielgruppe

Formulierer, die selber Expositionsszenarien für ihre Produkte erstellen möchten. Hieraus entstehen dann Tabellen, die den nachgeschalteten Anwendern der Produkte zur Verfügung gestellt werden können.

Inhaltliche Grundlage

In den Tabellen wird die unter Standardbedingungen maximal einsetzbare Menge nicht berechnet, sondern direkt eingegeben. Zur Bestimmung dieser Größe wird in der Regel eine Modellierung der Umweltbelastung entsprechend den Formeln im Leitfaden der ECHA zur umweltbezogenen Expositionsabschätzung (Teil R.16) vorgenommen werden.

Besonderheiten:

Besonderheit: Anhand dieser Tabellen können auch

- der PNEC-Wert und
- die Verringerung des Stoffeintrages durch die Kläranlage

verändert werden, d.h.: Stoffeigenschaften. Diese werden in den anderen Instrumenten fest vorgegeben - skaliert werden im Allgemeinen die Prozessparameter und die Umgebungsgrößen.

In den Tabellen werden Werte fest vorgegeben, es können keine eigenen Eingaben erfolgen. In einer vergleichbaren Form könnten auch nicht-lineare Abhängigkeiten dargestellt werden.

Es sind keine Obergrenzen vorgesehen.

Tab. 10: Profil: Eigenschaften der Scaling-Tabellen für Organika in der Galvanik

Die Scaling-Tabelle für Organika in der Galvanik	
1	Von welchem Akteur ist das Instrument entwickelt worden mit welcher Zielsetzung?
	Ökopol gemeinsam mit dem Zentralverband der Oberflächentechnik (ZVO). Ziel: Hilfestellung bei der Entwicklung von Expositionsszenarien.
2	Für welche Nutzergruppe ist das Instrument entwickelt worden?
	Formulierer, die Expositionsszenarien erstellen.
3	Welche Anwendungsbereiche werden angesprochen?
	Oberflächenveredlung.
4	Werden besondere Anwendungssituationen angesprochen?
	Einsatz von organischen Stoffen in Elektrolyten.
5	Welche Umweltkompartimente werden abgedeckt?
	Oberflächengewässer (Süßwasser)
6	Welche Eingabeparameter sind erforderlich?

	Volumenstrom des Vorfluters, PNEC-Wert (Besonderheit dieses Instrumentes!), Emissionsverringering in der Kläranlage
7	In welcher Form geschieht die Ergebnisdarstellung?
	Die maximal zulässige Einsatzmenge wird angegeben.
8	Komplexität des Instrumentes
	Niedrig.
9	Möglichkeit der direkten Übertragung auf andere Branchen
	Die Tabellen können – von der Struktur her – auch in anderen Branchen verwendet werden.
10	Möglichkeit der Übertragbarkeit nach Anpassung
	Direkte Übertragung ist möglich.
11	Inhaltliche Richtigkeit der zugrundeliegenden Formeln
	Die lineare Abhängigkeit der Größen wird richtig abgebildet. Die maximal mögliche Einsatzmenge unter Standardbestimmungen wird nicht im Instrument selbst berechnet. Sie wird aus einer vorliegenden Berechnung übernommen.
12	Berücksichtigung von Obergrenzen für die expositionsbestimmenden Größen
	Es werden keine Obergrenzen berücksichtigt.
13	Berücksichtigung von Auswirkungen auf andere Umweltkompartimente
	Nein.
14	Eignung des Instrumentes für die vorgesehene Nutzergruppe
	Das Instrument ist geeignet für Formulierer, die Expositionsszenarien erstellen.
15	Besondere Stärken und Schwächen des Instrumentes, auch im Vergleich
	Vorteil: einfacher Aufbau, leichte Nutzung. Nachteil: Wenig geeignet, wenn mehr als eine Größe verändert wird.
16	Weiterentwicklungsbedarf / -möglichkeiten
	Berücksichtigung von Obergrenzen.

3.5 Scaling-Formel für Abwasserbelastung durch Lösemittel

Im REACH Praxisführer zur Expositionsbewertung und zur Kommunikation in den Lieferketten⁹ ist in der ersten Auflage vom April 2009 eine Scalingformel für die Abwasserbelastung durch Acetonitril veröffentlicht worden. Sie ist Teil eines Expositionsszenarios für Acetonitril. Die Formel wird in der nachfolgenden Tabelle wiedergegeben.

⁹ Der REACH Praxisführer ist vom Verband der Chemischen Industrie (VCI) und vom europäischen Chemieverband (CEFIC) herausgegeben worden (<http://www.vci.de/default~cmd~shd~docnr~125022~lastDokNr~102474.htm>).

Tab. 11: Die Scaling-Formel zur Belastung im Abwasser durch Acetonitril. Quelle: REACH Praxisführer zur Expositionsbeurteilung und Kommunikation in den Lieferketten, April 2009.

Information on estimated exposure and DU guidance	
8	Exposure estimation and reference to its source
9	<p>Guidance to DU to evaluate whether he works inside the boundaries set by the ES</p> <p>The exposure is inside the boundaries set by the ES if the following requirements are met:</p> <p>Environment:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Waste water: <ul style="list-style-type: none"> ○ The maximum release to waste water can be calculated by the following equation: <ul style="list-style-type: none"> ▪ $\text{Maximum release [kg/day]} = 0.120 * 0.1 * (F_R + E_D) / E_D$ <div style="display: flex; justify-content: space-around; margin-top: 5px;"> F_R = Flow rate of river E_D = STP effluent discharge </div> ○ The RMM in section 6.2 and 7 are followed.

F_R : Volumenstrom des Vorfluters; E_D : Volumenstrom der Kläranlage

Die Formel ermöglicht die Berechnung, wieviel Kilogramm Acetonitril/Tag mit dem Prozessabwasser in eine Kläranlage freigesetzt werden darf, in Abhängigkeit von dem Volumenstrom des Vorfluters und vom Volumenstrom der Kläranlage.

Den Angaben liegt eine Expositionsabschätzung und Risikocharakterisierung zugrunde. Sie führte zu dem Ergebnis, dass eine Freisetzung von 0.12 kg Acetonitril/Tag mit dem Prozessabwasser zulässig ist, wenn der Volumenstrom der Kläranlage 2.000 Kubikmeter/Tag und der Volumenstrom des Vorfluters mindestens 18.000 Kubikmeter/Tag beträgt. Diese Vorgaben sind auch im Expositionsszenario aufgeführt (aus dem Verhältnis zwischen Kläranlagenvolumenstrom und Vorflutervolumenstrom ergibt sich der Faktor von 0,1 in der Formel zur Berechnung des maximal zulässigen Freisetzung in Tab. 12). Die nachfolgende Tabelle zeigt den entsprechenden Auszug des Expositionsszenarios.

Tab. 12: Auszug aus dem Expositionsszenario mit Zusatzinformationen zur Scaling-Formel

Risk Management Measures	
6.1	Risk management measures related to human health

6.2	Risk management measures related to the environment: <ul style="list-style-type: none">▪ Waste water:<ul style="list-style-type: none">- Any potential releases to water should be avoided as far as possible- Waste waters should be directed to an STP- Maximum daily release to waste water per site¹: 0.120 kg/day▪ Air: Any potential releases to air should be avoided as far as possible▪ Soil: Direct release to soil should be avoided <p>¹ STP effluent discharge = 2000 m³/day; Flow rate of effluent receiving river = 18000 m³/day; see section 9 for an equation to calculate the maximum release to waste water on the basis of a known effluent discharge and a known flowrate of the receiving river.</p>
------------	--

Zwei Größen können verändert werden: die Kapazität der Kläranlage (behandeltes Wasservolumen in Kubikmeter/ Tag) und der Volumenstrom des Vorfluters (in Kubikmeter/Tag).

Berechnete Größe

Mit der Scaling-Formel zur Abwasserbelastung durch ein Lösemittel kann berechnet werden, welche Lösemittelmenge maximal in die Kläranlage freigesetzt werden darf.

Ergebnis der Berechnung:

Die maximal Menge, die in das Abwasser freigesetzt werden darf, wird in Kilogramm/Tag angegeben („Maximum Release“).

Zielgruppe der Scaling-Hilfe:

Formulierer, die den Stoff in Gemischen einsetzen, oder nachgeschaltete Anwender, die den Stoff oder ein den Stoff enthaltendes Gemisch selbst einsetzen.

Inhaltliche Grundlage:

In der Formel wird die unter Standardbedingungen maximal einsetzbare Menge nicht berechnet, sondern direkt eingegeben. Zur Bestimmung dieser Größe erfolgte eine Modellierung der Abwasserbelastung entsprechend den Leitlinien der ECHA zur umweltbezogenen Expositionsabschätzung (Teil R.16).

Besonderheiten:

Als Scaling-Parameter werden lediglich die Kläranlagen- und Vorflutervolumenströme angegeben. Es werden keine Obergrenzen eingezogen. Als Ergebnis wird bei diesem Instrument nicht die maximal mögliche Einsatzmenge angegeben, sondern die maximal zulässige Menge, die ins Abwasser freigesetzt werden darf.

Tab. 13: Profil: Eigenschaften der Scaling-Formel für Abwasserbelastungen durch Lösemittel

Die Scaling-Formel für Abwasser-Belastungen durch Lösemittel	
1	Von welchem Akteur ist das Instrument entwickelt worden mit welcher Zielsetzung?
	Das Instrument wurde von einem Stoffhersteller entwickelt. Zur Unterstützung des Scalings durch seine Kunden.
2	Für welche Nutzergruppe ist das Instrument entwickelt worden?
	Industrielle und professionelle Anwender des Lösemittels.
3	Welche Anwendungsbereiche werden angesprochen?
	Industrielle Verwendungen von Lösemitteln.
4	Werden besondere Anwendungssituationen angesprochen?
	Geschlossene Anwendungen und Batch-Produktionen.
5	Welche Umweltkompartimente werden abgedeckt?
	Oberflächengewässer (Süßwasser)
6	Welche Eingabeparameter sind erforderlich?
	Volumenstrom der Kläranlage, Volumenstrom des Vorfluters
7	In welcher Form geschieht die Ergebnisdarstellung?
	Nennung der Menge, die ins Abwasser freigesetzt werden darf pro Tag.
8	Komplexität des Instrumentes
	Niedrig.
9	Möglichkeit der direkten Übertragung auf andere Branchen
	Übertragbarkeit ist gegeben
10	Möglichkeit der Übertragbarkeit nach Anpassung
	Übertragbarkeit ist gegeben
11	Inhaltliche Richtigkeit der zugrundeliegenden Formeln
	Die Formel bildet das Verhältnis zwischen Expositionshöhe und aufnehmender Wassermenge richtig ab. DIE maximal mögliche Einsatzmenge unter Standardbestimmungen wird nicht im Instrument selbst berechnet. Sie wird aus einer vorliegenden Berechnung übernommen.
12	Berücksichtigung von Obergrenzen für die expositionsbestimmenden Größen
	Obergrenzen werden nicht berücksichtigt.
13	Berücksichtigung von Auswirkungen auf andere Umweltkompartimente
	Es wird nur das Umweltkompartiment Wasser berücksichtigt.
14	Eignung des Instrumentes für die vorgesehene Nutzergruppe
	Das Instrument kann von Formulierern und End-Anwendern genutzt werden.
15	Besondere Stärken und Schwächen des Instrumentes, auch im Vergleich
	Vorteilhaft: begrenzte Zahl an Eingabeparametern. Nachteil: keine direkte Verbindung zur eingesetzten Menge.
16	Weiterentwicklungsbedarf / -möglichkeiten
	Erläuterung der Eingabeform (Angaben in Kubikmetern/Tag). Erläuterung, wie die „freigesetzte“ Menge berechnet werden kann.

3.6 Das Tabellen-Kalkulationsblatt REACH Scale Umwelt

Das Tabellen-Kalkulationsblatt REACH Scale Umwelt ist vom Öko-Institut im Rahmen des REACH Praxisführers ausgearbeitet worden¹⁰. Es stellt eine Weiterentwicklung und Vereinfachung des Tabellen-Kalkulationsblattes dar, das gemeinsam mit Unternehmen aus der Textilbranche entwickelt wurde (siehe Kapitel 3.3). In der folgenden Abbildung wird die Struktur des Kalkulationsblattes wiedergegeben.

REACH: Scale Lederplex 900		Umwelt	Wasser
1. Ihr aufnehmendes Wasservolumen (nach Kläranlage)		200.000 m3/Tag	
Standard-Annahme: 200.000 m3 /Tag		! Höchstwert: 2 Mio m3/Tag!	
2. Ihre betriebliche Emissions-Verringerung (RMM):		99 %	0,01
Standard-Annahme: Fällung mit Fe(OH)3, 99% Verringerung			0,01
<div style="display: flex; align-items: center;"> <div style="font-size: 2em; margin-right: 10px;">➔</div> <div> <p>Wieviel kg Lederplex 900 kann ich unter den beschriebenen Bedingungen (siehe 1,2,3,4) maximal einsetzen?</p> <p>570 kg / Tag</p> </div> </div>			
In das Oberflächengewässer abgegebene Menge		0,57 kg / Tag	
Seltene Anwendungen (weniger als 1x/Monat) sind möglich bis höchstens (unter den oben angegebenen Bedingungen (1,2,3,4)).		5.700 kg / Tag	
In spezifischen Fällen können Sie auch die folgenden Parameter verändern:			
3. Fixiergrad		90 %	0,10
Standard-Annahme: 90%			0,10
4. Emissionsverringern in der kommunalen Kläranlage		0 %	0,00
Standard-Annahme: 0 %			0,00
Die folgenden Parameter können nicht verändert werden:			
PNEC Oberflächenwasser		2 Mikrogramm/Liter	
Verhältnis PEC/ PNEC maximum		1	
Höchste mögliche Einsatzmenge / Tag bei Standard-Annahmen:		570 kg/Tag	

Abb. 3: Der Aufbau des Tabellen-Kalkulationsblattes REACH Scale Umwelt

In der Kalkulationstabelle können vier expositionsbestimmende Größen vom nachgeschalteten Anwender eingegeben werden:

die Wassermenge/Zeiteinheit des aufnehmenden Vorfluters (vor der Kläranlage, genauer der mittlere Niedrigwasserabfluss (MNQ)), die Wirksamkeit betrieblicher Emissions-Minderungsmaßnahmen, der Fixiergrad (Angabe, welcher Anteil der im Färbebehälter enthaltenen Chemi-

¹⁰ Der REACH Praxisführer zur Expositionsbewertung und zur Kommunikation in den Lieferketten ist vom Verband der Chemischen Industrie (VCI) und vom europäischen Chemieverband (CEFIC) herausgegeben worden (<http://www.vci.de/default~cmd~shd~docnr~125022~lastDokNr~102474.htm>).

kalien auf die Textilfaser aufgetragen wird) und die Emissionsverringerung in der kommunalen Kläranlage.

