

TEXTE

00/2024

Teilbericht

ChemSelect: Das Bewertungskonzept

Transformation im Chemikaliensektor durch
konzeptionelle Ansätze und Lebenszyklusbewertung
von Chemikalien

von:

Antonia Reihlen, Dirk Jepsen, Andreas Gruhlke
Ökopol GmbH, Hamburg

Dirk Bunke, Clara Löw
Öko-Institut e.V., Freiburg

Frank Hintsch
Frank Hintsch IT Consulting, Hamburg

Herausgeber:
Umweltbundesamt

TEXTE 00/2024

Ressortforschungsplan des Bundesministeriums für
Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und
Verbraucherschutz

Forschungskennzahl 3722 65 404 0

UBA-FB XXX

Teilbericht

ChemSelect: Das Bewertungskonzept

Transformation im Chemikaliensektor durch
konzeptionelle Ansätze und Lebenszyklusbewertung von
Chemikalien

von

Antonia Reihlen, Dirk Jepsen, Andreas Gruhlke
Ökopol GmbH, Hamburg

Dirk Bunke, Clara Löw
Öko-Institut e.V., Freiburg


Frank Hintsch
Frank Hintsch IT Consulting, Hamburg


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 der Studie:

Ökopol GmbH – Institut für Ökologie und Politik
Nernstweg 32-34
22765 Hamburg

Abschlussdatum:

Oktober 2025

Redaktion:

Fachgebiet IV 1.1 Internationales Chemikalienmanagement
Christopher Blum

Publikationen als pdf:

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

ISSN 1862-4804

Dessau-Roßlau, November 2024

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

Kurzbeschreibung: ChemSelect: Das Bewertungskonzept

Das Bewertungskonzept beschreibt die Bereiche, Kriterien und Indikatoren zur Nachhaltigkeitsbewertung von Stoffen mit der Online-Anwendung ChemSelect des Umweltbundesamtes. Die Bewertungskriterien betreffen: Nennung auf Problemstofflisten, physikalisch-chemische Gefahren, Humantoxizität, Umwelttoxizität, Exposition von Beschäftigten, Exposition von Verbraucher*innen, Exposition der Umwelt, Klima- und Ozonschädlichkeit, Ressourcenverbrauch, Kreislauffähigkeit und Verantwortung in der Lieferkette. Diese Hauptkriterien werden anhand von 1 bis 4 Unterkriterien ermittelt. Für jedes Unterkriterium wird die Bewertungsfarbe (rot/gelb/grün) anhand von Indikatoren ermittelt. Das Fehlen von Informationen wird ebenfalls berücksichtigt. Das Konzept beschreibt außerdem die Bewertungslogik für den Vergleich mehrerer Stoffe sowie die Bewertung und den Vergleich von Gemischen.

Da ChemSelect einfach und richtungssicher sein soll, sind möglichst einfache Indikatoren gewählt worden, die möglichst ohne vertiefte Expertise über Chemikalien oder Umweltwirkungen ermittelbar sind. Die Indikatoren sind tendenziell konservativ gewählt, um falsch-positiven Bewertungen zu vermeiden.

Abstract: ChemSelect – the assessment concept

The assessment concept describes the areas, criteria and indicators for the sustainability assessment of substances using the German Environment Agency's online application ChemSelect. The assessment criteria concern: Mention on lists of problematic substances, physical-chemical hazards, human toxicity, environmental toxicity, exposure of employees, exposure of consumers, exposure of the environment, climate and ozone depletion, resource consumption, recyclability and responsibility in the supply chain. These main criteria are determined on the basis of 1 to 4 sub-criteria. The assessment colour (red/yellow/green) is determined for each sub-criterion using indicators. The absence of information is taken into account. The concept also describes the evaluation logic for the comparison of several substances as well as the evaluation and comparison of mixtures.

As ChemSelect is intended to be simple and reliable, the simplest possible indicators have been chosen that can be determined without in-depth expertise on chemicals or environmental impacts. The indicators tend to be conservative in order to avoid false-positive assessments.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis.....	10
Tabellenverzeichnis	10
Abkürzungsverzeichnis	13
Zusammenfassung.....	15
Summary	21
1 Einleitung.....	26
2 Die Nachhaltigkeitsbewertung im Überblick.....	27
2.1 Bewertungsaspekte.....	27
2.2 Ermittlung der Bewertungsfarben	28
2.2.1 Stoffe.....	28
2.2.1.1 Unterkriterien	28
2.2.1.2 Hauptkriterien.....	29
2.2.2 Gemische	30
2.3 Die Ermittlung der Nachhaltigkeitsrangfolge bei Vergleichen von Chemikalien	31
2.3.1 Bildung der Ränge für Stoffe.....	32
2.3.2 Bildung der Ränge für Gemische.....	32
2.3.2.1 Hauptkriterien Listen, Human- und Umwelttoxizität	32
2.3.2.2 Klima- und ozonschädigende Wirkung, Ressourcenverbrauch, Kreislauffähigkeit	33
2.3.2.3 PC-Gefahren, Verantwortung des Lieferanten und Substituierbarkeit	34
2.4 Darstellung des Bewertungsergebnisses	35
2.4.1 Nachhaltigkeitsprofil.....	35
2.4.2 Nachhaltigkeitsvergleiche	38
2.5 Einstufungen von Stoffen und Unsicherheiten bei der Einstufung.....	38
3 Erläuterung der Haupt- und Unterkriterien	40
3.1 Nennung auf Problemstofflisten.....	40
3.2 Physikalisch-chemische Gefahren.....	41
3.3 Humantoxizität.....	41
3.3.1 Unterkriterium 1: Krebserzeugende, mutagene und reproduktionstoxische Wirkung.....	41
3.3.2 Unterkriterium 2: Störungen des Hormonsystems beim Menschen.....	41
3.3.3 Unterkriterium 3: Schädigungen bei Kontakt mit Haut und Augen.....	42
3.3.4 Unterkriterium 4: Weitere Schädigungen der menschlichen Gesundheit	42
3.4 Umwelttoxizität.....	43

3.4.1	Unterkriterium 1: Aquatische Toxizität	43
3.4.2	Unterkriterium 2: PBT/vPvB-Stoffe und Ferntransport	43
3.4.3	Unterkriterium 3: PMT/vPvM-Stoffe	44
3.4.4	Unterkriterium 4: Störungen des Hormonsystems in der Umwelt.....	45
3.5	Expositionspotenziale (Arbeiter, Verbraucher, Umwelt).....	46
3.5.1	Einleitung	46
3.5.2	Systematik der Haupt- und Unterkriterien zum Expositionspotenzial	47
3.5.3	Berechnung des Expositionspotenzials für Stoffe	48
3.5.3.1	Prüfung der Relevanz von Lebenszyklusstufen.....	48
3.5.3.2	Anwendung von Formeln zur Berechnung des Expositionspotenzials	49
3.5.4	Ermittlung der Parameter zur Berechnung der Expositionspotenziale für Stoffe	50
3.5.4.1	R = Freisetzungs-/Kontaktpotenzial.....	50
3.5.4.2	Einleitung zu den Faktoren	51
3.5.4.3	F_{mob} = Einfluss der Mobilität auf das Expositionspotenzial.....	51
3.5.4.4	F_{conc} = Konzentration des Stoffes im jeweiligen Lebenszyklusschritt	52
3.5.4.5	F_M = Anwendungsmenge	52
3.5.4.6	F_T = Faktoren, die sich aus Schutzgut und Lebenszyklusschritt ergeben.....	53
3.5.5	Ermittlung der Bewertungsfarbe für Unterkriterien und Hauptkriterien für Stoffe	54
3.5.6	Bildung von Rängen für Stoffe	55
3.5.7	Ermittlung der Bewertungsfarben für Gemische.....	55
3.5.7.1	Aggregation der Detailergebnisse der Einzelstoffe für das Gemisch	55
3.5.7.2	Weitere Schritte zur Ermittlung des Expositionspotenzials für Gemische	55
3.5.8	Bildung von Rängen für den Vergleich von Gemischen.....	56
3.6	Klima- und ozonschädigende Wirkung	56
3.6.1	Intrinsisches Treibhauspotenzial	56
3.6.2	CO ₂ -Emissionen während der Herstellung.....	57
3.6.3	Ozonschädigende Wirkung	57
3.7	Ressourcenverbrauch	57
3.7.1	Energieverbrauch.....	58
3.7.2	Wasserverbrauch	58
3.7.3	Verbrauch von Rohstoffen	58
3.7.3.1	Indikatoren für nachwachsende Rohstoffe	58
3.7.3.2	Indikatoren für nicht nachwachsende Rohstoffe	59
3.7.3.3	Erläuterungen und Referenzen.....	60

3.8	Kreislauffähigkeit	60
3.8.1	Anwendung des Hauptkriteriums Kreislauffähigkeit	61
3.8.1.1	Kreislauffähigkeit ist nicht relevant	61
3.8.1.2	Unterkriterium: Potenzial zurückgewonnen zu werden.....	61
3.8.1.3	Bewertung von Stoffen/Gemischen, die nicht zu einem Material/Produkt werden ...	62
3.8.1.4	Bewertung von Chemikalien die in/an Materialien Produkten integriert werden	62
3.8.2	Unterkriterium Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren	63
3.8.2.1	Bewertung von Chemikalien, die nicht zu Material/Produkt werden.....	63
3.8.2.2	Bewertung von Chemikalien, die in/an Material/Produkt integriert werden	63
3.8.3	Bewertung von Gasen.....	64
3.8.4	Detailbewertung der Unterkriterien nach Materialart.....	64
3.8.4.1	Keramik und mineralische Baumaterialien.....	64
3.8.4.2	Glas	65
3.8.4.3	Metalle.....	65
3.8.4.4	Papier.....	66
3.8.4.5	Holz	67
3.8.4.6	Leder	67
3.8.5	Polymer / Kunststoff / Plastik	67
3.8.5.1	Polymer / synthetische und natürliche Fasern / Textilien.....	68
3.8.5.2	Polymer / Gummi.....	69
3.8.5.3	Verbundmaterialien.....	70
3.9	Verantwortung des Lieferanten.....	70
3.9.1	Übernahme von Verantwortung für den Arbeitsschutz mit Bezug zum Produkt.....	70
3.9.2	Übernahme von Verantwortung für die Umwelt	70
3.9.3	Übernahme von Verantwortung für das soziale Umfeld.....	70
3.10	Substituierbarkeit.....	71
4	Weitere Erläuterungen zum Bewertungskonzept.....	75
4.1	Mangelnde Kenntnis über die Identität von Inhaltsstoffen in Gemischen	75
4.1.1	Hauptkriterien mit Bezug zur Gefährlichkeit von Stoffen.....	75
4.1.2	Lebenswegbezogene Hauptkriterien	75
4.2	Fehlende Kenntnis der genauen Konzentration von Inhaltsstoffen	76
4.3	„Inhärente Sicherheit“ in den Haupt- und Unterkriterien	77
4.4	„Vorrang von Rot“ bei gefährlichen Eigenschaften bei Gemischen	77
A	Anhänge.....	78

A.1	Formeln zur Berechnung des Expositionspotenzials	78
A.2	Auswahl von Freisetzungsszenarien	80
A.2.1	Arbeitsplatz	80
A.2.2	Verbraucher	80
A.2.3	Umwelt.....	82
A.3	Treibhausgasemissionen von Stoffen	83
A.4	Energieverbrauch für die Herstellung von Stoffen	89
A.5	Wasserverbrauch für die Herstellung von Stoffen.....	92

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Auszug aus einem Nachhaltigkeitsprofil (Beispiel)	35
Abbildung 2: Zusammenfassung einer Nachhaltigkeitsbewertung (Beispiel).....	37
Abbildung 3: Ablaufschema zur Ermittlung der drei Hauptkriterien zur Exposition.....	47
Abbildung 4: Screenshot ChemSelect: Abfrage der Lebenszyklusstufen	49
Abbildung 1: Auszug aus einem Nachhaltigkeitsprofil (Beispiel)	35
Abbildung 2: Zusammenfassung einer Nachhaltigkeitsbewertung (Beispiel).....	37
Abbildung 3: Ablaufschema zur Ermittlung der drei Hauptkriterien zur Exposition	47
Abbildung 4: Screenshot ChemSelect: Abfrage der Lebenszyklusstufen	49
Abbildung 5: Nutzerdialog zur Ermittlung der Freisetzung in die Umwelt: Formulierung und Verwendung von Gemischen als Prozesshilfsmittel	83
Abbildung 6: Nutzerdialog zur Ermittlung der Freisetzung in die Umwelt: Verwendung von Gemischen und Verarbeitung von Erzeugnissen	84
Abbildung 7: Nutzerdialog zur Ermittlung der Freisetzung in die Umwelt: Service life von Erzeugnissen und Behandlung von Chemikalienabfällen	85

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Überblick über Bewertungsbereiche und ihre Haupt- und Unterkriterien	27
Tabelle 2: Grundlegende Herangehensweise zur Bewertung der Hauptkriterien für Gemische	31
Tabelle 3: Herangehensweise zur Ermittlung der Ränge für Gemische	34
Tabelle 4: Risikohinweis Arbeitnehmer.....	36
Tabelle 5: Risikohinweis Verbraucher	36
Tabelle 6: Risikohinweis Umwelt.....	36
Tabelle 7: Listen, die beim Hauptkriterium „Problemstofflisten“ abgefragt werden	40
Tabelle 8: Indikatoren zu physikalisch-chemischen Gefahren	41
Tabelle 9: Indikatoren zur krebserzeugende, mutagene und reproduktionstoxische Wirkung.....	41
Tabelle 10: Indikatoren zu Störungen des Hormonsystems beim Menschen	42
Tabelle 11: Indikatoren zu Schädigungen bei Kontakt mit Haut und Augen	42

Tabelle 12: Indikatoren für Unterkriterium 4: Weitere Schädigungen der menschlichen Gesundheit.....	43
Tabelle 13: Indikatoren zur aquatischen Toxizität	43
Tabelle 14: Indikatoren zu PBT/vPvB-Stoffe und Ferntransport	44
Tabelle 15: Indikatoren zu PMT/vPvM-Stoffe	45
Tabelle 16: Indikatoren zu Störungen des Hormonsystems in der Umwelt	45
Tabelle 17: Ergebnisse pro Target – Beispiele: links Hydrauliköl und rechts Gartenstuhl	48
Tabelle 18: Indikatoren zur Bewertung der Mobilität – Factor F_{mob}	51
Tabelle 19: Indikatoren zur Festlegung des Faktors F_{conc} anhand der Konzentration des Stoffes	52
Tabelle 20: Faktor F_M für die Bewertung der Expositionspotenzials für Arbeiter	53
Tabelle 21: Faktor F_M für die Bewertung der Expositionspotenzials für Verbraucher	53
Tabelle 22: Faktor F_M für die Umweltbewertung	53
Tabelle 23: Faktor F_T für die Bewertung des Expositionspotenzials für Arbeiter	54
Tabelle 24: Faktoren F_T für die Bewertung des Expositionspotenzials für Verbraucher	54
Tabelle 25: Indikatoren zum intrinsischen Treibhauspotenzial	56
Tabelle 26: Indikatoren für CO ₂ -Emissionen während der Herstellung	57
Tabelle 27: Indikatoren für ozonschädigende Wirkungen	57
Tabelle 28: Indikator für den Energieverbrauch	58
Tabelle 29: Indikator für den Wasserverbrauch.....	58
Tabelle 30: Indikatoren zum Verbrauch an nachwachsenden Rohstoffen	59
Tabelle 31: Indikatoren zum Verbrauch an nicht nachwachsenden Rohstoffen	59
Tabelle 32: Indikatoren für Stoffe und Gemische, die nicht in/an/als Material gebunden werden	62
Tabelle 33: Fallunterscheidungen für die Detailprüfung bzgl. des Einsatzes in Materialien.....	63
Tabelle 34: Rückgewinnungspotenzial in/an/als Keramik oder für mineralischen Baumaterialien	64
Tabelle 35: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Keramik oder mineralischen Baumaterialien.....	64
Tabelle 36: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Glas	65
Tabelle 37: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Glas	65
Tabelle 38: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Metalle /Legierungen	66
Tabelle 39: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Metallen	66
Tabelle 40: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Papier	66
Tabelle 41: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Papier.....	66
Tabelle 42: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Leder	67

Tabelle 43: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Leder	67
Tabelle 44: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Kunststoff.....	68
Tabelle 45: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Plastik.....	68
Tabelle 46: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Textilien (Fasern)	68
Tabelle 47: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Textilien	69
Tabelle 48: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Gummi	69
Tabelle 49: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Gummi	69
Tabelle 50: Indikatoren für die Übernahme von Verantwortung für den Arbeitsschutz.....	70
Tabelle 51: Indikatoren für die Übernahme von Verantwortung für die Umwelt ..	70
Tabelle 52: Indikatoren für die Übernahme von Verantwortung für das soziale Umfeld.....	70
Tabelle 53: Indikatoren für die Substituierbarkeit von Stoffen	72
Tabelle 54: Indikatoren für die Substituierbarkeit von Gemischen	73
Tabelle 55: Formeln zur Berechnung des Expositionspotentials	78
Tabelle 56: Parameter für generische Freisetzungs- und Kontaktszenarien – Arbeiter	80
Tabelle 57: Freisetzungs- und Kontaktzentarien für das Schutzgut Verbraucher (Stoffe/Gemische)	81
Tabelle 58: Freisetzungs- und Kontaktzentarien für Erzeugnisse für das Schutzgut Verbraucher	82
Tabelle 59: Treibhausgasemissionen von Stoffen in den Kategorien rot, gelb und grün	86
Tabelle 60: Energieverbrauch für die Herstellung von Stoffen in den Kategorien rot, gelb und grün	89
Tabelle 61: Wasserverbrauch für die Herstellung von Stoffen in den Kategorien rot, gelb und grün	92

Abkürzungsverzeichnis

Air	Luft
Aquat.	Aquatisch
Art. Proc.	Verarbeitung von Erzeugnissen (article processing)
CLP	Regulation on the Classification, Labelling and Packaging of Chemicals; Verordnung zur Einstufung, Kennzeichnung und Verpackung von Chemikalien
CMR	Carcinogenic, Mutagenic and Reprotoxic substances; Karzinogene, Mutogene und Reproduktionstoxische Stoffe
Cons	Consumer - Verbraucher
CRM	Critical Raw Materials; Kritische Rohstoffe
ED	Endokriner Disruptor
EDC	Endocrine Disrupting Chemical; Endokrin wirksamer Stoff
ED List	Endocrine Disruptor List, Liste Endokriner Disruptoren
EMKG	Einfaches Maßnahmenkonzept Gefahrstoffe
env	Environment; Umwelt
EP	Expositionspotenzial
EU	Europäische Union
Form	Formulierung
GWP	Globales Erwärmungspotenzial (engl. Global warming potential)
hh	Human Health, Menschliche Gesundheit
H-Satz	Gefahrenhinweis gemäß CLP-Verordnung
Inhal	Inhalation
KMR	Karzinogene, Mutogene und Reproduktionstoxische Stoffe
L RTP	Long Range Transport Potential (Fähigkeit zum Ferntransport)
ODS	Ozone Depleting Substance; Ozonzerstörender Stoff
OECD	Organisation for Economic Cooperation and Development; Organisation für Wirtschaftliche Zusammenarbeit und Entwicklung
Oral	Oral, Aufnahmeweg Ingestion
PBT/vPvB	Persistente, Bioakkumulierbare und Toxische Stoffe / sehr Persistente und sehr Bioakkumulierbare Stoffe
PC	Physikalisch-chemisch
PFAS	Per- und polyfluorierte Alkylsubstanzen
PMT/vPvM	Persistent, Mobile und Toxische Stoffe / sehr Persistente und sehr Mobile Stoffe
POP	Persistent Organic Pollutants; Persistente Organischen Schadstoffe
REACH	Regulation on the registration, evaluation, authorisation and restriction of chemicals; Verordnung über die Registrierung, Evaluierung, Zulassung und Beschränkung von Chemikalien

Service life	Nutzungsphase von Erzeugnissen
SIN – Liste	Substitute It Now – Liste; Liste sofort zu ersetzender Stoffe
Skin	Haut – Aufnahmeweg Hautkontakt
Soil	Boden
SSbD	Safe and Sustainable by Design; Sicher und Nachhaltig entworfen
SVHC	Substances of Very High Concern (besonders besorgniserregende Stoffe)
TRGS	Technische Regeln Gefahrstoffe
UN	United Nations; Vereinte Nationen
Use	Verwendung von Gemischen, mit oder ohne Integration in Erzeugnisse
Waste	Abfall
Water	Wasser
Work	Arbeiter

Zusammenfassung

ChemSelect ist eine Online-Anwendung, mit der die Nachhaltigkeit von Stoffen und Gemischen anhand verschiedener Kriterien bewertet und verglichen werden kann. ChemSelect wurde insbesondere für kleine und mittelständische Unternehmen, die Chemikalien anwenden (Formulierer und Endanwender), entwickelt und soll eine einfache und schnelle Bewertung ermöglichen, auch mit begrenzten Ressourcen und Kompetenzen. In vielen Fällen sind die Ergebnisse von Nachhaltigkeitsvergleichen eindeutig und erlauben es, nachhaltigere Chemikalien auszuwählen. In anderen Fällen sind weitergehende Prüfungen notwendig.

In diesem Dokument ist das Konzept erläutert, das der Online-Anwendung ChemSelect zugrunde liegt. Die Haupt- und Unterkriterien sowie deren jeweilige Indikatoren zur Ermittlung der Nachhaltigkeit von Stoffen und Gemischen werden beschrieben und begründet. Das Konzept beschreibt zudem, wie die Online-Anwendung ChemSelect einzelne Bewertungsergebnisse zusammenfasst, wie sie mit Datenlücken umgeht wird und wie die Nachhaltigkeitsrangfolgen beim Vergleich von Stoffen und Gemischen ermittelt werden.

Die Online-Anwendung ChemSelect basiert auf dem Leitfaden für Nachhaltige Chemikalien des Umweltbundesamtes und dem Programm SubSelect und erweitert diese um einige Bewertungsparameter. ChemSelect ist sowohl online als auch als Download verfügbar.

