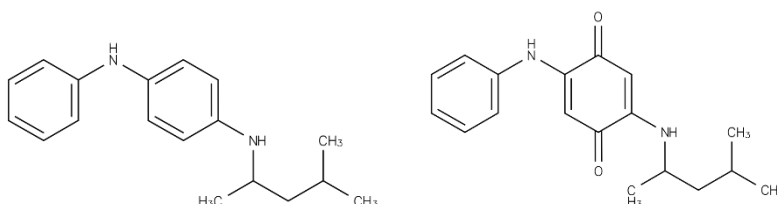


Kurzdossier Spurenstoffe

Stoffname: 6-PPD (N-(1,3-Dimethylbutyl)-N'-phenyl-p-phenylendiamin) und das Transformationsprodukt 6-PPDC (N-(1,3-Dimethylbutyl)-N'-phenyl-p-phenylendiamin chinon)

CAS-Nr: 793-24-8, 2754428-18-5



Wasserlöslichkeit: circa 1 mg/L (6-PPD) ¹, 38 µg/L (6-PPDC) ²

Dissoziationskonstante(n): pKa = 0,7 und 6,7 (6-PPD)¹

Der Fokus der vorliegenden Relevanzbewertung liegt auf Deutschland. Sie gründet auf Umweltbeobachtungsdaten aus der Bundesrepublik Deutschland. Daten aus anderen Ländern können als zusätzliche Interpretationshilfe herangezogen werden.

Dieses Kurzdossier umfasst ausschließlich die für die Bewertung der Relevanz erforderlichen Informationen. Die Bewertung erfolgt auf dem aktuellen Stand des Wissens und den vorliegenden Informationen.

Anwendung

6-PPD (N-(1,3-Dimethylbutyl)-N'-phenyl-p-phenylendiamin, CAS-Nr: 793-24-8) wird zur Herstellung von Reifen und Gummiprodukten als Ozonschutz- und Antioxidationsmittel verwendet. Es wird in Mengen von $\geq 10\,000$ bis $< 100\,000$ t in der EU hergestellt oder importiert. ¹ 6-PPDC ist ein Transformationsprodukt von 6-PPD.

Ausgewählte Daten zum Vorkommen in Gewässern und Biota

Bezug/Betrachtungseinheit	Jahr und Monitoringdaten [µg/L]	Quelle
Oberflächengewässer, Niedersachsen	6-PPDC, 2020: in 2 Proben von 168 nachgewiesen (max. 0,033); BG = 0,013	3
Oberflächengewässer, Deutschland (NTS-Portal)	6-PPDC (12 Messstellen): • Schwebstoffe: 640 Detektionen • Wasser: 30 Detektionen	4
Oberflächengewässer, Rheinland-Pfalz	6-PPDC, 2011-2021: • Schwebstoffe: $< 3,75 - 374$ ng/g	5
Oberflächengewässer, Toronto, Kanada	6-PPDC: • 2019-2020: 2,3 ($\pm 0,05$) (Maximalkonzentration)	6

Ausgewählte Daten zum Vorkommen in Gewässern und Biota

	<ul style="list-style-type: none"> 2020: 0,21 ($\pm 0,02$) – 0,72 ($\pm 0,26$) 	7
Oberflächengewässer, Seattle und San Francisco, USA	6-PPDC, 2018: <ul style="list-style-type: none"> <0,3 – 3,2 1 – 3,5 	8
Straßenabläufe, Aachen, NRW	6-PPDC, 2022 (BG = 0,0024; Wiederfindungsrate = 76%; nachstehende Konzentrationen nicht um die Wiederfindungsrate korrigiert): <ul style="list-style-type: none"> Autobahn (n=17): 0,4 – 2,12 Landstraße (n=2): 0,338 – 0,349 	9
Straßenabläufe, Regenrückhaltebecken, NRW	6-PPDC, 2022: Detektiert über Non-target	10
Straßenabläufe, Trondelag, Norwegen	6-PPDC, 2021: <ul style="list-style-type: none"> 0,11 – 0,14 	11
Straßenabläufe, Seattle und Los Angeles, USA	6-PPDC, 2018: <ul style="list-style-type: none"> 0,8 – 19 4,1 – 6,1 	8
Schnee auf Straßen, Leipzig, Sachsen	6-PPD, n = 13, 2021: <ul style="list-style-type: none"> 0,065 – 0,783 6-PPDC, n=20, 2021: <ul style="list-style-type: none"> 0,11 – 0,428 	12
Schnee auf Straßen, Leipzig, Sachsen	6-PPD: <ul style="list-style-type: none"> Höherer Anteil in Partikelfraktion (Verteilung Wasser/Partikel = 0,001) 6-PPDC: <ul style="list-style-type: none"> Ähnlicher Anteil in Wasserphase und Partikeln wie bei 6-PPD 	13
Kläranlagenzufluss, Leipzig, Sachsen	2021, 6-PPDC: <ul style="list-style-type: none"> 0,105 (Mittelwert während Schneefall) 0,052 (Mittelwert während Regen) Nicht detektiert bei Trockenwetter 	13
Kläranlagenabfluss, Leipzig, Sachsen	2021, 6-PPDC, n=7: <ul style="list-style-type: none"> 0,04 – 0,065 	12