Die Eingabe erfolgt in den Zeilen, die mit den Ziffern 1 - 4 beginnen und dunkelgelb bzw. hellgelb markiert sind.

Berechnete Größe

Im Tabellenkalkulationblatt REACH Scale wird direkt die Menge des Produktes berechnet, die der nachgeschaltete Anwender maximal pro Tag einsetzen darf.

Ergebnis der Berechnung:

Die maximal zulässige Menge des Produktes wird in der grün markierten Tabellen-Zelle in der Mitte des Tabellenblattes angegeben (in der Abbildung 4 beträgt diese Menge 570 Kilogramm/Tag).

Ergänzend wird die Menge angegeben, die bei seltener Anwendung möglich ist. Der Begriff „Seltene Anwendung“ wird beschrieben als „weniger als einmal pro Monat“. Dies sollte ergänzt werden entsprechend der Festlegung aus der ECHA Leitlinie: weniger als 1x/Monat (**mit einer Dauer von unter 24 Stunden**) (ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment, Part R.10, Kapitel R.10.3.3, S.29).

Zielgruppe der Scaling-Hilfe:

REACH Scale Umwelt ist entwickelt worden für nachgeschaltete Anwender von Chemikalien, die bisher keine Erfahrungen in der umweltbezogenen Expositionsabschätzung haben (nicht für Formulierer).

Inhaltliche Grundlage:

Im Tabellenblatt wird die unter Standardbedingungen maximal einsetzbare Menge nicht berechnet, sondern ein vom Registranten ermittelter Wert direkt eingegeben. Zur Bestimmung dieser Größe wird in der Regel eine Modellierung der Abwasserbelastung entsprechend den ECHA Leitlinien zur umweltbezogenen Expositionsabschätzung (Teil R.16) durchgeführt werden.

Im Scaling-Instrument wird nicht zwischen dem Volumenstrom der Kläranlage und dem Volumenstrom des Vorfluters vor der Kläranlage unterschieden.

Besonderheiten:

Die Eingabemöglichkeiten in diesem Instrument sind bewusst eingeschränkt worden auf die Größen, die beim nachgeschalteten Anwender der Stoffe bzw. Gemische von den Angaben im Expositionsszenario des Lieferanten abweichen können.

Es ist eine Obergrenze eingezogen worden für den Volumenstrom des Vorfluters. Der höchste mögliche Eingabewert sind hier 2.000.000 Kubikmeter. Dies entspricht bei einem Standardwert von 2.000 m³ für den Volumenstrom in die Kläranlage einem Vorfluter-Verdünnungsfaktor von 1000. Dieser Maximalwert wird im Teil R 16 (Umweltbezogene Expositionsabschätzung) der ECHA Leitlinien zu den Informationsanforderungen und zur Stoffsicherheitsbeurteilung festgelegt (http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/information_requirements_r16_en.pdf?vers=27_05_10).

Es wird unterschieden zwischen zwei Kernparametern, die in der Regel variabel sind (Vorflutervolumen und Wirksamkeit der betrieblichen Risikomanagement-Maßnahmen), und zwei weiteren Scaling-Größen, die nur beim Vorliegen zusätzlicher Daten verändert werden sollten: dem Fixiergrad und der Emissionsverringerung in der Kläranlage. Unter Emissionsverringerung in der Kläranlage wird hierbei mechanische Entfernung, Abbau, Adsorption an den Klärschlamm und Freisetzung in die Atmosphäre verstanden).

Bei diesem Scaling-Instrument bleiben die voreingestellten Ausgangswerte dauerhaft sichtbar.

Tab. 14: Profil: Eigenschaften des Tabellen-Kalkulationsblattes REACH Scale Umwelt

Das Tabellen-Kalkulationsblatt REACH Scale Umwelt	
1	Von welchem Akteur ist das Instrument entwickelt worden mit welcher Zielsetzung?
	REACH Scale wurde vom Öko-Institut entwickelt zur Unterstützung von End-Anwendern, die wenig bis keine Erfahrung mit Expositionsabschätzungsinstrumenten haben.
2	Für welche Nutzergruppe ist das Instrument entwickelt worden?
	Nachgeschaltete Anwender von Chemikalien (Stoffen und Gemischen)
3	Welche Anwendungsbereiche werden angesprochen?
	Textilveredlung
4	Werden besondere Anwendungssituationen angesprochen?
	Kontinuierliche und diskontinuierliche Prozesse (Batch-Verfahren).
5	Welche Umweltkompartimente werden abgedeckt?
	Oberflächengewässer (Süßwasser)
6	Welche Eingabeparameter sind erforderlich?
	Volumenstrom des Vorfluters, Wirksamkeit betrieblicher Emissions-Minderungsmaßnahmen, Fixiergrad und Emissionsverringerung in der kommunalen Kläranlage.

Das Tabellen-Kalkulationsblatt REACH Scale Umwelt	
7	In welcher Form geschieht die Ergebnisdarstellung?
	Angabe der maximal erlaubten täglichen Einsatzmenge / Angabe der möglichen Einsatzmenge bei seltener Verwendung
8	Komplexität des Instrumentes
	Niedrig bis mittel (Tabellen-Kalkulationsblatt).
9	Möglichkeit der direkten Übertragung auf andere Branchen
	Übertragbarkeit auf andere Branchen.
10	Möglichkeit der Übertragbarkeit nach Anpassung
	s.o., das Tabellenblatt kann auch in anderen Branchen genutzt werden, ggf. sind die Begrifflichkeiten an die Branche anzupassen (z.B. „Fixiergrad“).
11	Inhaltliche Richtigkeit der zugrundeliegenden Formeln
	Die linearen Abhängigkeiten werden richtig wiedergegeben. Die maximal mögliche Einsatzmenge unter Standardbestimmungen wird nicht im Instrument selbst berechnet. Sie wird aus einer vorliegenden Berechnung übernommen.
12	Berücksichtigung von Obergrenzen für die expositionsbestimmenden Größen
	Obergrenzen sind eingezogen beim aufnehmenden Wasservolumen.
13	Berücksichtigung von Auswirkungen auf andere Umweltkompartimente
	Keine Berücksichtigung anderer Umweltkompartimente ausser Wasser.
14	Eignung des Instrumentes für die vorgesehene Nutzergruppe
	Das Instrument ist für End-Anwender geeignet.
15	Besondere Stärken und Schwächen des Instrumentes, auch im Vergleich
	Vorteil: Beschränkung auf wenige Eingabeparameter. Schwächen: keine Berücksichtigung des Volumenstromes der Kläranlage.
16	Weiterentwicklungsbedarf / -möglichkeiten
	Einbezug weiterer Obergrenzen. Berücksichtigung des Volumenstromes der Kläranlage. Entwicklung vergleichbar strukturierter Instrumente für andere Umweltkompartimente.

3.7 Die REACH Arbeitshilfe Abwasser des Verbandes TEGEWA

Die REACH Arbeitshilfe Abwasser ist vom Verband TEGEWA entwickelt worden. Im Verband TEGEWA sind u.a. Hersteller von Lederhilfsmitteln und Textilhilfsmitteln vertreten. Die Arbeitshilfe Abwasser stellt eine Weiterentwicklung und Vereinfachung des Tabellen-Kalkulationsblattes dar, das gemeinsam mit Unternehmen aus der Textilbranche entwickelt wurde (siehe Kapitel 3.3). In der folgenden Abbildung wird die Struktur der Arbeitshilfe gezeigt.

Berechnung der maximal möglichen täglichen Einsatzmenge eines Lederhilfsmittels nach REACH			
Handelsname des Lederhilfsmittels		Farbmittel	
Diese Angaben entnehmen Sie bitte dem Sicherheitsdatenblatt oder dem Expositionsszenario Ihres Chemikalienlieferanten:		Diese Angaben sind Ihre spezifischen Unternehmensdaten.	
Gehalt der Leitsubstanz in der Formulierung	70,00 %	Emissionsminderung durch prozess-integrierte Maßnahmen	99,00 %
Stoffmengenreduktion durch mechanische Abwasserreinigung	0,00 %	tägliche Abwassermenge Ihres Unternehmens	100 m ³ /d
Stoffmengenreduktion durch biologische Abwasserreinigung	0,00 %	mittlere tägliche Trockenwetterwassermenge des Gewässers, in welches Sie Ihr Abwasser direkt oder indirekt einleiten.	900 m ³ /d
Stoffmengenreduktion durch chemische Abwasserreinigung	0,00 %	Auszehrgrad	90,00 %
PNEC-Wert	2,00 µg/l		
Bei regelmäßiger Anwendung dürfen Sie in Ihrem Unternehmen täglich maximal folgende Menge des Lederhilfsmittels einsetzen, ohne abwasserseitig die Umwelt zu gefährden.			2,86 kg/d
Bei seltener Anwendung (bis zu max. 12 mal im Jahr) dürfen Sie in Ihrem Unternehmen täglich maximal folgende Menge des Lederhilfsmittels einsetzen, ohne abwasserseitig die Umwelt zu gefährden.			28,57 kg/d

Abb. 4: Aufbau der REACH Arbeitshilfe Abwasser des Verbandes TEGEWA

In der Arbeitshilfe können insgesamt 9 Größen verändert werden. Die Arbeitshilfe ermöglicht damit eine vollständige Umweltexpositionsabschätzung auf der Grundlage der im Kapitel 3 genannten Formel. Die Werte werden in die weiß hinterlegten Felder im oberen Teil der Arbeitshilfe eingegeben.

Berechnete Größe

In der REACH Arbeitshilfe Abwasser wird direkt die Menge des Produktes berechnet, die der nachgeschaltete Anwender maximal pro Tag einsetzen darf.

Ergebnis der Berechnung:

Als Ergebnis wird im unteren Drittel der Tabelle die maximal zulässige Menge des Produktes angegeben. Außerdem wird angegeben, welche Menge bei seltener Anwendung eingesetzt werden darf.

Zielgruppe der Scaling-Hilfe:

Die REACH Arbeitshilfe Abwasser wurde für Formulierer und für Gerber (die nachgeschalteten Anwender von Gerberei-Chemikalien) entwickelt.

Inhaltliche Grundlage:

In der Arbeitshilfe erfolgt eine direkte Modellierung der Abwasserbelastung entsprechend der über der Tabelle 3 gezeigten Formel. Das Vorgehen entspricht damit der Beschreibung in den ECHA Leitlinien zur Umweltexpositionsabschätzung¹¹. In der Arbeitshilfe wird nur zwischen dem Abwasservolumenstrom des Unternehmens und dem Volumenstrom des Vorfluters unterschieden. Die im ECHA Leitfaden R.16 vorgegebenen Standardeinstellungen für die Wasservolumina von Kläranlage und Vorfluter sind nicht übernommen worden (Kläranlagenkapazität 2.000 m³/Tag, Verdünnungsfaktor Vorfluter: 10). TEGEWEA geht davon aus, dass die Tabelle sowohl von Direkt- als auch von Indirekteinleitern verwendet wird.

In der Arbeitshilfe wird für das Verhalten der Stoffe in der Kläranlage nicht das Ergebnis einer Modellierung der unterschiedlichen Prozesse eingesetzt, die in einer Kläranlage stattfinden (biologischer Abbau, Adsorption am Klärschlamm, Freisetzung eines Teils des Stoffes in die Atmosphäre¹²). Stattdessen sollen einzelne Faktoren für die mechanische, die biologische und die chemische Stoffmengenreduktion angegeben werden. Diese Werte werden in vielen Fällen nicht vorliegen. Bei einer Überarbeitung der Arbeitshilfe sollten deshalb die genannten Einzelfaktoren ersetzt werden durch einen Faktor für die Stoffreduktion in der Kläranlage, der alle hierfür wichtigen Prozesse berücksichtigt.

Der Begriff „Seltene Anwendung“ wird in der Arbeitshilfe beschrieben als „bis zu maximal 12mal im Jahr“. Dies sollte ersetzt werden durch die Festlegung aus der ECHA Leitlinie: weniger als 1x/Monat (mit einer Dauer von unter 24 Stunden) (ECHA Guidance on information requirements and chemical safety assessment, Part R.10, Kapitel R.10.3.3, S.29).

Besonderheiten:

In der REACH Arbeitshilfe Abwasser können viele Parameter eingegeben werden. Eingabemöglichkeiten für die Konzentration eines Stoffes im

¹¹ (http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/information_requirements_r16_en.pdf?vers=27_05_10).

¹² Eine solche Modellierung wird z.B. im umweltbezogenen Expositionsabschätzungsinstrument EUSES anhand des Berechnungsmoduls „SimpleTreat“ vorgenommen.

Produkt und für den PNEC-Wert eines Inhaltsstoffes sind wichtig für Formulierer, aber ohne Bedeutung für die nachgeschalteten Anwender von Chemikalien.

Es werden keine Obergrenzen für die Eingabewerte vorgegeben.

Bei diesem Scaling-Instrument bleiben die voreingestellten Ausgangswerte nicht dauerhaft sichtbar, sondern werden vom Anwender der Arbeitshilfe mit eigenen Werten überschrieben. Das erschwert es, nach erstmaliger Benutzung die ursprüngliche Einschätzung des Lieferanten nachzuvollziehen.