Im Folgenden wird das Bewertungskonzept von ChemSelect erläutert. Es basiert auf neun Hauptkriterien, die jeweils spezifische Unterkriterien haben.

Nennung auf Problemstofflisten

Werden Chemikalien auf regulatorischen Listen, z. B. der POP-Konvention oder des REACH Anhang XIV aufgeführt, gibt es eine behördliche Bewertung darüber, dass ein Stoff besonders problematische Eigenschaften hat. Das Hauptkriterium „Nennung auf Problemstofflisten“ hat kein Unterkriterium. Stoffe, die auf den folgenden Listen stehen, werden mit rot bewertet: Stockholm-Konvention, Persistente Organische Schadstoffe, Kyoto-Protokoll, Montrealer Protokoll, REACH Kandidatenliste, Liste der Karzinogenen, Mutagenen und Reproduktionstoxischen Stoffe (KMR-Liste) aus der Verordnung zur Einstufung und Kennzeichnung (CLP) und den Technischen Regeln für Gefahrstoffe 905 (TRGS 905). Stoffe, die auf der SIN-Liste oder der Liste von „Gruppen strukturverwandter Stoffe“ stehen, werden mit gelb bewertet, da hier noch keine abschließende Bewertung vorliegt.

Gemische, die Stoffe auf einer Problemstoffliste enthalten, werden ebenfalls und unabhängig von der Konzentration des Stoffes mit rot bewertet.

Physikalisch-chemische Gefahren

Die Einstufung von Stoffen und Gemischen wird genutzt, um das Hauptkriterium „physikalisch-chemische Gefahren“ zu bewerten. Es gibt keine Unterkriterien. Die Indikatoren für dieses Kriterium sind an die Bewertungen des Einfachen Maßnahmenkonzept Gefahrstoffe angelehnt. Hierbei sind auch die EUH-Sätze aufgeführt. Die physikalisch-chemischen Gefahren werden für Gemische anhand der Einstufung des Gemisches eingegeben und bewertet.

Humantoxizität

Das Hauptkriterium „Humantoxizität“ hat vier Unterkriterien: Karzinogenität, Mutagenität und Reproduktionstoxizität (CMR); Endokrine Wirkungen beim Menschen (ED hh), schädigende Wirkungen bei Kontakt mit Haut und Augen sowie weitere schädigende Wirkungen. Die Bewertung der Kriterien erfolgt überwiegend anhand der eingegebenen H-Sätze. Für die endokrine Wirkung ist es zudem möglich, weitere Informationen (Listen, Literatur) in die

Bewertung einzubeziehen. Die Indikatoren für die Bewertung lehnen sich an die Indikatoren für Gefahrstoffe des EMKG an. EUH-Sätze sind in der Auswahl verfügbar.

Die Humantoxizität von Gemischen wird zunächst anhand der Einstufung des Gemisches bewertet. Das Ergebnis wird dann anhand der Toxizität der Inhaltsstoffe überprüft: sind im Gemisch CMR-Stoffe oder EDCs in Konzentrationen oberhalb von 0,1% enthalten, so wird die Bewertung mit einer ggf. strikteren Bewertung der Einzelstoffe überschrieben.

Umwelttoxizität

Das Hauptkriterium „Umwelttoxizität“ hat vier Unterkriterien: Persistenz, Bioakkumulation und Toxizität / hohe Persistenz und hohe Bioakkumulation (PBT/vPvB), Persistenz, Mobilität und Toxizität / hohe Persistenz und hohe Mobilität (PMT/vPvM), aquatische Toxizität und endokrine Wirkungen für die Umwelt (ED env). Die Bewertung der Kriterien beruht auf der Priorisierung von Umweltschadstoffen der EU-Kommission gemäß Chemikalienstrategie für Nachhaltigkeit. Hierbei werden „Verdachtsstoffe“ mit gelb bewertet. Die Indikatoren beruhen einerseits auf den eingegebenen H-Sätzen. Andererseits können für die Kriterien PBT/vPvB, PMT/vPvM sowie endokrine Wirkung weitere Informationen (Listen, Literatur) genutzt werden, da bisher noch keine Einstufungen mit H-Sätzen für diese Eigenschaften vorliegen.

Die Umwelttoxizität von Gemischen wird, analog zur Humantoxizität, zunächst anhand der Einstufung des Gemisches bewertet. Das Ergebnis wird dann für die Kriterien PBT/vPvB, PMT/vPvM und EDC env überprüft: sind im Gemisch solche Stoffe oberhalb von 0,1% enthalten, so wird die Bewertung des Gemisches mit einer ggf. strikteren Bewertung der Einzelstoffe überschrieben.

Expositionspotenzial

Das Expositionspotenzial wird anhand der Hauptkriterien „Expositionspotenzial Arbeit“, „Expositionspotenzial Verbraucher“ und „Expositionspotenzial Umwelt“ charakterisiert. Das Hauptkriterium „Expositionspotenzial Arbeit“ hat zwei Unterkriterien entsprechend der relevanten Expositionsrouten dermal und inhalativ. Das Hauptkriterium „Expositionspotenzial Verbraucher“ hat drei Unterkriterien, die die Routen dermal, oral und inhalativ abdecken. Das Hauptkriterium „Expositionspotenzial Umwelt“ gliedert sich entsprechend in die drei Umweltmedien in die Umweltmedien Wasser, Boden und Luft.

Zur Ermittlung der Expositionspotenziale wird eine Formel verwendet, welche die Emission aus der Anwendung, die Mobilität des Stoffes, seine Anwendungsmenge, Konzentration (nur Arbeit und Verbraucher), die Abbaubarkeit (nur Umwelt), sowie die Anwendungshäufigkeit (nur Arbeit) berücksichtigt. Für diese expositionsbeeinflussenden Parameter werden jeweils Faktoren festgelegt, die in die Berechnung eingehen. Das Expositionspotenzial aus der Anwendung wird anhand eines groben Anwendungsszenarios ermittelt.

Das Expositionspotenzial wird zunächst für jeden Lebenszyklusschritt und Expositionspfad für Mensch und Umwelt berechnet. Diese Werte werden dann zu Unterkriterien zusammengefasst, die das Expositionspotenzial pro Expositionspfad beschreiben (also insgesamt 8 Unterkriterien). In einem weiteren Aggregationsschritt werden die Hauptkriterien gebildet.

Das Vorgehen entspricht in keiner Weise einer wissenschaftlichen Expositionsabschätzung, sondern ist lediglich eine Annäherung mit der Endaussage, ob es im Lebenszyklus mindestens eine Expositionssituation gibt, welche kritisch ist. Es findet an dieser Stelle auch keine Kombination dieser Information mit der Gefährlichkeit statt.

Die Bewertung von Gemischen erfolgt anhand der Ergebnisse der enthaltenen Inhaltsstoffe. Dies erfordert einen zusätzlichen Aggregationsschritt. Stoffe mit unterschiedlichen Funktionen

können unterschiedliche Lebenszyklen haben (In einem Lack ist das Lösemittel am Ende nicht in einem Erzeugnis enthalten, die Pigmente jedoch schon). Dies wird in der Bewertung berücksichtigt.

Wirkungen auf Klima und Ozon

Das Hauptkriterium „Klima- und ozonschädigende Wirkung“ unterteilt sich in die Unterkriterien „Intrinsisches Treibhauspotenzial“, „CO₂-Emission während der Herstellung“ sowie „ozonschädigende Wirkung“. Bei den beiden Kriterien zur Klimawirkung beruht die Bewertung auf den Werten der CO₂-Äquivalente. Bei den beiden Kriterien zur Klimawirkung beruht die Bewertung auf den Werten der CO₂-Äquivalente. Aufgrund der großen Bandbreite von der Global Warming Potentials (GWP) ist die Unterscheidung in drei Kategorien naturgemäß relativ grob. Dies gilt auch für das Ozonzerstörungspotenzial, welches sowohl anhand der Information über Stofflisten und H-Sätze als auch über selbst eingegebene Werte ermittelt wird. Die Festlegung der Indikatoren beruht auf der Expert*inneneinschätzung des Projektteams.

Die Bewertung von Gemischen erfolgt anhand der Bewertungen der Einzelstoffe. Hierbei werden die Wertungen für die jeweiligen Unterkriterien und das Hauptkriterium gemittelt.

Ressourcenverbrauch

Das Hauptkriterium „Ressourcenverbrauch“ hat drei Unterkriterien: Wasserverbrauch, Energieverbrauch und Verbrauch an Rohstoffen. Für den Wasser- und Energieverbrauch werden die jeweilige Menge pro kg hergestelltem Stoff erfragt. Die Indikatoren für die Ampelfarben wurden aus einem Vergleich von Werten aus Datenbanken für verschiedene Stoffe abgeleitet. In ChemSelect werden den Nutzer*innen sog. Vergleichslisten zur Verfügung gestellt, die verschiedene Stoffe und Stoffgruppen und ihre Verbräuche auflisten. So können im Fall fehlender Daten für den bewerteten Stoff „ähnliche“ Stoffe gesucht und als Orientierung verwendet werden.

Die Bewertung von Gemischen erfolgt anhand der Bewertungen der Einzelstoffe. Hierbei werden die Wertungen für die jeweiligen Unterkriterien und das Hauptkriterium gemittelt.

Kreislauffähigkeit

Das Hauptkriterium „Kreislauffähigkeit“ hat zwei Unterkriterien: Potenzial zur Rückgewinnung und Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren. Da ChemSelect global angewendet werden soll, muss dieses Kriterium unabhängig von der vorhandenen Abfallinfrastruktur bewertbar sein und zusätzlich berücksichtigen, dass die Nutzer*innen von ChemSelect ggf. nur wenig Kenntnisse über die Endprodukte und ihre Entsorgungswege haben.

Die zentralen Unterscheidungen bei diesem Kriterium sind, ob ein Stoff/Gemisch als solches zu Abfall wird oder als Teil eines Erzeugnisses. Im ersten Fall wird die Bewertung an die Einsatzmenge von Rezyklaten geknüpft. Dies ist eine Information, welche den Anwender*innen bekannt sein sollte. Im zweiten Fall wird die Bewertung eng an die Materialien geknüpft, in/an denen die Stoffe enthalten sind.

Die Ableitung der Indikatoren beruht auf Einschätzungen der Expert*innen im Projektteam. Gemische werden bzgl. der Rückgewinnung als Ganzes, bzgl. der Kontamination von Sekundärmaterialien anhand ihrer Inhaltsstoffe bewertet. Die Indikatoren sollten in 10 Jahren überprüft werden, da in diesem Bereich auch global viel Veränderung stattfindet.

Verantwortung des Lieferanten

Das Hauptkriterium „Verantwortung des Lieferanten“ wird anhand von drei Unterkriterien ermittelt, welche sich auf den Bereich Arbeitsschutz, Umweltschutz und Engagement im sozialen

Bereich beziehen. Diese Kriterien beziehen sich also nur indirekt auf die Chemikalien und bilden einen (kleinen) Teil der sozialen Dimension der Nachhaltigkeit ab. Für dieses Kriterium wurden Indikatoren gewählt, die wahrscheinlich von den Nutzer*innen von ChemSelect auch recherchiert oder erfragt werden können.

Substituierbarkeit

Die Abfrage des Hauptkriteriums „Substituierbarkeit“ hat einen anderen Status in ChemSelect als die Bewertungskriterien: das Substitutionspotenzial geht nicht in das Nachhaltigkeitsprofil oder den Nachhaltigkeitsvergleich ein. Zudem schließt sich die Bewertung nur dann an, wenn der Stoff eine hohe Priorität für die Substitution hat. Das Kriterium Substituierbarkeit soll Anhaltspunkte dafür geben, wie „einfach“ eine Substitution möglich ist und kann somit zu einer Priorisierung beitragen, wenn ein*e Anwender*in mehrere problematische Stoffe oder Gemische identifiziert hat.

Wird im ersten Unterkriterium „Verfügbarkeit von Alternativen“ festgestellt, dass es Alternativen zu dem Stoff/Gemisch gibt, entfällt die weitere Bewertung der Substituierbarkeit. Andernfalls wird über eine Einschätzung der Komplexität der Verwendung sowie, ob es bereits seit längerem eine regulatorische Diskussion über den Stoff (in einem Gemisch) gibt, ein Hinweis gegeben, ob es wahrscheinlich ist, dass Alternativen zur Verfügung stehen.

Bewertungskonzept

Die Bewertung von ChemSelect soll einfach und richtungssicher sein. Daher mussten einerseits verständliche und für die Nutzer*innen ermittelbare Parameter gefunden werden und diese andererseits so verknüpft werden, dass keine Überschätzungen der Nachhaltigkeit auftreten. Insbesondere für die Kriterien, die sich auf die Toxizität von Stoffen und Gemischen beziehen, ist ein Ansatz gewählt worden, der dafür sorgt, dass die Sicherheit (geringe [Umwelt-]Toxizität) nicht durch andere Aspekte der Nachhaltigkeit „überschrieben“ werden kann.

Grundsätzlich wird für jedes Unterkriterium eine Bewertung anhand definierter Indikatoren für rot/gelb/grün vorgenommen. Für die Berechnungen wird den Farben auch ein Wert zugeordnet: rot = 5, gelb = 3 und grün = 1. Je niedriger der Wert, desto besser schneidet ein Stoff/ Gemisch in der Bewertung ab.

Fehlen Informationen, wird die Farbe Rosa (zwischen rot und gelb) vergeben, die den Wert 4 hat. Ist ein Kriterium noch nicht bearbeitet worden (keine Eingabe im Tool), so ist sie grau (Bewertung wie rosa mit dem Wert 4). In einigen Fällen sind bestimmte Aspekte für einen Stoff nicht relevant (z. B. Persistent für anorganische Stoffe). In diesen Fällen wird die Farbe Blau vergeben, die zur Folge hat, dass das Unterkriterium oder Hauptkriterium in der Bewertung nicht berücksichtigt wird.

Bei der Aggregation der Bewertungsergebnisse der Unterkriterien zu Hauptkriterien für Stoffe wird nach zwei Prinzipien verfahren:

- ▶ Für Kriterien, die sich auf die Gefahrenpotenziale beziehen (Toxizität, Umwelttoxizität, Listen) bestimmt das Unterkriterium mit der schlechtesten Bewertung die Bewertung des Hauptkriteriums. Dieses Prinzip wird „Vorrang von Rot“ genannt.
- ▶ Für die übrigen Kriterien wird das Hauptkriterium anhand der Mittelwerte der Unterkriterien gebildet. Hierfür werden die Farben in Wertebereiche unterteilt: 1-1,67 = grün, 1,67 – 3,3 = gelb, 3,3 bis 4,14 = rosa und > 4,14 = rot.

Wenn es keine Bewertung mit der Farbe Rosa gibt, werden die Unterkriterien ab dem Bereich von 3,3 mit rot bewertet.

Bei Hauptkriterien mit nur einem Unterkriterium ist die Bewertung für das Unterkriterium und das Hauptkriterium gleich.

Bei der Bewertung von Gemischen wird ähnlich vorgegangen. Das Prinzip des Vorrangs von Rot wird für die Aggregation der Ergebnisse von den Inhaltsstoffen für das Gemisch als Ganzes verwendet, wenn es sich um Hauptkriterien mit Bezug zur Sicherheit von Chemikalien handelt. Bei den anderen Kriterien werden wiederum Mittelwerte gebildet.

Die drei Hauptkriterien zur Exposition haben eine eigenständige Logik der Aggregation von Informationen, weil hier noch eine zusätzliche Ebene hinzukommt. Da diese nicht kurz erläutert werden kann, wird hier auf das Hauptkapitel im folgenden Bericht verwiesen.

Rangbildung im Vergleich

Neben der Erstellung eines Nachhaltigkeitsprofils ist es mit ChemSelect möglich bis zu 5 Stoffe oder Gemische direkt miteinander zu vergleichen. Um hier Unterschiede in der Bewertung zu verdeutlichen, werden zusätzlich zu den Bewertungsfarben Ränge gebildet. Bei der Bewertung von Stoffen ergeben sich die Ränge aus den Mittelwerten der Hauptkriterien. Bei Vergleichen von Gemischen wird die Konzentration der Stoffe in die Rangbildung einbezogen und die Bewertungsergebnisse der Einzelstoffe dadurch gewichtet. So können die Nutzer*innen beispielsweise ein zu ersetzendes Gemisch und vier alternative Produkte miteinander vergleichen und sehen, welches am besten abschneidet.

Darstellung der Ergebnisse

Die Ergebnisse der Bewertung werden als Tabellen dargestellt in denen sowohl die Haupt- als auch die Unterkriterien mit ihrem Bewertungsergebnis (Farbe) sowie bei Vergleichen den Rängen dargestellt werden. Dies erzeugt eine hohe Transparenz über die Teilergebnisse und erlaubt es den Nutzenden, zu prüfen und festzulegen, welche der Kriterien in ihren Entscheidungsprozessen welches Gewicht bekommen sollen. Zudem ermöglicht es Optimierungspotenziale zu identifizieren; insbesondere, wenn die Expositionspotenziale hoch sind, können hier ggf. mit anderen Maßnahmen als einer Substitution Verbesserungen umgesetzt werden.

Damit die Bewertungsergebnisse auch im Betrieb kommuniziert werden könnten, gibt es eine Möglichkeit, die Ergebnisse in einer Zusammenfassung darzustellen. Hier werden insgesamt 5 Bewertungsaspekte dargestellt:

- ▶ Die Nennung von Stoffen (in Gemischen) auf Problemstofflisten;
- ▶ Risikohinweise, die sich aus einer Kombination der Ergebnisse der Human- und Umwelttoxizität mit den jeweils relevanten Expositionspotenzialen ergeben sowie
- ▶ einer Zusammenfassung der „weiteren“ Wirkungen auf die Umwelt, in denen die Ergebnisse aus der Klimawirkung, Ozonzerstörung, des Ressourcenverbrauches und der Kreislauffähigkeit dargestellt werden.

Die Verantwortung des Lieferanten ist in dieser Darstellung nicht berücksichtigt.

Kompatibilität von ChemSelect und Anwendung

ChemSelect versteht sich als ein anwendungsorientiertes Tool zur Unterstützung von (kleinen und mittelständischen) Unternehmen, die ihr Chemikalienmanagement verbessern wollen, indem sie nachhaltigere Chemikalien auswählen. Die Kriterien und Indikatoren lehnen sich, wo möglich, an bestehende Bewertungssysteme an. Wo keine entsprechenden Systeme vorhanden sind, wurde auf eine Expert*innenbewertung aus dem Projektteam zurückgegriffen. Die Daten-

und Wissensgrundlage für einige Parameter wird sich in den nächsten Jahren weiterentwickeln (z. B. Informationen über Stoffe und ihre Klimawirkung oder die Möglichkeiten der Wiedergewinnung von Materialien) und sollten z. B. nach 10 Jahren überprüft werden

Das Bewertungskonzept und die Indikatoren für ChemSelect wurden mit Expert*innen aus UBA, BAuA und BfR sowie aus Unternehmen diskutiert und teilweise an die Ergebnisse der Diskussionen angepasst. ChemSelect wurde zudem anhand verschiedener Stoffe getestet und validiert. Bei der Entwicklung der Bewertungsmethode und den Parametern wurde darauf geachtet, eine Kompatibilität mit dem Konzept des Safe and Sustainable by Design (SSbD) auf EU-Ebene geachtet.

Summary

ChemSelect is an online application that can be used to assess and compare the sustainability of substances and mixtures based on various criteria. ChemSelect was developed especially for small and medium sized companies using chemicals (formulators and end users) and is designed to provide a simple and quick assessment that is possible even with limited resources and competences. In many cases, the results of sustainability comparisons are clear and allow more sustainable chemicals to be selected. In other cases, further assessments are necessary.

This document explains the concept behind the ChemSelect online application. The main and sub-criteria and their respective indicators for determining the sustainability of substances and mixtures are described and justified. The concept also describes how the ChemSelect online application summarizes individual assessment results, how it deals with data gaps and how the sustainability rankings are determined when comparing either several substances or several mixtures with each other.

The ChemSelect online application is based on the German Environment Agency's Guideline for Sustainable Chemicals and a former version of the SubSelect program and expands these with some assessment parameters. ChemSelect is available both online and as a download.

The ChemSelect assessment concept is explained below. It is based on 10 main criteria, each of which has specific sub-criteria.

Entry on lists of problematic substances

If chemicals are included on regulatory lists, e.g. the POP Convention or REACH Annex XIV, there is an official assessment that a substance has particularly problematic properties. The main criterion "Mentioned on lists of problematic substances" has no sub-criterion. Substances on the following lists are rated red: Stockholm Convention on Persistent Organic Pollutants, Kyoto Protocol, Montreal Protocol, REACH Candidate List, List of Carcinogens, Mutagens and Reproductive Toxins (CMR List) from the Classification and Labelling Regulation (CLP) and the Technical Rules for Hazardous Substances 905 (TRGS 905). Substances that are on the SIN list or the list of "groups of structurally related substances" are labelled yellow, as no assessment by authorities has yet been concluded.

Mixtures containing substances on a list of hazardous substances are also rated red, regardless of the concentration of the substance.

Physical-chemical hazards

The classification of substances and mixtures is used to assess the main criterion "physical-chemical hazards". There are no sub-criteria. The indicators for this criterion are based on the indicators suggested in the Easy-to-use workplace control scheme for Hazardous Substances (EMKG) by the German Federal Office for Workers Safety and Health (BAuA). The EUH phrases are also considered here. The physical-chemical hazards for mixtures are entered and evaluated based on the classification of the mixture.

Human toxicity

The main criterion "human toxicity" has 4 sub-criteria: Carcinogenicity, mutagenicity and reproductive toxicity (CMR); endocrine disrupting chemical for human health (EDC hh), adverse effects in contact with skin and eyes and other adverse effects. The evaluation of the criteria is mainly based on the H statement entered. For the endocrine effect, it is also possible to include further information (lists, literature) in the assessment. The indicators for the evaluation are based on the indicators of the EMKG. EUH phrases are available in the selection.