Stoffeigenschaften gemäß Relevanzkriterien

	Bezugswert / Triggerwert	Daten für jeweiligen Stoff	Bewertung der Besorgnis (<i>Besorgnis durch „+“ bzw. keine durch „-“ gekennzeichnet</i>)
Persistenz/ biologische Abbaubarkeit	Persistent, wenn „nicht leicht biologisch abbaubar“ / „nicht inhärent abbaubar“ oder gemäß Annex XIII der REACH-Verordnung ¹⁴ und zugehörigem Leitfaden ¹⁵	<p>6-PPD:</p> <ul style="list-style-type: none"> 6PPD is not readily biodegradable with 2 % biodegradation in 28 days (CERI 1994) ¹ Nicht leicht biologisch abbaubar (OECD TG 301 C) ¹⁶ Hydrolyse: DT₅₀ = 8 h (26 °C) ¹ <p>6-PPDC:</p> <ul style="list-style-type: none"> “Aqueous stability tests observed a slight-to-moderate loss of 6PPDQ over 47 days (26 ± 3% loss) for pH 5, 7 and 9” (6-PPDQ = 6-PPDC) ² Hydrolyse DT₅₀ = 12,8 – 16,3 d (25 °C) ¹⁷ 	<p>6-PPD: +</p> <p>6-PPDC: keine Bewertung</p>
Mobilität/ Adsorptionsfähigkeit	Mobil (M): log K _{OC} < 3 Sehr mobil (vM): log K _{OC} < 2 ¹⁸	6-PPD: K _{OC} = 5754 (calculated) ¹ → log K _{OC} = 3,76	6-PPD: -
Humantoxizität (auf Basis von CLP)	Humantoxisch, wenn die Kriterien zur Klassifizierung nach CLP-Verordnung Kategorie Kanzerogen (1A, 1B) oder Keimzellmutagen (1A, 1B) oder Reproduktionstoxisch (Kategorie 1A, 1B, 2) oder STOT RE (1, 2) erfüllt sind ¹⁹	6-PPD: Repr. 1B, H360FD ²⁰	6-PPD: +
Ökotoxizität (akut/chronisch; Standardtests)	Ökotoxisch, wenn LC ₅₀ /EC ₅₀ < 0,1 mg/L oder NOEC < 0,01 mg/L gemäß Annex XIII der REACH-Verordnung ¹⁴ und zugehörigem Leitfaden ¹⁵	<p>6-PPD:</p> <p>Akute Toxizität</p> <ul style="list-style-type: none"> Zebrafish embryo (<i>Danio rerio</i>) 96-h LC₅₀ = 442,62 µg/L ²¹ 	6-PPD: +