Die REACH Arbeitshilfe Abwasser des Verbandes TEGEWA	
1	Von welchem Akteur ist das Instrument entwickelt worden mit welcher Zielsetzung?
	Entwickler: Verband TEGEWA, gemeinsam mit dem Verband der deutschen Lederindustrie.
2	Für welche Nutzergruppe ist das Instrument entwickelt worden?
	Formulierer von Gemischen und nachgeschaltete Anwender von Chemikalien.
3	Welche Anwendungsbereiche werden angesprochen?
	Industrielle und gewerbliche Verwendungen mit Umwelteintrag.
4	Werden besondere Anwendungssituationen angesprochen?
	Einsatz von Stoffen zur Lederherstellung (in Gerbereien).
5	Welche Umweltkompartimente werden abgedeckt?
	Oberflächengewässer (Süßwasser)
6	Welche Eingabeparameter sind erforderlich?
	Konzentration des Stoffes im Produkt, Stoffreduktion durch mechanische, biologische und chemische Abwasser-Reinigung, Wirksamkeit der Emissionsminderungsmaßnahmen, Abwassermenge des Unternehmens, Abwassermenge des Vorfluters, Auszehrgrad, PNEC-Wert
7	In welcher Form geschieht die Ergebnisdarstellung?
	Angabe der maximal zulässigen Einsatzmenge/Tag und der Einsatzmenge/Tag bei seltener Anwendung
8	Komplexität des Instrumentes
	Mittlere Komplexität.
9	Möglichkeit der direkten Übertragung auf andere Branchen
	Übertragbarkeit ist gegeben.
10	Möglichkeit der Übertragbarkeit nach Anpassung
	Übertragbarkeit ist gegeben, ggf. ist die Terminologie anzupassen (z.B. „Auszehrgrad“).
11	Inhaltliche Richtigkeit der zugrundeliegenden Formeln
	Den Berechnungen liegt EUSES zugrunde. Die Angaben zu Abbaugraden in den einzelnen Stufen der Kläranlagen sind durch SimpleTreat-Modellierungen zu ersetzen. Die Definition „seltene Verwendung“ ist an die Vorgaben aus der ECHA Leitlinie anzupassen.
12	Berücksichtigung von Obergrenzen für die expositionsbestimmenden Größen
	Keine Obergrenzen.
13	Berücksichtigung von Auswirkungen auf andere Umweltkompartimente
	Andere Umweltkompartimente werden nicht berücksichtigt.
14	Eignung des Instrumentes für die vorgesehene Nutzergruppe
	Für die Zielgruppe (Formulierer und Gerber) erfahrungsgemäß geeignet.
15	Besondere Stärken und Schwächen des Instrumentes, auch im Vergleich

	Vorteil: Anwenderfreundliche Struktur. Nachteil: Original-Vorgaben werden durch Eingabe eigener Werte überschrieben.
16	Weiterentwicklungsbedarf / -möglichkeiten
	Einbezug von Obergrenzen. Dokumentation der Vorgabewerte.

Tab. 15: Profil: Eigenschaften der REACH Arbeitshilfe Abwasser des Verbandes TEGEWA

4 Erforderliche Parameter und bestehende Eigenentwicklungen

Bereits jetzt liegen erste Eigenentwicklungen von Scaling-Instrumenten durch wirtschaftliche Akteure vor. Im jetzt folgenden Kapitel werden die in den bestehenden Instrumenten eingesetzten Parameter dargestellt, kommentiert und Empfehlungen gegeben, welche Parameter in Scaling-Instrumenten zu berücksichtigen sind und welche Mindestanforderungen erfüllt werden müssen, damit das Scaling nicht zu Fehlbeurteilungen führt. Es werden außerdem Hinweise auf sinnvolle Ergänzungen für eine Weiterentwicklung von Scaling-Instrumenten gegeben.

In den sieben untersuchten Instrumenten werden insgesamt 19 verschiedene Parameter eingesetzt. In der folgenden Tabelle werden sie genannt, mit einem Hinweis, in welchen der im Kapitel 3 beschriebenen Instrumente sie verwendet werden.

Einige der Parameter sind miteinander verwandt. So beziehen sich Begriffe wie Fixier-, Aufzieh- bzw. Auszehrgrad letztendlich alle auf den Anteil der Einsatzmenge eines Stoffes, der auf oder im bearbeiteten Material verbleibt. Verwandte Parameter sind in der Tabelle in sieben Gruppen zusammengestellt. Bei Bedarf erfolgt in der Tabelle auch eine kurze Kommentierung der einzelnen Parameter.

Tab. 16: Veränderbare Größen, die in den Scaling-Instrumenten genannt werden

	Parameter	Kommentierung
1	Konzentration des Stoffes im Produkt	Dieser Wert kann nur durch den Formulierer verändert werden, nicht durch einen Anwender der Chemikalien
2	Verbrauch eines Stoffes im Prozess	
2.1	Fixiergrad	In verschiedenen Branchen werden unterschiedliche Begriffe für denselben Inhalt eingesetzt.
	Auszehrgrad	
2.2	Anteil der Einsatzmenge, der freigesetzt wird	Dieser Wert ergibt sich aus der Gesamtmenge abzüglich des Wertes aus 2.1
3	Einsatzmenge und Anzahl Einsatz-Tage/Jahr	
3.1	Einsatzmenge / Tag	Aus diesen beiden Größen wird die Größe 3.1. berechnet.
3.2	Einsatzmenge / Jahr Einsatztage / Jahr	
4	Wirksamkeit betrieblicher Risikominderungsmaßnahmen	
5	Stoffverbleib in der kommunalen Kläranlage	
5.1	Eliminierungsgrad in der Kläranlage / Emissionsverringerung in der kommunalen Kläranlage / Stoffreduktion in der Kläranlage	Zusammenfassender Wert, der die Einzelprozesse verbindet, die in 5.2 angesprochen werden.
5.2	Elimination in der mechanischen Behandlung	Die Prozesse, die bei der mechanischen, biologischen und chemischen Abwasserreinigung auftreten, können in der Regel nicht getrennt mit Faktoren gekennzeichnet werden.
	Biologische Abbaubarkeit Adsorption an Klärschlamm	
6	Aufnehmende Wassermenge	
6.1	Tägliche Abwassermenge des Unternehmens	Standardannahme: 2.000 m ³ (ECHA R.16)
6.2	Kapazität (Abwasservolumen) der Kläranlage	
6.3	Volumen des Vorfluters	Präzisere Beschreibung von 6.3 (R.16: 18000 m ³ /d)
6.4	Mittlere tägliche Trockenwassermenge des Vorfluters / Mittlerer Niedrigwasserabfluss (MNQ)	
6.5	Verdünnungsfaktor im Vorfluter	Bei Standardberechnungen = 10 gesetzt
6.6	Gesamte aufnehmende Wassermenge	Summe aus 6.2 und 6.3, Standard: 20.000 m ³
7	Parameter, die sich auf die ökotoxischen Eigenschaften der Stoffe beziehen	
	PNEC aquatisch	Stoffgröße, nicht skalierbar.

4.1 Obergrenzen für mögliche Eingabewerte

Bei den meisten Parametern ist es sinnvoll, in der Berechnung Obergrenzen vorzugeben, um Rechenfehler zu vermeiden. Vorschläge für diese Begrenzungen werden in der letzten Spalte der nachfolgenden Tabelle gemacht.

Tab. 17: Eingabe-Obergrenzen für veränderbare Größen in Scaling-Instrumenten

Parameter		Vorschlag Obergrenze
1	Konzentration des Stoffes im Produkt	100%
2	Verbrauch eines Stoffes im Prozess	
	Fixiergrad	100%
	Auszehrgrad	100%
	Anteil der Einsatzmenge, der freigesetzt wird	100%
3	Einsatzmenge und Anzahl Einsatz-Tage/Jahr	
	Einsatztage / Jahr	365
	Einsatzmenge / Tag	-
	Einsatzmenge / Jahr	-
4	Wirksamkeit betrieblicher Risikominderungsmaßnahmen	99,5%
5	Stoffverbleib in der kommunalen Kläranlage	
	Eliminierungsgrad in der Kläranlage / Emissionsverringern in der kommunalen Kläranlage / Stoffreduktion in der Kläranlage	100%
	Elimination in der mechanischen Behandlung	100%
	Biologische Abbaubarkeit	100%
	Adsorption an Klärschlamm	100%
6	Aufnehmende Wassermenge	
	Tägliche Abwassermenge des Unternehmens	-
	Volumenstrom der Kläranlage	20.000
	Volumenstrom des Vorfluters (Mittlerer Niedrigwasserabfluss (MNQ))	2.000.000 m ³
	Verdünnungsfaktor im Vorfluter	1000
	Gesamte aufnehmende Wassermenge	2.000.000 m ³

Bei der Berechnung der lokalen Konzentration im Vorfluter soll gemäß der ECHA Leitlinie R.16 der Verdünnungsfaktor einen Wert von 1.000 nicht übersteigen (Standardwert: 10) (ECHA R.16, chap. 16.6.6.2, S.62). Hieraus ergibt sich ein Maximalwert für den Volumenstrom des Vorfluters von 2 Mio. m³ /Tag (Standardannahme: Kläranlagen Abwasservolumen 2.000 m³/Tag).

Bei den Risikominderungsmaßnahmen schlagen wir vor, für die Wirksamkeit einen Wert von maximal 99,5% vorzugeben. Sollten in Einzelfällen nachgewiesenermaßen höhere Wirksamkeiten erreicht werden, kann der Wert verändert werden (z.B. auf 99,9%).

Die Einsatzmengen und der Bezugswert $PNEC_{aquatisch}$ sind vom Unternehmen bzw. vom Stoff abhängig. Hier können keine Vorschläge für Obergrenzen gemacht werden.

Die anderen in der Tabelle vorgeschlagenen Obergrenzen ergeben sich direkt aus dem jeweiligen Parameter. So kann die vom Gewebe aufgenommene Menge eines Stoffes nicht größer sein als die im Prozess

befindliche, eingesetzte Menge. Der Aufziehgrad, der angibt, welcher Anteil der eingesetzten Menge auf dem Gewebe verbleibt, liegt daher bei maximal 100%.

4.2 Verwendung einheitlicher Parameter

Die Verwendung unterschiedlicher Parameter für dieselbe expositionsbestimmende Größe erschwert das Verständnis und die Anwendung von Scaling-Instrumenten. Daher schlagen wir vor, die in der nachfolgenden Tabelle genannten Parameter in Scaling-Instrumenten für die Umweltexposition, Kompartiment Oberflächen-Süßwasser, zu verwenden. Hierbei ist allerdings zu beachten, dass es sinnvoll sein kann, dass Lieferanten die Scaling-Hilfen an die in ihrer Branche übliche Terminologie anpassen (z.B. Ersatz der Beschreibung „Verbrauch des Stoffes im Prozess“ durch die Worte „Fixiergrad“ oder „Auszehrgrad“).

Die vorgeschlagenen Obergrenzen entsprechen den Werten in der vorhergehenden Tabelle. Da die Eingabe von „100%“ bei einigen Größen dazu führen würde, dass keine Rechnungen mehr stattfinden (Teilung durch 0 ist nicht zulässig), ist der Wert „100%“ hier durch 99,9% ersetzt worden.

Tab. 18: Einheitliche Bezeichnungen für Eingabe-Größen in Scaling-Hilfen

	Parameter	Einheit, ggf. Obergrenze
1	Konzentration des Stoffes im Produkt	100%
2	Verbrauch des Stoffes im Prozess (Fixiergrad, Auszehrgrad)	99,9%
3	Einsatzmenge / Tag	- kg
4	Wirksamkeit betrieblicher Risikominderungsmaßnahmen	99,5%
5	Stoffreduktion in der Kläranlage	99,9%
6	Volumenstrom der Kläranlage in Kubikmeter/Tag	-, Kubikmeter/Tag (m3/Tag)
7	Volumenstrom des Vorfluters (ohne den Kläranlagenzufluss). Er wird angegeben als mittlerer Niedrigwasserabfluss (MNQ) des Vorfluters.	Max. 2.000.000 m3/Tag

Bei allen hier genannten Parametern kann davon ausgegangen werden, dass zumindest in einem bestimmten Umfang ein linearer Zusammenhang zwischen dem Parameter und der später zu erwartenden Umweltkonzentration gegeben ist. In den bisher verfügbaren umweltbezogenen Scaling-Instrumenten werden keine Parameter verwendet, die nicht-linear sind (z.B. Prozesstemperatur und deren Einfluss auf den Fixiergrad).

Bei genauer Kenntnis des Zusammenhanges zwischen Einflussgröße und Emission/Exposition könnten auch diese Parameter in eine Scaling-Hilfe aufgenommen werden (siehe Kapitel Weiterentwicklungsbedarf).

4.3 Mindestanforderungen an Scaling-Instrumente

Aus der Untersuchung der bestehenden Scaling-Instrumente können die folgenden Mindestanforderungen abgeleitet werden, die an solche Werkzeuge zu stellen sind:

4.3.1 Inhaltliche Richtigkeit der zugrundeliegenden Formeln und Annahmen

Die Scaling-Instrumente basieren letztlich auf Modellen zur umweltbezogenen Expositionsabschätzung. Diese Modelle sollten inhaltlich übereinstimmen mit den hierzu veröffentlichten Leitlinien (ECHA Guidances on Information Requirements and Chemical Safety Assessment, Part R.16). Das eingesetzte Modell sollte genannt werden. In der Regel handelt es sich um EUSES.

4.3.2 Verständlichkeit des Instrumentes bezogen auf die Zielgruppe

Die bestehenden Scaling-Instrumente unterscheiden sich erheblich in Umfang und Verständlichkeit für Nicht-Experten. Das komplizierteste Instrument stellt der ES-Modifier dar. Er erfordert zumindest grundlegende Kenntnisse in der Umweltexpositionsabschätzung. Diese Kenntnisse werden bei den meisten nachgeschalteten Anwendern von Chemikalien nicht vorhanden sein.

Am einfachsten zu verwenden sind Tabellen, in denen für einen Parameter Wertebereiche vorgegeben werden (wie in der Scaling-Hilfe für die Galvanik, Instrument Nr. 3).

Wenn mehrere expositionsbestimmende Größen verändert werden können, stellen übersichtlich gestaltete Tabellen-Kalkulationsblätter die einfachste Möglichkeit dar.

Die Verständlichkeit des Instrumentes für die jeweilige Zielgruppe sollte durch Erprobung mit einigen Test-Unternehmen überprüft und sichergestellt werden.