The human toxicity of mixtures is first assessed on the basis of the classification of the mixture. The result is then checked on the basis of the toxicity of the ingredients: If the mixture contains CMR substances or EDCs hh in concentrations above 0.1%, the initial assessment result is overwritten with a more stringent assessment of the individual substances, if necessary.

Environmental toxicity

The main criterion “environmental toxicity” has 4 sub-criteria: Persistence, bioaccumulation and toxicity / high persistence and high bioaccumulation (PBT/vPvB), persistence, mobility and toxicity / high persistence and high mobility (PMT/vPvM), aquatic toxicity and endocrine disrupting effects for the environment (EDC env). The evaluation of the criteria is based on the prioritisation of environmental pollutants by the EU Commission in accordance with the Chemicals Strategy for Sustainability. “Suspected substances” are rated as yellow. On the one hand, the indicators are based on the H statement. On the other hand, further information (lists, literature) can be used for the criteria PBT/vPvB, PMT/vPvM and endocrine disruption, as no classifications with H-statements are yet available for these properties.

As with human toxicity, the environmental toxicity of mixtures is initially assessed on the basis of the classification of the mixture. The result is then checked for the criteria PBT/vPvB, PMT/vPvM and EDC env: If the mixture contains such substances above 0.1%, the assessment of the mixture is overwritten with a more stringent assessment of the individual substances.

Exposure potential

The exposure potential is characterized on the basis of the main criteria “Occupational exposure potential”, “Consumer exposure potential” and “Environmental exposure potential”. The main criterion “Occupational exposure potential” has two sub-criteria corresponding to the relevant exposure routes (skin and inhalation). The main criterion “Consumer exposure potential” has three sub-criteria covering the dermal, oral and inhalation routes. The main criterion “Exposure potential environment” is divided into the three environmental media water, soil and air.

To determine the exposure potential, a formula is used which takes into account the emission from the application, the mobility of the substance, its application quantity, concentration (only work and consumer), the degradability (only environment), as well as the application frequency (only work). Factors are defined for each of these exposure-influencing parameters, which are included in the calculation. The emission potential from the application is determined on the basis of a rough use scenario.

The exposure potential is first calculated for each life cycle step and exposure pathway for humans and the environment. These values are then summarized into sub-criteria that describe the exposure potential per exposure pathway (i.e. a total of 8 sub-criteria). In a further aggregation step, the main criteria are formed.

The procedure in no way corresponds to a scientific exposure assessment but is merely an approximation with the final statement as to whether there is at least one exposure situation in the life cycle that is critical. There is also no combination of this information with a substance’s hazard at this point.

Mixtures are assessed on the basis of the results of the ingredients they contain. This requires an additional aggregation step. Substances with different functions can have slightly different life cycles (in a paint, the solvent is not contained in an article at the end, but the pigments are). This is taken into account in the assessment.

Effects on climate and ozone

The main criterion “climate and ozone-depleting effect” is divided into the sub-criteria “intrinsic global warming potential”, “CO₂ emissions during production” and “ozone-depletion”. For the two climate impact criteria, the assessment is based on the CO₂ equivalent values. Due to the wide range of Global Warming Potentials (GWP), the distinction between the three categories (red/yellow/green) is naturally relatively coarse. This also applies to the ozone depletion potential, which is determined using information from substance lists and H statements as well as self-entered values. The definition of the indicators is based on the expert assessment of the project team.

The evaluation of mixtures is based on the evaluation of the individual substances. The scores for the respective sub-criteria and the main criterion are derived using average values.

Resource consumption

The main criterion “resource consumption” has three sub-criteria: Water consumption, energy consumption and consumption of raw materials. For water and energy consumption, the respective quantity per kg of material produced is requested. The indicators for the traffic light colours were derived from a comparison of values from databases for various substances. In ChemSelect, users are provided with so-called comparison lists that contain various substances and substance groups and their consumption data. This means that if data is missing for the substance being assessed, “similar” substances can be searched for and used as a guiding value.

The evaluation of mixtures is based on the evaluations of the individual substances. The scores for the respective sub-criteria and the main criterion are averaged.

Potential for circular economy

The main criterion “circularity” has two sub-criteria: Potential for recovery and potential to contaminate secondary materials. As ChemSelect is intended to be used globally, this criterion must be assessable independently of the existing waste infrastructure and also take into account that ChemSelect users may have little knowledge of the end products and their disposal routes.

The central distinctions in this criterion are whether a substance/mixture becomes waste as such or as part of an article. In the first case, the assessment is linked to the quantity of recyclates used. This is information that users should be aware of. In the second case, the assessment is closely linked to the materials in/on which the substances are contained.

The derivation of the indicators is based on the assessments of the experts in the project team. Mixtures are assessed with regard to recovery as a whole and with regard to the contamination of secondary materials based on their ingredients. The indicators should be reviewed in 10 years, as a lot of change is also taking place globally in this area.

Responsibility of the supplier

The main criterion “Supplier responsibility” is determined on the basis of three sub-criteria, which relate to the areas of occupational health and safety, environmental protection and social commitment. These criteria therefore only indirectly relate to chemicals and represent a (small) part of the social dimension of sustainability. Indicators were chosen for this criterion that can probably also be researched or enquired about by the users of ChemSelect.

Substitutability

The query of the main criterion “substitutability” has a different status in ChemSelect than the other evaluation criteria: The substitutability is not included in the sustainability profile or the sustainability comparison. Moreover, the evaluation only follows if the substance has a high

priority for substitution. The criterion "substitutability" is intended to provide an indication of how "easily" substitution is possible and can therefore contribute to prioritisation if a user has identified several problematic substances or mixtures.

If it is determined in the first sub-criterion "Availability of alternatives" that there are alternatives to the substance/mixture, no further assessment of substitutability is required. Otherwise, an assessment of the complexity of the use and whether there has been a regulatory discussion about the substance (in a mixture) for some time will indicate the likelihood with which alternatives are available.

Evaluation concept

The ChemSelect assessment should be simple and reliable. For this reason, it was necessary to find parameters that are understandable and can be determined by the ChemSelect users and to link them in such a way that sustainability is not overestimated. For the criteria relating to the toxicity of substances and mixtures in particular, an approach was chosen that ensures that the (environmental) toxicity cannot be "overwritten" or "diluted" in the final results by other aspects of sustainability.

In principle, an assessment is made for each sub-criterion using defined indicators for red/yellow/green. A value is assigned to each colour for the calculations: red = 5, yellow = 3 and green = 1. The lower the value, the better a substance/mixture performs in the sustainability assessment.

If information is missing, the colour pink (between red and yellow) is assigned, which has a value of 4. If a criterion has not yet been processed (no entry in the tool), it is marked grey, but for the calculations the same value as for pink is used, i.e. 4. In some cases, certain aspects are not relevant for a substance (e.g. persistent for inorganic substances). In these cases, a bright blue colour is assigned, which means that the criterion is not taken into account in the assessment.

When aggregating the evaluation results of the sub-criteria to main criteria for substances, two principles are applied:

- For criteria relating to hazard potential (toxicity, environmental toxicity, lists), the sub-criterion with the worst rating determines the rating of the main criterion. This principle is called "Precedence of red".
- For the other criteria, the main criterion is formed on the basis of the mean values of the sub-criteria. For this purpose, the colours are divided into value ranges: 1-1.67 = green, 1.67 - 3.3 = yellow, 3.3 to 4.14 = pink and > 4.14 = red.

If there is no evaluation resulting in the colour pink, the sub-criteria are evaluated with red from the range of 3.3.

For main criteria with only one sub-criterion, the rating for the sub-criterion and the main criterion is the same.

A similar procedure is used for the evaluation of mixtures. The principle of precedence of red is used for the aggregation of the results of the ingredients for the mixture as a whole when it comes to main criteria relating to the safety of chemicals. For the other criteria, mean values are again calculated.

The three main criteria for exposure have their own logic of aggregation of information because an additional level is added here. As this cannot be explained briefly, reference is made here to the main chapter in the following report.

Ranking in comparisons

In addition to creating a sustainability profile, ChemSelect makes it possible to compare up to 5 substances or mixtures directly with each other. In order to clarify differences in the evaluation, ranks are formed in addition to the evaluation colours. When evaluating substances, the ranks result from the mean values of the main criteria. When comparing mixtures, the concentration of the substances is included in the ranking and the evaluation results of the individual substances are weighted as a result. For example, users can compare a mixture to be replaced with four alternative products and see which one performs best.

Description of the results

The results of the evaluation are presented as tables in which both the main and sub-criteria are shown with their evaluation result (colour) and, in the case of comparisons, the ranks. This creates a high level of transparency about the sub-results and allows users to check and determine which of the criteria should be given which weight in their decision-making processes. It also makes it possible to identify optimisation potentials, in particular regarding exposures, where improvements could be implemented with measures other than substitution.

To ensure that the assessment results can also be communicated within the company, it is possible to summarise the results. A total of 5 evaluation aspects are described here:

- ▶ The mentioning of substances (in mixtures) on lists of problematic substances;
- ▶ Risk indications resulting from a combination of the human and environmental toxicity results with the relevant exposure potentials and
- ▶ A summary of the "other" effects on the environment, in which the results from climate impact, ozone depletion, resource consumption and circularity are described.

The supplier's responsibility is not taken into account in this summary of the evaluation.

Compatibility of ChemSelect

ChemSelect is an application-orientated tool to support (small and medium-sized) companies that want to improve their chemicals management by selecting more sustainable chemicals. Where possible, the criteria and indicators are based on existing assessment systems. Where no corresponding systems are in place, an expert assessment from the project team was used. The data and knowledge base for some parameters will continue to develop over the next few years (e.g. information on substances and their impact on the climate or the possibilities for recycling materials) and should be reviewed after 10 years, for example.

The evaluation concept and the indicators for ChemSelect were discussed with experts from UBA, BAuA and BfR as well as from companies and partially adapted to the results of the discussions. ChemSelect was also tested and validated using various substances. When developing the assessment method and parameters, care was taken to ensure compatibility with the Safe and Sustainable by Design (SSbD) concept at EU level.

1 Einleitung

ChemSelect ist eine Online-Anwendung, die es Formulierern und Endanwendern von Chemikalien ermöglicht, die Nachhaltigkeit von Stoffen und Gemischen zu bewerten. Die Online-Anwendung ist richtungssicher und gleichzeitig einfach zu bedienen. Zudem ist sie mit den laufenden Prozessen zur Bewertung von sicheren und nachhaltigen Stoffen auf EU- und UN-Ebene (safe and sustainable by design (SSbD)) konsistent. ChemSelect misst der inhärenten Sicherheit von Chemikalien ein hoher Stellenwert bei und priorisiert eine Risikominderung unabhängig vom konkreten Anwendungskontext (s. auch Kapitel 4.3). ChemSelect richtet sich an Unternehmen in der ganzen Welt.

ChemSelect baut auf den Vorarbeiten zum Leitfaden für nachhaltige Chemikalien sowie dem Access Tool SubSelect auf. Die Grundlagen der Bewertungsmethodik sind in ChemSelect teilweise leicht modifizierter, übernommen worden. Es wurden einige zusätzliche Bewertungsaspekte aufgenommen.

ChemSelect bietet zwei Bewertungsfunktionen: Sollen **ein einzelner Stoff oder ein einzelnes Gemisch** bzgl. der Nachhaltigkeit bewertet werden, so kann ein **Nachhaltigkeitsprofil** erstellt werden. Sollen **mehrere Stoffe oder mehrere Gemische** bzgl. ihrer Nachhaltigkeit miteinander verglichen werden (Alternativenbewertung), so kann ein **Nachhaltigkeitsvergleich** erstellt werden. Dieser Vergleich zeigt eine Rangfolge der Nachhaltigkeit für die verschiedenen (Unter-) und Hauptkriterien.

Dieser Bericht dokumentiert das Bewertungskonzept von ChemSelect und die für die jeweiligen Kriterien relevanten Erläuterungen und Begründungen für die Bewertungsindikatoren. Der Bericht ist keine Anleitung zur Nutzung von ChemSelect und richtet sich an Fachleute. Der Bericht soll die Diskussion über das Bewertungskonzept ermöglichen und unterstützen.

2 Die Nachhaltigkeitsbewertung im Überblick

2.1 Bewertungsaspekte

Die Nachhaltigkeit von Stoffen und Gemischen wird durch ChemSelect anhand von Hauptkriterien bewertet. Diese können aus einem oder mehreren Unterkriterien bestehen. Die folgende Tabelle zeigt die Kriterien in der Übersicht.

Tabelle 1: Überblick über Bewertungsbereiche und ihre Haupt- und Unterkriterien

Bewertungsaspekt	Hauptkriterium	Unterkriterien
Stoffsicherheit	Nennung auf Problemstofflisten	Nennung auf Problemstofflisten
Stoffsicherheit	Physikalisch-chemische Gefahren	Physikalisch-chemische Gefahren (PC-Gefahren)
Stoffsicherheit	Humantoxizität	Krebserzeugende, mutagene und reproduktionstoxische Wirkung (CMR) Störungen des Hormonsystems beim Menschen (Endokriner Disruptor Mensch (ED hh)) Schädigende Effekte auf Haut und Auge Weitere schädliche Wirkungen
Stoffsicherheit	Umwelttoxizität	Aquatische Toxizität Persistente, bioakkumulierende und toxische Stoffe / sehr persistente und sehr bioakkumulierende Stoffe (PBT/vPvB) und Ferntransport Persistente, mobile und toxische Stoffe / sehr mobile, und sehr persistente Stoffe (PMT/vPvM-Stoffe) Störungen des Hormonsystems in der Umwelt (Endokriner Disruptor Umwelt (ED env))
Exposition	Expositionspotenzial Arbeiter Expositionspotenzial Verbraucher Expositionspotenzial Umwelt	Expositionspotenzial Arbeiter, dermal Expositionspotenzial Arbeiter, inhalativ Expositionspotenzial Verbraucher, dermal Expositionspotenzial Verbraucher, inhalativ Expositionspotenzial Verbraucher, oral Expositionspotenzial Umwelt, Wasser Expositionspotenzial Umwelt, Luft Expositionspotenzial Umwelt, Boden
Schädigende Wirkungen im Lebensweg	Klima- und ozonschädigende Wirkung	Intrinsisches Treibhauspotenzial CO ₂ -Emissionen während der Stoffherstellung Schädigung der Ozonschicht
Schädigende Wirkungen im Lebensweg	Ressourcenverbrauch ¹	Wasserverbrauch Energieverbrauch Verbrauch von Rohstoffen
Schädigende Wirkungen im Lebensweg	Kreislauffähigkeit	Potenzial zur Rückgewinnung Potenzial, Sekundärmaterialien zu verunreinigen
Schädigende Wirkungen im Lebensweg	Verantwortung des Lieferanten	Übernahme von Verantwortung für Arbeiter Übernahme von Verantwortung für die Umwelt

¹ Die Unterkriterien beziehen sich jeweils auf den kumulativen Verbrauch für die Herstellung eines Stoffes

Bewertungsaspekt	Hauptkriterium	Unterkriterien
		Übernahme von Verantwortung für das soziale Umfeld

Die Bewertung des Substitutionspotenzials wird nicht zur Nachhaltigkeitsbewertung dazugezählt, sondern ist eine Unterstützung für die Priorisierung des Handlungsbedarfes, wenn mehrere Stoffe zu substituieren wären. Im Folgenden wird an einigen Stellen auch die Bewertungslogik für die Substituierbarkeit beschrieben.

Die Kriterien werden für die Bewertung von Einzelstoffen verwendet. Werden Gemische bewertet, so werden die Unterkriterien entweder auf die enthaltenen Stoffe angewendet (z. B. Treibhausgasemissionen) und für das Gemisch zusammengefasst, oder für das Gemisch als Ganzes (z. B. Verantwortung des Lieferanten).

Im Kapitel 3 beschreiben wir die in der Tabelle genannten Haupt- und Unterkriterien im Detail. Dem möchten wir im Folgenden eine kurze Darstellung der Bewertungsprinzipien von ChemSelect und der Ergebnisdarstellung voranstellen.

2.2 Ermittlung der Bewertungsfarben

Im Folgenden werden die Regeln erläutert, nach denen die Farben für Unterkriterien für Stoffe vergeben werden, wie die Ergebnisse der Unterkriterien von Inhaltsstoffen eines Gemisches aggregiert werden, wie die Ergebnisse für Stoff und Gemische auf der Ebene der Hauptkriterien zusammengefasst werden und wie die Ermittlung von Bewertungsrängen erfolgt.

2.2.1 Stoffe

2.2.1.1 Unterkriterien

Das Ergebnis einer Bewertung wird von ChemSelect für jedes Unterkriterium anhand einer Ampelfarbe dargestellt. Hierbei wird

- **Rot** für das am wenigsten nachhaltige Ergebnis vergeben,
- **Grün** für das nachhaltigste und
- **Gelb** für ein Ergebnis im Bereich dazwischen.

Jedes Unterkriterium wird einzeln anhand von Indikatoren bewertet. Die Indikatoren definieren, wann ein Stoff für ein Unterkriterium „eher nachhaltig“ (grün), „weniger nachhaltig“ (gelb) oder „nicht nachhaltig“ (rot) ist. Die Indikatoren können numerisch oder qualitativ sein (z. B. „Stoff ist auf einer Problemstoffliste enthalten“).

Zudem sind drei weitere Fälle bzw. Farben in der Bewertung möglich:

- Die Farbe **Grau** wird vergeben, wenn ein Kriterium **(noch) nicht bearbeitet** ist bzw. der Nutzer sich dafür entscheidet, ein Kriterium nicht zu bearbeiten.
- Die Farbe **Rosa** wird vergeben, wenn ein*e Nutzer*in von ChemSelect ein Kriterium zwar bearbeitet, aber **keine Informationen gefunden** hat, die zur Bewertung genutzt werden können. Der Datenmangel kann darin begründet sein, dass es tatsächlich keine Daten gibt oder vorhandene Informationen nicht gefunden wurden.
- Die Farbe **Hellblau** wird vergeben, wenn ein Unterkriterium **nicht relevant ist**, z. B. weil ein Lebenszyklusschritt nicht vorkommt.

2.2.1.2 Hauptkriterien

Die Bewertungsfarbe eines Hauptkriteriums ergibt sich aus den Bewertungen der Unterkriterien. Die Bedeutung der Farben ist für die Haupt- und Unterkriterien gleich.

Ist ein Unterkriterium mit hellblau bewertet, wird es bei der Aggregation grundsätzlich **nicht berücksichtigt**, d. h. die Farbe des Hauptkriteriums richtet sich dann nach den Farben der anderen Unterkriterien. Sind alle Unterkriterien eines Hauptkriteriums hellblau, wird das Hauptkriterium als „nicht relevant“ (also auch hellblau) gewertet.

Es gibt drei Vorgehensweisen zur Ermittlung der Farbe der Hauptkriterien anhand der Farben der Unterkriterien:

- ▶ Nennung auf Problemstofflisten. Physikalisch-chemische Gefahren, Humantoxizität, Umwelttoxizität und Substituierbarkeit: Prinzip des Vorrangs von Rot (s. Textbox): Da es nicht möglich sein soll, toxische Wirkungen auszugleichen und ChemSelect der intrinsischen Sicherheit bewusst eine hohe Priorität einräumt dominiert rot die Bewertung.
- ▶ Klima- und Ozonschädigungen, Ressourcenverbrauch, Kreislauffähigkeit und Verantwortung des Lieferanten: Mittelwertbildung aus den jeweiligen Unterkriterien (s. umseitige Textbox). Dies ist dadurch begründet, dass ein Bewertungsaspekt einen anderen ausgleichen kann. Wird für die Herstellung eines Stoffes sehr viel Wasser („rot“) aber sehr wenig Energie („grün“) verbraucht, wird der Ressourcenverbrauch insgesamt mit „gelb“ bewertet.
- ▶ Hauptkriterium Expositionspotenzial für Arbeiter, Expositionspotenzial für Verbraucher und Expositionspotenzial für die Umwelt: hier wird eine Mischung aus den beiden Ansätzen verwendet. Dies ist im Kapitel 3.5 erläutert.

Prinzip des „Vorrangs von Rot“

Das Prinzip des „Vorrangs von Rot“ bedeutet eine „worst case“ Bewertung, die jedoch durch die transparente Darstellung der Ergebnisse relativiert wird. Die Bewertungsfarbe für ein Hauptkriterium² wird durch die folgenden Fragen ermittelt, die in der hier angegebenen Reihenfolge zu stellen und zu beantworten sind:

Prüfungen	Farbe Hauptkriterium
1 oder mehr Unterkriterien = rot?	Rot
Alle Unterkriterien = grün?	Grün
Max. 1 Unterkriterium rosa oder grau? ³	Dieses Unterkriterium wird ignoriert; nächster Schritt
Mind. 2 Unterkriterien rosa und/oder grau?	≥ 1= rosa → rosa; alle grau → grau
Alle anderen Fälle	Gelb

Sobald eine Frage mit „Ja“ beantwortet wurde, entfällt die Bearbeitung der auf sie folgenden Fragen.

Prinzip der Mittelwertbildung

Den drei Ampelfarben sowie den Fällen des „Nichtwissens“ wird ein Wert zugeordnet;

² Bei Bewertungen von Gemischen werden die Farben der Unterkriterien für das Gemisch analog ermittelt, indem die Prüfungen für die Ergebnisse der enthaltenen Stoffe durchgeführt werden und die Bewertungsfarbe des Unterkriteriums anhand des Prinzips des Vorrangs von Rot abgeleitet wird.

³ Hier wird akzeptiert, dass für ca. 25% der Kriterien unbekannt ist, wie die Bewertung aussieht. Dieses Prinzip der „Nichtigkeitsschwelle“ von 25% findet auch bei der Bewertung von Gemischen Berücksichtigung, wenn Ergebnisse von verschiedenen Stoffen für ein Gemisch aggregiert werden.