Stoffeigenschaften gemäß Relevanzkriterien

(nicht ökotoxisch, wenn $EC_{50} > \text{Wasserlöslichkeit}$)	<ul style="list-style-type: none"> Medaka (<i>Oryzias latipes</i>) 96-h $LC_{50} = 0,028 \text{ mg/L}$ (OECD TG 203) ¹ <p>Chronische Toxizität</p> <ul style="list-style-type: none"> Medaka (<i>Oryzias latipes</i>) 30d-NOEC = $0,0037 \text{ mg/L}$ (MITI 2002) ¹ <p>6-PPDC: Akute Toxizität</p> <ul style="list-style-type: none"> juvenile coho salmon (<i>Oncorhynchus kisutch</i>) 24 h-$LC_{50} = 95 \text{ ng/L}$ ²² Zebrafish embryo (<i>Danio rerio</i>) 96-h $LC_{50} = 132,92 \text{ µg/L}$ ²¹ Regenbogenforelle (<i>Oncorhynchus mykiss</i>) 72 h-$LC_{50} = 1 \text{ µg/L}$ ²³ Bachforelle (<i>Salvelinus fontinalis</i>) 24 h-$LC_{50} = 0,59 \text{ µg/L}$ ²³ 	6-PPDC: +
--	--	-----------

Gleichwertige zusätzliche Besorgnisgründe

	Bewertungsgrundlage	Bewertung
Bioakkumulation/ Lipophilie	<p>6-PPD: $\log K_{ow} = 4,68$ (20 °C, berechnet mit EPIWIN) ¹</p> <p>6-PPDC: $\log K_{ow} = 4,30 \pm 0,02$ ²</p>	Basierend auf den $\log K_{ow}$ Werten ist eine Bioakkumulation in aquatischen Organismen möglich, experimentelle Daten fehlen jedoch für eine abschließende Bewertung.
Transformationsprodukte	<p>6-PPDC als Transformationsprodukt von 6-PPD</p> <p>“Aqueous leaching simulations from tire tread wear particles (TWPs) indicated short term release of $\sim 5.2 \text{ µg}$ 6PPDQ per gram TWP over 6 h under flow-through conditions” ²</p>	+

Weitere Informationen und Bezugswerte

	Bezugswerte, Einstufungen	Bewertung und ggfs. Vergleich mit Monitoringdaten
CLP-Einstufung	6-PPD ²⁰ : Acute Tox. 4, H302 Skin Sens. 1A, H317 Repr. 1B, H360FD Aquatic Acute 1, H400 Aquatic Acute 1, M-factor=10 000 Aquatic Chronic 1, H410 Aquatic Chronic 1, M-factor=10	
WGK-Einstufung	6-PPD: WGK 2 ¹⁶	
Verhalten in Kläranlagen	6-PPDC, 2022 ¹² : <ul style="list-style-type: none"> • 0,59 – 1,1 µg/L (Kläranlagenzufluss) • 0,04 – 0,065 µg/L (Kläranlagenabfluss) • 99% (Eliminierungsrate) 	
Betroffenheit anderer Kompartimente	Durch Sorption an Partikel ist davon auszugehen, dass auch das Kompartiment Boden von den Spurenstoffeinträgen betroffen ist.	Eine Bewertung für das Kompartiment Boden wurde hier nicht vorgenommen.

Entscheidung des Gremiums zur Bewertung der Relevanz von Spurenstoffen

Basierend auf dem vorliegenden Kurzdossier wurde am 10.06.2024 folgende Entscheidung zur Relevanz des Stoffes gefällt: 6-PPD und das Transformationsprodukt 6-PPDC sind relevante Spurenstoffe.

Es sind aufgrund des neuen Nachweises der Substanzen noch nicht viele Daten vorhanden. Dennoch ist eine Bewertung möglich. 6-PPD ist persistent, es hydrolysiert zwar schnell, jedoch ist davon auszugehen, dass es durch die Sorption an die Reifenpartikel stabilisiert wird ¹³. Beide Substanzen erfüllen das Kriterium der Ökotoxizität. Hierbei ist hervorzuheben, dass akute Toxizitätswerte für einige aquatischen Fischarten im ng/L-Konzentrationsbereich liegen. Aufgrund der hohen Eintragsmengen durch Reifenabrieb ist davon auszugehen, dass relevante Mengen in die Gewässer eingetragen werden. 6-PPDC kann auch in Schwebstoffen in Gewässern nachgewiesen werden.