4.3.3 Eindeutige Kennzeichnung von Obergrenzen für das Scaling

Wenn Tabellen-Kalkulationsblätter als Scaling-Hilfen angeboten werden, sind für die möglichen Eingabewerte Obergrenzen einzuziehen. Wenn dies nicht der Fall ist, können zum einen leicht Rechenfehler passieren. Zum anderen kann der Bereich verlassen werden, in dem eine lineare Abhängigkeit zwischen der expositionsbestimmenden Größe und der Exposition besteht. Scaling führt dann zu Falscheinschätzungen.

4.3.4 Unterstützung der Anwender durch Beispiele und Hintergrund-Informationen

Scaling ist nicht selbsterklärend. Scaling-Instrumente sollten daher ausreichend erklärt werden. Wir empfehlen darüber hinaus jeweils zumindest ein Beispiel zur Verfügung zu stellen, dass die Anwendung verdeutlicht.

In den Hintergrundinformationen sollte auch erläutert werden, welche Optionen bestehen, wenn das Scaling ergibt, dass die Verwendung nicht abgedeckt ist.

4.4 Weiterentwicklungsbedarf und -möglichkeiten

Es gibt eine Reihe von Gesichtspunkten der umweltbezogenen Risikoabschätzung, die in den bislang vorliegenden Scaling-Instrumenten nicht oder nur selten berücksichtigt werden:

1. Es stehen überwiegend Scaling-Hilfen für Oberflächengewässer (Süßwasser) zur Verfügung. Weitere Umweltkompartimente (Belebtschlamm-Mikroorganismen, marine Ökosysteme und das dazugehörige Sediment, Luft, Boden, etc.) werden in einfach anwendbaren Instrumenten noch nicht abgebildet. Hier besteht Weiterentwicklungsbedarf.
2. In den Arbeitshilfen sind Eingabemöglichkeiten für jeweils eine Risikomanagement-Maßnahme vorhanden. Es sollte an Beispielen dargestellt werden, wie Scaling beim Vorliegen mehrerer Risikomanagement-Maßnahmen durchgeführt werden kann
3. Derzeit gibt es keine Scaling-Hilfestellung für Gemische, falls mehrere Stoffe risikobestimmend sind und unterschiedliche Risikomanagement-Maßnahmen erforderlich werden.
4. Durch das Einbeziehen von Auswahltabellen mit fest eingestellten Wertetafeln bei nicht-linearen Abhängigkeiten könnte der Anwendungsbereich des Scalings sinnvoll ausgedehnt werden.
5. Bisher werden in Scaling-Hilfen keine Expositions-Messwerte genutzt. Hier bestehen wahrscheinlich wichtige Weiterentwicklungsmöglichkeiten.
6. Die verfügbaren Instrumente sind ausgerichtet auf organische Stoffe. Besonderheiten bei Anorganika, Metallen, besonderen Stoffgruppen (z.B. Tensiden) werden noch nicht abgebildet. Hier können weitere expositionsbestimmende Größen in das Scaling aufgenommen werden (z.B. Bioverfügbarkeit in Abhängigkeit vom pH-Wert etc.).

5 Die Handlungsanleitung zum Scaling

Bislang fehlte eine Handlungsanleitung zum Scaling für nachgeschaltete Anwender. Unter Nutzung der in den vorherigen Kapiteln dargestellten Informationen und Erfahrungen ist im Forschungsprojekt eine solche Anleitung erarbeitet worden.

Die Handlungsanleitung ist in der gewählten Sprache ausgerichtet auf kleine und mittlere Unternehmen, die keine oder wenig Erfahrung mit der Expositionsbeurteilung haben. Sie unterstützt aber auch Registranten und Formulierer, die ihren Kunden Scaling-Hilfen in den Expositionsszenarien zur Verfügung stellen wollen.

Ein wesentlicher Bestandteil der Handlungsanleitung ist eine überarbeitete und erweiterte Fassung des im Kapitel 3.6 beschriebenen Tabellenkalkulationsblattes REACH Scale Umwelt.

Die Handlungsanleitung hat folgende Struktur:

- Einführung für Anwender: Warum Scaling?
- Wie geht Scaling?
- Beispiele.
- Das Muster-Kalkulationsblatt REACH Scale Umwelt.
- Hinweise für Registranten und Formulierer.
- Eine Formatvorlage, die die Erstellung einer produktspezifischen Scaling-Hilfe erleichtert („REACH_Scale_Umwelt_Vorlage“).
- Ergänzende Informationen zum Scaling.

Die Handlungsanleitung und das Tabellenkalkulationsblatt REACH Scale Umwelt liegen als eigenständige Dokumente vor. In diesem Bericht wird auf sie in der Anlage 3 hingewiesen.

In der Handlungsanleitung wird (in verkürzter Form) mit den Beispielen gearbeitet, die im folgenden Kapitel 6 dargestellt werden.

Handlungsanleitung zum Scaling: siehe Anlage 3 bzw. [# \(Link zum Dokument „Leitfaden“\)](#)

6 Durchführung des Scalings für 3 Branchen mit Ergebnisdokumentation

In diesem Kapitel wird für drei Branchen ein umweltbezogenes Scaling dokumentiert. Die ausgewählten Anwendungssituationen unterscheiden sich in ihren expositionsbestimmenden Größen. Anwendungsfelder sind die Galvanik, die Lederherstellung und die Textilveredlung.

In den drei Beispielen werden drei Scaling-Instrumente eingesetzt, die sich in ihrem Nutzerkreis unterscheiden und die drei im Arbeitsschritt 1 genannten Anwender ansprechen (Registrierer, Formulierer und Anwender der Chemikalien).

Im Galvanik-Beispiel wird eine Tabelle mit vorgegebenen Werten verwendet. Dieses Instrument ist für Anwender von Chemikalien geeignet, bei denen nur ein Parameter verändert wird (der Fixiergrad spielt hier keine Rolle).

Im Textilveredlungsbeispiel wird ein Tabellen-Kalkulationsblatt verwendet. Es ermöglicht die Veränderung einer begrenzten Parameteranzahl. Es ist daher besonders für Anwender von Chemikalien geeignet. An diesem Beispiel wird darüber hinaus gezeigt, wie ein Lieferant ein vorgegebenes allgemeines Format einer Scaling-Hilfe nutzen kann, um ein produktspezifisches Instrument für seinen Kunden auszuarbeiten.

Im Leder-Beispiel wird ein Tabellen-Kalkulationsblatt eingesetzt, das auch die Veränderung der Stoffkonzentration und die Wahl eines anderen PNEC-Wertes im Produkt erlaubt. Es ist daher besonders geeignet für Formulierer, die Gemische entwickeln und auf den Markt bringen.

In den folgenden drei Unterkapiteln werden diese Beispiele ausgeführt. Die Beispiele sind einheitlich strukturiert:

- Ausgangspunkt für alle Beispiele ist die Situation des Anwenders in der Praxis. Der Anwender erhält ein erweitertes Sicherheitsdatenblatt mit einem Expositionsszenario. Im Expositionsszenario werden Hinweise zum Scaling gegeben. Dargestellt werden die Teile des Expositionsszenarios, die die Scaling-Informationen und die expositionsbestimmenden Größen enthalten.
- Wir dokumentieren die Annahmen zu den expositionsbestimmenden Größen durch den Registrierer und das sich hieraus ergebende Ergebnis der Risikobeschreibung.
- Wir beschreiben die tatsächliche Situation beim nachgeschalteten Anwender. Dies bezieht sich auf die Größen, für die ein Scaling vorgeschlagen wird.
- Wir beschreiben die erforderlichen Arbeitsschritte zur Umsetzung der im Expositionsszenario gegebenen Scaling-Empfehlungen und die Ergebnisse. Hierbei wenden wir die Vorgehensweise an, die in der Handlungshilfe empfohlen wird. Es können im Einzel-

fall mehrere Durchläufe beim Scaling erforderlich sein, bis eine sichere Verwendung nachgewiesen ist.

- Im zweiten Beispiel, der Textilveredlung, beschreiben wir als erstes, wie der Lieferant eine produktspezifische Scaling-Hilfe ausarbeiten kann. Anschließend zeigen wir die Anwendung der Hilfe durch den nachgeschalteten Anwender (entsprechend den Beispielen 1 und 3).

Durch die Ausarbeitung der Beispiele wird die Umsetzung der Handlungsleitung in der Praxis gezeigt.

6.1 Scaling-Beispiel Galvanik

7. Charakterisierung der Verwendung und des Stoffes, auf den sich das Expositionsszenario bezieht.

Für die galvanische Beschichtung von Werkstoffen werden in wässrigen Elektrolyten organische Verbindungen als Prozesschemikalien eingesetzt. Im Beispiel handelt es sich um ein Alkylsulfonat (Kettenlänge C10-18, Natriumsalz), das zur Senkung der Oberflächenspannung zugesetzt wird.

Das Alkylsulfonat wird nicht durch Reaktionen verbraucht. Allerdings wird ein Teil des Elektrolyten bei den Tauchvorgängen in die Folgebäder verschleppt und ins Abwasser eingetragen. Um diesen Verlust auszugleichen, wird kontinuierlich Alkylsulfonat nachdosiert. In dem in der Galvanik eingesetzten Produkt ist Alkylsulfonat in einer Konzentration von 50% enthalten.

Das verwendete Alkylsulfonat ist biologisch leicht abbaubar. Es hat einen niedrigen Dampfdruck (5 Pascal bei 20 °C) und besitzt nicht die Tendenz zur Bioakkumulation. Der $PNEC_{aquatisch, Süßwasser}$ beträgt 8 Mikrogramm/l.

Die SimpleTreat Modellierung ergibt, dass der Stoff zum Großteil in der Kläranlage abgebaut wird. In den Vorfluter gelangen lediglich 13% der in die Kläranlage eingetragenen Stoffmenge.

8. Expositionsbestimmende Größen und Ergebnis der Risikobeschreibung durch den Registrant

Für die Expositionsabschätzung und die Risikobeschreibung geht der Registrant von folgenden Werten aus:

- Eingesetzte Menge des Produktes/Tag: 2,46 kg

REACH Handlungsanleitung Scaling

- Konzentration von Alkylsulfonat im Produkt: 50%
- Emissionsverringerung in der Kläranlage: 87%
- Wirksamkeit betrieblicher Teilstrom-Behandlungsmaßnahmen: 0%
- Volumenstrom der Kläranlage: 2.000 m³/Tag
- Volumenstrom des Vorfluters: 20.000 m³ / Tag (mittlerer Niedrigwasserabfluss (MNQ))
- PNEC_{aquatisch, Süßwasser} 8 Mikrogramm/l.
- Resultierender Risikoquotient: 0,99

Ergebnis: Die Verwendung ist sicher.

Hinweis: In der Praxis sollte der Risikoquotient möglichst einen Wert deutlich unter 1 aufweisen, da in einem Unternehmen dieselben Stoffe in mehreren Produkten verwendet werden können. Dann ergibt sich eine höhere Gesamtbelastung durch den Stoff für die Umwelt.

Bei den Kunden können sich vor allem die Vorfluter-Volumina wesentlich unterscheiden. Daher erstellt der Registrant als Scaling-Hilfe eine Tabelle. In ihr werden für mehrere Vorfluter-Volumina die maximal möglichen täglichen Einsatzmengen genannt.

Hinweis: Bei Galvanisierungsprozessen können auch die Form und Anzahl der behandelten Teile und die Anzahl der gefahrenen Wareenträger einen Einfluss auf die verschleppte Stoffmenge haben. Der nachgeschaltete Anwender hat die Aufgabe, zu überprüfen, ob die von ihm vorgenommene Verwendung (ggf. mit diesen Besonderheiten) vom Expositionsszenario seines Lieferanten abgedeckt wird.

9. Auszüge aus dem Expositionsszenario: skalierbare Größen und Scaling-Hilfe

3 Anwendungsbedingungen	
Maximal mögliche Einsatzmenge	2,46 kg / Tag zum Ausgleich von Elektrolytverlusten
Örtliche Voraussetzungen	Vorfluter-Volumenstrom: 20.000 m³/Tag (mittlerer Niedrigwasserabfluss) Indirekteinleiter bei einer Kapazität des Klärwerks von mindestens 2.000 m³/Tag

4 Hilfestellung zur Überprüfung, ob die eigene Verwendung abgedeckt ist

Vorfluter- volumen- strom (m ³ /Tag)	1.000	5.000	10.000	20.000	40.000	80.000	160.000	200.000
Max. Einsatz- menge / Tag (in kg/Tag)	0,12	0,6	1,23	2,46	4,9	9,8	19,7	24,6

10. Situation des Anwenders bezogen auf die skalierbaren Größen

Der Kunde leitet einen Galvanikbetrieb in Freiburg. Er ist Anwender von Chemikalien und setzt täglich 9 kg des Produktes ein. Das Unternehmen ist ein Indirekteinleiter. Die Kläranlage hat einen Volumenstrom von 2.000 m³/Tag. Der Vorfluter der Kläranlage hat einen Volumenstrom (mittlerer Niedrigwasserabfluss (MNQ)) von 84.000 m³/Tag.

11. Arbeitsschritte, um ein Scaling durchzuführen, und Ergebnisse

Der Kunde vergleicht seine Einsatzmenge und sein Vorflutervolumen mit den Werten in der Tabelle. Das **Vorflutervolumen** liegt knapp über dem in der Tabelle genannten Wert von 80.000 m³/Tag. Laut Tabelle ist hier eine Einsatzmenge von 9,8 kg/Tag vertretbar. Der Kunde setzt eine geringere Menge ein.

Es ist zu erwarten, dass die Anwendung des Kunden unter Umweltsichtspunkten sicher ist. (Allerdings kann es dennoch zu problematischen Umweltbelastungen kommen, wenn mehrere Unternehmen derselben Branche in dieselbe Kläranlage bzw. auf lokaler Ebene in denselben Vorfluter einleiten).

6.2 Scaling Beispiel Textilveredlung

1. Charakterisierung der Verwendung und des Stoffes, auf den sich das Expositionsszenario bezieht.

Für die Färbung von Baumwollgewebe werden u.a. Metallkomplexfarbstoffe eingesetzt. In vielen Fällen bringen Stoffhersteller ihre Stoffe auch selber als Gemische auf den Markt.