Farbe	Wertigkeit
Grün	1
Gelb	3
Rosa/grau	4
Rot	5

Die Ergebnisse der Unterkriterien werden addiert und durch die Anzahl der Unterkriterien geteilt. Für das Ergebnis gilt folgende Regel:

Mittelwert	Farbe Hauptkriterium
< 1,67	Grün
1,67-3,3	Gelb
> 3,3 – 4,14	Rosa
> 4,14	Rot

Wenn in der Bewertung kein Rosa vergeben wurde, ist eine Vergabe von Rosa für das Hauptkriterium nicht möglich. In dem Fall wird die folgende Bewertungsskala verwendet

Mittelwert	Farbe Hauptkriterium
< 1,67	Grün
1,67-3,3	Gelb
> 3,3	Rot

2.2.2 Gemische

Für die Bewertung der Gemische werden die gleichen Kriterien und Bewertungsprinzipien angewendet, wie für die Stoffe. Es werden zwei Fälle für die Bewertung der Unterkriterien unterschieden:

- Bewertung des Gemisches als Ganzes oder
- Bewertung anhand der Bewertungen der Inhaltsstoffe.

Wird das Gemisch als Ganzes bewertet so werden die gleichen Indikatoren und das gleiche Vorgehen wie für die Stoffbewertung angewendet. Basiert die Bewertung auf den Ergebnissen der Inhaltsstoffe, so werden die Einzelergebnisse der Inhaltsstoffen für ein Unterkriterium zusammengefasst. Dies erfolgt entweder:

- anhand des Prinzips des „Vorrangs von Rot“ (s. Textbox in Kapitel 2.2),
- Oder anhand von Formel 1 (s. u.).

Zur Bildung von gewichteten Mittelwerten werden die Zahlenwerte der Bewertungsfarben (rot = 5, rosa = 4, gelb = 3 und grün = 1) für jeden Inhaltsstoff mit der Konzentration des jeweiligen Stoffes im Gemisch multipliziert und daraus eine Summe gebildet, die durch die Anzahl der Inhaltsstoffe dividiert wird.

Mit blau bewertete Unterkriterien werden in der weiteren Bewertung ignoriert.

Formel 1: Berechnung der Werte für ein Unterkriterium eines Gemisches (gewichteter Mittelwert)

$$\frac{(\sum \text{Konz}_{\text{rot}} * 5 + \sum \text{Konz}_{\text{rosa/grau}} * 4 + \sum \text{Konz}_{\text{gelb}} * 3 + \sum \text{Konz}_{\text{grün}} * 1)}{\sum \text{Konz}_{\text{alle Farben}}}$$

Die Bewertungsfarbe für das Unterkriterium im Gemisch wird anhand der Mittelwerte bestimmt.

- Grün: Mittelwert < 1,67
- Gelb: Mittelwert liegt zwischen 1,65 und 3,3
- Rot: Mittelwert > 3,3.

Die folgende Tabelle zeigt im Überblick, welche Herangehensweise für welches Hauptkriterien verwendet wird und wie im Fall der Bewertung anhand der Inhaltsstoffe die Aggregation der Ergebnisse erfolgt.

Tabelle 2: Grundlegende Herangehensweise zur Bewertung der Hauptkriterien für Gemische

Hauptkriterium	Herangehensweise Bewertung	Aggregation der Ergebnisse je Unterkriterium
Nennung auf Problemstofflisten	Basierend auf Inhaltsstoffen	Vorrang Rot
PC-Eigenschaften	Für das Gemisch als Ganzes	Entsprechend Indikatoren
Humantoxizität	Einstufung des Gemisches sowie basierend auf Inhaltsstoffen	Vorrang Rot
Umwelttoxizität	Einstufung des Gemisches sowie basierend auf Inhaltsstoffen	Vorrang Rot
Expositionspotenziale	Basierend auf Inhaltsstoffen	Mittelwert und Vorrang von Rot (s. Kapitel 3.5.7.1)
Klima- und ozonschädigende Wirkung	Basierend auf Inhaltsstoffen	Gewichteter Mittelwert
Ressourcenverbrauch	Basierend auf Inhaltsstoffen	Gewichteter Mittelwert
Kreislauffähigkeit	Basierend auf Inhaltsstoffen	Gewichteter Mittelwert
Verantwortung des Lieferanten	Für das Gemisch als Ganzes	Entsprechend Indikatoren
Substitutionspotenzial	Für das Gemisch als Ganzes	Entsprechend Indikatoren

Gemische werden bzgl. der Human- und Umwelttoxizität zunächst anhand ihrer Einstufung des bewertet. Allerdings kann das Ergebnis für Unterkriterien, CMR, PBT/vPvB, PMT/vPvM und EDC (hh/env) überschrieben werden, wenn das Gemisch Stoffe mit diesen Eigenschaften in Konzentrationen > 0,1% enthält. Dies kann dann der Fall sein, wenn das Gemisch nicht richtig eingestuft wurde, oder z. B. für die Bewertung nicht die Stoffeinstufung, sondern anderweitige Informationen berücksichtigt wurden.

2.3 Die Ermittlung der Nachhaltigkeitsrangfolge bei Vergleichen von Chemikalien

Neben der Erstellung von Nachhaltigkeitsprofilen, bietet ChemSelect die Möglichkeit, mehrere Stoffe und Gemische miteinander zu vergleichen. Hierfür ermittelt ChemSelect für jedes Unter- und Hauptkriterien eine Rangfolge der bewerteten Stoffe bzw. Gemische. Die Chemikalie mit dem niedrigsten Rang (1) ist für das jeweils betrachtete Unter- oder Hauptkriterium die „nachhaltigste“. Die Chemikalie mit dem höchsten Rang (maximal 5, da insgesamt 5 Stoffe oder Gemische miteinander verglichen werden können) ist diejenige, welche bei dem entsprechenden

Kriterium am wenigsten nachhaltig ist. Diese Ränge sind also relativ und gelten nur für das jeweils geprüfte Set an Stoffen/Gemischen.

2.3.1 Bildung der Ränge für Stoffe

Für alle Kriterien mit Ausnahme der Hauptkriterien zum Expositionspotenzial⁴ werden die Ränge für Stoffe wie folgt abgeleitet.

Unterkriterien

Zur Ermittlung der Ränge werden die Bewertungsfarben in numerische Werte übersetzt, die gleichzeitig die Ränge der Unterkriterien für die Stoffe darstellen: Grün = 1; Gelb = 3 und Rot = 5. Unterkriterien, die mit rosa bewertet werden, erhalten den Wert und Rang 4. Mit grau oder hellblau bewertete Unterkriterien werden nicht in der Rangbildung der Unterkriterien berücksichtigt.

Hauptkriterien

Zur Ermittlung der Ränge der Hauptkriterien für Stoffe wird wie folgt vorgegangen:

Für die Kriterien Human- und Umwelttoxizität wird die Rangfolge gemäß dem Prinzip „Vorrang von Rot“ gebildet, d. h. der Stoff mit der höchsten Anzahl an roten Unterkriterien erhält den schlechtesten Rang, der mit den wenigsten roten Kriterien den besten Rang. Danach wird diese Prüfung für die mit gelb bewerteten Kriterien weitergeführt. Als letztes wird der Rang 1 für alle Hauptkriterien vergeben, die nur mit grün bewertete Unterkriterien haben.

Für alle anderen Kriterien

1. Aus den Rängen der Unterkriterien eines Hauptkriteriums wird der Mittelwert gebildet.
2. Die Ränge werden entsprechend der Mittelwerte vergeben. Der niedrigste Mittelwert erhält den Rang 1, der zweit niedrigste den Rang 2 etc. Der höchste Mittelwert erhält den höchsten Rang (am wenigsten nachhaltig).

Im Nachhaltigkeitsvergleich werden neben den Rängen auch die Ampelfarben der Haupt- und der Unterkriterien dargestellt.

2.3.2 Bildung der Ränge für Gemische

2.3.2.1 Hauptkriterien Listen, Human- und Umwelttoxizität

Unterkriterien

Werden mehrerer Gemische miteinander verglichen, so verläuft die Ermittlung der Ränge für die Unterkriterien von Hauptkriterien, die anhand der Einzelstoffe bewertet werden, wie folgt:

1. Die Ergebnisse der Unterkriterien für jeden Stoff in jedem Gemisch werden ermittelt
2. Alle Unterkriterien = grün → Rang 1
3. Die Summe der Konzentrationen aller Stoffe, die eine rote Bewertung haben, werden je Gemisch summiert
4. Das Gemisch mit der höchsten Konzentration an mit rot bewerteten Stoffen bekommt den letzten (am wenigsten nachhaltigen) Rang. Dasjenige mit der zweithöchsten Konzentration den zweitletzten etc.
5. Danach werden alle Gemische, die keine Stoffe mit einer roten aber Stoffe mit einer rosa Bewertung verglichen und wie folgt verfahren:

⁴ Die Rangbildung für das Hauptkriterium Exposition ist in den Kapiteln 3.5.6 und 3.5.8 beschrieben.

- a. ist die Summe der Konzentrationen der Stoffe, die mit rosa bewertet sind $< 25\%$, so werden diese nicht berücksichtigt (-->Schritt 6; Prüfung gelb).
 - b. ist die Summe der Konzentrationen der Stoffe, die mit rosa bewertet sind $\geq 25\%$, bekommt das Gemisch mit der höchsten Konzentration an rosa den höchsten, noch nicht vergebenen Rang, das mit der zweit-höchsten Konzentration den dann noch "schlechtesten" (höchsten) Rang etc.
6. Danach werden alle Gemische, deren strikteste Bewertung gelb ist verglichen und hier ebenso verfahren: die Summe der Konzentrationen der Stoffe, die mit gelb bewertet sind, wird gebildet. Das Gemisch mit der niedrigsten Konzentration bekommt den besten, noch verfügbaren Rang, das mit der zweit-niedrigsten Konzentration den dann noch verfügbaren besten Rang etc.

Unterkriterien mit einer hellblauen Bewertung werden nicht berücksichtigt, bei einer grauen Bewertung wird der Stoff in der Rangbildung für dieses Unterkriterium nicht berücksichtigt.

Hauptkriterien

Die Ränge für die Hauptkriterien werden anhand des Mittelwerts der Ränge der Unterkriterien gebildet. Auch hier bezeichnet der erste Rang das nachhaltigste Gemisch (d. h. das Gemisch mit dem niedrigsten Mittelwert) und der letzte Rang das am wenigsten nachhaltige Gemisch (d. h. das Gemisch mit dem höchsten Mittelwert). Im Nachhaltigkeitsvergleich werden die Ampelfarben der Haupt- und Unterkriterien dargestellt.

2.3.2.2 Klima- und ozonschädigende Wirkung, Ressourcenverbrauch, Kreislauffähigkeit

Unterkriterien

Bei diesen Kriterien wird für jedes Bewertungsergebnis der Inhaltsstoffe für ein Unterkriterium der dazugehörige numerische Wert verwendet (Rot = 5; Rosa/Grau = 4, Gelb = 3 und Grün = 1). Die Konzentration aller Komponenten mit der gleichen Farbe werden jeweils aufsummiert und mit dem Wert ihrer Bewertungsfarbe multipliziert. Die Summe der erhaltenen Werte ist der „Kategoriewert“ und wird zur Festlegung der Ränge verwendet (je höher der Kategoriewert, desto schlechter der Rang (höherer Zahlenwert)). Stoffe im Gemisch, deren Unterkriterium mit hellblau bewertet ist, werden in der Rangbildung nicht berücksichtigt. Für die Ermittlung der Bewertungsfarbe werden die folgenden numerischen Bandbreiten als Indikatoren festgelegt:

- Ergebnis $< 1,67$ = grün
- Ergebnis $1,67 \leq 3,3$ → gelb
- Ergebnis $3,3 \leq 4,14$ → rosa
- Ergebnis größer 4,14 → rot

Wenn es keine Bewertung mit der Farbe Rosa gibt, werden die Unterkriterien ab einem Wert von 3,3 mit rot bewertet.

Hauptkriterien

Die Ränge für die Hauptkriterien werden anhand des Mittelwerts der Ränge der Unterkriterien gebildet. Auch hier bezeichnet der erste Rang den nachhaltigsten und der letzte Rang den am wenigsten nachhaltigen Stoff. Im Nachhaltigkeitsvergleich werden die Ampelfarben der Haupt- und Unterkriterien dargestellt.

Da die Ränge der Unterkriterien gemittelt werden und konzentrationsabhängig sind, kann es vorkommen, dass ein Hauptkriterium, das die Farbe GELB hat, einen höheren (weniger nachhaltigen) Rang bekommt als ein Hauptkriterium mit der Farbe Rot.

2.3.2.3 PC-Gefahren, Verantwortung des Lieferanten und Substituierbarkeit

Für die Hauptkriterien „PC-Gefahren“, „Verantwortung des Lieferanten“ und „Substituierbarkeit“ erfolgt die Ermittlung der Bewertungsfarbe direkt anhand der Indikatoren für das Gemisch.

Die Ränge für den Nachhaltigkeitsvergleich entsprechen dem Wert der Bewertungsfarbe: Es gibt die Ränge 5 (rot), 4 (rosa/grau), 3 (gelb) und 1 (grün). Haben zwei Gemische bei einem Unter- und/oder Hauptkriterium die gleiche Farbe, erhalten sie auch den gleichen Rang.

In der folgenden Tabelle ist das Vorgehen zur Ermittlung der Ränge in einer Übersicht zusammengestellt.

Tabelle 3: Herangehensweise zur Ermittlung der Ränge für Gemische

Hauptkriterium	Ermittlung Bewertungsfarbe	Rang Unterkriterium Gemisch	Rang Hauptkriterium
Nennung auf Problemstofflisten	Vorrang Rot, basierend auf Inhaltsstoffen	Ränge lt. \sum der Konzentrationen an Stoffen mit roter/gelber Bewertung (Vorrang von Rot)	Vorrang von Rot ⁵
PC-Gefahren	Indikatoren für Gemisch	Entsprechend der Bewertungsfarbe	Entsprechend Bewertungsfarbe
Humantoxizität	Vorrang Rot; basierend auf Inhaltsstoffen	Ränge lt. \sum der Konzentrationen an Stoffen mit roter/rosa/gelber Bewertung (Vorrang von Rot)	Vorrang von Rot ⁵
Umwelttoxizität	Vorrang Rot basierend auf Inhaltsstoffen	Ränge lt. \sum der Konzentrationen an Stoffen mit roter/rosa/gelber Bewertung (Vorrang von Rot)	Vorrang von Rot ⁵
Expositions-potenzial	Basierend auf Inhaltsstoffen	Ränge basierend auf dem Mittelwert der Expositionswerte	Mittelwert der Ränge der Unterkriterien
Klima- und ozonschädigende Wirkung	Basierend auf Inhaltsstoffen	Nach Summen aus Konzentration <ul style="list-style-type: none"> • „rote“ Stoffe * 5 • „rosa“ und/oder „graue“ Stoffe * 4 • „gelbe“ Stoffe * 3 • „grüne“ Stoffe * 1 	Mittelwert der Ränge der Unterkriterien
Ressourcenverbrauch	Basierend auf Inhaltsstoffen	Nach Summen aus Konzentration <ul style="list-style-type: none"> • „rote“ Stoffe * 5 • „rosa“ und/oder „graue“ Stoffe * 4 • „gelbe“ Stoffe * 3 • „grüne“ Stoffe * 1 	Mittelwert der Ränge der Unterkriterien
Kreislauf-fähigkeit	Basierend auf Inhaltsstoffen	Nach Summen aus Konzentration <ul style="list-style-type: none"> • „rote“ Stoffe * 5 • „rosa“ und/oder „graue“ Stoffe * 4 • „gelbe“ Stoffe * 3 • „grüne“ Stoffe * 1 	Mittelwert der Ränge der Unterkriterien

⁵ Hier bekommt das Gemisch den schlechtesten (höchsten) Rang, welches die meisten Unterkriterien hat, die mit rot bewertet wurden.

Hauptkriterium	Ermittlung Bewertungsfarbe	Rang Unterkriterium Gemisch	Rang Hauptkriterium
		Vergabe der Ränge gemäß steigender Kategoriewerte	
Verantwortung des Lieferanten	Für das Gemisch als Ganzes	Entsprechend der Bewertungsfarbe	Mittelwert der Ränge der Unterkriterien
Substituierbarkeit	Für das Gemisch als Ganzes	Entsprechend der Bewertungsfarbe	Mittelwert der Ränge der Unterkriterien

2.4 Darstellung des Bewertungsergebnisses

2.4.1 Nachhaltigkeitsprofil

Das Nachhaltigkeitsprofil wird tabellarisch und im Detail dargestellt, d. h. die Bewertungsfarben sowohl der Hauptkriterien als auch der Unterkriterien sind direkt sichtbar. Bei Gemischen können zusätzlich die Ergebnisse/Farben der Unterkriterien je Inhaltsstoff des Gemisches angezeigt werden.

Analog zum Nachhaltigkeitsprofil werden bei Nachhaltigkeitsvergleichen die Ränge und die Farben aller verglichenen Stoffe und Gemische nebeneinander aufgeführt. Auch hier sind bei Gemischen die Einzelergebnisse für die Inhaltsstoffe abrufbar.

Zusätzlich zu dieser Darstellung gibt es eine Möglichkeit eine „Zusammenfassung“ zu erstellen, in der die Ergebnisse der Bewertung stärker aggregiert werden. Bei dieser Zusammenfassung wird das Hauptkriterium „PC-Gefahren“ nicht berücksichtigt, da ChemSelect primär auf (Öko-)toxikologische Gefahren fokussiert, die PC-Gefahren im Wesentlichen für die Verarbeitung von Chemikalien und im Arbeitsschutz relevant sind, und auch in anderen Bewertungssystemen, die PC-Eigenschaften einen untergeordneten Stellenwert haben.

Abbildung 1: Auszug aus einem Nachhaltigkeitsprofil (Beispiel)

Bisphenol S		←
<p>⚠ Die Bewertung des Stoffes zeigt Defizite in der Nachhaltigkeit. Prüfen Sie bitte das Potenzial zur Substitution und verschaffen sich einen Eindruck darüber, wie einfach oder schwierig eine Substitution sein könnte.</p>		<p>Substitutionspotenzial Zusammenfassung</p>
5	Nennung auf Problemstofflisten	
5	Physikalisch-chemische Eigenschaften	
5	Humantoxizität	
5	Krebserzeugende, mutagene und reproduktionstoxische Wirkung	
3	Störungen des Hormonsystems beim Menschen	
3	Schädigungen bei Kontakt mit Haut und Augen	
1	Weitere Schädigungen der menschlichen Gesundheit	
5	Umwelttoxizität	
3	Aquatische Toxizität	
1	PBT/vPvB-Stoffe und Ferntransport	
1	PMT/vPvM-Stoffe	
3	Störungen des Hormonsystems in der Umwelt	

In der „Zusammenfassung“ werden die folgenden Informationen ausgegeben:

- **Aspekt „Besondere Besorgnis“:** Der Stoff steht auf einer Problemstoffliste bzw. ein Gemisch enthält einen Stoff, der auf einer Stoffliste steht.

- **Aspekt „Risikohinweise Gesundheit und Umwelt“:** Die Informationen zur Gefährlichkeit für den Menschen und für die Umwelt werden mit dem Ergebnis der Expositionsbetrachtung kombiniert (s. unten) und entsprechende Risikohinweise ausgegeben.

Tabelle 4: Risikohinweis Arbeitnehmer

Exposition Gefährlichkeit	Mind. 1 Expo- Potenzial ist rot	Mind. 1 Expo- Potenzial ist gelb	Alle Expo- Potenziale sind grün	Alle Expo- Potenziale sind grau
CMR, ED hh (lt. Liste)	Rot	Rot	Rot ⁶	Rot
Humantoxizität rot	Rot	Gelb	Gelb	Rosa
Humantoxizität gelb	Gelb	Gelb	Grün	Rosa
Humantoxizität grün	Grün	Grün	Grün	Grün

Tabelle 5: Risikohinweis Verbraucher

Exposition Gefährlichkeit	Mind. 1 Expo- Potenzial ist rot	Mind. 1 Expo- Potenzial ist gelb	Alle Expo- Potenziale sind grün	Alle Expo- Potenziale sind grau
CMR, ED hh, PBT/vPvB, oder PMT/vPvM ⁷ (lt. Liste)	Rot	Rot	Rot ⁶	Rot
Humantoxizität rot	Rot	Gelb	Gelb	Rosa
Humantoxizität gelb	Gelb	Gelb	Grün	Rosa
Humantoxizität grün	Grün	Grün	Grün	Grün

Tabelle 6: Risikohinweis Umwelt

Exposition Gefährlichkeit	Mind. 1 Expo- Potenzial ist rot	Mind. 1 Expo- Potenzial ist gelb	Alle Expo- Potenziale sind grün	Alle Expo- Potenziale sind grau
PBT/vPvB, ED env oder PMT/vPvM (lt. Liste)	Rot	Rot	Rot ⁶	Rot
Umwelttoxizität rot	Rot	Gelb	Gelb	Rosa
Umwelttoxizität gelb	Gelb	Gelb	Grün	Rosa
Umwelttoxizität grün	Grün	Grün	Grün	Grün

Die Risikohinweise können einen Erläuterungstext beinhalten, der beschreibt, welche Risiken weshalb zu erwarten sind.

- **Aspekt „Wirkungen im Lebenszyklus“:** Aus den Ergebnissen Treibhausgasemissionen, Ressourcenverbrauch und Kreislauffähigkeit wird ein Mittelwert gebildet

⁶ Für SVHC-Stoffe wird jede Exposition als problematisch angesehen (s. Generic Approach to Risk Management der Chemikalienstrategie) und daher hier rot vergeben. In ChemSelect wird dieses Ergebnis in der Zusammenfassung erläutert.

⁷ Anders als bei den Arbeitern, werden PBT/vPvB und PMT/vPvM in beiden Risikohinweisen für Verbraucher berücksichtigt, da hier eine Exposition über die Umwelt möglich ist.

Das Kriterium **Substituierbarkeit** wird als Zusatzinformation zum Bewertungsergebnis ausgegeben. Es liefert Anhaltspunkte, ob ein Stoff oder Gemisch eher „einfach und schnell“ oder eher „schwer und langfristig“ ersetzbar sein könnte.