Quellen

- (1) *Registration Dossier N-1,3-dimethylbutyl-N'-phenyl-p-phenylenediamine* - ECHA. <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/15367/2/3> (accessed 2022-07-19).
- (2) Hu, X.; Zhao, H. (Nina); Tian, Z.; Peter, K. T.; Dodd, M. C.; Kolodziej, E. P. Chemical Characteristics, Leaching, and Stability of the Ubiquitous Tire Rubber-Derived Toxicant 6PPD-Quinone. *Environ. Sci.: Processes Impacts* **2023**, 25 (5), 901–911. <https://doi.org/10.1039/D3EM00047H>.
- (3) Scheurer, M.; Nödler, K.; Schmid, R.; Schaffer, M. *Vorkommen Persistenter Und Mobiler Organischer Spurenstoffe in Niedersächsischen Oberflächengewässern (PMT/vPvM-Stoffe) - Landesweiter Überblick Und Identifikation von Belastungsschwerpunkten*; Niedersächsischer Landesbetrieb für Wasserwirtschaft, Küsten- und Naturschutz; DVGW-Technologiezentrum Wasser Karlsruhe: Niedersachsen, 2022. https://www.nlwkn.niedersachsen.de/download/185693/NLWKN_2022_Vorkommen_persistenter_und_mobiler_organischer_Spurenstoffe_in_niedersaechsischen_Oberflaechengewaessern_PMTvPvM-Stoffe_.pdf.
- (4) *NTS Portal*. <https://ntsportal.bafg.de> (accessed 2024-05-22).
- (5) BfG Unveröffentlichte Daten, Datengrundlage: Schwebstoffmessprogramms Des Landesamtes Für Umwelt Rheinland-Pfalz.
- (6) Johannessen, C.; Helm, P.; Lashuk, B.; Yargeau, V.; Metcalfe, C. D. The Tire Wear Compounds 6PPD-Quinone and 1,3-Diphenylguanidine in an Urban Watershed. *Arch Environ Contam Toxicol* **2022**, 82 (2), 171–179. <https://doi.org/10.1007/s00244-021-00878-4>.
- (7) Johannessen, C.; Helm, P.; Metcalfe, C. D. Detection of Selected Tire Wear Compounds in Urban Receiving Waters. *Environ Pollut* **2021**, 287, 117659. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2021.117659>.
- (8) Tian, Z.; Zhao, H.; Peter, K. T.; Gonzalez, M.; Wetzel, J.; Wu, C.; Hu, X.; Prat, J.; Mudrock, E.; Hettinger, R.; Cortina, A. E.; Biswas, R. G.; Kock, F. V. C.; Soong, R.; Jenne, A.; Du, B.; Hou, F.; He, H.; Lundeen, R.; Gilbreath, A.; Sutton, R.; Scholz, N. L.; Davis, J. W.; Dodd, M. C.; Simpson, A.; McIntyre, J. K.; Kolodziej, E. P. A ubiquitous tire rubber-derived chemical induces acute mortality in coho salmon. *Science* **2021**, 371 (6525), 185–189. <https://doi.org/10.1126/science.abd6951>.
- (9) Unveröffentlichte Daten Aus Dem Projekt „RoadTox - Ökotoxikologische Bewertung von Reifenabrieb in Niederschlagabflüssen Stark Befahrener Straßen“, 2021-2024, Gefördert Durch Das Ministerium Für Umwelt, Naturschutz Und Verkehr Des Landes Nordrhein-Westfalen (MUNV NRW).
- (10) LANUV NRW. *Non Target – News #13*. https://www.lanuv.nrw.de/fileadmin/lanuv/analytik/non_target/Chinon_13.pdf.
- (11) Kryuchkov, F.; Foldvik, A.; Sandodden, R.; Uhlig, S. Presence of 6PPD-Quinone in Runoff Water Samples from Norway Using a New LC–MS/MS Method. *Front. Environ. Chem.* **2023**, 4, 1194664. <https://doi.org/10.3389/fenvc.2023.1194664>.
- (12) Maurer, L.; Carmona, E.; Machate, O.; Schulze, T.; Krauss, M.; Brack, W. Contamination Pattern and Risk Assessment of Polar Compounds in Snow Melt: An Integrative Proxy of Road Runoffs. *Environ. Sci. Technol.* **2023**, 57 (10), 4143–4152. <https://doi.org/10.1021/acs.est.2c05784>.
- (13) Seiwert, B.; Nihemaiti, M.; Troussier, M.; Weyrauch, S.; Reemtsma, T. Abiotic Oxidative Transformation of 6-PPD and 6-PPD Quinone from Tires and Occurrence of Their Products in Snow from Urban Roads and in Municipal Wastewater. *Water Research* **2022**, 212, 118122. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2022.118122>.
- (14) *Verordnung (EG) Nr. 1907/2006 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 18. Dezember 2006 zur Registrierung, Bewertung, Zulassung und Beschränkung chemischer Stoffe (REACH)*. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/TXT/?uri=CELEX%3A02006R1907-20140410> (accessed 2022-07-08).
- (15) European Chemicals Agency. *Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment: Chapter R.11: PBT and vPvB Assessment*; Publications Office: LU, 2017.
- (16) *N-(1,3-Dimethylbutyl)-N'-phenyl-1,4-benzoldiamin* - ChemInfo Public. <https://recherche.chemikalieninfo.de/public/stoff/7881?dv=18&st=0&sid=06462f50-dc4b-4c69-b7df-55860a39eea3&sv=s6&o=GSBL.FULGOMORPH&ps=25> (accessed 2022-07-22).
- (17) Chen, X.; He, T.; Yang, X.; Gan, Y.; Qing, X.; Wang, J.; Huang, Y. Analysis, Environmental Occurrence, Fate and Potential Toxicity of Tire Wear Compounds 6PPD and 6PPD-Quinone. *Journal of Hazardous Materials* **2023**, 452, 131245. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2023.131245>.