Im diesem Beispiel produziert der Registrant den Metallkomplexfarbstoff (Natriumsalz einer Nitronaphthalin-Verbindung) und vertreibt ihn als Bestandteil seines Gemisches Cuprasol Blau 294 an Textilveredler.

Der Metallkomplexfarbstoff erfüllt nicht die Testkriterien für inhärente biologische Abbaubarkeit. Er hat einen niedrigen Dampfdruck (1 Pascal) und ist nicht bioakkumulativ. Der $PNEC_{\text{aquatisch, Süßwasser}}$ beträgt 2 Mikrogramm/l.

Die SimpleTreat Modellierung ergibt, dass der Stoff in der Kläranlage nicht biologisch abgebaut wird, nicht an den Klärschlamm adsorbiert und sich auch nicht in die Luft verflüchtigt. Daher wird er praktisch vollständig in den Vorfluter eingetragen.

Da die Einsatzbedingungen für Farbstoffe in der Textilveredlung stark von dem zu färbenden Substrat, den Prozessbedingungen und den Unternehmensbedingungen vor Ort abhängen, führt der Registrant zunächst eine Stoffsicherheitsbeurteilung unter Verwendung von Standardwerten für die expositionsbestimmenden Größen durch.

Er möchte seinen Kunden, klein- und mittelständischen Textilveredlern, eine leicht anzuwendende Scaling-Hilfe zur Verfügung stellen. Um sie zu erstellen, nutzt er die Formatvorlage „REACH_Scale_Umwelt_Vorlage“.

2. Expositionsbestimmende Größen und Ergebnis der Risikobeschreibung durch den Registrant

Für die Expositionsabschätzung und die Risikobeschreibung geht der Registrant bei dieser Verwendung von folgenden Werten aus:

- Konzentration Metallkomplexfarbstoff im Gemisch: 70%
- Fixiergrad bei der Baumwollfärbung: 90%
- Wirksamkeit betrieblicher Teilstrom-Behandlungsmaßnahme (katalytische Oxidation des Farbstoffes): 99%
- Emissionsverringerung in der Kläranlage: 0%
- Volumenstrom der Kläranlage: 20.000 m³/Tag
- Volumenstrom Vorfluter: 180.000 m³/Tag (mittlerer Niedrigwasserabfluss (MNQ))
- $PNEC_{\text{aquatisch, Süßwasser}}$ 2 Mikrogramm/l.
- Risikoquotient $PEC/PNEC$: 0,99

Hieraus ergibt sich eine maximal erlaubte tägliche Einsatzmenge des Farbstoffgemisches Cuprasol Blau 294 von 570 kg/Tag.

Da mehrere expositionsbestimmende Größen veränderbar sind, entwickelt der Registrant als Scaling-Hilfe ein Tabellen-

REACH Handlungsanleitung Scaling

Kalkulationsblatt. Es ermöglicht die direkte Eingabe mehrerer Parameter.

3a. Erstellung der Scaling-Hilfe durch den Registranten unter Nutzung einer Vorlage

Der Registrant setzt die Formatvorlage „REACH_Scale_Umwelt_Vorlage“ ein (MUSTER, hier richtigen Link bitte einfügen, sobald verfügbar. http://REACH_Scale_Umwelt_Vorlage).

Im Registerblatt „4_Voreinstellungen“ trägt er den Produktnamen und die von ihm getroffenen Angaben zu den expositionsbestimmenden Größen ein (s. folgende Abbildung).

REACH Scale		Umwelt		Wasser	
Eingabeseite für den Registrierer / Formulierer					
Bitte geben Sie für Ihr Produkt die folgenden Werte und ggf. Kommentare ein:					
Name Ihres Produktes	Cuprasol Blau 294			Beispiel	Lederplex 900
Größe	Wert	Einheit	Kommentar		
PNEC Oberflächenwasser	1	µg/Liter		2 µg/Liter	
Volumenstrom des Vorfluters (siehe Anmerkung 1)	180.000	m³/Tag		180.000 m³/Tag	
Volumenstrom der Kläranlage	20.000	m³/Tag		20.000	
Effizienz der betrieblichen Emissionsverringerung	99	% Verringerung	katalytische Oxidation	99 %	
Stoffverbrauch im Prozess (Fixierung, Auszehrung)	90	%		90 %	
Emissionsverringerung in der kommunalen Kläranlage	0	%		0 %	
Maximal mögliche Einsatzmenge (siehe Anmerkung 2)	570	kg/Tag		570 kg/Tag	
Obergrenzen Eingabewerte					
Abgabe in die Kläranlage max. (siehe Anmerkung 3)		kg		100 kg	
Aufnehmendes Wasservolumen max. (s. Anmerkung 4)	2.000.000	m³/Tag		2.000.000 m³/Tag	
Berechnungsrelevanter Inhaltsstoff des Gemisches	Metallkomplexfarbstoff				
<p>Anmerkung 1: Zur Charakterisierung wird der mittlere Niedrigwasservolumenstrom (MNQ) genommen – ein Wert, den Sie für Ihren Vorfluter bei der unteren Wasserbehörde erfahren können.</p> <p>Anmerkung 2: Bei dieser Einsatzmenge ergibt sich ein Risikoquotient (PEC/PNEC) von 0,99. Er ist das Verhältnis zwischen der erwarteten Konzentration in der Umwelt ("PEC") und der Konzentration, bei der keine schädlichen Auswirkungen des Stoffes auf Wasserorganismen zu erwarten sind ("PNEC").</p> <p>Anmerkung 3: Wenn Ihre Stoffsicherheitsbeurteilung eine kritische Eintragsmenge in die Kläranlage ergeben hat (schädliche Auswirkungen auf Klärschlammorganismen), tragen Sie diesen Wert hier ein.</p> <p>Anmerkung 4: Bei der Expositionsabschätzung kann für das Vorflutervolumen nur mit einem Wert von höchstens dem 1.000 fachen des Kläranlagenvolumens gerechnet werden. Als Voreinstellung wird im Tabellenblatt eine Obergrenze von 2.000.000 Kubikmetern/Tag gesetzt.</p>					

Die Formatvorlage erzeugt dann automatisch die produktspezifische Scaling-Hilfe im Registerblatt „2_Tabelle“ (siehe folgende Abbildung).

REACH Scale	Cuprasol Blau 294	Umwelt	Wasser
1. Die Größe Ihres Vorfluters (Volumenstrom in Kubikmeter/Tag)	180.000	m ³ /Tag	
Standard-Annahme: 180.000 m ³ /Tag			
2. Die Größe Ihrer Kläranlage (Volumenstrom in Kubikmetern/Tag):	20.000	m ³ /Tag	
Standard-Annahme: 20.000 m ³ /Tag			
3. Ihre betriebliche Emissions-Verringerung:	99,0	%	
Standard-Annahme: 99,0 % Verringerung katalytische Oxidation			
 Wieviel kg Cuprasol Blau 294 können Sie unter den beschriebenen Bedingungen (1,2,3,4) maximal einsetzen?		570 kg/Tag	
Seltene Anwendungen (weniger als 1x/Monat, kürzer als 24 Std.) sind möglich mit max.		5.700 kg/Tag	
In die Kläranlage werden abgegeben:	0,6 kg/Tag		
In das Oberflächengewässer werden abgegeben:	0,6 kg/Tag		
Falls Ihnen belastbare Daten vorliegen, können Sie auch die folgenden zwei Größen verändern:			
4. Verbrauch des Stoffes in Ihrer Anwendung (Fixierung, Auszehrung)	90,0	%	
Standard-Annahme: 90 %			
5. Emissionsverringern in der Kläranlage	0,0	%	
Standard-Annahme: 0 %			
Höchste mögliche Einsatzmenge / Tag bei Standard-Annahmen:		570 kg / Tag	

Der Registrant speichert seine Datei unter dem Namen „R_Scale_Cuprasol_Blau_294“ ab. Er löscht dann in dieser Datei das erste, das vorletzte und das letzte Registerblatt.

3b. Auszüge aus dem Expositionsszenario: skalierbare Größen und Scaling-Hilfe

In dem Expositionsszenario für den Farbstoff Cuprasol Blau 294 macht der Registranten folgende Angaben zu den skalierbaren Größen (Hinweis: die Konzentration des Metallkomplexfarbstoffes im Gemisch kann nur vom Formulierer, nicht vom Anwender verändert werden):

3 Anwendungsbedingungen	
Maximal mögliche Einsatzmenge	570 kg/Tag
Konzentration im Produkt	70%
Fixiergrad	mind. 90%
Teilstrombehandlung (Betriebliche Emissionsverringern)	Katalytische Oxidation. Verringerung Metallkomplexfarbstoff-Gehalt: mindestens 99%.
Örtliche Voraussetzungen	Volumenstrom des Vorfluters : 180.000 m ³ / Tag (mittlerer Niedrigwasserabfluss (MNQ)) Indirekteinleiter bei einer Kapazität des Klärwerks von mindestens 20.000 m ³ /Tag (Volumenstrom)
4 Hilfestellung zur Überprüfung, ob die eigene Verwendung abgedeckt ist	
Verweis auf Arbeitshilfe im Internet	Zur Überprüfung Ihrer eigenen Verwendung nutzen Sie die Scalinghilfe (MUSTER, nicht aktiv : http://www.cuprasol_Blau_294_scale.html)

4. Situation des Anwenders bezogen auf die skalierbaren Größen

Der Kunde setzt täglich 400 kg von Cuprasol Blau 294 ein. Der Fixiergrad liegt bei 60%. Der Kunde ist Indirekteinleiter. Die aufnehmende Kläranlage hat einen Volumenstrom von 40.000 m³/Tag. Der Vorfluter hat einen Volumenstrom von 260.000 m³/Tag (mittlerer Niedrigwasserabfluss, MNQ).

5. Arbeitsschritte, um ein Scaling durchzuführen, und Ergebnisse.

Der Kunde vergleicht Einsatzmenge, Fixiergrad, Wirksamkeit der Oxidation und seine Volumenströme (Kläranlage und Vorfluter) mit den Werten in der Tabelle.

Die Einsatzmenge und die Vorflutervolumina deuten auf eine niedrigere Exposition hin. Der niedrigere Fixiergrad lässt eine höhere Exposition erwarten. Zur Beurteilung des Zusammenwirkens der vier Faktoren trägt der Kunde seine Werte in das Tabellenkalkulationsblatt „Cuprasol_Blau_294“ ein (siehe nachfolgende Abbildung):

REACH Scale	Cuprasol Blau 294	Umwelt	Wasser
1. Die Größe Ihres Vorfluters (Volumenstrom in Kubikmeter/Tag)	260.000	m ³ /Tag	1,4444444444
Standard-Annahme: 180.000 m ³ /Tag			
2. Die Größe Ihrer Kläranlage (Volumenstrom in Kubikmetern/Tag):	40.000	m ³ /Tag	
Standard-Annahme: 20.000 m ³ /Tag			
3. Ihre betriebliche Emissions-Verringerung:	99,0	%	
Standard-Annahme: 99,0 % Verringerung katalytische Oxidation			
 Wieviel kg Cuprasol Blau 294 können Sie unter den beschriebenen Bedingungen (1,2,3,4) maximal einsetzen?		214 kg/Tag	
Seltene Anwendungen (weniger als 1x/Monat, kürzer als 24 Std.) sind möglich mit max.		2.137 kg/Tag	
In die Kläranlage werden abgegeben:		0,9 kg/Tag	
In das Oberflächengewässer werden abgegeben:		0,9 kg/Tag	
Falls Ihnen belastbare Daten vorliegen, können Sie auch die folgenden zwei Größen verändern:			
4. Verbrauch des Stoffes in Ihrer Anwendung (Fixierung, Auszehrung)	60,0	%	
Standard-Annahme: 90 %			
5. Emissionsverringerung in der Kläranlage	0,0	%	
Standard-Annahme: 0 %			
Höchste mögliche Einsatzmenge / Tag bei Standard-Annahmen:		570 kg / Tag	

Die Kalkulation ergibt, dass der Kunde bis zu 214 kg/Tag einsetzen kann. Damit ist die Verwendung des Veredlers nicht durch das Expositionsszenario abgedeckt. Hier ist eine Änderung der Prozessführung erforderlich, um durch eine Verbesserung des Fixiergrades eine Verringerung der Abwasserfracht zu erreichen.

6.3 Scaling Beispiel Lederherstellung

1. Charakterisierung der Verwendung und des Stoffes, auf den sich das Expositionsszenario bezieht.

Bei der Lederherstellung werden zur Haltbarmachung der Tier-Haut Gerbmittel eingesetzt. Sie reagieren mit den Proteinen der Haut und führen so zu einer Vernetzung und Erhöhung der Haltbarkeit. Einer der mengenmäßig bedeutendsten Gerbstoffe ist Glutaraldehyd.

Im Gerbprozess wird Glutaraldehyd zu einem hohen Anteil durch Reaktion mit der Tierhaut verbraucht. In der Gerberei wird außerdem das Prozessabwasser aus dem Gerbeschritt in der Regel mit dem alkalischen Abwasser aus dem vorgelagerten Prozessschritt, der Enthaarung (Äscherung) vereinigt. Im Abwasser aus der Äscherei ist in hohen Konzentrationen Eiweiß enthalten. Die Restmenge Glutaraldehyd aus dem Gerbschritt reagiert zu einem großen Teil mit diesen Eiweißmengen.

Glutaraldehyd ist biologisch gut abbaubar. Es hat einen niedrigen Dampfdruck (10 Pascal bei 20 °C) und ist nicht bioakkumulierbar. Der $PNEC_{aquatisch, Süßwasser}$ beträgt 1,25 Mikrogramm/l.

Die SimpleTreat Modellierung ergibt, dass der Stoff zum Großteil in der Kläranlage abgebaut wird. In den Vorfluter gelangen lediglich 12% der in die Kläranlage eingetragenen Stoffmenge.

