

TEXTE

134/2023

Abschlussbericht

Integration von Biozidmonitoringdaten aus Literaturquellen in eine Datenbank

von:

Stephanie Graumnitz, Annika Stoll, Dr. Dirk Jungmann,
GWT-TUD GmbH, Dresden

Dr. Marcus Rybicki

TZW: DVGW -Technologiezentrum Wasser, Abt. Wasserverteilung, Dresden

Herausgeber:

Umweltbundesamt, GWT-TU Dresden GmbH

TEXTE 134/2023

Projektnummer 172962

FB001179

IT Rahmenkonzept

Abschlussbericht

Integration von Biozidmonitoringdaten aus Literaturquellen in eine Datenbank

von

Stephanie Graumnitz, Annika Stoll, Dr. Dirk Jungmann,
GWT-TUD GmbH, Dresden

Dr. Marcus Rybicki

TZW: DVGW -Technologiezentrum Wasser, Abt.
Wasserverteilung, Dresden

Im Auftrag des Umweltbundesamtes

Impressum

Herausgeber

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

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

 [/umweltbundesamt](https://twitter.com/umweltbundesamt)

Durchführung des Projektes:

GWT-TUD GmbH
Freiberger Str. 33
01062 Dresden

Abschlussdatum:

November 2022

Redaktion:

Fachgebiet IV 1.2 Biozide
Dr. Maria Vogel, Dr. Christiane Meier, Dr. Inga Hilbrandt, Korinna Ziegler, Sergi Grebenyuk, Daniel Laska

Publikationen als pdf:

<http://www.umweltbundesamt.de/publikationen>

ISSN 1862-4804

Dessau-Roßlau, September 2023

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

Kurzbeschreibung: Integration von Biozidmonitoringdaten aus Literaturquellen in eine Datenbank

Mit der Anwendung von Biozidprodukten geht der unerwünschte Eintrag von Biozidwirkstoffen in die Umwelt einher, was potentielle Risiken für Mensch und Ökosysteme birgt. Zahlreiche Veröffentlichungen aus Europa thematisieren den Eintrag von Bioziden in die Umwelt, dennoch fehlt eine zentrale Sammlung von Monitoringdaten, wodurch eine gesamtheitliche Auswertung erschwert wird. Ziel des vorliegenden Projektes war daher, europaweite Monitoringdaten von Bioziden aus wissenschaftlichen Publikationen, Berichten und externen Datenbanken zu extrahieren, zu validieren und in einer einheitlichen Struktur darzustellen. So wird die Grundlage für eine Monitoringdatenbank geschaffen. Als Ergebnis wurden **32.281** Umweltkonzentrationen von Bioziden aus **192** Publikationen und Berichten eingetragen. Zusätzlich wurden **4.000.219** Datensätze mit Umweltkonzentrationen von Bioziden aus zwei externen Datenbanken für die Integration in die Biozid-Datenbank aufgearbeitet. Der komplette Datensatz enthält somit insgesamt **4.032.500** Daten von **119** Bioziden und deren Transformationsprodukten, die in **31** Ländern des europäischen Kontinents und in verschiedenen Umweltmatrizes gemessen wurden.

Abstract: Integration of biocide monitoring data from literature sources into a database

The use of biocidal products is accompanied by the undesired release of biocidal active substances into the environment, which could lead to potential risks for humans and ecosystems. Numerous publications from Europe address the entry of biocides into the environment, but there is no central collection of biocide monitoring data that would allow a comprehensive evaluation. The aim of the present project was therefore to extract Europe-wide monitoring data on biocides from scientific publications, reports and external databases, to validate them and to present them in a uniform structure in order to create the basis for a monitoring database. The intention is to get a manageable way to evaluate published data and make biocide monitoring data available to the public. As a result, **32.281** environmental concentrations of biocides were entered from **192** publications and reports. In addition, **4.000.219** data sets with environmental concentrations of biocides from two external databases were processed for integration into the biocide database. The dataset thus contains a total of **4.032.500** data of **119** biocides and their transformation products measured in **31** countries of the European continent and different environmental matrices.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis.....	6
Tabellenverzeichnis	6
Abkürzungsverzeichnis	7
Zusammenfassung.....	8
Summary	9
1 Einleitung.....	10
2 Erstellung der Datenbank.....	11
2.1 Technischer Hintergrund der Datenbank	11
2.2 Erarbeitung der Datenbankstruktur.....	11
2.3 Substanzliste der Biozide	15
3 Datenimplementierung	16
3.1 Kriterien für die Datenimplementierung	16
3.1.1 Bewertung der Literatur	17
3.2 Daten aus wissenschaftlichen Publikationen und Berichten	17
3.2.1 Import großer Datenmengen.....	18
3.3 Datenimport aus externen Datenbanken	19
3.3.1 Übersicht über die zu integrierenden externen Datenbanken.....	19
3.3.2 Vorgehensweise bei der Integration der externen Datenbanken	19
3.3.3 Ergebnisse zur Integration der externen Datenbanken.....	24
4 Ausblick	25
5 Quellenverzeichnis	26
A Anhang	28

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Datenbankstruktur der MySQL-Projektdatenbank	14
Abbildung 2:	Interner Entscheidungsbaum für die Kategorisierung der wissenschaftlichen Publikationen bezüglich ihrer Plausibilität.	17

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Parameter der finalen Biozid-Datenbank und nähere Beschreibung der Parameter.....	11
Tabelle 2:	Ergebnis der Sortierung der bereitgestellten Literatur nach den Kriterien für die Datenimplementierung.....	18
Tabelle 3:	Übersicht über die aus dem Datensatz der Rheinüberwachungsstation, Weil am Rhein (RÜS), Umweltanalyse Wasserphase übernommenen Informationen	20
Tabelle 4:	Überblick über die aus der NORMAN-Datenbank in die Biozid-Datenbank übernommenen Daten und Informationen	21
Tabelle 5:	Überblick über die Matrizes der NORMAN-Datenbank und die jeweilige Zuordnung zu den Matrizes der Biozid-Datenbank ..	23
Tabelle 6:	Liste der bioziden Wirkstoffe, die beim Dateneintrag in die Biozid-Datenbank berücksichtigt wurden. Fett hervorgehoben sind diejenigen Wirkstoffe, die in der finalen Biozid-Datenbank enthalten sind.....	28
Tabelle 7:	Auflistung der in der finalen Biozid-Datenbank enthaltenen Umweltmatrizes	45
Tabelle 8:	Substanzen aus der NORMAN-Datenbank, deren Dateneinträge nicht in die Biozid-Datenbank übernommen wurde	47

Abkürzungsverzeichnis

CAS	Chemical Abstract Service Registry Number
ChemInfo	Informationssystem Chemikalien des Bundes und der Länder
Coord.	Koordinate
DB	Datenbank (Database)
DOI	Digital Object Identifier System
ECHA	European Chemicals Agency
GWT	Gesellschaft für Wissens- und Technologietransfer
ID	Identifikationsnummer
LoD	Limit of Detection (Nachweisgrenze)
LoQ	Limit of Quantification (Bestimmungsgrenze)
MEC	Measured environmental concentration
MS Access	Microsoft Access
MS Excel	Microsoft Excel
MySQL	relationales Datenbankverwaltungssystem
OGD Basel-Stadt	Fachstelle für Open Government Data des Kantons Basel-Stadt
RAK	Regulatorisch akzeptable Konzentration
RÜS	Rheinüberwachungsstation Weil am Rhein
subsp.	Subspezies
SQL	Datenbanksprache
TUD	Technische Universität Dresden
UBA	Umweltbundesamt
UQN	Umweltqualitätsnorm

Zusammenfassung

Ziel des Projektes war der Aufbau einer Biozid-Datenbank und die Implementierung verfügbarer Umweltkonzentrationen von, innerhalb Europas erfassten, Bioziden aus Publikationen, Berichten und externen Datenbanken.

Der Bericht beschreibt die Herangehensweise bei der Identifizierung relevanter Daten sowie den Eintrag dieser Daten in die Datenbank. Hierbei wird auf die Struktur der Datenbank, die Sortierung der Literatur, die Bewertung der Literatur und die methodische Herangehensweise bei der Extraktion der Daten aus externen Datenbanken eingegangen. Es werden relevante Eckdaten zu quantitativen Inhalten der Datenbank dargestellt.

Für die neue Biozid-Datenbank wurde die Struktur der bestehenden Datenbank „Arzneimittel in der Umwelt“ (Dusi et al. 2019, Graumnitz et al. 2020, Projektnummer 97778 und 146562) als technische Grundlage verwendet und an die neuen Anforderungen adaptiert.

Die Literatur für die Datenbank wurde von den Mitarbeitenden des Umweltbundesamts bereitgestellt. Bei der bereitgestellten Literatur handelt es sich um 25 Berichte, wovon acht durch das Umweltbundesamt veröffentlicht wurden, 320 Publikationen und zwei externe Datenbanken (NORMAN EMPODAT Database-Chemical Occurrence Data und Datensatz der Rheinüberwachungsstation). Die Eignung dieser Literatur für den Eintrag in die Biozid-Datenbank wurde nach dafür definierten Kriterien bewertet.

Die Implementierung relevanter Parameter aus der bereitgestellten Literatur in die Datenbank erfolgte durch manuellen Eintrag über eine graphische Nutzeroberfläche. Große Datensätze und externe Datenbanken wurden mittels (halb)automatischen Dateneintrags in die Datenbank implementiert. Die Daten der externen Datenbanken wurden für die Datenübertragung an die Struktur der Biozid-Datenbank angepasst.

Als Ergebnis wurden 32.281 Umweltkonzentrationen von 117 Bioziden aus 192 Publikationen und Berichten eingetragen. Dabei wurden 3.872 Dateneinträge aus 169 Publikationen und Berichten manuell und 28.409 Dateneinträge aus 24 Publikationen und Berichten in Biozid-Datenbank eingetragen. Zusätzlich wurden 4.000.219 Datensätze mit Umweltkonzentrationen von Bioziden aus den zwei externen Datenbanken für die Integration in die Biozid-Datenbank aufgearbeitet. Der Datensatz der Biozid-Datenbank enthält somit insgesamt 4.032.500 Daten von 119 Bioziden und deren Transformationsprodukten, die in 31 Ländern des europäischen Kontinents, vor allem aus Frankreich, den Niederlanden, Deutschland und der Schweiz für verschiedene Umweltmatrizes erhoben wurden.

Summary

The aim of the project was to build a biocide database and to implement available environmental concentrations of biocides recorded within Europe from publications, reports, and already available databases.

The report describes the approach to identify relevant data and to implement these data into the database. The structure of the database, the sorting, evaluation of the literature and the methodological approach to extracting data from external databases are addressed. Relevant key data on quantitative contents of the database are presented.

For the new database, the existing database for "Pharmaceuticals in the Environment" (Dusi et al. 2019, Graumnitz et al. 2020, project number 97778 and 146562) was used as a technical basis and adapted to the new requirements.

The literature for the database was provided by the German Environment Agency. The literature provided consists of 25 reports, eight of them published by the German Environment Agency, 320 publications and two external databases (NORMAN EMPODAT Database-Chemical Occurrence Data and the dataset Rheinüberwachungsstation). The suitability of this literature for implementation in the biocide DB was evaluated according to self-defined criteria.

The implementation of relevant parameters from the provided literature into the database was done by manual entry. Large data sets and external databases were implemented by semi-automatic data entry into the database. The data from the external databases were adapted to the structure of the biocide database for data transfer.

As a result, 32,281 environmental concentrations of 117 biocides from 192 publications and reports were entered. In this process, 3,872 data entries from 169 publications and reports were entered manually and 28,409 data entries from 24 publications and reports were entered into biocide database. In addition, 4,000,219 data records with environmental concentrations of biocides from two external databases were processed for integration into the biocide database. The dataset of the biocide database thus contains a total of 4,032,500 data of 119 biocides and their transformation products measured in 31 countries, especially France, the Netherlands, Germany and Switzerland for different environmental matrices.

1 Einleitung

„Biozide sind Substanzen oder Produkte, die Schädlinge oder Lästlinge zerstören, abschrecken, unschädlich machen, ihre Wirkung verhindern oder sie auf eine andere Art und Weise bekämpfen sollen.“ (Biozid-Verordnung (EU) Nr. 528/2012). Die Anwendungsmöglichkeiten von Biozidprodukten sind vielfältig – so können sie beispielsweise im Materialschutz, der Schädlingsbekämpfung, aber auch im Bereich Antifouling bei Schiffen oder als Desinfektionsmittel eingesetzt werden. Ihre intensive Nutzung hat jedoch zur Folge, dass die enthaltenen Wirkstoffe heute teilweise ubiquitär in der Umwelt zu finden sind (Fuhrmann et al. 2006). Biozide gelangen durch die unterschiedlichsten Eintragspfade in verschiedene Umweltkompartimente, sei es durch das Abwasser aus Krankenhäusern (Lasek et al. 2018) oder Haushalten, (Fuchs et al., 2020, Wieck et al., 2018, Rager et al. 2019, Wulka et al. 2016) durch das Abwaschen von Baumaterialien (UBA, 2022b) oder das Lösen von Antifoulinganstrichen bei Schiffen (Watermann et al., 2015, Thomas et al. 2002, Kahle & Nöh, 2009, Koivisto et al. 2016, Kotthoff et al., 2018), wodurch letztlich auch Einträge in die Nahrungskette möglich sind. Mit dem unerwünschten Auftreten der Substanzen in der Umwelt sind gleichzeitig potentielle Risiken für Mensch und Ökosystem verbunden, da die biozide Wirkung auch Nicht-Zielorganismen betreffen kann (UBA, 2022a, UBA, 2022b). Vor allem schwer abbaubare und damit in der Umwelt langlebige Substanzen können den negativen Impact auf Nicht-Zielorganismen erhöhen, da es hier zu einer Akkumulation in den unterschiedlichen Matrices kommen kann (UBA, 2022, Jacob et al. 2018).