- (18) EUROPÄISCHE KOMMISSION. *DELEGIERTE VERORDNUNG (EU) 2023/707 DER KOMMISSION Vom 19. Dezember 2022 Zur Änderung Der Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 in Bezug Auf Die Gefahrenklassen Und Die Kriterien Für Die Einstufung, Kennzeichnung Und Verpackung von Stoffen Und Gemischen*. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/TXT/HTML/?uri=CELEX:32023R0707&qid=1681394384679&from=EN> (accessed 2023-04-14).
- (19) *Verordnung (EG) Nr. 1272/2008 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. Dezember 2008 über die Einstufung, Kennzeichnung und Verpackung von Stoffen und Gemischen*. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/de/TXT/?uri=CELEX:32008R1272> (accessed 2022-07-08).
- (20) ECHA. *Registry of CLH intentions until outcome - N-1,3-dimethylbutyl-N'-phenyl-p-phenylenediamine*. <https://echa.europa.eu/de/registry-of-clh-intentions-until-outcome/-/dislist/details/0b0236e186eecd7b>.
- (21) Varshney, S.; Gora, A. H.; Siriyappagounder, P.; Kiron, V.; Olsvik, P. A. Toxicological Effects of 6PPD and 6PPD Quinone in Zebrafish Larvae. *Journal of Hazardous Materials* **2022**, 424, 127623. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2021.127623>.
- (22) Tian, Z.; Gonzalez, M.; Rideout, C. A.; Zhao, H. N.; Hu, X.; Wetzel, J.; Mudrock, E.; James, C. A.; McIntyre, J. K.; Kolodziej, E. P. 6PPD-Quinone: Revised Toxicity Assessment and Quantification with a Commercial Standard. *Environ. Sci. Technol. Lett.* **2022**, 9 (2), 140–146. <https://doi.org/10.1021/acs.estlett.1c00910>.
- (23) Brinkmann, M.; Montgomery, D.; Selinger, S.; Miller, J. G. P.; Stock, E.; Alcaraz, A. J.; Challis, J. K.; Weber, L.; Janz, D.; Hecker, M.; Wiseman, S. Acute Toxicity of the Tire Rubber-Derived Chemical 6PPD-Quinone to Four Fishes of Commercial, Cultural, and Ecological Importance. *Environ. Sci. Technol. Lett.* **2022**, 9 (4), 333–338. <https://doi.org/10.1021/acs.estlett.2c00050>.

Impressum

Herausgeber

Umweltbundesamt
Spurenstoffzentrum des Bundes
Spurenstoffzentrum@uba.de
Internet: www.spurenstoffzentrum.de

Autorenschaft, Institution

Umweltbundesamt
Internet:
www.umweltbundesamt.de
 [/umweltbundesamt.de](https://www.facebook.com/umweltbundesamt.de)
 [/umweltbundesamt](https://twitter.com/umweltbundesamt)