2. Expositionsbestimmende Größen und Ergebnis der Risikobeschreibung durch den Registrant

Der Registrant stellt Glutaraldehyd für unterschiedliche Verwendungen her. Seine Kunden sind in der Regel nicht Anwender von Chemikalien, sondern Formulierer. Ein Teil des Glutaraldehyd wird an die Hersteller von Gerbmitteln verkauft. Für die Expositionsabschätzung und die Risikobeschreibung geht der Registrant bei dieser Verwendung von folgenden Werten aus:

- Konzentration Glutaraldehyd im Gemisch: 100% (je nach Formulierer sind die Konzentrationen von Glutaraldehyd im gebrauchsfertigen Gemisch sehr unterschiedlich. Der Registrant geht in seinen Berechnungen davon aus, dass Glutaraldehyd als Reinstoff eingesetzt wird. Die tatsächliche Konzentration im Produkt wird vom Kunden einberechnet).
- Auszehrgrad beim Gerbprozess: 90%

- Wirksamkeit betrieblicher Teilstrom-Behandlungsmaßnahme (Vereinigung mit Abwasser aus der Äscherei): 95%
- Emissionsverringierung in der Kläranlage: 88%¹³
- Volumenstrom der Kläranlage: 20.000 m³/Tag
- Vorfluter-Volumenstrom: 180.000 m³ / Tag (mittlerer Niedrigwasserabfluss)
- PNECaquatisch, Süßwasser 1,25 Mikrogramm/l.
- Risikoquotient PEC/PNEC: 0,99

Hieraus ergibt sich eine maximal erlaubte tägliche Einsatzmenge an Glutaraldehyd von 417 kg/Tag.

Je nach Formulier können die Konzentrationen von Glutaraldehyd in den Gerbmitteln sehr unterschiedlich sein. Außerdem können sich bei den Gerbereien der Auszehrgrad, die Wirksamkeit der betrieblichen Teilstrom-Behandlung und das Vorfluter-Volumen wesentlich von den Annahmen des Registrants unterscheiden.

Da mehrere expositionsbestimmende Größen veränderbar sind, nutzt der Registrant als Scaling-Hilfe ein Tabellen-Kalkulationsblatt, das von den Lederhilfsmittelherstellern auf Verbandsebene erstellt wurde. Es ermöglicht die direkte Eingabe mehrerer Parameter.

3. Auszüge aus dem Expositionsszenario: skalierbare Größen und Scaling-Hilfe

3 Anwendungsbedingungen	
Maximal mögliche Einsatzmenge	417 kg/Tag
Konzentration im Produkt	100%
Auszehrgrad	mind. 90%
Teilstrombehandlung (Betriebliche Emissionsminderung)	Zusammenführung des Prozessabwassers mit dem Abwasser aus der Äscherei. Glutaraldehydreduktion: mindestens 95%.
Örtliche Voraussetzungen	Vorfluter-Volumenstrom: 180.000 m ³ / Tag (mittlerer Niedrigwasserabfluss (MNQ)) Indirekteinleiter bei einem Volumenstrom des Klärwerks von mindestens 20.000 m ³ /Tag
4 Hilfestellung zur Überprüfung, ob die eigene Verwendung abgedeckt ist	

¹³ Diese Verringerung kann durch mechanische Prozesse, durch Abbau, durch Adsorption an den Klärschlamm oder durch Verflüchtigung des Stoffes in die Luft bedingt sein.

Verweis auf Arbeitshilfe im Internet	Um Ihnen die Überprüfung Ihrer Verwendung zu erleichtern, nutzen Sie die Scalinghilfe (MUSTER, nicht aktiv: http://www.leder.abwasser.scale.html)
---	---

Berechnung der maximal möglichen täglichen Einsatzmenge eines Lederhilfsmittels nach REACH			
Handelsname des Lederhilfsmittels		Gerbmittel auf Basis von Glutaraldehyd	
Diese Angaben passen Sie an Ihr Produkt an		Diese Angaben sind Ihre spezifischen Unternehmensdaten.	
Gehalt der Leitsubstanz in der Formulierung	100,0	%	Emissionsminderung durch prozess-integrierte Maßnahmen
			95,0
			%
Stoffmengenreduktion durch die Kläranlage	88,0	%	tägliche Abwassermenge der Kläranlage
			20.000
			m ³ /d
			mittlere tägliche Trockenwetterwassermenge des Gewässers, in welches das Abwasser direkt oder indirekt eingeleitet wird
			180.000
			m ³ /d
PNEC-Wert	1,25	µg/l	Auszehrgrad
			90,00
			%
Bei regelmäßiger Anwendung dürfen Sie in Ihrem Unternehmen täglich maximal folgende Menge des Lederhilfsmittels einsetzen, ohne abwasserseitig die Umwelt zu gefährden.			417
			kg/d
Bei seltener Anwendung (seltener als 1x / Monat, hierbei kürzer als 24 Stunden) dürfen Sie in Ihrem Unternehmen täglich folgende Menge des Lederhilfsmittels einsetzen, ohne abwasserseitig die Umwelt zu gefährden.			4.167
			kg/d

4. Situation des Anwenders bezogen auf die skalierbaren Größen

Der Kunde ist ein Formulierer, der Glutaraldehyd als Rohstoff für die Produktion des Gerbmittels Gerberol 70S, eines Gemisches, einsetzt. Für die Umweltexposition ist im Gemisch Glutaraldehyd der wesentliche Inhaltsstoff.

In Gerberol 70S ist Glutaraldehyd in einer Konzentration von 50% enthalten. Der Formulierer möchte in seinem Expositionsszenario angeben, welche Menge Gerberol 70S maximal von seinem Kunden pro Tag eingesetzt werden kann.

Beim Auszehrgrad, bei der betrieblichen Teilstrombehandlung und bei der Vorflutergröße übernimmt er die Annahmen des Registranten.

5. Arbeitsschritte, um ein Scaling durchzuführen, und Ergebnisse.

Der Formulierer trägt im Tabellen-Kalkulationsblatt für die Konzentration im Produkt 50% ein. Da die anderen Parameter unverändert

bleiben, ergibt sich für Gerberol 70S eine maximal mögliche Einsatzmenge von 834 kg/Tag.

Er teilt im Sicherheitsdatenblatt von Gerberol 70S diese Menge und die zugehörigen Werte der anderen expositionsbestimmenden Größen dem Gerber mit. Damit der Gerber unternehmensspezifische Werte überprüfen kann, stellt der Formulierer dem Gerber auch das Tabellenkalkulationsblatt zur Verfügung – mit dem Wert „50%“ für die Konzentration von Glutaraldehyd im Produkt Gerberol 70S.

7 Literatur zum Thema Scaling

Zur Durchführung der Stoffsicherheitsbeurteilung und zu den Pflichten nachgeschalteter Anwender sind von der europäischen Chemikalienagentur umfangreiche Leitlinien herausgegeben worden. In ihnen wird an mehreren Stellen auf das Thema „Scaling“ eingegangen.

- Die ECHA Leitlinie für nachgeschaltete Anwender beschreibt im Kapitel 5.2.5 zunächst die wichtigsten Grundzüge des Scalings und geht hier auch darauf ein, unter welchen Bedingungen Scaling nicht möglich ist.
(http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/du_de.pdf?vers=29_01_08)
- Das daran anschließende Kapitel 5.3 enthält ein Ablaufschema, in dem die einzelnen Schritte erläutert werden, die ein nachgeschalteter Anwender bei der Überprüfung, ob seine Verwendungen durch ein Expositionsszenario abgedeckt sind, vornehmen sollte. Im Kommentar „i)“ wird dann detaillierter auf das Vorgehen beim Scaling eingegangen.
- In den ECHA Leitlinien zu den Informationsanforderungen und zur Stoffsicherheitsbeurteilung wird das umweltbezogene Scaling im Kapitel R.16.3.5 kurz angesprochen sowie in einigen weiteren Hinweisen.
(http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/information_requirements_r16_en.pdf?vers=27_05_10)
- Die ausführlichste Darstellung des Themas findet sich – eher unerwartet – im Teil G der ECHA Leitlinie zu den Informationsanforderungen und zur Stoffsicherheitsbeurteilung: Erweiterung des Sicherheitsdatenblattes. Hier werden im Anhang G-1 Methoden zum Scaling vorgestellt und Beispiele gegeben.
(http://guidance.echa.europa.eu/docs/guidance_document/information_requirements_part_g_en.pdf?vers=20_08_08)

8 Anhang

8.1 Ergänzende Informationen zum Scaling

Scaling ist unter REACH eine sehr wichtige Möglichkeit, um sicherzustellen, dass am Ort des Geschehens – beim Anwender – Verbesserungen im Umweltschutz erreicht werden. Scaling setzt beim Anwender Grundkenntnisse der Expositionsbewertung voraus. Durch den Registrant muss Scaling bei der Durchführung der Stoffsicherheitsbeurteilungen und bei der Erstellung der Expositionsszenarien mit bedacht und ausgearbeitet werden, damit der nachgeschaltete Anwender dieses Scaling auch durchführen kann.

Seit gut zwei Jahren werden auf europäischer Ebene Scaling-Instrumente entwickelt. Parallel arbeiten einzelne Hersteller an individuellen Scaling-Werkzeugen. Die Instrumente zeichnen sich durch eine sehr unterschiedliche Komplexität aus. Derzeit gibt es keine behördlich abgestimmte Handlungsempfehlung, die auf der Grundlage einer Prüfung vorhandener Konzepte Anwendern beim Scaling die erforderlichen Hilfestellungen gibt.

8.1.1 Hintergrund: REACH und Scaling

Die Thematik „Scaling“ wird im Text der REACH-Verordnung in Zusammenhang mit den Pflichten nachgeschalteter Anwender angesprochen. Zu ihren wesentlichen Verpflichtungen gehört die Überprüfung, ob ihre Verwendungsbedingungen durch die vom Lieferanten bereitgestellten Expositionsszenarien abgedeckt sind. Ist dies nicht der Fall, kann auf den nachgeschalteten Anwender die Verpflichtung zukommen, selber Stoffsicherheitsbeurteilungen durchzuführen und eigene Stoffsicherheitsberichte zu erstellen.

In der folgenden Abbildung sind die Handlungsmöglichkeiten des nachgeschalteten Anwenders, der ein erweitertes Sicherheitsdatenblatt mit Expositionsszenario erhält, in einer Übersicht dargestellt. Dem Scaling kommt im Prozess der Überprüfung, ob die eigene Verwendung abgedeckt ist, eine wichtige Bedeutung zu.

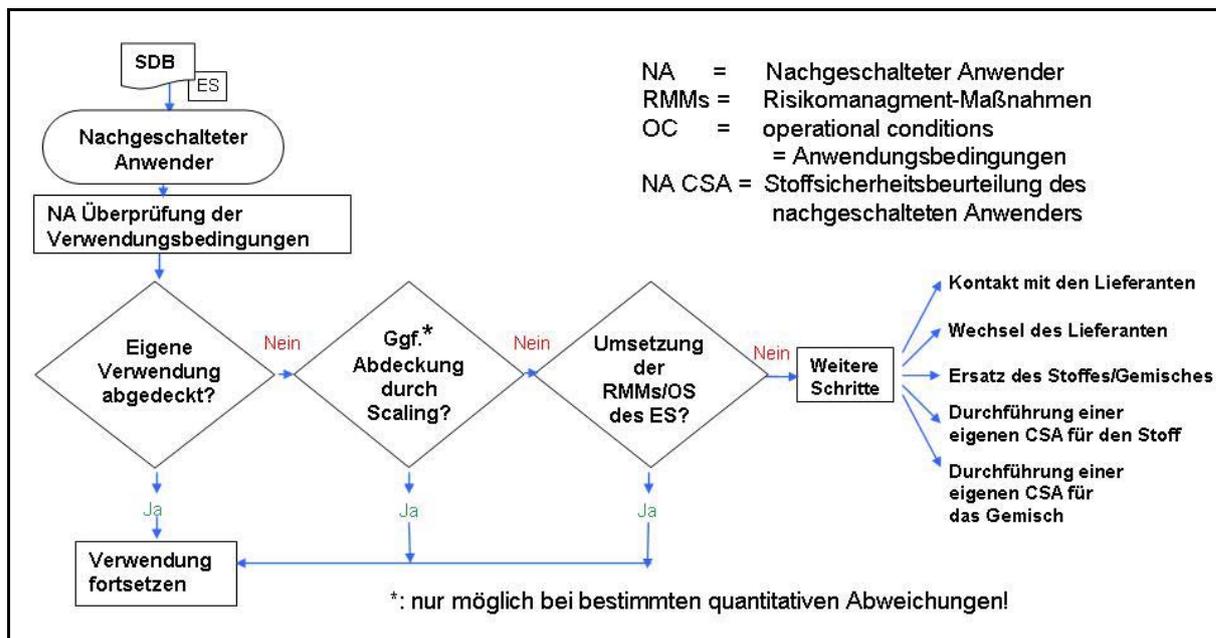


Abb. 5: Nachgeschaltete Anwender und Überprüfung ihrer Verwendungsbedingungen

Die Abbildung zeigt die Aufgaben und die Handlungsmöglichkeiten nachgeschalteter Anwender – nach Erhalt eines erweiterten Sicherheitsdatenblattes (Quelle: eigene Ausarbeitung).

Wir weisen an dieser Stelle darauf hin, dass die Möglichkeit des Scalings nur genutzt werden kann, wenn keine qualitativen Abweichungen vom Expositionsszenario vorliegen und wenn im Expositionsszenario Hilfestellungen zum Scaling gegeben werden.

Wenn die Verwendung des nachgeschalteten Anwenders vom Expositionsszenario nicht abgedeckt wird, kann er seine Prozesse an die im Expositionsszenario gemachten Bedingungen anzupassen (dies wird durch die letzte Raute in der Abbildung 2 dargestellt). D.h. z.B.: Er wendet eine zusätzliche Fällungsmaßnahme an, die im Expositionsszenario beschrieben ist, um Restgehalte eines Stoffes im Prozessabwasser zu verringern.

Wenn er dies nicht tut, hat er eine Reihe von Möglichkeiten, die in der Abbildung als „Weitere Schritte“ bezeichnet werden.

- Er kann seine Verwendung dem Lieferanten mitteilen und ihn bitten, ein Expositionsszenario zu erstellen, das seinen Verwendungsbedingungen entspricht;

- Er kann für seine Verwendung eine eigene Stoffsicherheitsbeurteilung durchführen, ein Expositionsszenario erstellen und dieses ggf. Ihren Kunden mitteilen;
- Er kann zu einem anderen Lieferanten wechseln, der in seinen erweiterten Sicherheitsdatenblättern seine Verwendungen abdeckt.