Um das Ausmaß der Umweltbelastung zu erfassen, werden zahlreiche Messungen von bioziden Wirkstoffen in verschiedenen Umweltmatrices durchgeführt und die Ergebnisse in Form von Berichten, wissenschaftlichen Publikationen und Datenbanken veröffentlicht. Durch die unterschiedliche Datenstruktur der Quellen ist es jedoch nur erschwert möglich, einen Überblick über die Verteilung der Schadstoffe in der Umwelt zu erhalten. Die Erstellung einer einheitlichen Übersicht aller in Europa gemessenen Daten bietet die Möglichkeit, das Vorkommen von Bioziden in der Umwelt besser zu analysieren und zu bewerten.

Ziel dieses Projektes ist es, die vom Umweltbundesamt bereitgestellten Expositionsdaten von Bioziden aus wissenschaftlichen Publikationen, Berichte und Datenbanken nach entsprechender Validierung in einer Datenbank zusammenzustellen. Die Auswahl der Expositionsdaten beschränkt sich dabei auf aktuell genehmigte bzw. im Genehmigungsverfahren befindliche Biozide und deren Transformationsprodukte. Hierfür werden die Daten manuell oder halbautomatisch aus der Literatur und externen Datenbanken in eine MySQL-Arbeitsdatenbank übertragen. Dabei kann auf bereits vorhandene Strukturen aus einem vergangenen Projekt „Arzneimittel in der Umwelt“ (Dusi et al., 2019, Graumnitz et al., 2020) zurückgegriffen werden.

Perspektivisch sollen die gesammelten Daten in eine öffentlich zugängliche Datenbank integriert werden und so zum Beispiel die Arbeit im regulatorischen Bereich unterstützen, aber auch der Information der Öffentlichkeit dienen.

2 Erstellung der Datenbank

2.1 Technischer Hintergrund der Datenbank

Die in der Literatur enthaltenen Messwerte von Bioziden einschließlich relevanter Metadaten wie beispielsweise Probenahmeort oder Matrix wurden aus Gründen der Praktikabilität zunächst durch manuellen oder halbautomatischen Dateneintrag in eine MySQL-Projektdatenbank eingepflegt. Die MySQL-Projektdatenbank wurde unter Verwendung von Open-Source-Webtechnologie mit einem LAMP-Server (Linux – Ubuntu 16.04 LTS, Apache 2.4.18, MySQL 5.7.23, PHP 7.0.32) im Campusnetz der TU Dresden gehostet. Der manuelle Dateneintrag erfolgte über ein PHP-basiertes Frontend. Der halbautomatische Dateneintrag erfolgte mittels der Software R® direkt in die MySQL-Projektdatenbank. Der technologische Hintergrund der MySQL-Projektdatenbank basiert auf der MySQL-Projektdatenbank der Datenbank „Arzneimittel in der Umwelt“ (Dusi et al., 2019, Graumnitz et al., 2020) und wurde an die Anforderungen der Biozid-Datenbank angepasst. Die finale Biozid-Datenbank wurde dem UBA als csv-Datei zur Verfügung gestellt.

2.2 Erarbeitung der Datenbankstruktur

Die Datenbankstruktur der MySQL-Projektdatenbank basiert im Wesentlichen auf der Struktur der Datenbank „Arzneimittel in der Umwelt“ (Dusi et al., 2019, Graumnitz et al., 2020). In Zusammenarbeit mit dem UBA wurde diese Datenbankstruktur an die Erfordernisse der neuen Biozid-Datenbank angepasst. Die wesentlichen Parameter der finalen Biozid-Datenbank sind in Tabelle 1 dargestellt und näher erläutert.

Tabelle 1: Parameter der finalen Biozid-Datenbank und nähere Beschreibung der Parameter

	Parameter	Beschreibung des Parameters
Biocide agent	Common/trivial biocide agent name	Trivialname des Biozids/Transformationsprodukts
	Additional agent name	Weiterer Namen des Biozids/Transformationsprodukts (IUPAC/CAS-Name)
	CAS-Number	CAS-Nummer
	Product Type	Produkttyp des Biozids nach Anhang V der Verordnung über Biozidprodukte (Verordnung (EU) Nr. 528/2012)
	Type of analyte (Parent, Transformation Product)	Information, ob es sich um eine Ausgangssubstanz oder ein Transformationsprodukt handelt
	Name of parent substance	Name der Ausgangssubstanz, wenn es sich bei der Substanz um ein Transformationsprodukt handelt
Sampling	Matrix	Umweltmatrix, in der gemessen wurde (vgl. Tabelle 7, Anhang A)

	Parameter	Beschreibung des Parameters
	Matrix comment	Nähere Informationen zur Matrix (z.B. Artname bei Matrix Biota)
	Sampling Location	Probenahmestelle (Name des Gewässers, des Ortes etc.)
	Sampling Province	Provinz/Gemeinde/Bundesland der Probenahme
	Sampling Country	Land in dem die Daten erhoben wurden
	Coordinates	Koordinaten der Probenahmestelle als WGS84-Dezimalkoordinaten, ggf. umrechnen der Originalkoordinaten
	Sampling Period	Beginn und Ende der Probenahme (Jahr)
	Number of Samples	Anzahl der Proben, die den Wert bilden
	Sampling description	Weitere Informationen zur Probenahme (exaktes Datum, genaue Beschreibung der Probenahmestelle und Probenahme)
Method of Measurement	Sampling method	Art der Probenahme (z.B. Stichprobe, Mischprobe etc.)
Results of Measurement	MEC (original/ standardised)	Gemessene Umweltkonzentration als originaler Wert und standardisiert auf Bezugseinheit (numerische Angabe)
	LoD (original/ standardised)	Nachweisgrenze als originaler Wert und standardisiert auf Bezugseinheit
	LoQ (original/ standardised)	Bestimmungsgrenze als originaler Wert und standardisiert auf Bezugseinheit
	Statistical Parameter	Angabe, ob es sich um einen Einzelwert, Maximalwert, Mittelwert, Kleiner-als-Wert etc. handelt
	Detection	Angabe, ob der angegebene Wert oberhalb der Bestimmungsgrenze (positive detection) oder unterhalb von Bestimmungsbzw. Nachweisgrenze liegt
Literature	Citation	Literaturzitat

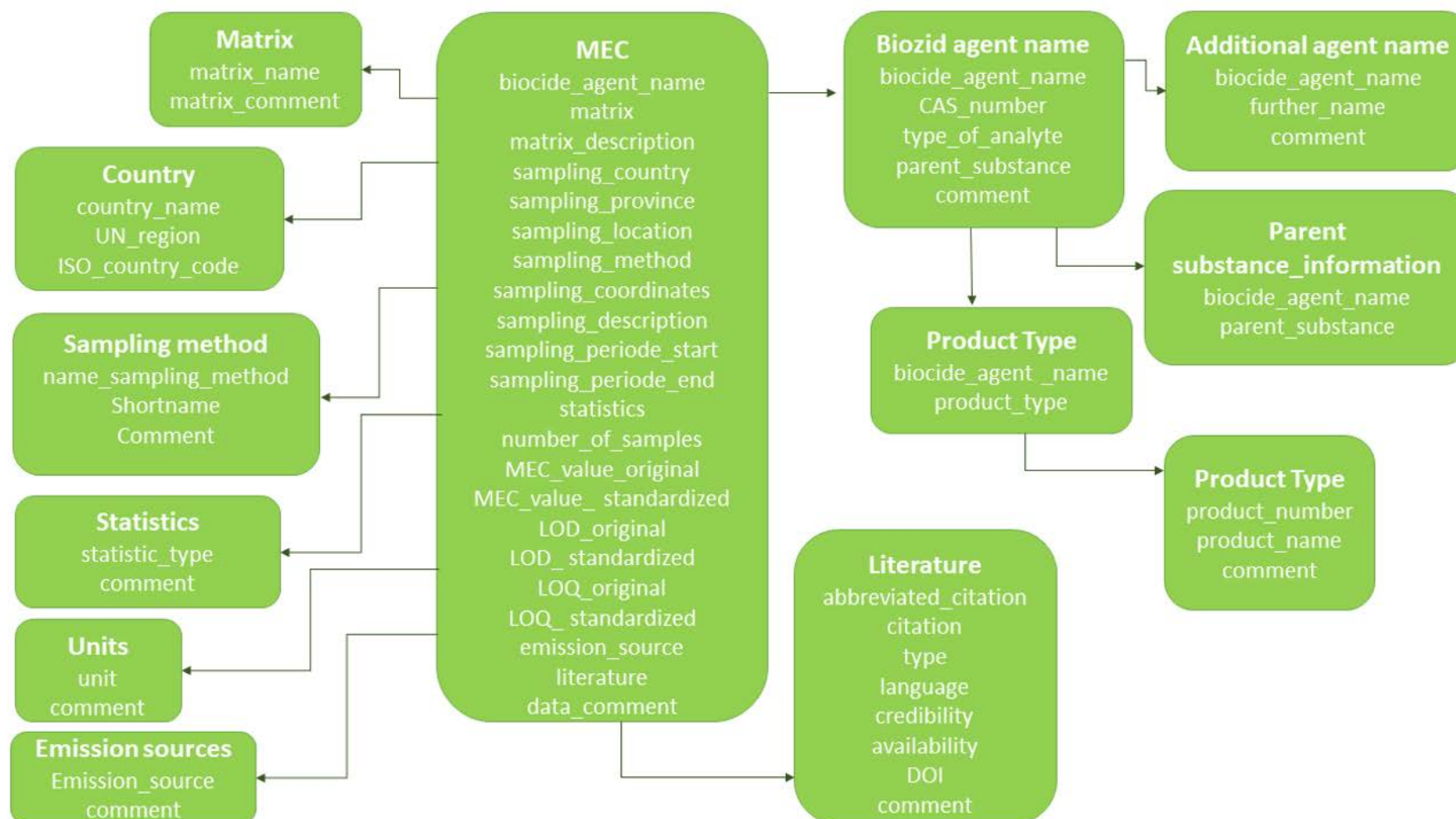
	Parameter	Beschreibung des Parameters
	Source of reference (DOI/ Link)	Link/DOI zur Literatur
	Type of Literature	Angabe, ob sich um Ergebnisse der Forschung von Universitäten, Forschungszentren, Behörden, Industrie etc. handelt
	Literature credibility	Glaubwürdigkeit der Literatur (vgl. Kapitel 3.1.1)

Wesentliche Änderungen an der Datenbankstruktur im Vergleich zur Datenbank „Arzneimittel in der Umwelt“ (Dusi et al., 2019, Graumnitz et al., 2020) beziehen sich auf das Hinzufügen von Spalten zur Tabelle „MEC“ oder dem Hinzufügen neuer Tabellen, die mit der Tabelle „MEC“ verknüpft sind (vgl. Abbildung 1). Diese Änderungen sind im Folgenden aufgelistet:

- ▶ Hinzufügen einer Spalte für die Koordinaten der Probenahmestelle (Format: WGS84, Dezimalgrad, x-Koordinate y-Koordinate)
- ▶ Hinzufügen von Spalten für Wert und Einheit des originalen/standardisierten LoQ
- ▶ Hinzufügen einer Spalte für nähere Informationen zur Matrix (Matrix comment)
- ▶ Hinzufügen einer Tabelle für die Probenahmemethode (sampling method)
- ▶ Hinzufügen einer Tabelle für die Produkttypen des Biozids nach Anhang V der Verordnung über Biozidprodukte (Verordnung (EU) Nr. 528/2012). Auf diese Weise können einer Substanz mehrere Produkttypen zugeordnet werden
- ▶ Hinzufügen einer Tabelle für die Ausgangssubstanzen. Auf diese Weise können einem Transformationsprodukt mehrere Ausgangssubstanzen zugeordnet werden.
- ▶ Hinzufügen einer Tabelle für weitere Substanznamen. Auf diese Weise können einer Substanz mehrere weitere Namen zugeordnet werden

Das Schema der finale MySQL-Projektdatenbank kann Abbildung 1 entnommen werden.