Dieses Kriterium wird im Kapitel 3.10 genauer beschrieben. Es wird nur dann abgefragt, wenn die Ergebnisse der Bewertung der vorhergehenden Kriterien andeuten, dass der Stoff eine hohe Substitutionspriorität hat. Dies wird anhand der Ergebnisse der Zusammenfassung der Hauptkriterien (siehe Kap. 3.10) ermittelt.

Abbildung 2: Zusammenfassung einer Nachhaltigkeitsbewertung (Beispiel)

A Die Bewertung des Stoffes zeigt Defizite in der Nachhaltigkeit. Prüfen Sie bitte das Potenzial zur Substitution und verschaffen sich einen Eindruck darüber, wie einfach oder schwierig eine Substitution sein könnte.

5	Nennung auf Problemstofflisten
1	Physikalisch-chemische Eigenschaften
5	Humantoxizität
5	Krebserzeugende, mutagene und reproduktionstoxische Wirkung
5	Störungen des Hormonsystems beim Menschen
1	Schädigungen bei Kontakt mit Haut und Augen
1	Weitere Schädigungen der menschlichen Gesundheit
5	Umwelttoxizität
5	Aquatische Toxizität
1	PBT/vPvB-Stoffe und Ferntransport
1	PMT/vPvM-Stoffe
5	Störungen des Hormonsystems in der Umwelt
3	Expositionspotenzial an Arbeitsplätzen
3	Expositionspotenzial an Arbeitsplätzen - Dermal
1	Expositionspotenzial an Arbeitsplätzen - Inhalation
1	Expositionspotenzial für Verbraucher
1	Expositionspotenzial für Verbraucher - Dermal
1	Expositionspotenzial für Verbraucher - Inhalation
1	Expositionspotenzial für Verbraucher - Oral
1	Expositionspotenzial für die Umwelt
1	Expositionspotenzial für die Umwelt - Wasser
1	Expositionspotenzial für die Umwelt - Luft
1	Expositionspotenzial für die Umwelt - Boden
3	Klima und Ozon
1	Intrinsisches Treibhauspotenzial
3	CO ₂ -Emissionen während der Herstellung
1	Ozonschädigende Wirkung
3	Ressourcenverbrauch
3	Energieverbrauch
3	Wasserverbrauch
3	Verbrauch von Rohstoffen
5	Kreislauffähigkeit
5	Potenzial zur Rückgewinnung
5	Potenzial, Sekundärmaterialien zu verunreinigen
3	Verantwortung des Lieferanten
3	Übernahme von Verantwortung für Arbeiter
1	Übernahme von Verantwortung für die Umwelt
3	Übernahme von Verantwortung für das soziale Umfeld

2.4.2 Nachhaltigkeitsvergleiche

Bei den Nachhaltigkeitsvergleichen werden für jedes Unterkriterium und jedes Hauptkriterium der jeweils bewerteten Stoffe und Gemische Ränge gebildet (s. Kapitel 2.3). Diese Ränge werden als zentrales Ergebnis dargestellt, wobei auch die Bewertungsfarben der Haupt- und Unterkriterien sichtbar sind.

Die Bildung der Ränge für die „Zusammenfassung“ der Ergebnisse für Stoffe erfolgt durch Mittelwertbildung der Ränge der Hauptkriterien, die in die jeweiligen Aspekte einfließen (s.o.). Auf Ebene der Gemische wird keine Zusammenfassung erstellt.

2.5 Einstufungen von Stoffen und Unsicherheiten bei der Einstufung

Bei mehreren Hauptkriterien werden zur Bewertung die Gefahrenhinweise (H-Sätze) aus der Einstufung und Kennzeichnung nach CLP-Verordnung genutzt. Die H-Sätze sind international im GHS (Globally Harmonised System) harmonisiert. In der EU müssen Inverkehrbringer von Stoffen und Gemischen die H-Sätze ermitteln. Außerdem können seitens der Behörden auf EU-Ebene harmonisierte Einstufungen für Stoffe festgelegt werden. Die H-Sätze werden im Einstufungs- und Kennzeichnungsregister der ECHA veröffentlicht. Sie müssen mit dem Sicherheitsdatenblatt von Chemikalien (gemäß REACH Verordnung Anhang 2) in den Lieferketten kommuniziert werden.

Die H-Sätze sind Unternehmen, die mit Stoffen und Gemischen umgehen, vertraut. Sie sind auch der Bezugspunkt für die Ableitung von Risikomanagement-Maßnahmen im Einfachen Maßnahmenkonzept Gefahrstoffe (EMKG), das von der Bundesanstalt für Arbeitsschutz und Arbeitsmedizin entwickelt wurde⁸. Die H-Sätze ermöglichen eine schnelle Bewertung über das Vorhandensein von problematischen Stoffeigenschaften und werden daher in ChemSelect als Indikatoren verwendet.

Die Einstufungen der Inverkehrbringer beruhen auf den „vorhandenen“ Daten. Für viele (die Mehrheit) der Stoffe fehlen jedoch Studien und Testergebnisse, anhand derer eine vollständige Einstufung vorgenommen werden könnte. Der Grund dafür, dass ein Stoff bzgl. einer gefährlichen Eigenschaft nicht eingestuft ist, kann also sowohl sein, dass vorhandene Testergebnisse zeigen, dass die Eigenschaft nicht vorliegt als auch, dass die Datenlage nicht ausreicht, um eine Beurteilung der Einstufung vorzunehmen. Im zweiten Fall kann also von einer fehlenden Einstufung nicht auf eine fehlende Gefährlichkeit geschlossen werden.

ChemSelect kann diese Lücke in der Gefahrenidentifizierung und -kommunikation nicht schließen. Die Beurteilung der gefährlichen Eigenschaften mit „Grün“ (= nicht gefährlich) erfolgt daher „basierend auf dem aktuellen Stand des Wissens“ und vorbehaltlich neuer Daten, die diese Einschätzung ändern können.

Eine weitere Schwierigkeit bei der Verwendung der Einstufungen besteht darin, dass verschiedene Hersteller einen Stoff unterschiedliche einstufen können, d. h., dass die abgeleiteten H-Sätze nicht immer identisch sind. Dies kann sowohl am Reinheitsgrad des Stoffes liegen als auch an den Daten, die den jeweiligen Hersteller*innen für die Einstufung zur Verfügung standen.

ChemSelect verweist auf die Zusammenstellung der Einstufungen der Datenbanken der ECHA. Hier ist erkennbar, welche H-Sätze von den Behörden festgelegt wurden (harmonisierten Einstufung), welche aus Registrierungs dossiers (hier wird eine gewisse Qualitätssicherung vorausgesetzt) und welche von einzelnen Herstellern stammen. So können die Nutzer*innen von

⁸ Das EMKG ein Control-Banding-Tool ist. Es schlägt passende Schutzmaßnahmen für den Umgang mit Gefahrstoffen vor und unterstützt die Gefährdungsbeurteilung am Arbeitsplatz.

ChemSelect sich für die Information mit der höchsten Qualität entscheiden bzw. einen Vergleich mit den Informationen in ihrem Sicherheitsdatenblatt vornehmen.

Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass vorliegende Einstufungen für Stoffe unvollständig oder fehlerhaft sind. Diese Unsicherheiten können nur durch eine aufwändige Auswertung sonstiger vorhandener, wissenschaftlicher Informationen zum Stoff oder durch zusätzliche Analysen behoben werden. Es ist unwahrscheinlich, dass Unternehmen diesen Zusatzaufwand leisten werden. Auch in anderen Bewertungssystemen (z. B. GreenScreen) sind die H-Sätze die wesentliche Bewertungsgrundlage bei vielen Kriterien.

Einzelne bestehende Einstufungen werden von den europäischen Behörden im Rahmen der Anpassungen an den technischen Fortschritt (Adaptation on Technical Progress, ATP) regelmäßig überprüft und ggf. geändert. Hierauf und auf die Stellen, an denen die Änderungen dokumentiert sind, wird in einem Hilfetext in ChemSelect hingewiesen.

3 Erläuterung der Haupt- und Unterkriterien

Im Folgenden sind alle Hauptkriterien und ihre Unterkriterien beschrieben und die Indikatoren für die Bewertungsfarben aufgeführt und begründet.

3.1 Nennung auf Problemstofflisten

Das Kriterium liefert eine Warnung, dass ein Stoff besonders besorgniserregend ist. Es stützt sich auf einige internationale und europäische Listen.

Tabelle 7: Listen, die beim Hauptkriterium „Problemstofflisten“ abgefragt werden

Nr	Liste	Bezug	Kommentar
1	Stockholm-Konvention, Persistente Organische Schadstoffe (persistent organic pollutants - POPs)	Global	POPs in den Anhängen plus POP-Kandidaten
2	Kyoto-Protokoll, Treibhausgase	Global	
3	Montrealer Protokoll, ozonschichtzerstörende Stoffe (ozone depleting substances – ODPs)	Global	
4	REACH Kandidatenliste	EU	
5	SIN-Liste	EU	Wird von vielen Unternehmen eingesetzt
6	Liste der Karzinogenen, Mutagenen und Reproduktionstoxischen Stoffe (KMR-Liste) aus der Verordnung zur Einstufung und Kennzeichnung (CLP) und den Technischen Regeln für Gefahrstoffe 905 (TRGS 905)	Global (CLP) + EU	Sicherheitsnetz für die kritischsten Einstufungen
7	Gruppen strukturverwandter Stoffe	Global (u.a. OECD PFAS ⁹)	Vermeidung von bedauerlicher Substitution

Oft werden problematische, verbotene Stoffe durch (noch) nicht regulierte, aber ebenfalls problematische Stoffe („regrettable substitution“) ersetzt. Deshalb sind in ChemSelect auch Listen problematischer Ersatzstoffe für die Stoffgruppen der Bisphenole, Phthalate, Chlorparaffine, bromierten Flammschutzmittel und PFAS gemäß OECD-Definition („Gruppen strukturverwandter Stoffe“) ohne biologisch abbaubare PFAS hinterlegt.

Indikatoren

- Rot: Stoff ist auf einer oder mehreren regulatorischen Listen (POPs, SVHC etc.) enthalten.
- Gelb: Stoff ist auf der SIN-Liste bzw. steht im Verdacht aufgrund von Strukturähnlichkeiten ebenso schädlich zu sein, wie ein Stoff, der auf einer regulatorischen Liste steht.¹⁰
- Grün: Stoff ist auf keiner Liste enthalten.

⁹ Per- und polyfluorierte Alkylsubstanzen / Chlorparaffine / Bisphenole / Phthalate / bromierte Flammschutzmittel.

¹⁰ Dies sind in Tabelle 7 die Listen strukturverwandter Gruppen (Nr. 7)

3.2 Physikalisch-chemische Gefahren

Es gibt lediglich ein Unterkriterium basierend auf der physikalisch-chemischen (PC)-Einstufung, d. h. der H-Sätze¹¹. Die Indikatoren entsprechen der Bewertung der Gefährlichkeit durch das „Einfache Maßnahmenkonzept Gefahrstoffe“ (EMKG).

Tabelle 8: Indikatoren zu physikalisch-chemischen Gefahren

ROT	GELB	GRÜN
H200, 201, 202, 203, 205, 220, 221, 222, 228, 230, 231, 240, 241, 242, 250, 251, 260, 261, 270, 271, EUH014, EUH019, EUH044	H204, 222, 223, 224, 225, 226, 228, 229, 251, 252, 272, 280, 281, 290, EUH018, EUH206, EUH209, EUH209A, EUH211, EUH212, EUH029, EUH031, EUH032, EUH066, EUH070, EUH071	Kein H-Satz, der auf gefährliche PC-Eigenschaften hinweist

3.3 Humantoxizität

3.3.1 Unterkriterium 1: Krebserzeugende, mutagene und reproduktionstoxische Wirkung

Die Bewertung bezieht sich ausschließlich auf die Einstufung der Stoffe¹¹, d.h. anhand der H-Sätze. Die Einteilung der Indikatoren basiert auf dem EMKG. Bei ChemSelect entspricht die Farbe „Rot“ den Gefährlichkeitsgruppen E und D des EMKG, „Gelb“ den Gruppen C, B und A des EMKG. Die Einteilung in „Grün“ erfolgt nur dann, wenn keine Einstufung vorliegt.

Tabelle 9: Indikatoren zur krebserzeugende, mutagene und reproduktionstoxische Wirkung

ROT	GELB	GRÜN
H340, 350, 350i, 360, 360D, 360DF, 360F, 360FD, 360Fd, EUH201, EUH201A, EUH207	H341, 351, 361, 361d, 361f, 361fd, 362	Keine Einstufung mit einer der genannten H-Sätze

Bei Gemischen wird überprüft, ob Stoffe > 0,1% enthalten sind, bei denen entweder aufgrund eines H-Satzes oder anderer Informationen eine der Eigenschaften gegeben ist (Stoffbewertung). Ist dies der Fall, dominiert die Bewertung dieses Stoffes das Ergebnis, d. h. die Einstufung des Gemisches wird mit der Bewertung des Stoffes überschrieben.

3.3.2 Unterkriterium 2: Störungen des Hormonsystems beim Menschen

Das Kriterium wird anhand der (zukünftige) Einstufung und verschiedenen Listen bewertet. Die Einteilung der Indikatoren unterscheidet nach „nachgewiesenen Endokrinen Disruptoren (EDCs)“, „ECD-Verdachtsstoffen“ und solchen, für die endokrine Wirkungen unwahrscheinlich sind. Die folgenden Listen können verwendet werden:

- ▶ ED List der EU: <https://edlists.org/about-this-site>
- ▶ Kandidatenliste: <https://echa.europa.eu/de/candidate-list-table>
- ▶ TEDX-Colborn-Liste: <https://endocrinedisruption.org/interactive-tools/tedx-list-of-potential-endocrine-disruptors/search-the-tedx-list>
- ▶ SIN-Liste: <https://sinlist.chemsec.org/>

Den ersten beiden Listen liegen behördliche Bewertungsprozesse zugrunde. Nennungen in der ED List der EU in Liste 1 oder in der REACH Kandidatenliste als hormonell schädigender Stoff

¹¹ Hinweis: Auf Datenunsicherheiten bei der Verwendung von H-Sätzen gehen wir im Kapitel 2.5 ein.

zeigen an, dass bei einem Stoff eindeutig hormonell schädigende Wirkungen nachgewiesen wurden. Dies führt zur Bewertungsfarbe „rot“.

Nennungen auf der TEDX-Colborn-Liste bzw. der SIN-Liste zeigen, dass es Hinweise auf hormonelle Schädigungen gibt. Sofern keine Nennung auf einer der beiden ersten Listen vorliegt, sondern ausschließlich auf den beiden letztgenannten Listen, führt dies zur Bewertungsfarbe „GELB“.

Wenn in den Listen keine Unterscheidung zwischen Auswirkungen auf den Menschen (hh, human health) und auf die Umwelt (env, environment) erfolgt, wird davon ausgegangen, dass ein hier gelisteter Stoff sowohl für den Menschen als auch für die Umwelt eine schädigende Wirkung auf das Hormonsystem hat oder Hinweise hierauf vorliegen.

Tabelle 10: Indikatoren zu Störungen des Hormonsystems beim Menschen

ROT	GELB	GRÜN
EUH 380, EUH 381 / Nachgewiesener EDC hh auf REACH-Kandidatenliste oder	Auf der TEDX Colborn-Liste oder der SIN-Liste als EDC gelistet Oder EUH201, EUH201A, EUH207	Nicht gelistet, keine Hinweise auf EDC hh oder EDC env und
In der EU ED List in der List I genannt (als EDC hh oder ohne Angabe, ob EDC hh oder EDC env)	In der EU ED List in Liste II oder III genannt Als EDC Class 2 oder 3 in EU ED-Liste (mit Bezug auf hh oder ohne Angabe, ob EDC hh oder EDC env).	Nicht in EU-ED Liste mit Bezug zu hh (oder ohne Angabe, ob EDC hh oder EDC env).
Von ECHA ED EG als "EDC hh" bewertet oder ohne Angabe, ob EDC hh oder EDC env.	Andere Hinweise auf hormonelle Aktivität	Von der ECHA ED Expert Gruppe als „nicht-ED hh“ oder als „nicht-ED ohne Angabe zu hh oder env bewertet

Bei Gemischen wird überprüft, ob Stoffe > 0,1% enthalten sind, bei denen entweder aufgrund eines H-Satzes oder anderer Informationen diese Eigenschaft gegeben ist (Stoffbewertung). Ist dies der Fall, dominiert das Ergebnis dieses Stoffes die Bewertung des Gemisches, d. h. die Einstufung des Gemisches wird mit dem Ergebnis des Stoffes überschrieben.

3.3.3 Unterkriterium 3: Schädigungen bei Kontakt mit Haut und Augen

Stoffe mit den unten genannten H-Sätzen können bei Kontakt mit Haut und Augen zu Schädigungen führen. Es sind zum einen lokale Wirkungen (z. B. Hautreizungen), aber auch systemische Effekte (z. B. Vergiftungen). Die Indikatoren entsprechen der Bewertung der Gefährlichkeit durch das EMKG. Die Farbe Rot bei ChemSelect entspricht den Gefährlichkeitsgruppen E und D beim EMKG, „Gelb“ den Gruppen A, B und C beim EMKG.

Tabelle 11: Indikatoren zu Schädigungen bei Kontakt mit Haut und Augen

ROT	GELB	GRÜN
H310	H311,312, H314 ,315, 317, 318, 319, EUH202, EUH203, EUH204, EUH205, EUH208, EUH070	Keine Einstufung oder EUH066

3.3.4 Unterkriterium 4: Weitere Schädigungen der menschlichen Gesundheit

Hier werden Schadwirkungen (Endpunkte) auf den Menschen überprüft, die von den ersten drei Unterkriterien nicht abgedeckt werden. Die Indikatoren entsprechen der Bewertung der

Gefährlichkeit durch EMKG. Die Farbe Rot bei ChemSelect entspricht den Gefährlichkeitsgruppen E und D beim EMKG, „Gelb“ den Gruppen A, B und C beim EMKG.

Tabelle 12: Indikatoren für Unterkriterium 4: Weitere Schädigungen der menschlichen Gesundheit

ROT	GELB	GRÜN
H300, 330, 370, 372, EUH032, EUH201, EUH201A, EUH207	H301, 302, 304, 314, 331, 332, 334, 370, 371, 373 EUH029, EUH031, EUH203, EUH204, EUH208, EUH071	Keine Einstufung oder „nur“ H335, H336

3.4 Umwelttoxizität

Die Struktur der Kriterien entspricht der des Hauptkriteriums „Gesundheitsgefahren“. Diese werden teilweise anhand von H-Sätzen bewertet.¹² Es gibt vier Unterkriterien für das Hauptkriterium Umweltgefahren:

- ▶ Aquatische Toxizität (Aquatic toxicity)
- ▶ Persistenz, Bioakkumulation und Toxizität / hohe Persistenz und hohe Bioakkumulation und Ferntransport (PBT/vPvB sowie “long-range transport”)
- ▶ Persistenz, Mobilität und Toxizität / hohe Persistenz und starke Mobilität (PMT/vPvM)
- ▶ Störungen des Hormonsystems in der Umwelt (EDCs env)

3.4.1 Unterkriterium 1: Aquatische Toxizität

Mit diesem Kriterium wird die akute und chronische Toxizität für aquatische Organismen abgeprüft. Die Indikatoren beziehen sich auf die Einstufung der Stoffe bezüglich ihrer Gefährlichkeit für die Umwelt (Gefahrensätze der 400er-Reihe) und auf Ergebnisse aus Messungen der akuten und der chronischen Toxizität gegenüber Wasserorganismen. Die Einteilung in Rot, Gelb und Grün erfolgt nach der Schwere der Effekte.

Tabelle 13: Indikatoren zur aquatischen Toxizität

ROT	GELB	GRÜN
H400, 410, 420, EUH201, EUH201A, EUH207 Akute aquat. Tox (LC 50) <10,0 mg/l Chronische aquat. Tox (NOEC) <1,0 mg/l	H411, 412 und 413 Akute aquat. Tox (LC 50) 10,0 – 100,0 mg/l Chronische aquat. Tox (NOEC) 1,0 – 10,0 mg/l	Kein H-Satz, der mit 4 beginnt Akute aquat. Tox (LC 50) > 100,0 mg/l Chronische aquat. Tox (NOEC) >10,0 mg/l

3.4.2 Unterkriterium 2: PBT/vPvB-Stoffe und Ferntransport

Mit diesem Kriterium wird geprüft, ob sich Stoffe in der Umwelt und/oder Organismen anreichern können. Hierfür werden verschiedene Stoffeigenschaften betrachtet und entsprechende Indikatoren angeboten. Zudem wird auch der Ferntransport berücksichtigt.

Die Indikatoren für die Überprüfung der PBT/vPvB-Eigenschaften beziehen sich auf die Einstufung der Stoffe gemäß den neuen Gefahrenklassen PBT und vPvB, auf Ergebnisse behördlicher Bewertungen (Listung von Stoffen), Veröffentlichungen in der Literatur und

¹² Hinweis: Auf Datenunsicherheiten bei der Verwendung von H-Sätzen gehen wir im Kapitel 2.5 ein.

Messergebnissen zu den Stoffeigenschaften P, B und T mit Bezug auf die Schwellenwerte der CLP-Verordnung.

Die Farbe „Rot“ wird nur vergeben, wenn die Stoffe mit den entsprechenden H-Sätzen eingestuft wurden bzw. behördliche Bewertungen vorliegen, die zeigen, dass der Stoff ein PBT-Stoff oder ein vPvB-Stoff ist. Fehlen diese Informationen, können einzelne Mess- oder Modellierungsdaten verwendet werden, um Hinweise zu erhalten, ob die Kriterien für P, B und T bzw. vPvB erfüllt sind. Ist dies der Fall wird die Farbe „Gelb“ vergeben.

Die Indikatoren für die Überprüfung der Möglichkeit des Ferntransports beziehen sich auf Schwellenwerte zur Halbwertszeit des Stoffes in der Luft gemäß Anhang D der Stockholm-Konvention, Ergebnisse aus der Modellierung dieser Eigenschaft und auf Veröffentlichungen.