Diese Schritte sind in der Regel alle mit einem erheblichen Aufwand verbunden. Die Durchführung einer eigenen Stoffsicherheitsbeurteilung dürfte für die Mehrzahl der nachgeschalteten Anwender eine Überforderung darstellen, auch wenn sie sich in dieser Beurteilung „lediglich“ um ihre eigene Verwendung kümmern müssen. Es ist zumindest fraglich, ob in diesem Falle bei formaler Erfüllung der Anforderung tatsächlich ein zufriedenstellendes Schutzniveau erreicht wird.

Vor diesem Hintergrund ist es nicht nur für die wirtschaftlichen Akteure, sondern – unserer Einschätzung nach – auch für die behördlichen Begleit- und Kontrollaufgaben wichtig, dass möglichst viele Anwendungen durch qualitativ gute Expositionsszenarien abgedeckt sind.

Allerdings können auch innerhalb einer Branche die Verwendungen ein und desselben Stoffes in unterschiedlichen Unternehmen sehr stark voneinander abweichen. Weder vom Hersteller eines Einzelstoffes, noch vom Formulierer, der das Gemisch mit diesem Stoff auf den Markt bringt, kann erwartet werden, dass er die Bandbreite aller Details von Verwendungen / Verwendungsbedingungen kennen und hinsichtlich der auftretenden Emissionssituationen prüfen.

Der Hersteller bzw. Formulierer kann daher in seinen Expositionsszenarien die sicheren Anwendungsbedingungen lediglich auf Basis von Standardannahmen für die identifizierten Verwendungen kommunizieren. Beim nachgeschalteten Anwender werden im Einzelfall andere Anwendungsbedingungen und andere Risikomanagement-Maßnahmen vorliegen.

Dem Thema „Scaling“ kommt daher eine hohe Bedeutung zu.

Unter REACH wird Scaling (direkt übersetzt: anpassen, angleichen) so verstanden, dass der nachgeschaltete Anwender die ihm im Expositionsszenario gegebene Expositionsabschätzung an seine Verwendungsbedingungen anpasst. Dies bedeutet: er verändert wesentliche Eckpunkte / Parameter der Expositionsabschätzung, indem er hier die Werte einsetzt, die bei ihm im Unternehmen vorliegen (z.B. seine tägliche Einsatzmenge). Unter Nutzung einfacher Rechenschritte kann er dann

überprüfen, ob die unter seinen speziellen Anwendungsbedingungen zu erwartenden Expositionen im sicheren Bereich sind oder nicht.

Trotz Abweichungen bei einzelnen expositionsbestimmenden Größen ist dann die Verwendung des nachgeschalteten Anwenders noch durch das Expositionsszenario des Lieferanten abgedeckt. Durch die Angabe von Scaling-Instrumenten hat der Lieferant daher die Möglichkeit, den Bereich der Verwendungsbedingungen zu vergrößern, der durch sein Expositionsszenario abgedeckt ist.

Bestehende Scaling-Hilfen unterscheiden sich beträchtlich in ihrer Komplexität. Es kann sich um einfache lineare Zusammenhänge handeln („wenn die Hälfte der Stoffmenge verwendet wird, kann die Expositionsdauer doppelt so hoch sein“) oder es kann erforderlich sein, elektronische Bewertungsinstrumente anzuwenden.

Scaling ist nur möglich, wenn der Lieferant in seinem Expositionsszenario die relevanten Scaling-Regeln oder die zugehörigen Scaling-Instrumente genau beschrieben (spezifiziert) hat. Hierdurch wird angezeigt, dass die Anwendbarkeit und die Grenzen des Scalings für die identifizierten Verwendungen vom Lieferanten beurteilt wurden und im Stoffsicherheitsbericht des Stoffes dokumentiert sind. Wenn der Registrant Bewertungsinstrumente angibt, sollte er die zugehörigen Eingangsgrößen nennen, die von ihm für die Expositionsbeurteilung und die Risikobeschreibung eingesetzt wurden.

8.2 Expositionsabschätzungsinstrumente und das Scaling-Instrument SciDeEx

8.2.1 ECETOC TRA version 2

ECETOC TRA („Targeted Risk Assessment“) ist ein Instrument zur Expositionsabschätzung, das von der Forschungsgruppe ECETOC entwickelt wird. Das Instrument wird als bevorzugtes Modell der Stufe 1 für die Expositionsabschätzung am Arbeitsplatz angesehen (ECHA CSA 2008, Teil D, Kapitel 5.3).

Die vollständig überarbeitete Version von ECETOC TRA (ECETOC TRA Version 2010, <http://www.ecetoc.org/tra>) ermöglicht die Abschätzung der Umweltexposition, der Verbraucherexposition und der inhalativen und dermalen Exposition am Arbeitsplatz.

ECETOC TRA liegt nur in einer englischen Sprachversion vor und besteht aus einzelnen Microsoft Excel®-Dateien für die Bereiche Arbeitsplatz und Verbraucher. Zusätzlich wurde ein integriertes Werkzeug („integrated tool“) entwickelt, das neben der Expositionsabschätzung für Arbeiter und Verbraucher auch die Umweltexpositions-

abschätzung beinhaltet. Benutzerhandbücher sind für alle diese Bestandteile verfügbar.

Verglichen mit der internet-basierten Vorgängerversion ist ECETOC TRA Version 2010 nunmehr als Microsoft Excel®-basiertes Instrument umgesetzt und enthält zahlreiche Veränderungen, die detailliert im begleitenden „Technical Report“ dargestellt werden.

Viele der in der neuen Version umgesetzten Änderungen zielen auf eine bessere Integration in den Prozess der Expositionsabschätzung unter REACH ab (z.B. Einführung der PROCs). Daher ist ECETOC TRA nunmehr ein Instrument der Expositionsabschätzung als (wie zuvor) ein Instrument der zielgerichteten Risikobewertung („targeted risk assessment“, TRA). Es ist nach Eingabe von PNECs oder analoger Werte allerdings immer noch möglich, Risikowerte zu berechnen. Wiederum finden sich weitere Details zum Hintergrund der Veränderungen und zum Anwendungsbereich der neuen Version im „Technical Report“.

Grundlage für die Umweltexpositionsabschätzungen in ECETOC TRA ist EUSES in der Form des TGD Excel Blattes. Hiermit können Freisetzungsabschätzungen, PEC-Berechnungen und auch die abschließende Risikobeschreibung (d.h. die Bildung des Risikoquotienten) durchgeführt werden¹⁴.

In ECETOC TRA sind Umweltexpositionsabschätzungen Teil des sog. „Integrierten Instrumentes“. (Für die Abschätzung der Exposition von Arbeitern gibt es in ECETOC TRA zusätzlich zum integrierten Instrument Module, die unabhängig voneinander benutzt werden können. Die umweltbezogene Abschätzung kann nur im integrierten Instrument vorgenommen werden).

Die neue Fassung von ECETOC TRA (version 2) nutzt dieselben Eingangsgrößen wie EUSES. Sie enthält bereits die neu entwickelten Umweltfreisetzungskategorien (ERCs). Es besteht auch die Möglichkeit, mit spezifischen Umweltfreisetzungskategorien (spERCs) zu arbeiten. ECETOC TRA führt zu denselben Ergebnisgrößen wie EUSES.

Der umweltbezogene Teil von ECETOC TRA besteht aus zwei Modulen: der Abschätzung der Freisetzung und der Berechnung der vorhergesagten

¹⁴ Das TGD Excel-Arbeitsblatt ist von ECETOC in Kooperation mit der Radboud University Nijmegen überarbeitet worden. Die überarbeitete Fassung von ECETOC TRA steht seit Herbst 2009 zur Verfügung. Die alte Version des TGD Excel-Arbeitsblattes ist nicht mehr aktuell.

Umweltkonzentration (PEC). Das Modul für die Abschätzung der Freisetzung nutzt zu Beginn die Environmental Release Categories, entsprechend dem TGD Excel Blatt. Es bietet vier Alternativen zu den ERCs: spezifische Umweltfreisetzungskategorien, Vorgabewerte aus den A und B Tabellen des früheren Leitfadens (Technical Guidance Document) zur Risikobewertung von Alt- und Neustoffen (<http://ecb.jrc.ec.europa.eu/tgd/>), Daten aus den OECD Emission Scenario Documents und gemessene Daten (unternehmens-spezifische Emissionsdaten).

Internet <http://www.ecetoc.org/tra> (Registrierung erforderlich).
Instrument (MS Excel® Arbeitsblatt) und Anleitung.
Druckfassung: ECETOC 2004, ECETOC 2009TR.

8.2.2 Der ES-Modifier

Ziele und Anwendungsbereich des ES-Modifier

Der ES-Modifier wurde von dänischen und niederländischen Beratungsfirmen auf Initiative des Dänischen Industrieverbandes (DI) und mit Unterstützung der dänischen Umweltschutzbehörde (Danish EPA) entwickelt. DI ist der Eigentümer des ES-Modifiers. Die Software (Prototype 3.0, Mai 2010) ist frei unter <http://es-modifier.dhigroup.com/> verfügbar. Sie ist derzeit noch auf Excel basiert (Stand März 2011). Geplant ist eine finale, nicht mehr auf Excel basierte Version, die direkt in dem von der Europäischen Chemikalienagentur entwickelten Instrument CHESAR einsetzbar sein soll.

Das Ziel ist es, den nachgeschalteten Anwendern ein Instrument an die Hand zu geben, um die Expositionsszenarien (ES), die sie vom Lieferanten erhalten haben, zu prüfen und ggf. zu modifizieren. Nach der im ES-Modifier gebrauchten Definition befindet sich der nachgeschaltete Anwender innerhalb des ES für einen bestimmten Stoff (als Einzelstoff oder im Gemisch), wenn alle Risikoverhältnisse („Risk Characterisation Ratios“, RCR) kleiner 1 sind, d.h. wenn die Exposition kleiner als der entsprechende wirkungsbezogene DNEL oder PNEC ist.

Nach Angaben der Entwickler hat der ES-Modifier als Anwender-Zielgruppe nachgeschaltete Anwender mit geringer Erfahrung in Risikobewertung, aber mit Grundlagenkenntnissen in Chemie und Toxikologie. Formulierer, die mehrere ES für die Stoffe erhalten, die in Gemischen verwendet werden sollen, können den ES-Modifier verwenden, um die ES zu prüfen und die ES für die eigene Verwendung und die ihrer Kunden anzupassen

Der ES-Modifier behandelt sowohl die Exposition des Menschen (am Arbeitsplatz und Verbrauchereexposition) als auch der Umwelt und arbeitet hauptsächlich mit Information, die dem REACH-konformen Sicherheitsdatenblatt des Lieferanten entnommen werden können.

Beschreibung des ES-Modifiers

Der ES-Modifier basiert auf Excel[®] und beinhaltet die folgenden Expositionsschätzungsmodelle:

- für berufliche Exposition ECETOC TRA (alle Expositionspfade), Stoffenmanager und EMKG-EXPO-TOOL¹⁵ (nur für inhalative Exposition), RiskOfDerm (nur für dermale Exposition¹⁶)
- für Verbrauchereexposition ECETOC TRA und EUSES (alle Expositionspfade)
- für Umweltexposition EUSES.¹⁷

Es benötigt auf verschiedenen Stufen Eingangsinformationen:

- Auswahl der Lebenszyklusstadien (Herstellung, Formulierung, Verarbeitung). Für die Endverwendung und Gebrauchsphase („service life“) muss auch die Gruppe der Verwender ausgewählt werden: industriell, professionell oder Verbraucher.
- Die Verwendungsbeschreibung mittels Deskriptoren entsprechend dem ECHA Leitfaden „Guidance on information requirements and

¹⁵ EMKG-EXPO-TOOL: Expositionsabschätzungsinstrument für die Exposition am Arbeitsplatz („Einfaches Maßnahmenkonzept Gefahrstoffe“). Dieses Instrument ist von der Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin (BAuA) entwickelt worden und ist frei verfügbar

(http://www.reach-helpdesk.de/en/Exposure/Exposure.html?_nnn=true).

¹⁶ RiskofDerm ist ein Expositionsabschätzungsinstrument für Expositionen der Haut. Es ist von der niederländischen Institution TNO entwickelt worden und ist frei verfügbar (<http://www.eurofins.com/product-testing-services/services/research-development/projects-on-skin-exposure-and-protection/riskofderm---skin-exposure-and-risk-assessment.aspx>)

¹⁷ Einführungen in wichtige Expositionsabschätzungsinstrumenten werden im Teil IV des REACH Praxisführers zur Expositionsbewertung und zur Kommunikation in den Lieferketten gegeben (<http://www.vci.de/default~cmd~shd~docnr~125022~lastDokNr~102474.htm>).

chemical safety assessment, 2010, Part R12): mit den vier Deskriptoren Verwendungssektor (SU), Produktkategorie (PC), Verfahrenskategorie (PROC) und Erzeugniskategorie (AC) und Umweltfreisetzungskategorien (ERC)

- Intrinsic Stoffeigenschaften: physikochemische Eigenschaften (z.B. log Pow, Dampfdruck, Wasserlöslichkeit), PEC regional aquatisch, PEC regional Boden und gefahrenbezogene Daten (DNEL und PNEC)
- Wenn als Bestandteil eines Gemischs verwendet: Zusammensetzung des Gemischs
- In Abhängigkeit vom verwendeten Expositionsabschätzungsmodell können zusätzliche Eingangsdaten notwendig werden.

Risikoverhältnisse (RCR) für die Exposition des Menschen über inhalative, dermale und orale Pfade und für alle Umweltkompartimente (Wasser, Luft, Boden, Kläranlage) werden graphisch als Balken dargestellt, die von grün nach rot wechseln, wenn der RCR den Wert 1 überschreitet. Die neueste Version des ES-Modifiers (Prototype 3.0, Mai 2010) enthält auch ein Modul zur Erstellung eines Expositionsszenarios.