Abbildung 1: Datenbankstruktur der MySQL-Projektdatenbank



Quelle: eigene Darstellung GWT-TUD GmbH

2.3 Substanzliste der Biozide

Für die in der Datenbank einzutragenden Substanzen wurden die als Biozid bei der ECHA (European Chemicals Agency (ECHA), 2023) gelisteten Wirkstoffe berücksichtigt. Zusätzlich wurden in Absprache mit dem UBA weitere relevante Transformationsprodukte ergänzt.

Stoffe natürlichen Ursprungs (z.B. Zitronensäure, Knoblauch), Lebensmittelzusatzstoffe im Sinne der Verordnung (EG) Nr. 1333/2008, Organismen (z.B. *Willaertia subsp. magna*, C2c.Maky, *Saccharomyces cerevisiae*), Metalle (z.B. Kupfer) sowie schnell reagierende Substanzen (z.B. Aktivchlor aus verschiedenen Ausgangssubstanzen) wurden nicht weiter berücksichtigt. Fehlende CAS-Nummern wurden recherchiert und wenn möglich ergänzt.

Die finale Liste mit Substanzen, die für die Biozid-Datenbank berücksichtigt wurden, enthält 283 Substanzen und ist in Tabelle 6, Anhang A dargestellt.

3 Datenimplementierung

3.1 Kriterien für die Datenimplementierung

Die vom UBA über das bibliographische Datenbank Programm Zotero© zur Verfügung gestellte Literatur wurde zunächst auf Verwendbarkeit hin geprüft. Dazu wurden die bereitgestellten 17 Forschungsberichte, acht UBA-Berichte und 320 wissenschaftliche Publikationen hinsichtlich verschiedener Kriterien bewertet.

Um die Anzahl der in die Biozid-Datenbank eingetragenen Daten zu erhöhen, wurde der ursprünglich festgelegte Zeitraum 2015-2020 erweitert und auch Publikationen aus anderen Jahren zur Implementierung in die Biozid-Datenbank hinzugezogen (Zeitraum 1990-2021).

Für die Datenimplementierung sollten alle Publikationen und Berichte berücksichtigt werden, bei denen Umweltkonzentrationen von bioziden Wirkstoffen vorlagen, die in folgenden Matrices gemessen wurden:

Trinkwasser, Grundwasser, Gülle, Niederschlags-/ Regenwassereinträge, Uferfiltration, Sediment (Meeresmündung, Meer, See, Fluss/Bach, unspezifisch), Boden, Bodenwasser, Oberflächenwasser (Meeresmündung, Meer, See, Fluss/Bach, unspezifisch), Kläranlagen Zu- und Ablauf, Mischwasserüberläufe, Klärschlamm, Luft, Biota terrestrisch und aquatisch.

Diese Liste der relevanten Umweltmatrices wurde während der Projektlaufzeit ergänzt. Eine Liste der Umweltmatrices, die in der finalen Biozid-Datenbank enthalten sind, befindet sich im Anhang (Tabelle 7).

Der Ausschluss von Literatur von der Datenimplementierung erfolgte nach den folgenden Ausschlusskriterien:

- ▶ **Ohne MEC:** Die Literatur enthält keine Umweltkonzentrationen in den gewünschten Matrices
- ▶ **Ohne relevante Substanzen:** Die Literatur enthält keine Substanzen, die in der für das Projekt erstellten Liste der Biozide und Transformationsprodukte aufgeführt sind (vgl. Kapitel 2.3 und Tabelle 6, Anhang A)
- ▶ **Nicht Europa:** Die Publizierten Daten wurden nicht in Europa gemessen
- ▶ **Einheit:** Die gemessenen Umweltkonzentrationen sind in nicht vergleichbaren Einheiten angegeben
- ▶ **Sprache:** Die Publikationen und Berichte wurden nicht in englischer bzw. deutscher Sprache verfasst
- ▶ **Review:** Bei der Literatur handelt es sich um Review-Artikel, bei denen keine eigene Datenerhebung durchgeführt wurde.
- ▶ **Sonstige:** Die Literatur eignet sich aus sonstigen Gründen nicht für die Datenimplementierung in die Biozid-Datenbank (Umweltkonzentrationen liegen z.B. nur als Grafik vor)

Das Ergebnis der Zuordnung der Forschungsberichte, UBA-Berichte und wissenschaftlichen Publikationen zu den oben genannten Kategorien ist in Kapitel 3.2, Tabelle 2 dargestellt.

3.1.1 Bewertung der Literatur

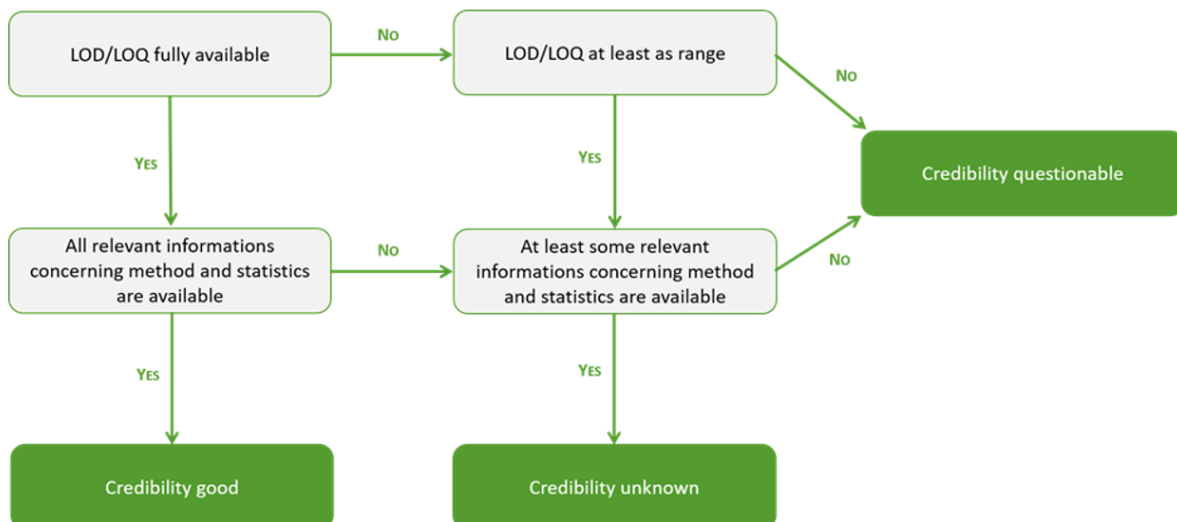
Nach der Prüfung der Daten bezüglich der in Tabelle 1 gelisteten Parameter wurde eine Bewertung für die in die Datenbank aufgenommenen Literatur („Credibility“) in die Kategorien „good“, „questionable“ und „unknown“ vorgenommen. Abbildung 2 zeigt, nach welchem Schema die Literatur bewertet wurde. Die Literatur wurde als gut bewertet, wenn für die Monitoringdaten eindeutige Detektionsgrenzen (LoD) und/oder Quantifikationsgrenzen (LoQ) aufgeführt werden. Zusätzlich wurde die Literatur nach der Qualität der Beschreibung der Methodik, der Messstellen und der Nachvollziehbarkeit der Studie bewertet.

Sollten wesentliche Parameter, wie z.B. Matrix, Probenahmestelle, Erläuterungen zur Statistik etc. nicht vollständig verfügbar gewesen sein und/oder der LoD/LoQ nur als Bereich angegeben sein, wurde die Literatur als „unknown“ eingestuft.

Wenn in der Literatur weder LoD noch LoQ angegeben war, die Beschreibung nicht nachvollziehbar war oder essenzielle Informationen bezüglich der Methodik oder der Standorte fehlten, wurde die Literatur mit „questionable“ bewertet.

Publikationen von Behörden sowie die externen Datenbanken wurden keiner Prüfung und Zuordnung in die Kategorien unterzogen, sondern bei *Credibility* mit „authority“ gekennzeichnet.

Abbildung 2: Interner Entscheidungsbaum für die Kategorisierung der wissenschaftlichen Publikationen bezüglich ihrer Plausibilität



Quelle: eigene Darstellung GWT-TUD GmbH

3.2 Daten aus wissenschaftlichen Publikationen und Berichten

Das Ergebnis der Kategorisierung der bereitgestellten Literatur nach den in Kapitel 3.1 erläuterten Kriterien ist in Tabelle 2 dargestellt. Von den durch das UBA bereitgestellten Publikationen und Berichten erfüllten 192 Publikationen und Berichte die Kriterien für die Implementierung in die Datenbank.

Tabelle 2: Ergebnis der Sortierung der bereitgestellten Literatur nach den Kriterien für die Datenimplementierung

Kategorie	Berichte	UBA-Berichte	Publikationen	Gesamt
Bereitgestellte Literatur	17	8	320	345
Ausgeschlossene Literatur	9	3	141	153
Ohne MEC	-	-	47	
Ohne relevante Substanzen	6	-	33	
Review	1	1	18	
Nicht Europa	1	-	22	
Einheit	-	-	4	
Sprache	-	-	3	
sonstige	1	2	14	
Ausgewertete Quellen	8	5	179	192
Manueller Dateneintrag	4	3	162	169
Halbautomatischer Dateneintrag	4	2	18	24

Von diesen 192 Publikationen und Berichten wurden **3.872** Dateneinträge aus **169** Publikationen und Berichten manuell in die Biozid-Datenbank eingetragen. In **24** Publikationen und Berichten waren sehr große Datenmengen enthalten, sodass diese mittels halbautomatischen Datenimport in die Biozid-Datenbank eingetragen wurden (vgl. Kapitel 3.2.1).

3.2.1 Import großer Datenmengen

Für Publikationen mit großen Datenmengen wurde der von Dusi et al. (2019) entwickelte Ansatz des halbautomatischen Datenimports in die MySQL-Projektdatenbank verwendet. Dazu wurde das gleiche generalisierte aber flexible Schema, bestehend aus einer Excel-Datei mit zwei Arbeitsblättern, verwendet und an die neue Biozid-Datenbank angepasst.

Im ersten Datenblatt (meta_table) werden alle Informationen, die benötigt werden, um einen Eintrag in der MySQL-Projektdatenbank zu generieren, implementiert. Das zweite Arbeitsblatt enthält eine Tabelle, in die Probenahmeinformationen, MEC-Werte, LoD- und/oder LoQ-Werte und eventuell statistische Informationen für jeden einzelnen MEC-Wert eingetragen werden.

Für den Datenimport in die MySQL-Projektdatenbank wurde ein an die Biozid-Datenbank angepasstes Import-Skript, basierend auf R (Version 4.2.1, R Core team, 2022), verwendet.

Die Ableitung der Detektion erfolgt beim halbautomatischen Datenimport automatisch über den mathematischen Vergleich von standardisierten MEC- und LoD/LoQ-Werten:

- ▶ MEC > LoD UND MEC > LoQ: positive detection
- ▶ MEC <= LoQ UND MEC > LoD: below quantification
- ▶ MEC <= LoD: below detection
- ▶ kein LoD und kein LoQ angegeben: not applicable

Die Berechnung der standardisierten MEC- und LoD/LoQ-Werten aus den originalen Werten erfolgte beim halbautomatischen Datenimport ebenfalls automatisch über die Einheiten der originalen Werte und Umrechnungsfaktoren.

Aus den **24** Publikationen und Berichten mit großen Datenmengen wurden in Summe **28.409** Umweltkonzentrationen von bioziden Wirkstoffen in die Biozid-Datenbank eingetragen.

3.3 Datenimport aus externen Datenbanken

3.3.1 Übersicht über die zu integrierenden externen Datenbanken

Zusätzlich zu den in Kapitel 3.2 beschriebenen Publikationen, konnte die Integration von Biozidmonitoringdaten aus zwei bereits existierenden Datenbanken in die Biozid-Datenbank realisiert werden. Nach Absprache mit dem UBA sollte die Integration dieser Datensätze zunächst nur für den Zeitraum 2015-2020 erfolgen.

Datensatz der Rheinüberwachungsstation, Weil am Rhein (RÜS), Umweltanalyse Wasserphase

Die Erhebung der Analysedaten der Matrix Wasser der binationalen Rheinüberwachungsstation, Weil am Rhein erfolgt durch das Amt für Umwelt und Energie des Kanton Basel-Stadt im Auftrag der Landesanstalt für Umwelt, Messungen und Naturschutz Baden-Württemberg (LUBW) und dem schweizerischen Bundesamt für Umwelt (BAFU) (AUE, 2022a). Der vom Amt für Umwelt und Energie auf opendata.swiss publizierte Gesamtdatensatz der Umweltanalyse Wasserphase wurde als csv-Datei heruntergeladen (AUE, 2022b). Der Datensatz wird im Folgenden als RÜS-Datensatz bezeichnet.