Die Einteilung in Rot, Gelb und Grün richtet sich bei den PBT/vPvB-Kriterien danach, ob diese Stoffeigenschaften bereits nachgewiesen sind, oder ob lediglich ein Verdacht besteht, z. B. aufgrund von Screening-Werten für einzelne Eigenschaften. Beim Ferntransport wurden die Kriterien der Stockholm Konvention für die Farbe Rot gewählt und die Kriterien basierend auf einer Expertenbewertung für gelb und grün abgeleitet.

Die PBT-Kriterien beziehen sich nur auf organische Stoffe. Für anorganische Stoffe wird daher dieses Kriterium als nicht relevant bewertet (Farbe: Blau). Bei Stoffen, die bei Raumtemperatur fest sind, wird davon ausgegangen, dass kein Ferntransport stattfindet.

Tabelle 14: Indikatoren zu PBT/vPvB-Stoffe und Ferntransport

ROT	GELB	GRÜN
EUH440, EU H441 oder Nennung auf der Kandidatenliste als PBT/vPvB- Stoff	Hinweise auf PBT/vPvB- Eigenschaften gemäß BP ECHA oder Literatur Oder Hinweise auf Überschreiten der Schwellenwerte für P, B und T bzw. vP und vB gemäß CLP-Verordnung (modellierte Werte), für Bioakkumulation: $\log K_{ow} \geq 4$	Keine Einstufung mit den EUH 440 bzw. EUH 441 und keine Hinweise, dass diese Eigenschaften vorliegen oder abgeschlossene Bewertung durch die Behörden, die zum Ergebnis nicht PBT/vPvB führt
oder	oder	und
Halbwertszeit Luft > 2 Tage oder Nachweis eines hohen LRT aus dem LRT-Tool oder einer vergleichbaren Modellierung	Halbwertszeit Luft 1-2 Tage oder Hinweise auf LRT aus LRT-Tool oder einer vergleichbaren Modellierung oder der Literatur	Halbwertszeit Luft < 1 Tag oder Keine Hinweise auf LRT aus LRT- Tool oder vergleichbaren Modellierungen.

Bei Gemischen wird überprüft, ob Stoffe > 0,1% enthalten sind, bei denen in der Bewertung bereits eine dieser Eigenschaften identifiziert wurde (rot / gelb). Ist dies der Fall, dominiert das Ergebnis für diesen Stoffes die Bewertung des Gemisches, d. h. die Einstufung des Gemisches wird mit dem Ergebnis des Stoffes überschrieben.

3.4.3 Unterkriterium 3: PMT/vPvM-Stoffe

Mit diesem Kriterium wird bewertet, ob ein Stoff aufgrund seiner Persistenz (P), seiner Mobilität (M) im Boden und seiner Toxizität (T) zu einer Gefahr für die Trinkwasservorräte werden kann. Es werden Indikatoren genutzt, die sich auf die Einstufung des Stoffes, auf vorhandene

Stofflisten, Veröffentlichungen und auf gemessene bzw. modellierte Daten zu Stoffeigenschaften mit Bezug auf die Schwellenwerte der CLP-Verordnung beziehen.

Stoffe, für die PMT/vPvM-Eigenschaften nachgewiesen sind, werden mit Rot bewertet, solche, für die es einen Verdacht gibt mit Gelb. Nur Stoffe, für die es keine Hinweise auf diese Merkmale gibt, erhalten eine grüne Bewertung.

Die Farbe „Rot“ wird nur vergeben, wenn die Stoffe mit den entsprechenden H-Sätzen eingestuft wurden bzw. behördliche Bewertungen vorliegen, die zeigen, dass der Stoff ein PMT-Stoff oder ein vPvM-Stoff ist. Fehlen diese Informationen, können einzelne Mess- oder Modellierungsdaten verwendet werden, um Hinweise zu erhalten, ob Stoffe die Kriterien für P, M und T bzw. vPvM erfüllen. In diesem Fall wird die Farbe „Gelb“ vergeben.

Die PMT-Kriterien beziehen sich nur auf organische Stoffe. Für anorganische Stoffe wird daher dieses Kriterium als nicht relevant bewertet (Farbe: Blau).

Tabelle 15: Indikatoren zu PMT/vPvM-Stoffe

ROT	GELB	GRÜN
EUH 450 / EUH 451 oder Nennung auf der Kandidatenliste als PMT/vPvM-Stoff	Nennung als potenzieller PMT/vPvM Stoff in Listen oder Literatur ohne Überschreitung der Schwellenwerte für die Stoffeigenschaften P, M, T gemäß CLP-Verordnung oder Hinweise auf Überschreiten der Schwellenwerte P, M und T bzw. vP und vM gemäß CLP -Verordnung	Keine Einstufung mit EU H450 bzw. EU H451 und keine Hinweise, dass diese Eigenschaften vorliegen oder abgeschlossene Bewertung durch die Behörden, die zum Ergebnis „nicht PMT/vPvM“ geführt hat.

Bei Gemischen wird überprüft, ob Stoffe > 0,1% enthalten sind, bei denen entweder aufgrund eines H-Satzes oder anderer Informationen diese Eigenschaft in der Bewertung identifiziert wurde (gelb/rot). Ist dies der Fall, dominiert das Ergebnis für diesen Stoff die Bewertung, d. h. die Einstufung des Gemisches wird mit dem Ergebnis des Stoffes überschrieben.

3.4.4 Unterkriterium 4: Störungen des Hormonsystems in der Umwelt

Dieser Indikator zeigt an, ob ein Stoff das Hormonsystem von Organismen in der Umwelt stören kann. Da solche Störungen einen großen Einfluss auf die Stabilität von Populationen haben, ist das Kriterium ein eigenständiger Aspekt, der analog den EDCs für die menschliche Gesundheit bewertet wird. Die Indikatoren beziehen sich auf die Einstufung der Stoffe gemäß den neuen Gefahrenklassen der CLP-Verordnung für EDCs, auf Ergebnisse behördlicher Bewertungen (Listung von Stoffen) und Veröffentlichungen in der Literatur.

Die Unterscheidung in Rot und Gelb richtet sich danach, ob die Eigenschaften gesichert vorliegen oder es Hinweise, bzw. einen Verdacht darauf gibt.

Tabelle 16: Indikatoren zu Störungen des Hormonsystems in der Umwelt

ROT	GELB	GRÜN
EUH 430, EUH 431 oder EDC env auf der REACH-Kandidatenliste oder In der EU ED-List in der List I genannt (als EDC env oder	In TEDX Colborn-Liste oder in der SIN Liste als EDC aufgeführt oder oder In der EU ED List in Liste II oder III genannt (mit Bezug auf env oder	Keine Einstufung mit EUH 430 oder 431 und Nicht auf einer EDC-Liste als EDC env oder hh gelistet und

ROT	GELB	GRÜN
ohne Angabe, ob EDC hh oder EDC env)) oder Von der ECHA ED Expertengruppe als "EDC env" bewertet oder als EDC (ohne Angabe zu env oder hh).	ohne Angabe, ob EDC env oder EDC hh)) oder Andere Hinweise auf endokrine Wirksamkeit gegenüber der Umwelt oder EUH201, EUH201A , EUH207	Nicht in der EU ED-Liste mit Bezug zu env (oder ohne Angabe, ob EDC env oder hh) aufgeführt oder Von ECHA ED EG als „nicht- EDC env“ oder als „nicht-EDC“ ohne Angabe zu env oder hh bewertet.

Bei Gemischen wird überprüft, ob Stoffe > 0,1% enthalten sind, bei denen entweder aufgrund eines H-Satzes oder anderer Informationen diese Eigenschaft identifiziert wurde (gelb/rot). Ist dies der Fall, dominiert das Ergebnis dieses Stoffes die Bewertung, d. h. die Einstufung des Gemisches wird mit dem Ergebnis des Stoffes überschrieben.

3.5 Expositionspotenziale (Arbeiter, Verbraucher, Umwelt)

3.5.1 Einleitung

Ziel der Betrachtungen mit ChemSelect ist es, eine **Einschätzung eines möglichen Expositionsniveaus** zu erhalten. Dieses ist primär von der Verwendung abhängig, die jedoch aufgrund der Vielzahl der möglichen Verwendungsfälle und der oft geringen Kenntnis der Verwender von Chemikalien über die anwendungsspezifischen Bedingungen, nur generisch bewertet werden kann. Die sog. Anwendungsszenarien und die Ermittlung der jeweiligen Expositionspotenziale lehnt sich an das Bewertungsmodell ECETOC TRA¹³ an und berücksichtigt die Prinzipien der ECHA-Leitfäden zur Expositionsbewertung¹⁴.

Das Expositionspotenzial wird für die Umwelt, Arbeiter und Verbraucher gegenüber Stoffen als solchen (Bewertungsgegenstand = Stoff) oder Stoffen in Gemischen (Bewertungsgegenstand = Gemisch) ermittelt. Anders als z. B. bei den Kriterien Treibhausgasemissionen oder Ressourcenverbrauch wird das Expositionspotenzials „die Lieferkette abwärts“ betrachtet, d. h. **Nutzer*innen von ChemSelect bewerten die eigene Verwendung sowie den weiteren Lebensweg**. Das korreliert mit der Produktverantwortung der jeweiligen Akteur*innen.

Bei der Ermittlung des Umweltexpositionspotenzials wird mit Ausnahme der Abbaubarkeit bzw. Persistenz das **Verhalten in der Umwelt nicht berücksichtigt**, da keine entsprechenden Modelle im Tool eingebunden sind.

Mit den drei Hauptkriterien zum Expositionspotenzial wird aufgezeigt, ob es Hinweise auf kritische Expositionen von Stoffen und Gemischen im Lebensweg gibt. Zudem werden die Expositionsniveaus verschiedener Stoffe und Gemische vergleichbar gemacht. Die Kategorien rot/gelb/grün sind lediglich qualitative Einschätzungen und in keiner Weise quantitative Expositionsabschätzungen. Das Expositionspotenzial wird nicht mit der Gefährlichkeit kombiniert, d. h. es erfolgt **keine Risikobetrachtung** und auch **keine Gefährdungsbeurteilung am Arbeitsplatz**.

ChemSelect betrachtet das Expositionspotenzial für jedes Schutzgut und jeden Lebenszyklusschritt der gewählten Verwendung des betrachteten Stoffes oder Gemisches. Wird ein Stoff oder

¹³ <https://www.ecetoc.org/tools/tra-main/>

¹⁴ ECHA (2016): Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment Chapter R.14: Occupational Exposure Assessment, Helsinki; ECHA (2016): Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment Chapter R.15: Consumer Exposure Assessment, Helsinki; ECHA (2016): Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment Chapter R.16: environmental Exposure Estimation. Verfügbar unter: <https://echa.europa.eu/de/guidance-documents/guidance-on-information-requirements-and-chemical-safety-assessment>

Gemisch für **mehrere Verwendungen** genutzt, müssen diese **jeweils separat bewertet werden**.

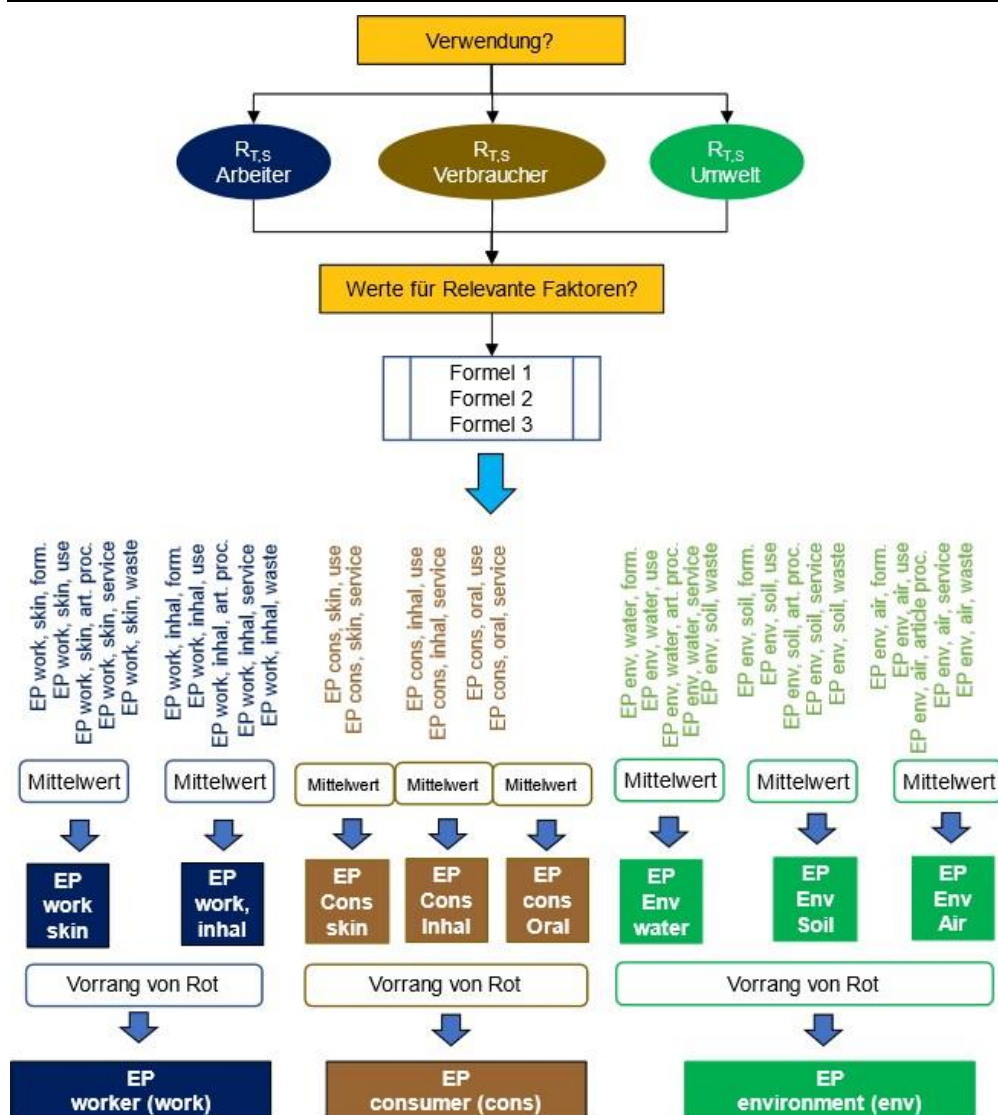
In der Abfallphase wird lediglich das Expositionspotenzial der Abfallbehandlung bewertet, nicht jedoch Expositionen aus Sekundärmaterialien. Mögliche Kontaminationen von Recyclingmaterialien werden im Hauptkriterium Kreislauffähigkeit (s. Kapitel 3.8) adressiert.

Das **Expositionspotenzial von Gemischen basiert auf den Expositionspotenzialen der enthaltenen Stoffe**. Für die Bewertung von Gasen gibt es einen angepassten Bewertungsweg. Abweichungen vom allgemeinen Vorgehen für Gase werden in den folgenden Kapiteln benannt.

3.5.2 Systematik der Haupt- und Unterkriterien zum Expositionspotenzial

Abbildung 3 zeigt wie die Hauptkriterien aus den Ergebnissen der Expositionspotenziale je Schutzgut, Lebenszyklusschritt und Expositionspfad in mehreren Schritten abgeleitet werden.

Abbildung 3: Ablaufschema zur Ermittlung der drei Hauptkriterien zur Exposition



R = Freisetzungs-/Kontaktpotenzial (Release); T= Schutzziel und Expositionspfad (Target), S = Lebenszyklusschritt (Step in life cycle); EP = Expositionspotenzial; work = Arbeitnehmer, cons = Verbraucher, env = Umwelt, skin = Haut, inhal = Inhalation; oral = Ingestion; Form. = Formulierung; use = Anwendung in Gemischen, inkl. Inkorporation in/an Erzeugnisse, art. proc. = Verarbeitung von Erzeugnissen, service = Nutzungsphase von Erzeugnissen, waste = Abfallphase, water = Wasser, soil = Boden, air = Luft

- In den ersten Bewertungsschritten wird die Relevanz von Lebenszyklusstufen und Schutzgütern geprüft und festgelegt, welche Formeln zur Berechnung der Expositionspotenziale für Arbeiter, Verbraucher und Umwelt anzuwenden sind (oberer Teil der Abbildung).
- Danach (Abbildung 3 Mitte) wird für jeden Lebenszyklusschritt das Expositionspotenzial für jedes Schutzgut und jeden Expositionspfad ermittelt (Detailergebnisse).
- Im nächsten Schritt werden die Detailergebnisse durch Mittelwertbildung für die jeweiligen Expositionspfade zu den Unterkriterien zusammengefasst (Abbildung 3 vorletzter Schritt)
- Im letzten Schritt werden die Hauptkriterien Expositionspotenzial Arbeiter, Expositionspotenzial Verbraucher und Expositionspotenzial Umwelt aus den Unterkriterien anhand des Prinzips des Vorrangs von Rot abgeleitet.

Die Ermittlung der Detailergebnisse (Schritt 1) ist im Kapitel 3.5.3.2, die Regeln für die Zusammenfassung der Ergebnisse für Stoffe in Kapitel 3.5.6 und die für Gemische in Kapitel 3.5.7 beschrieben.

Eine Bewertung mit grau ist für das Kriterium Expositionspotenzial nur insgesamt möglich (Nutzer entscheidet sich, das Expositionspotenzial gar nicht zu bewerten). In diesem Fall werden alle drei Hauptkriterien mit grau bewertet. Fehlen Informationen (rosa) oder sind Aspekte nicht relevant (hellblau), wird analog den anderen Kriterien verfahren.

3.5.3 Berechnung des Expositionspotenzials für Stoffe

3.5.3.1 Prüfung der Relevanz von Lebenszyklusstufen

Die Verwendung des Stoffes bzw. Gemisches und damit die Relevanz von Lebenszyklusstufen wird abgefragt. Wird z. B. ein Gemisch in der Anwendung bestimmungsgemäß verbraucht oder reagiert ab, so werden die darauffolgenden Lebenszyklusstufen „Nutzung Erzeugnis“ und Abfallphase als „nicht relevant“ bewertet und im Folgenden nicht berücksichtigt.

In Tabelle 17 sind für zwei Beispielanwendungen die möglichen Ergebnisse pro Target (Schutzziel und Pfad) aufgeführt. X bedeutet es gibt ein Ergebnis (Farbe/Wert) und graue Felder es gibt kein Ergebnis (nicht relevant).

Tabelle 17: Ergebnisse pro Target – Beispiele: links Hydrauliköl und rechts Gartenstuhl

Stage Target	Form	Use	Art. prod	Service life	Waste
Work inhal	X	X			X
Work skin	X	X			X
Cons inhal					
Cons skin					
Cons oral					
env water	X	X			X
env air	X	X			X
env soil	X	X			X

Stage Target	Form	Use	Art. Prod	Service life	Waste
Work inhal	X		X		X
Work skin	X		X		X
Cons inhal				X	
Cons skin				X	
Cons oral				X	
env water	X		X	X	X
env air	X		X	X	X
env soil	X		X	X	X

Die folgende Abbildung zeigt, wie die Relevanz von Lebenszyklusstufen in ChemSelect abgefragt werden.

Abbildung 4: Screenshot ChemSelect: Abfrage der Lebenszyklusstufen

Anwendungsszenario: Additiv in Papier

Beschreibung

Lebenszyklus

Anwendungsbedingungen

Faktoren

Relevanz von Lebenszyklusstufen

Übersicht: Schritte des Lebenszyklus

Auswahl der Schritte im Lebenszyklus

i Bitte treffen Sie eine Auswahl zu Punkt 1 und zu Punkt 2:

Ändern Sie den Schieber auf blau, wenn Ihr Unternehmen selbst Gemische herstellt; andernfalls belassen Sie ihn auf grau.

Bei der Auswahl für Punkt 2 richten Sie sich danach, in welchem Endprodukt der bewertete Stoff in Verkehr gebracht wird.

Ist dies ein Gemisch, so wählen Sie den zutreffenden Punkt unter 2.1.

Endet der Stoff in einem Erzeugnis/Endprodukt, so wählen Sie den zutreffenden Punkt unter 2.2.

Wählen Sie am Ende dieser Seite, wie der Stoff/das Gemisch angewendet wird.

☒ **1 – Mein Unternehmen stellt Gemische her (Formulierer)**

☐ **2.1 – Stoff (im Gemisch) ist das chemische Endprodukt oder reagiert ab; keine Integration in Erzeugnisse**

☐ 2.1.1 – Der Stoff (im Gemisch) reagiert in der Anwendung (z.B. Härter in 2-Komponenten Kleber)
☐ 2.1.2 – Der Stoff (im Gemisch) wird bestimmungsgemäß in die Umwelt eingebracht (z.B. Dünger)
☐ 2.1.3 – Der Stoff (im Gemisch) wird während/nach der Verwendung ins Abwasser freigesetzt (z.B. Prozesshilfsmittel, Shampoo)
☐ 2.1.4 – Der Stoff (im Gemisch) wird während/nach der Verwendung in die Luft freigesetzt (z.B. Lösemittel oder flüchtige Additive)
☐ 2.1.5 – Keine der obigen Antworten trifft zu

☒ **2.2 – Stoff (in Gemisch) wird Teil eines nicht-chemischen Endproduktes / Erzeugnisses**

☐ 2.2.1 – Der Stoff/das Gemisch wird selbst zum Hauptmaterial des Produktes
☐ 2.2.2 – Der Stoff/das Gemisch wird Bestandteil des Hauptmaterials (Additive)
☒ 2.2.3 – Der Stoff / das Gemisch wird auf Oberflächen aufgebracht

☐ **Eine Verarbeitung von Erzeugnissen findet nicht statt.**

Resultierende Schritte im Lebenszyklus

A

☒ Formulierung (von Gemischen)

B1

☐ Anwendung Stoff (im Gemisch) – wird kein Bestandteil eines Erzeugnisses

B2

☒ Anwendung Stoff (im Gemisch) – wird Teil eines Erzeugnisses

C

☒ Verarbeitung Erzeugnis (mit Stoff/Gemisch)

D

☒ Nutzung Erzeugnis (service life)

E

☒ Abfallphase

Benutzergruppen während der Anwendung (B1, B2)

☐ Der Stoff/ das Gemisch wird von gewerblichen Anwendern / Unternehmen **und** Verbrauchern eingesetzt
☒ Der Stoff / das Gemisch wird nur durch gewerbliche Anwender / Unternehmen eingesetzt
☐ Der Stoff / das Gemisch wird nur von Verbrauchern angewendet

3.5.3.2 Anwendung von Formeln zur Berechnung des Expositionspotenzials

Das Expositionspotenzial pro Lebenszyklusschritt¹⁵, Schutzziel¹⁶ und Expositionspfad¹⁷ wird anhand der Formel 2 berechnet, in die die folgenden Variablen für die Stoffe eingehen:

- Anwendungsszenario (alle Schutzgüter)
- Mobilität: Wasserlöslichkeit, Dampfdruck oder Staubigkeit (alle Schutzgüter)

¹⁵ Formulierung, Anwendung Gemisch, Verarbeitung Erzeugnis, Nutzung Erzeugnis, Abfallbehandlung

¹⁶ Verbraucher, Arbeiter und Umwelt

¹⁷ Oral, dermal, inhalativ, Wasser, Boden, Luft

- ▶ Konzentration im Gemisch / Erzeugnis (Arbeiter / Verbraucher)
- ▶ Anwendungsmenge (Arbeiter, Umwelt)
- ▶ Abbaubarkeit (Umwelt)
- ▶ Teilweise Anwendungsdauer (Arbeiter)

Je nach Schutzgut, Lebenszyklusschritt und Expositionspfad können unterschiedliche Faktoren die Exposition beeinflussen. Die jeweiligen Formeln, die im Programm angewendet werden, sind im Anhang aufgeführt. Die Form, in der ein Stoff oder Gemisch vorliegt (frei, in/als Matrix oder in/an einem Erzeugnis) ist bereits in den Anwendungsszenarien (s. Kapitel A.2) berücksichtigt und geht daher nicht zusätzlich in die Formel ein.