Einschätzung

Der ES-Modifier integriert alle geläufigen Expositionsabschätzungsmodelle. Er erlaubt alle relevanten Eingangsgrößen zu modifizieren und so die Risikoverhältnisse einzelner Stoffe in einem Gemisch neu zu berechnen. Damit kann der Anwender untersuchen, welche Parameter entscheidend für das Ergebnis der Risikocharakterisierung sind. Das erlaubt dem nachgeschalteten Anwender, die Modellparameter an seine spezifische Anwendungssituation anzupassen. Ebenso kann er die Ergebnisse verschiedener Expositionsabschätzungsmodelle vergleichen.

Da praktisch alle Details der Abschätzung modifiziert werden können, benötigt der Anwender des ES-Modifiers Hilfestellung für die Entscheidung, welche Art von Modifikation des Szenarios und des Modells ein Scaling im Rahmen des bestehenden Expositionsszenarios darstellt und was als neues Expositionsszenario anzusehen ist. Es sollte auch eine Hilfestellung zur Beschreibung der Grenzen und Möglichkeiten des Werkzeugs verfügbar gemacht werden.

Die Anwendung des ES-Modifiers setzt Grundkenntnisse der Expositionsabschätzung im Allgemeinen und der enthaltenen Expositionsabschätzungsmodelle voraus. Erfahrene Produktsicherheitsfachleuten von

Firmen, die im industriellen Maßstab Gemische herstellen, stellen deshalb eine Anwender-Zielgruppe dar.

Die notwendigen Eingangsdaten können überwiegend aus dem REACH-konformen Sicherheitsdatenblatt entnommen werden. Die händische Eingabe aller relevanten Informationen zu allen Stoffen eines Gemischs kann jedoch sehr zeitintensiv sein.

8.2.3 Emissionsabschätzungsmodule aus dem Matrix-Projekt des Umweltbundesamtes

Das Umweltbundesamt hat 2006 im Rahmen eines Forschungs- und Entwicklungsprojektes zwei branchenspezifische Emissionsabschätzungsinstrumente für den Umweltbereich entwickeln lassen („Matrix-Projekt“¹⁸).

Die in den Abschätzungen verwendete Methodik entspricht dem europäischen Technical Guidance Documents zur Risikobewertung von Neu- und Altstoffen¹⁹. Die branchen-spezifischen Daten zu den Prozessbedingungen wurden den OECD Emissions Scenario Dokumenten der jeweiligen Branche entnommen.

Die Berechnungsmodule wurden als flexible, Java basierte Internet-Anwendungen aufgebaut. Sie sind im Frühjahr 2006 ins Internet gestellt und öffentlich verfügbar gemacht worden (www.emissiontool.com).

In den Modulen erfolgt in einer bedienerfreundlichen Oberfläche die Berechnung entsprechend den Formeln, die auch im Emissionsabschätzungsinstrument EUSES genutzt werden. Die Vorgehensweise entspricht damit in den Grundzügen auch den Leitlinien, die von der ECHA zur umweltbezogenen Expositionsabschätzung und Risikobewertung veröffentlicht wurden.

¹⁸ Forschungs- und Entwicklungsprojekt FKZ 204 67 456, Branchen- und produktbezogene Emissionsabschätzungsinstrumente für Hersteller, Importeure und nachgeschaltete Anwender in REACH. Bearbeitung durch Ökopol GmbH, Öko-Institut e.V. und ChemieDaten GmbH. Endbericht vom März 2006.

¹⁹ EU Technical Guidance Document on Risk Assessment ("Technical Guidance Document in support of Commission Directive 93/67/EEC on Risk Assessment of New Notified Substances, 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", 2003).

Die Module beziehen sich auf Kunststoffadditive und auf Photochemikalien. Sie decken den gesamten Lebensweg der Chemikalien ab (Herstellung, Formulierung, Verwendung, Nutzungsphase, Entsorgung).

Die Expositionsabschätzungsmodule berücksichtigen nur das Umweltkompartiment Oberflächengewässer (Süßwasser). Die Elemente des Use Descriptor Systems konnten noch nicht berücksichtigt werden, da zum Zeitpunkt der Erarbeitung der Module dieses System noch nicht entwickelt war.

Weitere Informationen zum Matrixprojekt sind verfügbar unter <http://www.emissiontool.com/tool/> (siehe nachfolgende Abbildung).

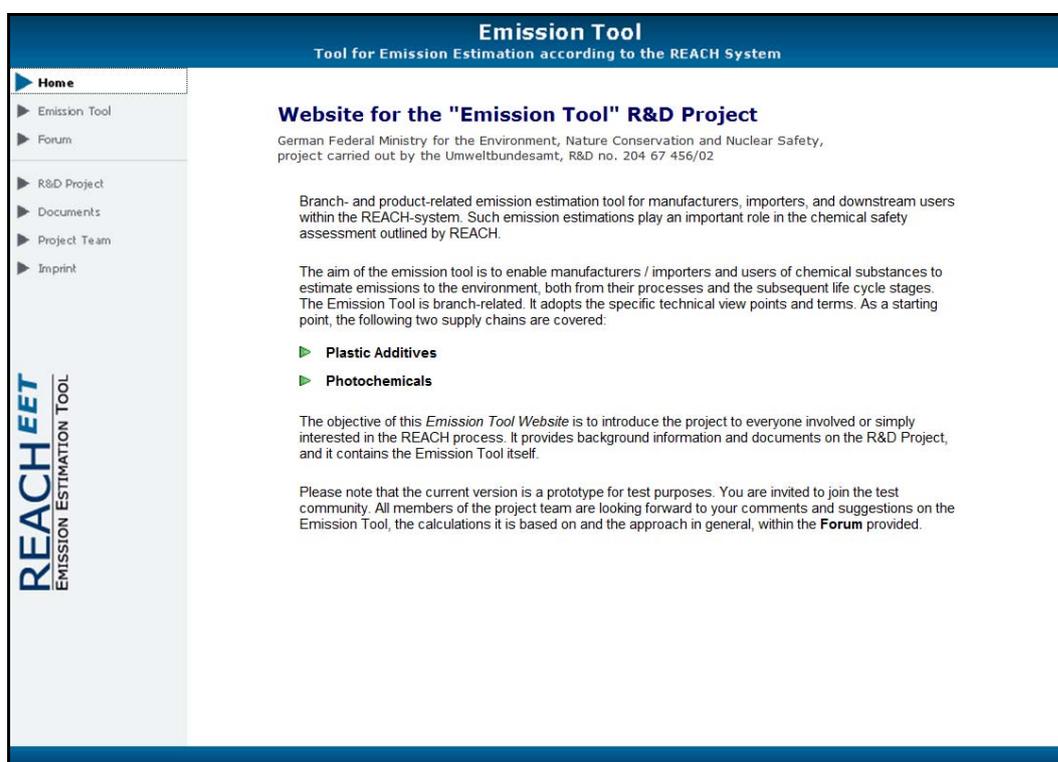


Abb. 6: Eingangseite des Emissionsabschätzungsinstrumentes aus dem Matrix-Projekt

8.2.4 ScIDeEx

In dem Expositionsabschätzungsinstrument ECETOC TRA version 2 (siehe Kapitel 8.2.1) können mehrere expositionsmodifizierende Faktoren („EMFs“) vom Anwender verändert werden. Diese Funktionalität ermöglicht das Scaling expositionsbestimmender Größen. Auch RiskOfDerm bietet gewisse Freiheitsgrade, die vom nachgeschalteten Anwender für das Scaling genutzt werden können.

Das hier vorgestellte Instrument ScIDeEx bezieht sich auf die Exposition von Arbeitern und hat keinen Bezug zur Umweltexposition.

Trotz der Schwerpunktsetzung von ScIDeEx auf den Arbeitsschutz stellen wir es an dieser Stelle vor, weil das Grundprinzip von ScIDeEx auch für die Weiter- bzw. Neuentwicklung von umweltbezogenen Scaling-Instrumenten interessant ist. Startpunkt ist ein bereits vorliegendes Instrument zur Expositionsabschätzung. Zu diesem Instrument wird ein passendes Scaling-Instrument als Ergänzung entwickelt. Diese Ergänzung ist weniger komplex und erfordert weniger Vorkenntnisse als das Expositionsabschätzungsinstrument.

Übertragen auf die Aufgabenstellung Umweltexposition könnte das zum Beispiel heißen: zur Expositionsbewertung von Metallen liegen spezifische Abschätzungsinstrumente vor, die über die Standardanwendung von EUSES hinausgehen. Sie können als Startpunkt für die Ableitung einer Scalinghilfe für Metalle mit dem Schwerpunkt Umweltexposition genutzt werden.

Für solche Ableitungen gibt das Instrument ScIDeEx gute Anregungen.

Die Nutzung von ECETOC TRA und RiskOfDerm erfordert einen gewissen Grad an Erfahrung. Daher sind ergänzende Hilfsmittel entwickelt worden, mit denen Scaling zu einer einfachen Aufgabe für nachgeschaltete Anwender wird. Das Werkzeug „ScIDeEx“ (Scaling of Inhalative and Dermal Exposure) wird vom Unternehmen Merck KG aA entwickelt, um ein Scaling der Arbeitnehmerexposition vornehmen zu können, auf der Grundlage von ECETOC TRA 2. Es unterstützt das Scaling der inhalativen und dermalen Exposition durch nachgeschaltete Anwender.

Die folgende Abbildung zeigt an einem Beispiel die Struktur des Instruments (vorläufiger Stand).

		TRA 2.0 Exposure values		Exposure Modifying Conditions						Scaled Exposure values		Risk Characterisation Ratios (RCR)			Select PROCs (activities) which may be performed by one worker within an 8 h workshift
Process Category	Description of Process Category	Inhalative Exposure [ppm] DOA > 4 h; no Ventilation; pure Substance	Dermal Exposure [mg / kg bw / day]; DOA > 4 h; no Ventilation; pure Substance	Duration of activity	Substance used in a preparation? If yes select concentration range (w/w)	Ventilation	Effectiveness of respiratory protective equipment (RPE) [%]	Effectiveness of Ventilation for Inhalative Exposure [%]	Effectiveness of Ventilation for Dermal Exposure [%]	Inhalative exposure [ppm]	Dermal Exposure [mg / kg bw day]	Inhalative Exposure	Dermal Exposure	Total Exposure (Inhalative + dermal)	
PROC1	1 - Use in closed process, no likelihood of exposure	0.1	0.34	> 4 h	no	none	no RPE	0	0	0.1	0.34	0.01	0.03	0.04	no
PROC2	2 - Use in closed, continuous process with occasional controlled exposure	50	1.37	> 4 h	no	none	no RPE	0	0	50	1.37	2.50	0.12	2.62	no
PROC3	3 - Use in closed batch process (synthesis or formulation)	100	0.34	> 4 h	no	none	no RPE	0	0	100	0.34	5.00	0.03	5.03	no
PROC4	4 - Use in batch and other processes (synthesis) where opportunity for exposure arises	250	6.86	> 4 h	no	none	no RPE	0	0	250	6.86	12.50	0.62	13.12	no
PROC5	5 - Mixing or blending in batch processes (multistage and/or significant contact)	500	13.71	> 4 h	no	none	no RPE	0	0	500	13.71	25.00	1.25	26.25	no
DNEL(inhal) [ppm for volatiles] : [mg/m ³ for solids] DNEL(dermal) [mg/kg bw/day]		20 11								Risk Characterisation Ratio Total Exposure (Aggregated Uses)			0.00		

Es handelt sich um ein Excel-gestütztes Instrument auf der Grundlage von ECETOC TRA version 2. Die Werte im Tabellenblatt sind in jedem Fall stoffspezifisch.

Abb. 7: Das Scaling-Instrument SciDeEx (Scaling of inhalative and dermal exposure).

Der Anwender kann drei expositionsmodifizierende Faktoren an seine Situation anpassen:

- die Dauer der Tätigkeit;
- die Konzentration des Stoffes im Gemisch;
- die Art der Lüftung.

Diese Größen haben einen linearen Einfluss auf die Expositionshöhe. Dies bedeutet, dass die ursprünglichen Expositionswerte, die in einem konservativen Ansatz von hohen Expositionen ausgehen, einfach mit einem festen Faktor multipliziert werden. Die folgende Tabelle zeigt als Beispiel diese expositionsmodifizierenden Faktoren für die Dauer der Tätigkeit.

Tab. 19: Die Abhängigkeit der Expositionshöhe von der Dauer der Tätigkeit (DOA, „Dauer der Anwendung“).

Dauer der Tätigkeit (DOA)	Expositionsmodifizierender Faktor (EMF)
> 4 h	Keine Veränderung (Faktor = 1)
1-4 h	0.6
15 min.-1 h	0.2
< 15 min.	0.1

ScIDeEX ermöglicht es auch, die Gesamt-Exposition zu berechnen, wenn mehrere Tätigkeiten vom selben Arbeitnehmer ausgeführt werden. In diesem Fall werden die Expositionen der einzelnen Prozesskategorien aufaddiert zu einem Wert für die Gesamtexposition. Im Instrument können beliebige individuelle Kombinationen berechnet werden.

Lieferanten können in ihre Expositionsszenarien einen Link zu einer Internetseite aufnehmen, auf der das stoffspezifisch ausgestaltete ScIDeEx-Instrument verfügbar ist.

Abb. 7 zeigt, wie eine stoffspezifische Ausführung des ScIDeEx-Instruments aussehen kann – für die nachgeschalteten Anwender. Im Gegensatz hierzu benötigen Akteure, die selber Expositionsszenarien erstellen, eine generische Fassung. Aus ihr können dann die stoffspezifischen Fassungen abgeleitet werden. Diese generische Fassung wird folgende Eigenschaften haben:

- alle Prozesskategorien (PROCs) werden abgedeckt;
- nicht-zutreffende PROCs werden einfach durch Löschen der entsprechenden Zeilen entfernt;

- der Nutzer kann die ECETOC TRA version 2 Daten einfügen, die die konservative Abschätzung der Exposition darstellen;
- der Nutzer sichert die Formatvorlage und speichert sie ab als stoff-spezifische Fassung.

Diese stoffspezifische Fassung kann dann den nachgeschalteten Anwendern zur Verfügung gestellt werden.

8.3 Die Handlungsanleitung zum Scaling

Siehe eigenes Dokument.