NORMAN EMPODAT Database - Chemical Occurrence Data

Aus dem, vom NORMAN-Netzwerk (Network of reference laboratories, research centres and related organisations for monitoring of emerging environmental substances) veröffentlichten, Datensatz "*Chemical Occurrence Data*", sollten Biozid-Daten in die Biozid-Datenbank integriert werden. Das NORMAN-Netzwerk organisiert die Entwicklung und Pflege verschiedener webbasierter Datenbanken für die Sammlung und Auswertung von Daten und Informationen über neu auftretende Stoffe in der Umwelt. Durch das UBA erfolgte die Abfrage von Biozid-Daten, die auf dem europäischen Kontinent für den Zeitraum 2015-2020 erhoben wurden aus der NORMAN EMPODAT Database *Chemical Occurrence Data* (NORMAN, 2022), im Folgenden als NORMAN-Datenbank (NORMAN-DB) bezeichnet. Die für die Matrices Abwasser, Biota, Grundwasser, Sedimente und Oberflächenwasser zur Verfügung stehenden Biozid-Daten wurden der GWT TUD GmbH durch das UBA als einzelne csv-Dateien bereitgestellt.

3.3.2 Vorgehensweise bei der Integration der externen Datenbanken

Bei der Integration der externen Datenbanken in die Biozid-Datenbank wurde wie folgt vorgegangen:

1. Einladen der originalen csv-Dateien in die Statistiksoftware R (siehe Kapitel 3.2.1)
2. Bearbeiten und Anpassen der originalen Datensätze an das Format der Datenbank. Dabei wurde im Detail wie folgt vorgegangen:
 - ▶ Abfragen relevanter Informationen der originalen Datensätze mittels SQL
 - ▶ Filtern relevanter Substanzen durch Abgleich der CAS-Nummern in den originalen Datensätzen mit den CAS-Nummern der Substanzliste der Biozid-Datenbank
 - ▶ Harmonisierung der Schreibweise der Substanzen

- Filtern nach dem relevanten Zeitraum (2015-2020), falls nötig
- 3. Export der angepassten Datensätze im csv-Format
- 4. Datenimport in die MySQL-Projektdatenbank mittels der Statistiksoftware R (siehe Kapitel 3.2.1)

Für die einzelnen Datenbanken ergaben sich spezifische Fragestellungen und Problematiken deren Lösung im Folgenden einzeln dargestellt werden:

Datensatz der Rheinüberwachungsstation, Weil am Rhein (RÜS), Umweltanalyse Wasserphase

Im Anschluss an das Filtern des Gesamtdatensatzes nach dem Zeitraum 2015-2020 und den relevanten bioziden Wirkstoffen, erfolgte die Abfrage relevanter Informationen mittels SQL in R. Einen Überblick über die Anpassung des RÜS-Datensatzes an die Struktur der Biozid-Datenbank gibt Tabelle 3.

Tabelle 3: Übersicht über die aus dem Datensatz der Rheinüberwachungsstation, Weil am Rhein (RÜS), Umweltanalyse Wasserphase übernommenen Informationen

Parameter RÜS-Datensatz	Parameter Biozid-DB
<i>geo_point_2d</i>	<i>sampling_coordinates_WGS84_dec</i>
<i>Probenahmedauer</i>	<i>sampling_description</i>
<i>BG</i>	<i>LoQ_original</i>
<i>Wert</i>	<i>MEC_orignal</i>
<i>Einheit</i>	<i>Unit_MEC_original</i> <i>Unit_LoQ_original</i>
<i>CAS-Bezeichnung</i>	<i>CAS_number</i>
<i>Probenahmedatum_date</i>	<i>sampling_description</i>
<i>Automatische_Auswertung</i>	<i>sampling_description</i>
<i>Probenahmejahr</i>	<i>sampling_period_start</i> <i>sampling_period_end</i>

Die Bedeutung der Abkürzung in der Spalte *Probenahmedauer* wurde recherchiert und in verständlichere Form umgewandelt ("14M_MK" = "336-h mixed sample, mix plastic", "1M_MS" = "24-h mixed sample", "1M14_MS" = "24-h mixed sample every 14 days, mix steel", "7M_MS" = "7-d mixed sample", "E28_MK" = "single measurement, mix steel").

Die Bedeutung der Spalte *Automatische_Auswertung* mit den Ausprägungen „True“ oder „False“ wurde bei der Fachstelle für OGD, Basel-Stadt per Mail angefragt. „Automatische Auswertung“ heißt, dass die Integration des Peaks von einem Algorithmus erledigt wurde und nur bei außerordentlich hohen Werten manuell nachkontrolliert wird. Sofern für einen Parameter zwei Resultate (einmal mit automatische Auswertung „True“ und einmal mit „False“) angegeben sind, ist dasjenige mit automatische Auswertung „True“ vorzuziehen.“ (persönliche Mitteilung per Mail vom 26.09.2022, Fachstelle für OGD Basel-Stadt). Dieser Mitteilung folgend wurden, wenn für einen Probenahmezeitpunkt und Parameter zwei Werte vorlagen, nur der behalten, für den bei der automatischen Auswertung „True“ angegeben war. Der zweite Wert mit der automatischen Auswertung = „False“ wurde aus dem Datensatz entfernt. Im Datensatz für den Zeitraum 2105-2020 gab es für **9.843** Messdaten zwei Analysewerte, einen Wert für

automatische Auswertung =“True“ und einen Wert für automatische Auswertung =“False“ (insgesamt also **19.686** Dateneinträge). Durch Entfernung dieser Daten wurde der Gesamtdatensatz also um **9.843** Dateneinträge reduziert. Weitere **413** Dateneinträge wurden aus dem Datensatz entfernt, weil das Feld mit dem MEC-Wert keine Zahl enthielt sondern nur die Bemerkung „n.bestimmbar“.

Die Spalte *Probenahmedauer_date* sowie die angepassten Parameter *Probenahmedauer* und *Automatische_auswertung* des Originaldatensatzes wurden zur Spalte *sampling_description* verkettet. Die Spalte *bg* (Bestimmungsgrenze) wurde zur Spalte *LoQ_original*. Die Berechnung der Information für die Detektion (Spalte *detection*) sowie der standardisierten Werte für MEC und LoQ erfolgte wie unter 3.2.1 beschrieben.

NORMAN EMPODAT Datenbank

Die csv-Dateien für die einzelnen Matrices Abwasser, Biota, Grundwasser, Oberflächenwasser und Sediment enthielten voneinander abweichende Strukturen (unterschiedliche Spaltenzahl und Spaltenbeschriftung). Die relevanten Informationen wurden mittels SQL für jede einzelne csv-Datei individuell abgefragt und an die Datenbankstruktur der Biozid-Datenbank angepasst. Tabelle 4 gibt einen Überblick über die aus den NORMAN-Datensätzen übernommenen Informationen und die Anpassung an die Struktur der Biozid-Datenbank.

Tabelle 4: Überblick über die aus der NORMAN-Datenbank in die Biozid-Datenbank übernommenen Daten und Informationen

Parameter in NORMAN-DB	Parameter Biozid-DB	Anmerkung
<i>Country</i>	<i>sampling_country</i>	
<i>Sampling site</i>	<i>sampling_description</i>	
<i>Longitude Decimal</i>	<i>sampling_coordinates_WGS84_dec</i> (zweiter Wert)	
<i>Latitude Decimal</i>	<i>sampling_coordinates_WGS84_dec</i> (erster Wert)	
<i>Sample matrix</i>	<i>matrix</i>	
<i>CAS No.</i>	<i>CAS_number</i>	
<i>Individual concentration</i>	<i>statistics</i> <i>detection</i>	
<i>Value</i>	<i>MEC_original</i>	
<i>Unit</i>	<i>Unit_original</i>	
<i>Sampling date –Day</i> <i>Sampling date –Month</i> <i>Sampling date –Year</i>	<i>sampling_description</i> <i>sampling_period_start</i> <i>sampling_period_end</i>	Die einzelnen Datumsspalten wurden zu einem Datum im Format JJJJ-MM-TT verknüpft, die Information aus der Spalte <i>sampling date-Year</i> wurde zudem in die Spalten 'Sampling Period Start' und 'Sampling Period End' übernommen

Parameter in NORMAN-DB	Parameter Biozid-DB	Anmerkung
<i>Species group</i>		
<i>Species name latin</i>	<i>matrix_description</i>	Nur relevant für Datensatz Biota
<i>Tissue element of species monitored</i>		
<i>Name of river/estuary/lake/reservoir</i>	<i>sampling_location</i>	
<i>Title of project</i>		
<i>Organisation</i>	<i>data_comment</i>	
<i>Contact</i>		
<i>Author</i>		
<i>Limit of detection (LoD)</i>	<i>LoD_original</i>	
<i>Limit of Quantification (LoQ)</i>	<i>LoQ_original</i>	
<i>Are the data controlled by competent authority (apart from accreditation body)?</i>	<i>data_comment (credibility)</i>	

Die automatische Ableitung der Information für die Spalte *Detection* aus dem MEC und dem LoD bzw. LoQ (vgl. 3.2.1) wurden beim Import der NORMAN-Datensätze in die Biozid-Datenbank ausgesetzt. Stattdessen wurde diese Information aus der Spalte *Individual concentration* der NORMAN-Datensätze übernommen und angepasst. „Less than LoQ“ wurde zu „below quantification“, „Less than LoD“ zu „below detection“ und „Individual value“ zu „positive detection“. Wenn keine Informationen vorhanden waren, wurde „not applicable“ eingetragen.

Zudem wurde aus der Spalte *Individual concentration* der NORMAN-Datensätze die Information für die Spalte *Statistics* abgeleitet. Für „Less than LoQ“ und „Less than LoD“ wurde „Smaller than“ und für „Individual value“ wurde „Single value“ in die Spalte eingetragen.

Die Matrizes der NORMAN-Datenbank wurden den Matrizes der Biozid-Datenbank zugeordnet. Einen Überblick dazu gibt Tabelle 5. Für die Matrizes des NORMAN-Datensatzes Biota wurden die Matrizes „Biota - Sea or Ocean“, „Biota - Lake“, „Biota - River/Stream“ und „Biota - Estuary“ neu zur Biozid-Datenbank hinzugefügt. Die Unterkategorien „Coastal water“, „Territorial (marine) water“ und „Sea water“ wurden sowohl für Biota als auch für die Matrizes Sedimente und Oberflächengewässer der jeweiligen Unterkategorie „Sea or Ocean“ der Biozid-Datenbank zugeordnet. Die Matrizes „Waste water – Municipal“, „Waste water – Industrial“ und „Waste water – Urban“ wurden alle der Matrix „Wastewater – unspecific“ zugeordnet. Die Information der verschiedenen Abwasser-Kategorien der NORMAN-DB wurden in der Spalte *Emission source* in der Biozid-Datenbank berücksichtigt. Für die Matrix „Waste water – Industrial“ als „Application – Industry“ und für die Matrizes „Waste water – Municipal“ und „Waste water – Urban“ als „Application - Urban Wastewater“.

Tabelle 5: Überblick über die Matrizes der NORMAN-Datenbank und die jeweilige Zuordnung zu den Matrizes der Biozid-Datenbank

Matrix NORMAN-DB	Matrix Biozid-DB
Biota - Coastal water	Biota - Sea or Ocean
Biota - Territorial (marine) water	
Biota - Lake water	Biota – Lake
Biota - River water	Biota - River/Stream
Biota - Terrestrial	Biota (terrestrial)
Biota - Transitional water	Biota - Estuary
Ground water	Groundwater
Sediments - Coastal water	Sediment - Sea or Ocean
Sediments - Territorial (marine) water	
Sediments - Lake water	Sediment - Lake
Sediments - River water	Sediment - River/Stream
Surface water - Coastal water	Surface Water - Sea or Ocean
Surface water - Sea water	
Surface water - Territorial (marine) water	
Surface water - Lake water	Surface Water - Lake
Surface water - River water	Surface Water - River/Stream
Surface water - Transitional water	Surface Water - Estuary
Waste water - Industrial	Wastewater - unspecific
Waste water - Municipal	
Waste water - Urban"	

Die Bewertung der eingetragenen Daten aus dem NORMAN-Datensatz erfolgte durch Ableitung der Informationen in der Spalte *Are the data controlled by competent authority* (apart from accreditation body)?

- ▶ „No“ → „credibility = Not applicable“
- ▶ fehlende Einträge (NA) → „credibility = unknown“
- ▶ „Yes“ → „credibility = good“

Diese Information wurde in die Spalte *data_comment* integriert.

Es wurden nur jene Substanzen aus der NORMAN-Datenbank übernommen die in der Substanzliste (vgl. Kapitel 2.3 und Tabelle 6, Anhang A) enthalten waren. Obwohl die NORMAN-Datensätze bereits bei der Abfrage durch das UBA nach Bioziden gefiltert wurden, wurden dennoch nicht alle Substanzen aus den NORMAN-Datensätzen in die Biozid-Datenbank übernommen. In Tabelle 8, Anhang A, sind die Substanzen aus den NORMAN-Datensätzen gelistet, welche nicht in die Biozid-Datenbank übernommen wurden.