Formel 2: Formel für das Expositionspotenzial je Schutzgut, Lebenszyklusschritt und Pfad

$$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_{conc,S} * F_M * F_T$$

EP = Expositionspotenzial, T= Schutzziel und Expositionspfad, S = Lebenszyklusschritt, R = Freisetzungs-/Kontaktpotenzial, F_{mob} = Faktor, der sich aus der Mobilität des Stoffes ergibt, F_{conc} = Faktor, der sich aus der Konzentration ergibt; F_M = Faktor, der sich aus der Anwendungsmenge ergibt und F_T = Faktor, der spezifisch für Arbeitsplatzszenarien ist (s. u.)

Bei Gemischen werden zunächst die Expositionspotenziale für jeden berücksichtigten Stoff im Gemisch ermittelt. Die Werte $EP_{T,S}$ für jeden Stoff im Gemisch werden dann für das Gemisch zusammengeführt (pro Schutzziel, Expositionspfad und Lebenszyklusschritt; s. Kapitel 3.5.7).

3.5.4 Ermittlung der Parameter zur Berechnung der Expositionspotenziale für Stoffe

3.5.4.1 R = Freisetzungs-/Kontaktpotenzial

Anhand weniger Fragen werden Anwendungsszenarien für den gesamten Lebenszyklus definiert. Mit jedem Szenario ist ein Kontakt- bzw. Freisetzungspotenzial pro Expositionspfad und Schutzziel verknüpft, das durch die Bewertungsfarbe und ihren numerischen Werten ausgedrückt wird. Die Anwendungsszenarien sind in Anlehnung an die Kategorisierung von Verwendungen durch die ECHA und das Modell ECETOC TRA¹⁸ abgeleitet.

Für den Arbeitsplatz werden die zentralen Parameter, welche die Freisetzung aus Prozessen bestimmen abgefragt: Grad der Geschlossenheit des Prozesses, Prozesstemperatur und Eintrag mechanischer Energie, Vorhandensein manueller Tätigkeit und die Entstehung von Stäuben und Dämpfen.

Für die Verbraucher wurden Gemische und Erzeugnisse gemäß ihrer Anwendungsbedingungen und damit zusammenhängenden Emission in Gruppen aufgeteilt, die sich durch das Emissionsmuster unterscheiden. Die Anwendung muss/kann einer dieser Gruppen zugeordnet werden.

Für die Umwelt werden im Dialog einige zentrale Emissionsbestimmende Parameter abgefragt, darunter ob die Anwendung gewerblich oder industriell erfolgt, ob Wasserkontakt besteht oder ob die Anwendung umweltoffen erfolgt.

Anhand dieser Informationen werden die Freisetzungspotenziale in grün, gelb, und rot eingeteilt, bzw. die Werte 1, 3 und 5 in Formel 2 eingesetzt. Es wird also keine Expositionshöhe abgeschätzt, sondern nur eine Differenzierung zwischen tendenziell hohen, mittleren oder

¹⁸ Die Szenarien wurde für die Nutzung in ChemSelect teilweise zusammengefasst.

niedrigen Emissionen aus der Anwendung getroffen. Dies ist also eine **qualitative** und **relative** Abschätzung. Detaillierte Erläuterungen finden sich in Kapitel A.2.

Bei Gasen wird grundsätzlich davon ausgegangen, dass es lediglich einen Lebenszyklusschritt gibt, bei denen diese freigesetzt werden (sollen). Daher fragt ChemSelect lediglich danach, welches dieser Schritte ist. Alle anderen Lebenszyklusstufen werden nicht berücksichtigt, da davon ausgegangen wird, dass die Emissionen im Vergleich zu diesem einen Schritt zu vernachlässigen sind. Zudem wird die Emission mit rot für Luft und Inhalation und grün für Boden, oral und dermal festgelegt.

3.5.4.2 Einleitung zu den Faktoren

Die Höhe der Faktoren soll den Einfluss der jeweiligen Aspekte auf das Expositionspotenzial repräsentieren. Es gibt es keine wissenschaftlichen Informationen, welches Gewicht diese Faktoren auf die Gesamtexposition haben und es ist anzunehmen, dass sich dies je nach Fall auch unterscheidet. Daher basieren die Indikatoren und Werte für die Faktoren auf Experteneinschätzungen sowie den Erfahrungen aus den Tests und Validierungen von ChemSelect. Da es nicht darum geht, eine konkrete Expositionshöhe abzuleiten, ist weniger der absolute Wert der Faktoren als vielmehr ihr Verhältnis zueinander relevant sowie die Möglichkeit, am Ende Expositionspotenziale richtungssicher und nachvollziehbar zu differenzieren.

3.5.4.3 F_{mob} = Einfluss der Mobilität auf das Expositionspotenzial

Das Freisetzungs-/Kontaktpotenzial „R“ ist lediglich durch die Anwendung(en) definiert und nicht von den jeweiligen Stoffen und ihren Eigenschaften. Da der Dampfdruck, die Staubigkeit und die Wasserlöslichkeit den Grad der Freisetzung und die Expositionshöhe beeinflussen (können), werden sie mittels dem Faktor F_{mob} in die Rechnung einbezogen. Je nach dem welcher Pfad betrachtet wird, wird der Faktor für den Dampfdruck (Inhalation, Luft, Boden), die Wasserlöslichkeit (Wasser) oder die Staubigkeit (Inhalation) genutzt.

Da die Mobilität von Stoffen einen deutlichen Einfluss auf die Expositionspotenziale haben, werden die Faktoren für mobile Stoffe auf 1,75 und für Stoffe mit einer geringen Mobilität auf 0,25 gesetzt. Die Mobilität wird in den Lebenszyklusstufen „Service life“ und „Abfall“ durch eine eventuelle Matrixbindung deutlich herabgesetzt. Dies ist in den Anwendungsszenarien (s. Kapitel A) berücksichtigt. Daher werden für alle Lebenszyklusstufen die gleichen Faktoren und Indikatoren verwendet.

Tabelle 18: Indikatoren zur Bewertung der Mobilität – Factor F_{mob}

Eigenschaft	$F_{mob} = 1,75$	$F_{mob} = 1$	$F_{mob} = 0,25$
Wasserlöslichkeit (Umwelt, Wasser)	> 10 mg/l	10 – 0,001 mg/l	< 0,001 mg /l
Dampfdruck (Umwelt, Luft)	Dampfdruck zwischen 0,0005 und 0,5		Feststoff Dampfdruck < 0,0005 oder < 0,5
Dampfdruck (Umwelt, Boden)	Feststoff	Siedepunkt $\geq 50^{\circ}\text{C}$ oder Dampfdruck $\leq 25\text{ kPa}$	Gase und/oder Siedepunkt < 50°C ; $V_p > 25\text{ kPa}$

Eigenschaft	$F_{mob} = 1,75$	$F_{mob} = 1$	$F_{mob} = 0,25$
Dampfdruck (Arbeit) ¹⁹	> 25 kPa; Gase und/oder Siedepunkt < 50°C	0,5 – 25 kPa und/oder 50 < Siedepunkt ≤ 150°C	< 0,5 kPa und/oder Siedepunkt > 150°C
Dampfdruck (Verbraucher)	> 0,1 kPa	0,1 kPa – 0,0005 kPa	< 0,0005 kPa
Staubigkeit ²⁰	Feine, leichte Pulver, z. B. Titandioxid Während Verwendung entstehen Staub-wolken, die sich erst nach mehreren Minuten absetzen.	Grobpulvrige Stoffe, Staub setzt sich ab	Flüssigkeiten, nicht staubende Feststoffe (Pellets, Wachs). Während der Verwendung werden nur geringe Mengen Staub beobachtet.

3.5.4.4 F_{conc} = Konzentration des Stoffes im jeweiligen Lebenszyklusschritt

Der Faktor F_{conc} wird für jeden Stoff in einem Gemisch, bzw. einem Material oder Erzeugnis festgelegt, wenn die Schutzgüter Arbeiter und Verbraucher bewertet werden. Werden Gemische bewertet, sind für die Konzentration der enthaltenen Stoffe meist nur Konzentrationsbandbreiten aus dem Sicherheitsdatenblatt bekannt. Für die Auswahl der Faktoren werden dann die maximalen Konzentrationen aus dem Sicherheitsdatenblatt (worst case) und nicht der Mittelwert verwendet. Die Konzentration in den auf die eigene Verwendung folgenden Lebenszyklusschritten muss geschätzt werden.

Die Konzentrationen der Stoffe in den jeweiligen Lebenszyklusschritten bestimmen den Wert des Faktors F_{conc} in Formel 2. Die Indikatoren für die Höhe der Faktoren in Tabelle 19 wurden durch Experteneinschätzung festgelegt. Da die Relevanz der Konzentration der Stoffe als hoch, jedoch weniger relevant als die Mobilität eingeschätzt wird, liegen die Werte für den Faktor bei 1,5, 1 und 0,5.

Tabelle 19: Indikatoren zur Festlegung des Faktors F_{conc} anhand der Konzentration des Stoffes

Verwendung des Stoffes...	$F_{conc} = 1,5$	$F_{conc} = 1$	$F_{conc} = 0,5$
Als solcher zur Formulierung	n.r.	100%	n.r.
Im Gemisch zur Verwendung (mit und ohne Integration in ein Erzeugnis)	> 25%	5-25%	< 5%
Im Erzeugnis (Verarbeitung, Verwendung, Abfall)	> 50%; 100%	10 – 50%	< 10%

3.5.4.5 F_M = Anwendungsmenge

Die Anwendungsmenge eines Stoffes beeinflusst ebenfalls die Höhe des Expositionspotenzials.

3.5.4.5.1 Arbeiter und Verbraucher

Die Faktoren für die Anwendungsmengen von Stoffen und Gemischen durch Arbeiter und Verbraucher sind dem EMKG entnommen und differenzieren „Größenordnungen“ (also 1000er-

¹⁹ Die Indikatoren sind dem EMKG angelehnt.

²⁰ Die Kategorien sind dem EMKG angelehnt.

Schritte). Beim Arbeiter beziehen sie sich auf die Menge, die pro Tag am Arbeitsplatz genutzt wird und beim Verbraucher auf die Menge, die „pro Verwendung“ eingesetzt wird.

Tabelle 20: Faktor F_M für die Bewertung der Expositionspotenzials für Arbeiter

Relevant für Lebenszyklusschritt	1,25	1	0,75
Formulierung/Verwendung von Stoffen/Gemischen	1-999t bzw. m ³	1-999kg bzw. l	1-999g bzw. ml

Tabelle 21: Faktor F_M für die Bewertung der Expositionspotenzials für Verbraucher

Relevant für Lebenszyklusschritt	1,5	1	0,5
Verwendung von Stoffen / Gemischen	1-999kg bzw. l	1-999g bzw. ml	1-999mg bzw. µl

3.5.4.5.2 Umwelt

Für die Bewertung der Umweltexposition wird die Anwendungsmenge der Chemikalien pro Jahr in der Formulierung (wenn die Bewertung durch den Formulierer durchgeführt wird) und in der Anwendung (wenn die Bewertung durch den Anwender durchgeführt wird) genutzt.

Wenn der Anwender ChemSelect nutzt, werden zwei Fälle unterschieden:

1. Der Stoff / das Gemisch wird nicht in/an ein Erzeugnis integriert: in dem Fall erfolgt eine zweite Abfrage, ob die Anwendung industriell mit Maßnahmen zur Emissionsminderung ist oder eher gewerblich. Im letzten Fall wird die angegebene Anwendungsmenge mit dem Faktor 10 multipliziert, da von einem „wide dispersive use“ ausgegangen wird, bei dem sich aus Umweltperspektive viele kleine Quellen aufaddieren und die eigene Anwendungsmenge die Freisetzung unterschätzt.
2. Der Anwender produziert ein Erzeugnis: in dem Fall wird in der zweiten Abfrage ermittelt, ob das Produkt ein Verbraucherprodukt ist und/oder von vielen gewerblichen Anwendern eingesetzt wird (z. B. ein Hammer). Auch in diesem Fall wird die eingegebene (eigene) Anwendungsmenge mit dem Faktor 10 multipliziert, um den Emissionen geringer Mengen aber aus vielen Quellen Rechnung zu tragen.

Tabelle 22: Faktor F_M für die Umweltbewertung

Parameter	$F_M=1,5$	$F_M=1$	$F_M=0,5$
Herstellung von Gemischen und Anwendung von Stoffen/Gemischen ohne Herstellung von Erzeugnissen	> 100t/a	10 – 100 t/a	< 10 t/a
Herstellung von Erzeugnissen, Service Life und Abfallbehandlung	> 10t/a	1–10 t/a	< 1 t/a

3.5.4.6 F_T = Faktoren, die sich aus Schutzgut und Lebenszyklusschritt ergeben

Mit diesem Faktor werden für Arbeiter und Verbraucher die Anwendungshäufigkeit und -Dauer bei Gemischen und bei der Umwelt die Abbaubarkeit in der Formel berücksichtigt.

3.5.4.6.1 Arbeiter

Mit dem Faktor F_T wird bewertet, wie lange / häufig mit einer Chemikalie umgegangen wird. Dieser Faktor ist nur für die Bewertung des Lebenszyklusschrittes relevant, den der bewertende Anwender selbst ausführt (eigener Betrieb). F_T hat als Default den Wert 1 und kann lediglich verringert werden (0,5); eine Erhöhung des Faktors ist nicht vorgesehen.

Tabelle 23: Faktor F_T für die Bewertung des Expositionspotenzials für Arbeiter

Parameter	$F_T = 0,5$
Verwendung von Gemischen	Anwendung < 15 Min oder Anwendung < 1/Monat

3.5.4.6.2 Verbraucher

Für das Expositionspotenzial von Verbrauchern sind lediglich die Lebenszyklusschritte „Anwendung von Gemischen“ und „Nutzung von Erzeugnissen“ relevant. Für diese beiden Schritte kann das Expositionspotenzial kleiner sein, wenn lediglich eine „seltene“ Nutzung vorliegt (verringender Faktor $F_T = 0,5$), oder höher sein (bei einer regelmäßigen, täglichen Nutzung, erhöhender Faktor $F_T = 1,5$).

Tabelle 24: Faktoren F_T für die Bewertung des Expositionspotenzials für Verbraucher

Faktor	$F_T = 1,5$	1	0,5
Anwendungshäufigkeit von Produkten	Regelmäßig / täglich, Gegenstand im direkten Umfeld (Haus, Auto etc.)	Gelegentliche Nutzung	Sehr selten (< 2 Mal pro Jahr), Gegenstand draußen / abgeschirmt

3.5.4.6.3 Umwelt

Bei der Bewertung des Umweltexpositionspotenzials ist die biologische Abbaubarkeit für die Kompartimente Wasser und Boden relevant.

- 0,5 bei „ready degradable“
- 1 bei inherently degradable
- 1,5 wenn „not degradable“

Beim Umweltexpositionspotenzial für die Luft wird aufgrund des häufigen Abbaus in der Atmosphäre der Faktor F_T für alle Stoffe auf 0,5 gesetzt. Eine Ausnahme bilden persistente Stoffe sowie ozonzerstörende Stoffe. Für diese Stoffe wird immer der Faktor 1,5 verwendet.

3.5.5 Ermittlung der Bewertungsfarbe für Unterkriterien und Hauptkriterien für Stoffe

Die Farben für die verschiedenen Kriterien werden in mehreren Schritten ermittelt:

1. Ermittlung des Expowertes pro Lebenszyklusschritt, Schutzgut, und Expositionspfad
2. Ermittlung, wieviel Prozent des maximal möglichen Wertes diese Werte haben
3. Bildung des Mittelwertes der Prozentsätze pro Schutzgut und Expositionspfad (also Mittelwert über den Lebenszyklus)
4. Farbe Unterkriterium: Ermittlung der Farbe für den mittleren Prozentwert anhand der Unterteilung <33/33-66/>66 (s.u.)
5. Farbe Hauptkriterien: Ermittlung der Farbe anhand des Prinzips „Vorrang von Rot“

Die „maximal möglichen Werte“ pro Lebenszyklusschritt, Schutzgut und Expositionspfad werden anhand der Formeln 1-3 und der jeweils höchsten möglichen Faktoren für ($EP_{T,S}(\max)$) ermittelt.

Die folgenden Prozentanteile definieren jeweils die Bereiche für die Bewertungsfarbe:

- Grün = < 33 des Maximalwertes
- Gelb = 33-66% des Maximalwertes
- Rot = > 66%

Kapitel A.1 enthält die Formeln und Maximalwerte bei Verwendung der höchsten Faktoren.

3.5.6 Bildung von Rängen für Stoffe

Die Ränge der **Unterkriterien** zum Vergleich der Nachhaltigkeit von verschiedenen Stoffen werden **durch den Vergleich der Mittelwerte der Prozentwerte** aus Schritt 3 im vorhergehenden Kapitel gebildet. Die Ränge der **Hauptkriterien** werden durch den **Vergleich der Mittelwerte** (der Prozentwerte) **der Unterkriterien** ermittelt.

Die Höhe der Werte definiert den Rang: der Stoff mit dem geringsten Wert erhält den Rang 1, der Stoff mit dem zweit-niedrigsten Wert den Rang 2 usw. Der Stoff mit dem höchsten Wert erhält den höchsten Rang, der der Anzahl der verglichenen Stoffe entspricht (maximal 5).

ChemSelect stellt die Ergebnisse der Unterkriterien und der Hauptkriterien dar. Die Ergebnisse pro Lebenszyklusschritt, Schutzgut und Expositionspfad (s. Abbildung 3) werden nur in Tabellenform und auf Anforderung gezeigt.

3.5.7 Ermittlung der Bewertungsfarben für Gemische

Das Expositionspotenzial für Gemische wird anhand der Expositionspotenziale der enthaltenen Einzelstoffe ermittelt. Hierbei wird jeweils mit dem Prozentanteil am Maximalwert gerechnet. Im Vergleich zum Vorgehen für Stoffe ist hier also ein zusätzlicher Aggregationsschritt notwendig.

3.5.7.1 Aggregation der Detailergebnisse der Einzelstoffe für das Gemisch

Die Aggregation der Expositionspotenziale (je Schutzgut, Expositionspfad und Lebenszyklusschritt) der Inhaltsstoffe eines Gemisches erfolgt durch **die Bildung eines Mittelwertes des „Prozentanteils des Maximalwerts“**, der für die jeweiligen Inhaltsstoffe ermittelt wurde. Das Ergebnis sind die detaillierten Expositionspotenziale pro Lebenszyklusschritt, Schutzgut und Expositionspfad für das Gemisch (alle Stoffe im Gemisch zusammen).

3.5.7.2 Weitere Schritte zur Ermittlung des Expositionspotenzials für Gemische

Analog zum Vorgehen für die Stoffe werden dann zunächst die Werte für das Gemisch pro Schutzgut und Expositionspfad für die **Unterkriterien** zusammengefasst. Hierbei werden erneut **Mittelwerte** gebildet. Das Ergebnis sind die Unterkriterien für die Expositionspotenziale für Arbeiter dermal, Arbeiter inhalativ, Verbraucher dermal, Verbraucher inhalativ und Verbraucher oral sowie Umwelt Boden, Umwelt Wasser, Umwelt Luft.

Zur Ermittlung der Bewertungsfarbe für des Expositionspotenzials je Schutzgut und Expositionspfad ($EP_{T,S}$) für das Gemisch werden die Bandbreiten zugrunde gelegt, welche für die Stoffbewertung ermittelt werden (<33 = grün; 33-66 = gelb; >66 = rot; s. Kapitel 3.5.5).

Im nächsten Schritt werden die Ergebnisse je Schutzgut und Expositionspfad für das Schutzgut insgesamt, den drei **Hauptkriterien**, aggregiert. Das Vorgehen ist analog zu den Stoffen und folgt dem Prinzip des **Vorrangs von Rot**. Das Ergebnis sind Werte, für die Hauptkriterien Expositionspotenzial Arbeiter, Expositionspotenzial Verbraucher und Expositionspotenzial

Umwelt für das Gemisch, die für die Bildung von Rängen genutzt werden können (s. nächstes Kapitel). Die Bewertungsfarben für die Hauptkriterien ergeben sich aus den Farben der Unterkriterien anhand des Prinzips des Vorrangs von Rot.