3.3.3 Ergebnisse zur Integration der externen Datenbanken

Ergebnis der Aufarbeitung der Datenbank der Rheinüberwachungsstation, Weil am Rhein (RÜS)

Der Datensatz der Rheinüberwachungsstation, Weil am Rhein (RÜS), Umweltanalyse Wasserphase enthielt für den Zeitraum 2015 – 2020 insgesamt 900.898 Dateneinträge. Nach Abgleich und Filtern der CAS-Nummern RÜS-Datensatz mit den CAS-Nummern in der Liste der relevanten Biozide und weiterer Bearbeitung des Datensatzes wie in Kapitel 3.3.2 beschrieben, verblieben **58.981** Dateneinträge von **32** bioziden Wirkstoffen, die in die Biozid-Datenbank importiert wurden.

Ergebnis der Aufarbeitung der NORMAN EMPODAT Database

Der NORMAN-Datensatz Biota enthielt ursprünglich 13.563 Dateneinträge. Nach dem Filtern der relevanten Substanzen, also der Substanzen, die in der Substanzliste Biozide enthalten waren, waren noch 9.897 Dateneinträge enthalten. Zudem waren im Datensatz Einträge von Messung in der Antarktis enthalten, die entfernt wurden. Final wurden **9.427** Einträge des Biota-Datensatzes in die Biozid-Datenbank übernommen wurden. Der NORMAN-Datensatz Grundwasser enthielt ursprünglich 1.132 Dateneinträge. Davon wurden **830** Dateneinträge, die nach dem Filtern der relevanten Substanzen verblieben in die Biozid-Datenbank übernommen. Der NORMAN-Datensatz Sediment enthielt 2.919 Datensätze, von denen **1.949** Datensätze in die Biozid-Datenbank übernommen wurden. Der NORMAN-Datensatz Oberflächengewässer enthielt ursprünglich **5.662.416** Dateneinträge. Nach dem Filtern der relevanten Substanzen verblieben **3.924.693** Einträge im Datensatz. Von den 5.956 Dateneinträgen des NORMAN-Datensatzes Abwasser wurde **4.339** Dateneinträge in die Biozid-Datenbank integriert. In Summe wurden **3.941.238** Dateneinträgen aus **28** Ländern und von **64** bioziden Wirkstoffen und deren Transformationsprodukten aus dem Datensatz der NORMAN-Datenbank in die Biozid-Datenbank integriert.

4 Ausblick

Ziel des Projektes war die Zusammenstellung und Validierung von europaweit erfassten Biozidmonitoringdaten aus Publikationen, Berichten und externen Datenbanken. Dazu wurde vom UBA bereitgestellte Literatur auf Umweltkonzentrationen von Bioziden hin durchsucht. Als Ergebnis wurden 32.281 Umweltkonzentrationen von Bioziden aus 192 Publikationen und Berichten in die Biozid-Datenbank eingetragen. Zusätzlich wurden 4.000.219 Datensätze mit Umweltkonzentrationen von Bioziden aus zwei externen Datenbanken (Datensatz der Rheinüberwachungsstation (RÜS), Weil am Rhein: Umweltanalyse Wasserphase und NORMAN EMPODAT Database - Chemical Occurrence Data) für die Integration in die Biozid-Datenbank aufgearbeitet. Der Datensatz für die Biozid-Datenbank enthält somit insgesamt 4.032.500 Daten von 119 Bioziden und deren Transformationsprodukten, die in 31 Ländern des europäischen Kontinents erhoben wurden.

Die Datenbank sollte im nächsten Schritt einer ausführlichen Datenanalyse unterzogen werden, um einen Überblick über die derzeit in der Datenbank enthaltenen Biozid-Daten zu erhalten. Von Interesse wäre beispielsweise der Anteil von einzelnen Bioziden und Transformationsprodukten, Umweltmatrizes und Ländern am Gesamtdatensatz. So fehlen in der Biozid-Datenbank derzeit (Stand: 20.12.2022) beispielsweise Daten aus Belarus, Bosnien und Herzegowina, Estland, Irland, Island, Lettland, Litauen und Nordmazedonien. Außerdem waren von den 283 Bioziden und Transformationsprodukten der im Projekt genutzten Liste biozider Wirkstoffe nur 119 Biozide und Transformationsprodukte in der Literatur und den zwei integrierten Datenbanken enthalten (vgl. Tabelle 6, Anhang A). Durch eine Analyse des Datensatzes können zukünftig zielgerichteter Literaturrecherchen durchgeführt oder die Notwendigkeit von spezifischen Messprogrammen abgeleitet werden.

Zudem sollte ein Abgleich der aus Publikationen entnommen Daten mit dem sehr großen Datensatz der NORMAN EMPODAT Datenbank erfolgen, um Doppelungen im Datensatz auszuschließen. Des Weiteren sollte überprüft werden, ob Daten aus weiteren zur Verfügung stehenden Datenbanken mit Umweltkonzentrationen von Bioziden aus Dänemark, Schweden und den Niederlanden bereits im NORMAN-Datensatz enthalten sind oder eine Implementierung dieser Datenbanken eine sinnvolle Ergänzung der Biozid-Datenbank darstellt. Eine zukünftige Recherche sollte zudem weitere europäische Datenbanken mit einbeziehen.

Um die Datenbank immer auf dem aktuellen Stand zu halten ist zudem die Planung für zukünftige Literaturrecherche und Integration der Daten in den Folgejahren von Bedeutung.

5 Quellenverzeichnis

Monografie:

Zeitschriftenartikel:

Koivisto E., Koivisto P., Hanski I. K., Korkolainen T., Vuorisalo T., Karhilahti A., Välttilä V., Loivamaa I., Koivisto S., (2016) Prevalence of anticoagulant rodenticides in non-target predators and scavengers in Finland; Report of the Finnish Safety and Chemicals Agency (Tukes)

Kotthoff, Matthias; Rüdell, Heinz; Jüring, Heinrich; Severin, Kevin; Hennecke, Stephan; Friesen, Anton; Koschorreck, Jan (2018). First evidence of anticoagulant rodenticides in fish and suspended particulate matter: spatial and temporal distribution in German freshwater aquatic systems. *Environmental Science and Pollution Research*, (), -. doi:10.1007/s11356-018-1385-8

Lasek, F., Leitner, N. K., Rauwel, G., Blanchier, L., Castel, O., Ayraud-Thevenot, S., & Deborde, M. (2018). Discharge of biocidal products from healthcare activities into a sewage system- a case study at a French university hospital. *Environmental Science and Pollution Research*. doi:10.1007/s11356-018-3882-1

Rager, A.-M., Leopold, S., & Eilts, B. (2019). Biozidprodukte im Haushalt – Argumente gegen den Einsatz im Hinblick auf die Auswirkungen auf Mensch und Umwelt. *HAUSWIRTSCHAFT UND WISSENSCHAFT*.

Thomas, K. V., McHugh, M., & Waldock, M. (07 2002). Antifouling paint booster biocides in UK Coastal waters: inputs, occurrence and environmental fate. *Science of The Total Environment*, 293(1–3), 117–127. doi: 10.1016/S0048-9697(01)01153-6

Wieck, Stefanie; Olsson, Oliver; Kümmerer, Klaus (2018). Not only biocidal products: Washing and cleaning agents and personal care products can act as further sources of biocidal active substances in wastewater. *Environment International*, 115(), 247–256. doi: 10.1016/j.envint.2018.03.040

Wulka, A.-K., Ruedel, H., Pohl, K., & Schwarzbauer, J. (2016). Analytical method development for determination of eight biocides in various environmental compartments and application for monitoring purpose. *Environmental Science and Pollution Research*, 21, S. 21894-21907. doi:10.1007/s11356-016-7296-7

Berichte:

Dusi, E., Rybicki, M., Jungmann, D. (2019): The database "Pharmaceuticals in the Environment". Update and new analysis. UBA-Texte 67, FB000079. Umweltbundesamt Dessau, Deutschland.

Fuchs, S., Toshovski, S., Kaiser M., Sacher F., Thoma A., (2020): Belastung der Umwelt mit Bioziden realistischer erfassen - Schwerpunkt Einträge über Kläranlagen; UBA-Texte 169, FB000306. Umweltbundesamt Dessau, Deutschland

Graumnitz, S., Jungmann, D. (2021): The database "Pharmaceuticals in the Environment". Update for the period 2017-2020. UBA-Texte 163, FB000627/ENG. Umweltbundesamt Dessau, Deutschland.

Jacob, J., Broll, A., Esther, A., & Schenke, D. (2018). *Rückstände von als Rodentizid ausgebrachten Anticoagulanzen in wildlebenden Biota*. UBA-Texte 04, FB 002598. Umweltbundesamt.

Kahle, M., & Nöh, I. (2009). *Eintragspfade und Informationen zur Belastungssituation und deren Auswirkungen*. UBA-Texte 09, Fachgebiet IV 1.2 Umweltbundesamt Dessau, Deutschland

Watermann, Burkhard; Daehne, Dagmar; Fürle, Constanze; Thomsen, Anja (2015): Sicherung der Verlässlichkeit der Antifouling- Expositionsschätzung im Rahmen des EU-Biozid-Zulassungsverfahrens auf Basis der aktuellen Situation in deutschen Binnengewässern für die Verwendungsphase im Bereich Sportboothäfen. Umweltbundesamt (UBA). Dessau (TEXTE, 68/2015). Online verfügbar unter <http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/sicherung-der-verlaesslichkeit-der-antifouling>.

Bücher:

Fuhrmann, G. F., Aigner, A., Büch, T., Legrum, W., & Steffen, C. (2006). *Toxikologie für Naturwissenschaftler: Einführung in die Theoretische und Spezielle Toxikologie*. (C. Elschenbroich, F. Hensel, & H. Hopf, Hrsg.) Marburg: Teubner Studienbücher Chemie.

Gesetzestexte

Verordnung (EU) Nr. 528/2012 über die Bereitstellung auf dem Markt und die Verwendung von Biozidprodukten. (PDF) Das Europäische Parlament und der Rat der Europäischen Union, 22. Mai 2012, <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/DE/TXT/PDF/?uri=CELEX:32012R0528> (letzter Zugriff: 21.12.2022)

Internetadressen:

Amt für Umwelt und Energie (AUE) (2022a). Rheinüberwachungsstation Weil am Rhein (RÜS). <https://www.aue.bs.ch/umweltanalytik/rheinueberwachungsstation-weil-am-rhein.html> (letzter Zugriff: 05.09.2022)

Amt für Umwelt und Energie (AUE) (2022b). Rheinüberwachungsstation: Umweltanalyse Wasserphase. <https://opendata.swiss/de/dataset/rheinuberwachungsstation-umweltanalyse-wasserphase1> (letzter Zugriff: 05.09.2022)

European Chemicals Agency (ECHA). (10. 01 2023). *Information on biocides*. (ECHA) Von <https://echa.europa.eu/de/information-on-chemicals/biocidal-active-substances> abgerufen

NORMAN (2022). NORMAN EMPODAT Database - Chemical Occurrence Data <https://www.NORMAN-network.com/nds/empodat/chemicalSearch.php> (letzter Zugriff: 10.11.2022)

UBA. (14. 01 2022) (2022a). Pflanzenschutzmittel in der Umwelt. (Umweltbundesamt, Dessau-Roßlau) Abgerufen am 05. 01 2023 von <https://www.umweltbundesamt.de/daten/chemikalien/pflanzenschutzmittel-in-der-umwelt>

UBA. (01. 06 2022) (2022b). Biozide in der Umwelt. (Umweltbundesamt Dessau-Roßlau) Abgerufen am 05. 01 2023 von <https://www.umweltbundesamt.de/daten/chemikalien/biozide-in-der-umwelt>

A Anhang

Tabelle 6: Liste der bioziden Wirkstoffe, die beim Dateneintrag in die Biozid-Datenbank berücksichtigt wurden. Fett hervorgehoben sind diejenigen Wirkstoffe, die in der finalen Biozid-Datenbank enthalten sind.

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
10049-04-4		Chlorine dioxide generated from sodium chlorate and hydrogen peroxide in the presence of a strong acid
101463-69-8	Flufenoxuron	
10222-01-2	DBNPA	2,2-dibromo-2-cyanoacetamide
104653-34-1	LM 2219, Difethialone	3-[3-(4'-bromo[1,1'-biphenyl]-4-yl)-1,2,3,4-tetrahydro-1-naphthalenyl]-4-hydroxy-2H-1-benzothiopyran-2-one
10599-90-3		Monochloramine generated from ammonia and a chlorine source
10605-21-7	MBC, Carbendazime	methyl benzimidazol-2-ylcarbamate
1065124-65-3	epsilon-Momfluorothrin	2,3,5,6-tetrafluoro-4-(methoxymethyl)benzyl (1R,3R)-3-((Z)-2-cyanoprop-1-enyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate
107-02-8	Acrolein	prop-2-enal
107-22-2	Glyoxal	oxalaldehyde
107534-96-3	Tebuconazole	1-(4-chlorophenyl)-4,4- dimethyl-3-(1,2,4-triazol- 1-ylmethyl)pentan-3-ol
1085-98-9	Dichlofluanid	N-(Dichlorofluoromethylthio)-N',N'- dimethyl-N-phenylsulfamide
1111-67-7	copper thiocyanate	
111-30-8	Glutaraldehyde	1,5-pentanedial
111988-49-9	Thiacloprid	(Z)-3-(6-chloro-3-pyridylmethyl)-1,3-thiazolidin-2-ylidenecyanamide

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
112-12-9	methyl nonyl ketone	undecan-2-one
1166-46-7	d-Tetramethrin	(1,3,4,5,6,7-hexahydro-1,3-dioxo-2H-isoindol-2-yl)methyl (1R-trans)-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate
118712-89-3	Transfluthrin	2,3,5,6-tetrafluorobenzyl (1R,3S)-3-(2,2-dichlorovinyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate
119515-38-7	KBR 3023, Icaridin	sec-butyl 2-(2-hydroxyethyl)piperidine-1- carboxylate/Icaridine (Icaridine)
120068-37-3	RPA 030, Fipronil	5-amino-1-(2,6-dichloro- α,α,α -trifluoro-p-tolyl)-4-trifluoromethylsulfinylpyrazole-3-carbonitrile
120-32-1	Clorophene	2-Benzyl-4-chlorophenol
12122-67-7	Zineb	zinc ethylenebis(dithiocarbamate) (polymeric)
12124-97-9	Ammonium bromide	Ammonium bromide
122453-73-0	Chlorfenapyr	4-bromo-2-(4-chlorophenyl)-1-ethoxy methyl-5-trifluoromethylpyrrole-3-carbonitrile
122454-29-9	Tralopyril	4-bromo-2-(4-chlorophenyl)-5-(trifluoromethyl)-1H-pyrrole-3-carbonitrile
124-38-9		Carbon dioxide generated from propane, butane or a mixture of both by combustion
124-65-2	Sodium Cacodylate	Sodium dimethylarsinate
127-52-6	Chloramin B	Natrium-N-chlorbenzolsulfonamid
127-65-1	Chloramin T	Tosylchloramide sodium
128275-31-0	PAP, phthalimidoperoxyacaproic acid	6-(phthalimido)peroxyhexanoic acid
129-06-6	Warfarin sodium	Warfarin sodium
130328-18-6	Silver zeolite	Silver zeolite
1305-62-0		Calcium dihydroxide/calcium hydroxide/caustic lime/hydrated lime/slaked lime
1305-78-8		Calcium oxide/lime/burnt lime/quicklime

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
131341-86-1	Fludioxonil	4-(2,2-difluoro-1,3-benzodioxol-4-yl)-1H-pyrrole-3-carbonitrile
131860-33-8	Azoxystrobin	methyl (E)-2-{2-[6-(2-cyanophenoxy)pyrimidin-4-yloxy]phenyl}-3-methoxyacrylate
133-07-3	Folpet	N-(trichloromethylthio)phthalimide
134-62-3	DEET, Diethyltoluamide	N,N-diethyl-meta-toluamide
13463-41-7	Zinc pyrithione	Pyrithione zinc
135410-20-7	NI-25, Acetamiprid	(E)-N1-[(6-chloro-3-pyridyl)methyl]-N2-cyano-N1-methylacetamidine
137-26-8	Thiram	tetramethylthiuram disulfide
138261-41-3	Imidacloprid	(E)-1-(6-chloro-3-pyridylmethyl)-N-nitroimidazolidin-2-ylideneamine
13863-41-7		Bromine chloride
139734-65-9	Ampholyt 20	Amines, N-C10-16-alkyltrimethylenedi-, reaction products with chloroacetic acid
148-79-8	Thiabendazole	2-thiazol-4-yl-1H-benzimidazole
14915-37-8	Copper pyrithione	Bis(1-hydroxy-1H-pyridine-2-thionato- O,S)copper
153719-23-4	Thiamethoxam	(EZ)-3-(2-chloro-1,3-thiazol-5-ylmethyl)-5-methyl-1,3,5-oxadiazinan-4-ylidene(nitro)amine
15879-93-3	chloralose	(R)-1,2-O-(2,2,2-trichloroethylidene)-α-D-glucofuranose
164907-72-6	glucoprotamin	
165252-70-0	Dinotefuran	(EZ)-(RS)-1-methyl-2-nitro-3-(tetrahydro-3-furylmethyl)guanidine
168316-95-8	Spinosad	Spinosad
173584-44-6	Indoxacarb	methyl (S)-N-[7-chloro-2,3,4a,5-tetrahydro-4a-(methoxycarbonyl)indeno[1,2-e][1,3,4]oxadiazin-2-ylcarbonyl]-4'-(trifluoromethoxy)carbanilate
1746-81-2	Monolinuron	3-(4-chlorophenyl)-1-methoxy-1-methylurea

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
1802181-67-4	,	polyhexamethylene biguanide hydrochloride with a mean number-average molecular weight (Mn) of 1415 and a mean polydispersity (PDI) of 4.7 (PHMB(1415;4.7))
18472-51-0	CHDG, Chlorhexidine gluconate	D-gluconic acid, compound with N,N''-bis(4-chlorophenyl)-3,12-diimino-2,4,11,13-tetraazatetradecanediamidine(2:1)
188023-86-1	d-Phenothrin	3-phenoxybenzyl (1R)-cis,trans-2,2- dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate
20859-73-8	,	Aluminium phosphide releasing phosphine
214710-34-6	Polymeric betaine	N-Didecyl-N-dipolyethoxyammonium borate/Didecylpolyoxethylammonium borate
21564-17-0	TCMTB, (benzothiazol-2-ylthio)methyl thiocyanate	1,3-benzothiazol-2-ylsulfanylmethyl thiocyanate
22781-23-3	Bendiocarb	2,2-dimethyl-1,3-benzodioxol-4-yl methylcarbamate
23031-36-9	Prallethrin	2-methyl-4-oxo-3-(prop-2-ynyl)cyclopent-2-en-1-yl 2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate
231937-89-6	d-Allethrin	(RS)-3-Allyl-2-methyl-4-oxocyclopent-2-en-1-yl-(1R,3R;1R,3S)-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)-cyclopropanecarboxylate (mixture of 4 isomers 1R trans, 1R:1R trans, 1S: 1R cis, 1R: 1R cis, 1S 4:4:1:1) (d-Allethrin)
2372-82-9	BAPLA, Diamine	N-(3-aminopropyl)-N-dodecylpropane-1,3-diamine
240494-71-7	Epsilon-metofluthrin	2,3,5,6-tetrafluoro-4-(methoxymethyl)benzyl (EZ)-(1RS,3RS;1RS,3SR)-2,2-dimethyl-3-prop-1-enylcyclopropanecarboxylate
24634-61-5	Potassium Sorbate	Potassium (E,E)-hexa-2,4-dienoate
2527-58-4	DTBMA	2,2'-dithiobis[N-methylbenzamide]
2527-66-4	MBIT, 2-methyl-1,2-benzothiazol-3(2H)-one	2-methyl-2,3-dihydro-1,2-benzothiazol-3-one
25322-99-0	Polymeric quaternary ammonium bromide (PQ Polymer)	2-Propenoic acid, 2-methyl-, butyl ester, polymer with butyl 2-propenoate and methyl 2-methyl-2-propenoate

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
25655-41-8	Polyvinylpyrrolidone iodine	2-Pyrrolidinone, 1-ethenyl-, homopolymer, compd. with iodine
25988-97-0		Polymer of N-Methylmethanamine (EINECS 204-697-4 with (chloromethyl) oxirane (EINECS 203-439-8)/Polymeric quaternary ammonium chloride (PQ Polymer)
260359-57-7	Esbiothrin	(RS)-3-Allyl-2-methyl-4-oxocyclopent-2-enyl (1R,3R)-2,2-dimethyl-3-(2-methyl prop-1-enyl)-cyclopropanecarboxylate (mixture of 2 isomers 1R trans: 1R/S only 1:3)
26046-85-5	1R-trans phenothrin	(3-phenoxyphenyl)methyl (1R,3R)-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropane-1-carboxylate
26172-54-3	2-Methyl-4-isothiazolin-3-one hydrochloride	2-methyl-2,3-dihydro-1,2-thiazol-3-one hydrochloride
26172-55-4	CMIT, Chlormethylisothiazolinon	5-Chloro-2-methyl-2H-isothiazol-3-one
2634-33-5	BIT, 1,2-benzisothiazolin-3-one	1,2-benzisothiazol-3(2H)-one
26530-20-1	OIT, Ocithilone	2-octyl-2H-isothiazol-3-one
2682-20-4	MIT, Methylisothiazoline	2-methyl-2H-isothiazol-3-one
27083-27-8		polyhexamethylene biguanide hydrochloride with a mean number-average molecular weight (Mn) of 1600 and a mean polydispersity (PDI) of 1.8 (PHMB(1600;1.8))
27519-02-4	Muscalure	cis-tricos-9-ene
27668-52-6	Dimethyloctadecyl[3-(trimethoxysilyl)propyl]ammonium chloride	1-Octadecanaminium, N,N-dimethyl-N-[3-(trimethoxysilyl)propyl]-, chloride (1:1)
28159-98-0	Cybutryne	N'-tert-butyl-N-cyclopropyl-6-(methylthio)-1,3,5-triazine-2,4-diamine
28772-56-7	Bromadiolone	3-[(1RS,3RS;1RS,3SR)-3-(4'-bromobiphenyl-4-yl)-3-hydroxy-1-phenylpropyl]-4-hydroxycoumarin
2893-78-9	Troclosene sodium	sodium 3,5-dichloro-2,4,6-trioxo-1,3,5-triazinan-1-ide
3006-10-8	MES, Mecetronium etilsulfate	Dimethylethylhexadecylammonium-ethylsulfate

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
30507-70-1	(9Z,12E)-tetradeca-9,12-dien-1-yl acetate	(9Z,12E)-tetradeca-9,12-dien-1-yl acetate
312600-89-8	Cu-HDO	Bis(N-cyclohexyl-diazenium-dioxy)copper
32718-18-6	BCDMH,	Bromochloro-5,5-dimethylimidazolidine-2,4-dione
330-54-1	Diuron	3-(3,4-dichlorophenyl)-1,1-dimethylurea
3380-30-1	DCPP, Diclosan	5-chloro-2-(4-chlorphenoxy)phenol
3380-34-5	Triclosan	2, 4, 4' – Trichloro – 2'-hydroxy diphenyl ether
34123-59-6	Isoproturon	3-(4-isopropylphenyl)-1,1-dimethylurea
35367-38-5	DFB, Diflubenzuron	1-(4-chlorophenyl)-3-(2,6-difluorobenzoyl)urea
35554-44-0	Imazalil	1-[2-(allyloxy)-2-(2,4-dichlorophenyl)ethyl]-1H-imidazole
35575-96-3	Azamethiphos	S-[(6-chloro-2-oxooxazolo[4,5-b]pyridin-3(2H)-yl)methyl] O,O-dimethylthiophosphate
35691-65-7	DBDCB, Bromothalonil	2-bromo-2-(bromomethyl)pentanedinitrile
3586-55-8	(ethylenedioxy)dimethanol	2-(hydroxymethoxy)ethoxymethanol
3691-35-8	Chlorophacinone	2-[(RS)-2-(4-chlorophenyl)-2-phenylacetyl]indan-1,3-dione
37247-91-9		Calcium magnesium oxide/dolomitic lime
3811-73-2	Sodium pyrrithione	Pyridine-2-thiol 1-oxide, sodium salt
39445-23-3		Calcium magnesium tetrahydroxide/calcium magnesium hydroxide/hydrated dolomitic lime
39515-40-7	Cyphenothrin	.alpha.-cyano-3-phenoxybenzyl2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate)
4080-31-3	CTAC, Methenamine 3-chloroallylochloride	1-(3-chloroprop-2-en-1-yl)-3,5,7-triaza-1-azoniatricyclo[3.3.1.1~3,7~]decane chloride

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
41591-87-1	Dimethyltetradecyl[3-(trimethoxysilyl)propyl]ammonium chloride	dimethyl(tetradecyl)[3-(trimethoxysilyl)propyl]azanium chloride
420-04-2	Cyanamide	Cyanamide
4299-07-4	BBIT, Butylbenzothiazolinon	2-butyl-benzo[d]isothiazol-3-one
4719-04-4	HHT, Triazinetriethanol	2,2',2''-(hexahydro-1,3,5-triazine-1,3,5-triyl)triethanol
494793-67-8	Penflufen	2'-[(RS)-1,3-dimethylbutyl]-5-fluoro-1,3-dimethylpyrazole-4-carboxanilide
51-03-6	Piperonyl butoxide	2-(2-butoxyethoxy)ethyl 6-propylpiperonyl ether
51200-87-4	DMO, 4,4-dimethyloxazolidine	4,4-Dimethyl-1,3-oxazolidin
51229-78-8	cis-CTAC	cis-1-(3-chloroallyl)-3,5,7-triaza-1-azoniaadamantane chloride
52304-36-6	Ethyl butylacetylaminopropionate	3-(N-acetyl-N-butyl)aminopropionic acid ethyl ester
52315-07-8	Cypermethrin	(RS)-α-cyano-3-phenoxybenzyl-(1RS)-cis, trans-3-(2,2-dichlorovinyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate
52-51-7	Bronopol	2-bromo-2-nitropropane-1,3-diol
52645-53-1	Permethrin	3-phenoxybenzyl (1RS,3RS;1RS,3SR)-3-(2,2-dichlorovinyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate
52918-63-5	Deltamethrin	(S)-α-cyano-3-phenoxybenzyl (1R,3R)-3-(2,2-dibromovinyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate
533-74-4	Dazomet	Tetrahydro-3,5-dimethyl-1,3,5-thiadiazine-2-thione
5395-50-6	TMAD	Tetrahydro-1,3,4,6-tetrakis(hydroxymethyl)imidazo[4,5-d]imidazole-2,5 (1H,3H)-dione
54406-48-3	Empenthrin	1-ethynyl-2-methylpent-2-enyl 2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropanecarboxylate
55406-53-6	IPBC, Iodocarb	3-iodo-2-propynylbutylcarbamate

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
55566-30-8	THPS	Tetrakis(hydroxymethyl)phosphonium sulphate (2:1)
55965-84-9	Isothiazolinone CMIT-MIT	Mixture of 5-chloro-2-methyl-2H- isothiazol-3-one (EINECS 247-500-7) and 2-methyl-2H- isothiazol-3-one (EINECS 220-239-6) (Mixture of CMIT/MIT)
56073-07-5	Difenacoum	3-((1RS,3RS;1RS,3SR)-3-biphenyl-4-yl-1,2,3,4-tetrahydro-1-naphthyl)-4-hydroxycoumarin
56073-10-0	Brodifacoum	3-[(1RS,3RS;1RS,3SR)-3-(4'-bromobiphenyl-4-yl)-1,2,3,4-tetrahydro-1-naphthyl]-4-hydroxycoumarin
5625-90-1	MBM, N,N'-methylenebismorpholine	N,N'-methylenebismorpholine
57-06-7	Allyl isothiocyanate	3-Isouthiocyanato-1-propen
5836-29-3	Coumatetralyl	2-hydroxy-3-(1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-yl)chromen-4-one
59-50-7	Chlorocresol	4-Chlor-3-methylphenol
60207-90-1	Propiconazole	1-[[2-(2,4-dichlorophenyl)-4-propyl-1,3-dioxolan-2-yl]methyl]-1H-1,2,4-triazole
61789-18-2	ATMAC/TMAC, Coco alkyltrimethylammonium chloride	N,N,N-trimethyl-C12-18-(even numbered)-alkyl-1-aminium chloride
61790-53-2		Silicium dioxide (Silicium dioxide/Kieselguhr)
62-56-6	thiourea	
6317-18-6	Methylene dithiocyanate	Methylene dithiocyanate
64359-81-5	DCOIT, Dichlorooctylisothiazolinon	4,5-Dichloro-2-octylisothiazol-3(2H)-one (4,5-Dichloro-2-octyl-2H-isothiazol-3-one)
6440-58-0	DMDMH, Glydant	1,3-bis(hydroxymethyl)-5,5-dimethylimidazolidine-2,4-dione
64628-44-0	Triflumuron	2-chloro-N-[[[4-(trifluoromethoxy) phenyl]amino]carbonyl]benzamide
65733-16-6	S-Methoprene	isopropyl (E,E)-(S)-11-methoxy-3,7,11-trimethyldodeca-2,4-dienoate
66204-44-2	MBO, oxazolidin	

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
66215-27-8	Cyromazine	N-cyclopropyl-1,3,5-triazine-2,4,6-triamine
66230-04-4	Esfenvalerate	(S)-.alpha.-Cyano-3-phenoxybenzyl (S)-2-(4-chlorophenyl)-3-methylbutyrate
66603-10-9	K-HDO,	Diazene, cyclohexylhydroxy-, 1-oxide, potassium salt
67375-30-8	alpha-Cypermethrin	[1.alpha.(S*),3.alpha.]-(.alpha.)-cyano-(3-phenoxyphenyl)methyl-3-(2,2-dichloroethenyl)-2,2-dichlorovinyl)-2,2-dimethyl-cyclopropanecarboxylate
67564-91-4	Fenpropimorph	cis-4-[(RS)-3-(4-tert-butylphenyl)-2-methylpropyl]-2,6-dimethylmorpholine
67892-31-3		Trichoderma harzianum strain T-720
68359-37-5	Cyfluthrin	.alpha.-cyano-4-fluoro-3-phenoxybenzyl-3-(2,2-dichlorovinyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate
68391-01-5	ADBAC (C12-18), Benzalkonium chloride (C12-18)	Alkyl (C12-18) dimethylbenzyl ammonium chloride
68424-85-1	BKC, Benzalkonium chloride (C12-16)	Alkyl (C12-16) dimethylbenzyl ammonium chloride
68424-95-3	DDAC (C8-10), Didecyl dimethylammonium chloride	di(actyl-decyl)dimethylammoniumchloride
68876-77-7	Saccharomyces cerevisiae (yeast)	Saccharomyces cerevisiae (yeast)
68989-01-5		Quaternary ammonium compounds, benzyl-C12-18-alkyldimethyl, salts with 1,2-benzisothiazol-3(2H)-one 1,1-dioxide
7173-51-5	DDAC-C10, Didecyl dimethylammonium chloride	N-decyl-N,N-dimethyl-1-decanaminium chloride
71751-41-2	Abamectin	Abamectin
72490-01-8	CGA 114597, Fenoxycarb	ethyl 2-(4-phenoxyphenoxy)ethylcarbamate
72963-72-5	Imiprothrin	[2,4-Dioxo-(2-propyn-1-yl)imidazolidin-3-yl]methyl(1R)-cis-chrysanthemate;[2,4-Dioxo-(2-propyn-1-yl)imidazolidin-3-yl] methyl(1R)-trans-chrysanthemate

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
731-27-1	Tolylfluanid	Dichloro-N-[(dimethylamino)sulphonyl] fluoro-N-(ptolyl)methanesulphenamide
7440-22-4		Silver, as a nanomaterial
7446-09-5	Sulfur dioxide	Sulphur dioxide generated from sulphur by combustion
7647-15-6	Sodium bromide	Sodium bromide
7696-12-0	Tetramethrin	cyclohex-1-ene-1,2-dicarboximidomethyl (1RS,3RS;1RS,3SR)-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-en-1-yl)cyclopropanecarboxylate
7726-95-6		Active bromine generated from sodium bromide by electrolysis
7747-35-5	EDHO	7a-ethyl-dihydro-1H,3H,5H-oxazolo[3,4-c]oxazole
7782-50-5		Active chlorine generated from chloride of ambient water by electrolysis
7783-20-2	Ammonium sulfate	Ammonium sulfate
79-08-3		Bromoacetic acid
8001-58-9	Creosote	Creosote
8002-48-0		Malt, ext.
8003-34-7	Pyrethrins and Pyrethroids	5-methyl-4-oxo-3-penta-2,4-dien-1-ylcyclopent-2-en-1-yl 2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-en-1-yl)cyclopropanecarboxylate
80844-07-1	Etofenprox	2-(4-ethoxyphenyl)-2-methylpropyl 3-phenoxybenzyl ether
81-81-2	Warfarin	4-hydroxy-3-[(1RS)-3-oxo-1-phenylbutyl]coumarin
82657-04-3	Bifenthrin	2-methyl-3-phenylbenzyl (1RS)-cis-3-(2-chloro-3,3,3-trifluoroprop-1-en-1-yl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate
83-79-4	Rotenone	(2R,6aS,12aS)-1,2,6,6a,12,12a-hexa hydro-2-isopropenyl-8,9-dimethoxychromeno[3,4-b]furo[2,3-h]chromen-6-one

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
84625-29-6		Capsicum annum, ext.
84665-66-7	MMPP	Magnesium monoperoxyphthalate hexahydrate
84696-25-3		Margosa extract from cold-pressed oil of the kernels of Azadirachta Indica extracted with super-critical carbon dioxide
85409-22-9	ADBAC (C12-C14)	Alkyl (C12-C14) dimethylbenzylammonium chloride
85409-23-0	ADEBAC (C12-C14), Didecyldimethylammoniumchlorid	Alkyl (C12-C14) dimethyl(ethylbenzyl)ammonium chloride
86347-14-0	Medetomidine	(RS)-4-[1-(2,3-dimethylphenyl)ethyl]-3H-imidazole
86479-06-3	Hexaflumuron	1-(3,5-dichloro-4-(1,1,2,2-tetrafluoroethoxy)phenyl)-3-(2,6-difluorobenzoyl) urea
87-90-1	Symclosene	1,3,5-Triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-trione, 1,3,5-trichloro-
886-50-0	Terbutryn	N2-tert-butyl-N4-ethyl-6-methylthio-1,3,5-triazine-2,4-diamine
894406-76-9	DDACarbonate, DDACarbonate	1-Decanaminium, N-decyl-N,N-dimethyl-, carbonate (3:2)
90035-08-8	Flocoumafen	4-hydroxy-3-[(1RS,3RS;1RS,3SR)-1,2,3,4-tetrahydro-3-[4-(4-trifluoromethylbenzyloxy)phenyl]-1-naphthyl]coumarin
90-43-7	2-Phenylphenol	biphenyl-2-ol
91465-08-6	PP321, lambda-cyhalothrin	(R)-a-cyano-3-phenoxybenzyl (1S)-cis-3-[(Z)-2-chloro-3,3,3-trifluoropropenyl]-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate and (S)-a-cyano-3-phenoxybenzyl (1R)-cis-3-[(Z)-2-chloro-3,3,3-trifluoropropenyl]-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate
92047-76-2	TCDO, Tetrachlorodecaoxide complex	Tetrachlorodecaoxide
94361-06-5	Cyproconazole	(2RS,3RS;2RS,3SR)-2-(4-chlorophenyl)-3-cyclopropyl-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol
94667-33-1	Bardap 26	Poly(oxy-1,2-ethanediyl), .alpha.-[2-(dide cilmethylammonio)ethyl]- .omega.- hydroxy-, propanoate

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
95737-68-1	Sodium pyrrithione	pyriproxyfen
Transformationsprodukte		
104390-58-1	CGA 118245	3-[2-(2,4-dichlorophenyl)-2-[1,2,4]triazol-1-yl-methyl-[1,3]dioxolan-4-yl]-propan-1-ol
10453-89-1	d-t-CRA / d-c-CRA, chrysanthemic acid	2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-enyl)cyclopropane-1-carboxylic acid
108-78-1	CGA 235129, Melamine	1,3,5-triazine-2,4,6(1H,3H,4H)-trimine
110-91-8	morpholine	morpholine
113665-89-7	[8,9-Z]-avermectin B1a	Spiro[11,15-methano-2H,13H,17H-furo[4,3,2-pq][2,6]benzodioxacyclooctadecin-13,2'-[2H]pyran]
1172-63-0	Jasmolin II	
1185255-09-7	R234886 , Benzeneacetic acid/ Azoxystrobin acid	2-[[6-(2-cyanophenoxy)-4-pyrimidinyl]oxy]-α-(methoxymethylene)-, (αE)-
119711-41-0	PGH, 1-Propargyl imidazol idine-2,4-dione	1-prop-2-ynylimidazolidine-2,4-dione
120067-83-6	Fipronil sulfide	5-amino-1-(2,6-dichloro-4-(trifluoromethyl)phenyl)-4-trifluoromethylthio-1-pyrazole-3-carbonitrile
120068-36-2	Fipronil sulfone	5-amino-1-(2,6-dichloro-a,a,a-trifluoro-p-tolyl)-4-trifluoro-methylsulfonylpyrazole-3-carbonitrile
120739-62-0	IM-1-4	6-Chloro-N-methyl-3-pyridinemethanamine
120-93-4	EU, Ethylenurea	imidazolidin-2-one
121-20-0	cinerin II	
121-21-1	pyrethrin I	
121-29-9	pyrethrin II	

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
126120-85-2	CGA 192155	(2,2-difluoro-benzo(1,3)dioxol-4-carbocyclic acid
13826-35-2	3-phenoxybenzyl alcohol	3-phenoxybenzyl alcohol
140-38-5	CPU , 4-chlorophenylurea	1-(p-chlorophenyl)-urea
1418095-12-1	CGA 339833	3-carbamoyl-2-cyano-3-(2,2-difluoro-1,3-benzodioxol-4-yl)oxirane-2-carboxylic acid
142346-93-8	DPH-Pyr	4-(2-pyridin-2-yloxypropoxy)phenol
146726-17-2	4-OH-bifentrin, 4-hydroxy-bifenthrin	(2-Methyl-3-biphenyl)methyl (1S,2S,3S)-3-[(1Z)-2-chloro-3,3,3-trifluoro-1-propen-1-yl]-2-(hydroxymethyl)-2-methylcyclopropanecarboxylate
15103-48-7	PSA, 2-pyridinesulfonic acid	Pyridine-2-sulfonic Acid
156304-01-7	CL 312094	1H-Pyrrole-3-carbonitrile,2-(4-chlorophenyl)-1-(ethoxymethyl)-5-(trifluoromethyl)-
159600-61-0	4'-OH-pyriproxyfen	4-[4-[2-(2-Pyridinyloxy)propoxy]phenoxy]phenol
162965-64-2	4'-OH	
168844-45-9	PYPAC	2-(Pyridin-2-yloxy)propanoic acid
1701-82-2	t-COOH-CA / c-COOH-CA,	
17834-02-5	6-hydroxy warfarin	4,6-dihydroxy-3-(3-oxo-1-phenylbutyl)chromen-2-one
17834-03-6	7-hydroxy warfarin	4,7-dihydroxy-3-(3-oxo-1-phenylbutyl)chromen-2-one
198774-27-5	PG, N-Propargyl glycine	
20054-45-9	2-mercapto-N-methyl benzamide	N-methyl-2-sulfanylbenzamide
200568-74-7	IN-JT333, N-Decarboxymethylated indoxacarb	methyl (4aS)-7-chloro-2-[[4-(trifluoromethoxy)phenyl]carbamoyl]-3,5-dihydroindeno[1,2-e][1,3,4]oxadiazine-4a-carboxylate
205650-69-7	RPA 200766 , Fipronil amide (RPA 200766)	5-amino-1-[2,6-dichloro-4-(trifluoromethyl)phenyl]-4-[(trifluoromethyl)sulfinyl]-1H-pyrazole-3-carboxamide

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
210880-92-5	CGA 322704, Clothianidin	(E)-1-(2-chloro-1,3-thiazol-5-ylmethyl)-3-methyl-2-nitroguanidine
22961-82-6	NC 7312, bendiocarb phenol	2,2-dimethylbenzo[1,3]dioxol-4-ol
2345-56-4	Malonamic acid	3-Amino-3-oxopropanoic acid
23505-33-1	M-12, 1,3-Benzodioxole-5-carboxylic acid, 6-propyl-	6-propyl-1,3-benzodioxole-5-carboxylic acid
236108-67-1	IM-1-2, (N'-(Aminocarbonyl)-N-[(6-chloro-3-pyridinyl)methyl]-N-methylethanimidamide)	
2385945-54-8	4-hydroxy-2-methyl-1,2-benzothiazol-3(2H)-one	
240802-59-9	R401553	2-[(1,6-Dihydro-6-oxo-4-pyrimidinyl)oxy]benzonitrile
24579-14-4	4'-hydroxy warfarin	5,6,7,8-tetradeuterio-4-hydroxy-3-[1-(4-hydroxyphenyl)-3-oxobutyl]chromen-2-one
25402-06-6	cinerin I	
28614-07-5	bromadiolone ketone	3-[(1RS)-3-(4'-bromobiphenyl-4-yl)-3-oxo-1-phenylpropyl]-4-hydroxy-2H-chromen-2-one
288-88-0	BF 480-16, 1,2,4-Triazole	1H-1,2,4-triazole
30125-65-6	GS 26575, terbutryn-desethyl	2-N-tert-butyl-6-methylsulfanyl-1,3,5-triazine-2,4-diamine
3151-48-2	NNOOA , (octylcarbamoyl)formic acid	2-(octylamino)-2-oxoacetic acid
3151-49-3	NNOMA , N-(n-octyl) malonamic acid	3-(octylamino)-3-oxopropanoic acid
33693-04-8	Terbumeton	2-methoxy-4-tert-butylamino-6-aethylamino-s-triazin
33813-20-6	DIDT, Etem	5,6-dihydro-(1H,3H)-imidazo[2,1-c]-1,2,4-dithiazole-3-thione
3567-62-2	DCPMU , diuron-desmethyl	N-(3,4-dichlorophenyl)-N-methylurea

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
365441-66-3	IM-1-5, N-[(6-Chloro-3-pyridyl)methyl]-N-methylacetamidine	N-[(6-chloropyridin-3-yl)methyl]-N-methylethanimidamide
3739-38-6	3-PBA , 3-Phenoxybenzoic acid	3-phenoxybenzoic acid
3839-22-3	2-Cyanobenzoic acid	
385-00-2	DFBA , 2,6-difluorobenzoic acid	2,6-difluorobenzoic acid
3984-14-3	N,N-DMS, N.N-Demethylsulfamid	
40136-43-4	metabolite ; 2-(methylcarbamoyl)benzenesulfonate	
4084-38-2	TFB-OH, 2,3,5,6-Tetrafluorobenzyl alcohol	(2,3,5,6-tetrafluorophenyl)methanol
41363-39-7	2-carbamoylbenzenesulfonic acid	2-carbamoylbenzenesulfonic acid
42105-98-6	N-methyl malonamic acid	3-(methylamino)-3-oxopropanoic acid
4466-14-2	jasmolin I	
4640-01-1	Methyltriclosan	Triclosan Methyl Ether
4710-17-2	DMSA, N,N-Dimethyl-N'-phenylsulfamide	
50-00-0	Formaline	formaldehyde
52369-55-8	metabolite 1, N-Methyl-2-(methylthio)benzamide	N-methyl-2-methylsulfanylbenzamide
526-37-4	CGA 355190	4H-1,3,5-Oxadiazine-4-one, 3-[(2-chloro-5-thiazolyl)methyl]tetrahydro-5-methyl-
5326-23-8	IC-0 , 6-Chloronicotinic acid	6-chloro-3-pyridinecarboxylic acid
54705-16-7	2-methylsulfanyl-benzamide	

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
54705-23-6	N-methyl-2-(methylsulfinyl) benzamide	
55-21-0	Benzamid	Benzenecarboxamide
556-61-6	MITC, methylisothiocyanate	methyl isothiocyanate
55701-05-8	DCVA , permethric acid	3-(2,2-Dichlorovinyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylic acid
63597-73-9	ddca, Br2CA	3-(2,2-Dibromovinyl)-2,2-dimethyl-(1-cyclopropane)carboxylic acid(cis isomer)por
652-18-6	TFB-COOH, 2,3,5,6-Tetrafluorobenzoic acid	2,3,5,6-tetrafluorobenzoic acid
66753-07-9	2-Hydroxy-terbuthylazine	6-(tert-butylamino)-4-(ethylamino)-1H-1,3,5-triazin-2-one
66840-71-9	DMST, N,N-dimethyl-N'-p-tolysulphamide	1-(dimethylsulfamoylamino)-4-methylbenzene
68359-57-9	FCR 1260	4-fluoro-3-phenoxybenzaldehyde
7462-62-6	NNOA, N-(n-octyl) acetamide	N-octylacetamide
749864-16-2	icaridin acid	2-(1-(sec-butoxycarbonyl)piperidin-2-yl)acetic acid
76114-73-3	PBC, 2-Propynyl butylcarbamate	
77279-89-1	FPB-acid,	
79-16-3	N-methyl acetamide	N-methylacetamide
82070-43-7	, hydroxy-N-methyl-2-(methylthio)benzamide	
82985-33-9	Terbutryn-sulfoxid	2-N-tert-butyl-4-N-ethyl-6-methylsulfinyl-1,3,5-triazine-2,4-diamine
850227-76-8	compound Ia , cyclopropane acid	(Z)-3-(2-chloro-3, 3, 3-trifluoropropenyl)-2, 2-dimethylcyclopropanecarboxylic acid

CAS-Nummer	Substanzname (Trivialname)	Substanzname (IUPAC/CAS Name)
85-41-6	Phthalimide	isoindole-1,3-dione
88-97-1	Phthalamic acid	2-carbamoylbenzoic acid
88-99-3	Phthalic acid	benzene-1,2-dicarboxylic acid
890044-32-3	CL322,250/BCCPCA,	
90250-68-3	DMST-acid, dimethylsulfotoluidid-acid	
934-32-7	2-AB, 2-Aminobenzimidazol	1H-benzimidazol-2-amine
939773-27-0	CPG, N-Carbamoyl-N-propargylglycine	
951009-69-1	R402173	2-[[6-(2-Cyanophenoxy)-4-pyrimidinyl]oxy]benzoic Acid; 2-((6-(2-Cyanophenoxy)pyrimidin-4-yl)oxy)benzoic Acid
96-45-7	imidazolidine-2-thione	imidazolidine-2-thione
96495-13-5	compound XV, hydroxylated lambda cyhalothrin	(RS)-a-cyano-3-(4-hydroxyphenoxy)benzyl-(Z)-:(RS)-cis-3-(2-chloro-3,3,3-trifluoropropenyl)-2,2-dimethylcyclopropanecarboxylate

Tabelle 7: Auflistung der in der finalen Biozid-Datenbank enthaltenen Umweltmatrizes

Matrix englisch	Matrix deutsch
Biota (aquatic)	Aquatische Organismen, allgemein
Biota (terrestrial)	Terrestrische Organismen
Biota - Sea or Ocean	Organismen (Meer)
Biota - Estuary	Organismen, Ästuar/Brackwasser
Biota – Lake	Organismen, See
Biota - River/Stream	Organismen, Fließgewässer
Combined sewer overflow	Überlauf der Mischwasserkanalisation
Drainage ditch	Entwässerungskanäle
Drinking Water	Trinkwasser
Dust	Staub
Groundwater	Grundwasser
Leachate	Sickerwasser
Manure - dung	Dung, fest
Manure - liquid	Dung, flüssig
Rain	Regen
Raw Water - Drinking Water Treatment Plant	Rohwasser von Wasserwerken vor Trinkwasseraufbereitung
Sediment - Estuary	Sediment, Ästuar/Brackwasser
Sediment - Lake	Sediment, Seen
Sediment - Reservoir	Sediment, Talsperren
Sediment - River/Stream	Sediment, Fließgewässern
Sediment - Sea or Ocean	Sediment, Meer
Soil	Boden
Stormwater runoff	Regenwasserabfluss
Surface Water - Aquaculture	Oberflächengewässer, Aquakultur
Surface Water - Estuary	Oberflächengewässer, Ästuar/Brackwasser
Surface Water - Lake	Oberflächengewässer, See
Surface Water - Pond	Oberflächengewässer, Teich
Surface water - Reservoir	Oberflächengewässer, Talsperre

Matrix englisch	Matrix deutsch
Surface Water - River/Stream	Oberflächengewässer, Fließgewässer
Surface Water - Sea or Ocean	Oberflächengewässer, Meer
Surface Water - unspecific	Oberflächengewässer, nicht näher spezifiziert
Suspended particulate matter - River/Stream	Schwebstoffe, Fließgewässer
Suspended particulate matter - Sea or Ocean	Schwebstoffe, Meer
Suspended particulate matter - WWTP effluent	Schwebstoffe, Kläranlagenablauf
Suspended particulate matter - WWTP inflow	Schwebstoffe, Kläranlagenzulauf
unknown	Matrix ist unbekannt oder Ergebnis der Messung in verschiedenen Matrices wird zusammen dargestellt
Wastewater, unspecific	Abwasser, nicht näher spezifiziert
Wastewater (untreated) - unspecific	Abwasser, nicht näher spezifiziert, unbehandelt
Wastewater hospital (untreated)	Abwasser Krankenhäuser, unbehandelt
Wastewater industrial (untreated)	Abwasser aus Industriegebieten, unbehandelt
Wastewater urban (untreated)	Abwasser aus Siedlungsgebieten, unbehandelt
Wastewater sludge	Abwasserschamm, nicht näher definiert
WWTP biosolid	Klärdünger
WWTP dehydrated sludge	Entwässerter Klärschlamm
WWTP effluent (treated)	Kläranlagenablauf, behandelt
WWTP inflow (untreated)	Kläranlagenzulauf, unbehandelt
WWTP primary effluent	Kläranlagenablauf, nach der 1. Reinigungsstufe
WWTP primary sludge	Klärschlamm, 1. Reinigungsstufe
WWTP secondary effluent	Kläranlagenablauf, nach der 2. Reinigungsstufe
WWTP secondary sludge	Klärschlamm, 2. Reinigungsstufe
WWTP sludge	Klärschlamm

Tabelle 8: Substanzen aus der NORMAN-Datenbank, deren Dateneinträge nicht in die Biozid-Datenbank übernommen wurde

Substanzname	CAS-Nummer
1,4-Dichlorobenzene	106-46-7
2-Mercaptobenzothiazole	149-30-4
4-Chloro-3,5-dimethylphenol	88-04-0
Abamectin B1a	65195-55-3
Benzoic acid	65-85-0
Chlorothalonil	1897-45-6
Chlorotoluron	15545-48-9
Chlorpyrifos-methyl	5598-13-0
Diazinon	333-41-5
Dichlorvos	62-73-7
Dimethoate	60-51-5
Endosulfan sulfate	1031-07-8
Fentin (Triphenyltin)	668-34-8
Malathion	121-75-5
Methomyl	16752-77-5
Phoxim	14816-18-3
Pirimiphos-methyl	29232-93-7
Prometryn	7287-19-6
Terbutylazine	5915-41-3
Triclocarban	101-20-2