3.5.8 Bildung von Rängen für den Vergleich von Gemischen

Für den Vergleich mehrerer Gemische werden die Werte für die Teilergebnisse der Unterkriterien verglichen und analog zum Vorgehen für Stoffe die Ränge anhand der Höhe dieser Werte vergeben. Die Vergabe der Ränge für die Hauptkriterien erfolgt durch Bildung der Mittelwerte der Ränge der Unterkriterien. Für das Expositionspotenzial je Schutzgut, Expositionspfad und Lebenszyklusschritt ist dies aufgrund der vielen Einzelergebnisse nicht vorgesehen.

3.6 Klima- und ozonschädigende Wirkung

Das Hauptkriterium besteht aus drei Unterkriterien:

- ▶ Intrinsisches Treibhauspotenzial
- ▶ CO₂-Emissionen während der Herstellung
- ▶ Ozonschädigende Wirkung

Für Gemische werden die Ergebnisse jeweils anhand der Ergebnisse der Einzelstoffe durch Mittelwertbildung ermittelt. Das Unterkriterium „Ozonschädigende Wirkung“ kann für alle als gefährlich eingestuften Inhaltsstoffe eines Gemisches bewertet werden.

Bei den ersten beiden Unterkriterien („Intrinsisches Treibhauspotenzial“ und CO₂-Emissionen während der Herstellung) kann die Bewertung begrenzt werden auf Stoffe, die mindestens einen Anteil von 10% an den Bestandteilen eines Gemisches haben (bezogen auf die Masse der Inhaltsstoffe des Gemisches ohne Wasser).

Wenn mehr als 25% der Inhaltsstoffe eines Gemisches (bezogen auf die Masse der Inhaltsstoffe ohne Wasser) nicht bewertet werden können, ist keine Aussage zum Gemisch möglich.

Falls in einem Gemisch viele Inhaltsstoffe in Konzentrationen < 10% enthalten sind, sollten die mengenmäßig bedeutenderen bewertet und dabei die 25% Marke erreicht werden.

3.6.1 Intrinsisches Treibhauspotenzial

Als Maß für die klimaschädigende Wirkung eines Stoffes wird sein Treibhauspotenzial (Global Warming Potential (GWP)) verwendet. Einige Stoffe mit einem sehr hohen Treibhauspotenzial sind außerdem im Kyoto-Protokoll gelistet. Der Wertebereich für die Farben „Rot“, „Gelb“ und „Grün“ wurde anhand einer Übersicht der Treibhauspotentiale einer größeren Zahl von Stoffen festgelegt.

Tabelle 25: Indikatoren zum intrinsischen Treibhauspotenzial

ROT	GELB	GRÜN
Der Stoff wird als Treibhausgas im Kyoto-Protokoll gelistet und hat ein hohes Treibhauspotenzial (GWP > 500) oder		Feststoffe bei 20°C
Treibhauspotenzial > 500	Treibhauspotential zwischen 100 und 500	Treibhauspotenzial niedriger als 100

3.6.2 CO₂-Emissionen während der Herstellung

Die Indikatoren für das Unterkriterium wurden anhand eines Vergleiches der CO₂-Äquivalente verschiedener Stoffe in Ökobilanzdatenbanken festgelegt.

Tabelle 26: Indikatoren für CO₂-Emissionen während der Herstellung

ROT	GELB	GRÜN
> 10 kg CO ₂ -Äquiv./kg Stoff (s. Anhang)	1 - 10 kg CO ₂ -Äquiv./kg Stoff (s. Anhang)	< 1 kg CO ₂ -Äquiv./kg Stoff (s. Anhang)

Für eine Vertiefung und für einen Vergleich mehrerer Produkte ist eine vergleichende Einzelfallbewertung unter Berücksichtigung der funktionellen Einheit erforderlich.

3.6.3 Ozonschädigende Wirkung

Die Indikatoren beziehen sich auf die Einstufung des Stoffes gemäß CLP-Verordnung, die Nennung im Montreal-Protokoll und den Wert des Ozonerstörungspotentials.

Tabelle 27: Indikatoren für ozonschädigende Wirkungen

ROT	GELB	GRÜN
H420 oder Listung im Montreal-Protokoll		Kein H 420 oder Keine Listung im Montreal Protokoll
Ozonerstörungspotenzial (ODP) > 0,02	ODP 0,0001 – 0,02	ODP = 0 oder nicht-halogenierte Verbindung oder Feststoff bei Raumtemperatur

Hinweis: Als „ROT“ wird der Bereich des ODP bezeichnet, der die aktuell im Montreal-Protokoll gelisteten Stoffe abdeckt. Bei Raumtemperatur feste Stoffe und nicht-halogenierte Stoffe haben kein Ozonerstörungspotenzial.

3.7 Ressourcenverbrauch

In ChemSelect werden der Aufwand für die Herstellung von Stoffen erhoben. Gemische werden anhand der Ergebnisse ihrer Inhaltsstoffe bewertet. Es werden drei Unterkriterien angewendet:

- Der Verbrauch an Energieträgern,
- Der Wassereinsatz und
- Die Auswirkungen des Verbrauchs von Rohstoffen (erneuerbare und nicht-erneuerbare Primärrohstoffe) auf den Menschen und die Umwelt;

Die Bewertung kann begrenzt werden auf Stoffe, die mindestens einen Anteil von 10% an den Bestandteilen eines Gemisches haben (bezogen auf die Masse der Inhaltsstoffe des Gemisches ohne Wasser). Wenn mehr als 25% der Inhaltsstoffe eines Gemisches (bezogen auf die Masse der Inhaltsstoffe ohne Wasser) nicht bewertet werden können, ist keine Aussage zum Gemisch möglich. Falls in einem Gemisch viele Inhaltsstoffe enthalten sind mit Anteilen unter 10%, sollten die mengenmäßig bedeutenderen bewertet und dabei die 25% Marke erreicht werden.

Nicht bilanziert werden weitere Ressourcen wie Boden, Luft und Biodiversität. Für eine Detailbewertung der Ressourcenintensität von Chemikalien wären eine komplexe Analyse unterschiedlicher Auswirkungen von Materialien und Alternativen auf Mensch und Umwelt zu

erfassen²¹. Dies kann ChemSelect nicht leisten. Und es ist auch unwahrscheinlich, dass die Nutzer*innen von ChemSelect diese Informationen finden werden. ChemSelect kann aber erste Hinweise liefern, ob bei einer Chemikalie oder einem Gemisch der Ressourcenverbrauch genauer angeschaut werden sollte oder eher nicht prioritär ist.

3.7.1 Energieverbrauch

Der Indikator zum Energieverbrauch wurde anhand eines Vergleiches der Energieverbrauchs-Daten verschiedener Stoffe in Ökobilanzdatenbanken festgelegt.

Tabelle 28: Indikator für den Energieverbrauch

ROT	GELB	GRÜN
> 100 MJ /kg Stoff (s. Anhang)	10 – 100 MJ/kg Stoff (s. Anhang)	< 10 MJ / kg Stoff (s. Anhang)

Für eine Vertiefung und für einen Vergleich mehrerer Produkte ist eine vergleichende Einzelfallbewertung unter Berücksichtigung der funktionellen Einheit erforderlich.

3.7.2 Wasserverbrauch

Der Indikator zum Wasserverbrauch wurde anhand eines Vergleiches der Wasserverbrauchs-Daten verschiedener Stoffe in Ökobilanzdatenbanken festgelegt

Tabelle 29: Indikator für den Wasserverbrauch

ROT	GELB	GRÜN
> 100 Liter /kg Stoff (s. Anhang)	5 – 100 Liter /kg Stoff (s. Anhang)	< 5 Liter / kg Stoff (s. Anhang)

Für eine Vertiefung und für einen Vergleich mehrerer Produkte ist eine vergleichende Einzelfallbewertung unter Berücksichtigung der funktionellen Einheit erforderlich.

3.7.3 Verbrauch von Rohstoffen

Hohe Verbräuche an Rohstoffen („Ressourcen“) und die Nutzung kritischer Rohstoffe sind nicht nachhaltig. Kritische Rohstoffe (CRM) haben potenziell „hohe Versorgungsrisiken“ und gleichzeitig eine hohe ökonomische Bedeutung. Zusätzlich kann es bei der Gewinnung von Rohstoffen zu schädlichen Auswirkungen auf den Menschen und die Umwelt kommen. Daher sollten Stoffe bevorzugt werden, deren Herstellung sich durch einen niedrigen Verbrauch an Rohstoffen, durch die Nutzung nicht-kritischer Rohstoffe und die Nutzung von Rohstoffen mit wenig negativen Auswirkungen auszeichnen. Ein wesentliches Ziel ist hierbei der Ersatz von seltenen und strategisch wichtigen Rohstoffen durch Rohstoffe, die langfristiger verfügbar sind und weniger schädliche Auswirkungen haben²².

3.7.3.1 Indikatoren für Nachwachsende Rohstoffe

Die folgende Tabelle zeigt die Strukturierung des Unterkriteriums „Rohstoffverbrauch“ bei nachwachsenden Rohstoffen. Die Verfügbarkeit der Rohstoffe sowie ökologische und soziale negative Auswirkungen der Rohstoffgewinnung mit drei Fragen ermittelt.

²¹ Müller et. al 2017: Dematerialization – A Disputable Strategy for Resource Conservation Put under Scrutiny, Resources 2017, 6, 68; doi:10.3390/resources6040068

²² <https://www.umweltbundesamt.de/themen/weniger-kritische-rohstoffe-fuer-umwelttechnologien>

- Geschieht der Anbau auf ökologisch bedeutsamen Flächen (Flächen, die für den Erhalt der Biodiversität wichtig sind, z. B. Primärwälder)?
- Werden internationale Standards beim Anbau eingehalten?
- Geschieht der Anbau in Konkurrenz zum Anbau von Lebensmitteln?

Tabelle 30: Indikatoren zum Verbrauch an nachwachsenden Rohstoffen

ROT	GELB	GRÜN
Der Rohstoff wird auf ökologisch bedeutsamen Flächen angebaut oder Beim Anbau werden internationale Standards nicht eingehalten Oder Der Anbau konkurriert mit dem Anbau von Lebensmitteln.	Der Rohstoff wird in einigen wenigen Regionen auf ökologisch bedeutsamen Flächen angebaut oder Beim Anbau werden internationale Standards in einigen Fällen nicht eingehalten oder Der Anbau konkurriert in einigen Regionen mit dem Anbau von Lebensmitteln.	Der Rohstoff wird nicht auf ökologisch bedeutsamen Flächen angebaut Und Beim Anbau werden internationale Standards eingehalten und Der Anbau konkurriert nicht mit dem Anbau von Lebensmitteln.

3.7.3.2 Indikatoren für nicht nachwachsende Rohstoffe

Die folgende Tabelle zeigt die Strukturierung des Unterkriteriums „Rohstoffverbrauch“ bei den nicht nachwachsenden Rohstoffen. Die Verfügbarkeit des Rohstoffes und die sozialen und ökologischen Fragen der Rohstoffgewinnung werden anhand von zwei Leitfragen ermittelt:

- Gibt es problematische soziale und ökologische Folgen bei der Rohstoff-Gewinnung?
- Handelt es sich um einen kritischen Rohstoff, dessen Verfügbarkeit auf Dauer fraglich ist?

Tabelle 31: Indikatoren zum Verbrauch an nicht nachwachsenden Rohstoffen

ROT	GELB	GRÜN
Die Rohstoffgewinnung hat sehr negative soziale und ökologische Konsequenzen Der Rohstoff ist ein kritischer Rohstoff. oder Listung EU CRM 2022 bzw. ÖkoRess2	Die Rohstoffgewinnung hat negative soziale und ökologische Konsequenzen oder Der Rohstoff könnte in wenigen Jahren zu einem kritischen Rohstoff werden. oder Listung ÖkoRess 2	Die Rohstoffgewinnung hat keine negativen sozialen und ökologischen Konsequenzen und Der Rohstoff ist kein kritischer Rohstoff und Listung als unkritisch in ÖkoRess 2.

Zur Unterstützung der Beantwortung werden Beispiele für Stoffe angegeben:

- GRÜN: Eisen, mineralischen Rohstoffe: Gips, Kalk und Sand.
- GELB: Erdgas und Erdöl, Aluminium und Kupfer (kritische Umweltbelastungen bei der Gewinnung möglich; in ÖkoRess genannt als Rohstoffe mit mittlerem aggregiertem Umweltbelastungspotenzial)
- ROT: Beryllium, Gallium und Niobium (gelistet als CRM EU 2020 und hohes aggregiertes Umweltbelastungspotenzial laut ÖkoRess-Studie (UBA ÖkoRess 2020)).

3.7.3.3 Erläuterungen und Referenzen

Die Beantwortung aller oben genannten Leitfragen erfordert Einschätzungen durch die Nutzer*innen. Die Antworten können für ein und denselben Stoff länderspezifisch unterschiedlich ausfallen. Zur Unterstützung für die Beantwortung der Fragen „Gibt es problematische soziale und ökologische Folgen bei der Rohstoff-Gewinnung?“ und „Handelt es sich um einen kritischen Rohstoff?“ werden zwei Listen hinterlegt²³:

- Liste der kritischen Rohstoffe in der EU, die im Abstand von einigen Jahren von der EU-Kommission herausgegeben wird. (Quelle: CRM EU 2020):
<https://ec.europa.eu/docsroom/documents/42849>
- Ergebnisse des ÖkoRess II Projektes²⁴ des Umweltbundesamtes, welche kritische Rohstoffe in drei Gruppen unterteilt (UBA ÖkoRess 2020):
<https://www.umweltbundesamt.de/publikationen/oekoress-ii>.

Problematisch ist hierbei, dass sich die EU-Liste der kritischen Rohstoffe nur auf die EU bezieht und für andere Länder andere Rohstoffe kritisch sind. Hierauf wird in der Anwendung hingewiesen.

3.8 Kreislauffähigkeit

Das Hauptkriterium „Kreislauffähigkeit“ hat zwei Unterkriterien, die sich auf den jeweiligen Bewertungsgegenstand (Stoff oder Gemisch) beziehen:

- a) Das **Potenzial aus Abfällen zurückgewonnen** zu werden sowie
- b) Das **Potenzial Sekundärmaterial zu kontaminieren**.

Die Bewertung bezieht sich auf eine Verwendung in einem konkreten Material/Produkt. Wird der Stoff/das Gemisch in mehreren Materialien oder Produkttypen verwendet, müssen diese separat bewertet werden.

Die Bewertung der Kreislauffähigkeit ist unabhängig von der lokalen Recycling-Infrastruktur des Abfallsektors und der lokalen Gesetzgebung. So kann ChemSelect weltweit angewendet werden.

Die Wiederverwendung von Erzeugnissen oder Produkten wird mit dem Kriterium der Kreislauffähigkeit nicht berücksichtigt. Gründe dafür sind: Für den Stoff beginnt kein neuer Kreislauf, sondern es verlängert sich durch eine Wiederverwendung lediglich der Lebenszyklus. ChemSelect bewertet Stoffe und Gemische (nicht Erzeugnisse). Bei der Wiederverwendung von Erzeugnissen sind rechtliche Aspekte zu beachten sowie die lokale Infrastruktur, beides kann sich je nach Region stark unterscheiden.

Zudem bleibt die Bewertung der Kreislauffähigkeit mit ChemSelect relativ generisch und damit lediglich grob abschätzend, weil:

- ▶ lokale Faktoren, wie die Recycling-Infrastruktur, nicht berücksichtigt werden können,
- ▶ am Anfang der Lieferkette oft nur wenig Kenntnis über den Lebensweg der Produkte (und die daraus entstehenden Abfällen) vorhanden ist,
- ▶ in der Bewertung lediglich eine Differenzierung in rot, gelb und grün möglich ist.

²³ Diese beiden Listen müssten regelmäßig aktualisiert werden.

²⁴ Umweltbundesamt, Texte 79/2020, <https://www.umweltbundesamt.de/themen/kritische-rohstoffe-aus-umweltsicht-ermittelt>

Grundsätzlich haben Stoffe und Gemische, die als solche verwendet werden (also nicht in/an Erzeugnissen enden) ein hohes Wiedergewinnungspotenzial (leicht zurückzuerhalten und aufzubereiten) und, in dem Fall wo sie nicht während der Verwendung mit weiteren Gemischen zusammen eingesetzt werden, ein geringes Potenzial Sekundärmaterialien zu verunreinigen (Stoffe und Gemische sind dann selbst die „Sekundärmaterialien“).

Werden die zu bewertenden Stoffe oder Gemische in/an Materialien (in Erzeugnissen) eingesetzt, so wird mit ChemSelect das Potenzial, zurückgewonnen zu werden in Bezug auf dieses Material, d. h. gemeinsam mit diesem Material bewertet. Es wird nicht bewertet, ob ein Stoff/Gemisch aus einem Material wiedergewonnen werden kann.

Für die Rückgewinnung von Materialien (mit den bewerteten Stoffen/Gemischen) wird der Stand der Technik in der EU für die Verfügbarkeit von Recyclingverfahren angenommen. Hierauf und mögliche Diskrepanzen zwischen Potenzial und Realität, insbesondere in Ländern mit weniger entwickelter Recyclinginfrastruktur, wird in der Ergebnisdarstellung hingewiesen.

3.8.1 Anwendung des Hauptkriteriums Kreislauffähigkeit

3.8.1.1 Kreislauffähigkeit ist nicht relevant

Das Hauptkriterium Kreislauffähigkeit wird als „nicht relevant“ angesehen, wenn aufgrund der Funktion einer Chemikalie keine Wiedergewinnung und kein Recycling (und damit auch keine Möglichkeit der Kontamination von Sekundärmaterialien) „vorgesehen“ ist. Dies ist z. B. dann der Fall, wenn die bewertete Chemikalie (Stoff oder Gemisch) in der Anwendung „verbraucht“, d. h. zerstört, umgewandelt, oder „bestimmungsgemäß“ in die Umwelt emittiert wird (z. B. Lösemittel in Farben, Geschirrspülmittel, Feuerwerkskörper).

3.8.1.2 Unterkriterium: Potenzial zurückgewonnen zu werden

Dieses Unterkriterium bezieht sich auf zwei Aspekte der Rückgewinnung:

- a) die Möglichkeit, einen Stoff oder ein Gemisch aus dem Abfallstrom zu extrahieren und wiederzugewinnen, und
- b) die Qualität der wieder eingesetzten Chemikalie oder des wieder eingesetzten Materials, insbesondere in Bezug auf den Erhalt der Funktionalität der Chemikalien.

Für das Unterkriterium Rückgewinnungspotenzial ist einerseits zu unterscheiden, was zurückgewonnen werden soll:

- Wenn ein Stoff bewertet wird und im Lebenszyklus nicht in/an/auf Material eingesetzt wird, ist das Ziel der Rückgewinnung der Stoff.
- Wenn ein Gemisch bewertet wird und im Lebenszyklus nicht in/an/auf Material eingesetzt wird, ist das Ziel der Rückgewinnung das Gemisch.
- Wenn ein Stoff oder Gemisch in/an/auf einem Material / Produkt eingesetzt wird, ist das Ziel der Rückgewinnung das Material, in dem der Stoff oder das Gemisch enthalten ist, möglichst unter Beibehalt der Funktion der Chemikalien.

Bei Stoffen/Gemischen die als solche eingesetzt und am Ende ihres Lebenszyklus' nicht Bestandteil eines Materials/Erzeugnisses werden, wird grundsätzlich davon ausgegangen, dass Rückgewinnung und ein Recycling möglich und ein erneuter Einsatz mit derselben Funktionalität möglich sind. Ein Maß dafür, wie gut diese Rückgewinnung möglich ist, ist die Einsatzquote recycelter Stoffe oder Gemische im eigenen Unternehmen.

Werden Stoffe oder Gemische selbst zum Material („Hauptbaustein), in ein Material integriert (Additive) oder an ein Material/Produkt aufgebracht (Beschichtungen, Kleber etc.) wird in ChemSelect die Rezyklierbarkeit des Materials zur Bewertungsgrundlage.

Die Grundfragen, welche sich zur Bewertung mit rot/gelb/grün stellen sind:

- Kann man das Material aus dem Abfallstrom herausbekommen?
- Wird die Funktion des Stoffes / Gemisches im Material auch im Sekundärmaterial genutzt, d. h. ist ein hochwertiger Einsatz des Sekundärmaterials die Regel oder wird die Funktionalität gar nicht mehr benötigt und das Sekundärmaterial in „geringwertigeren“ Verwendungen eingesetzt (Downcycling)?

Bei der Qualität des Recyclingergebnisses wird grundsätzlich die Farbe „Grün“ für das Potenzial²⁵, ein hochwertiges, funktionales Sekundärmaterial zu erhalten, vergeben. Die Farbe „Gelb“ zeigt eine Wiederverwendung auf niedrigem Qualitätsniveau und die Farbe „Rot“ einen nicht-stofflichen Verwertungsweg an, z. B. Deponierung oder die Nutzung als Ersatzbrennstoff.

Für Gemische wird das Unterkriterium für das Gemisch als Ganzes bewertet.

3.8.1.3 Bewertung von Stoffen/Gemischen, die nicht zu einem Material/Produkt werden

Bei Stoffen und Gemischen, die als solche angewendet werden, hängt das Rückgewinnungspotenzial von der konkreten Handhabung in der Anwendung ab. Als Indikator für das Rückgewinnungspotenzial wird die Einsatzquote von Stoffen und Gemischen im eigenen Betrieb verwendet.

Tabelle 32: Indikatoren für Stoffe und Gemische, die nicht in/an/als Material gebunden werden

Kriterium	Grün	Gelb	Rot
Anteil recycelter Stoffe/Gemische am Gesamteinsatz der Chemikalien im Unternehmen, das die Bewertung durchführt (eigene Einsatzmenge)	> 50%	25-50 %	< 25 %

3.8.1.4 Bewertung von Chemikalien die in/an Materialien Produkten integriert werden

Stoffe und Gemische, die in Materialien oder Produkten angewendet werden, erfordern eine material- und produktbezogenen Prüfung (s. Kapitel 3.8.4) des Potenzials, zurückgewonnen zu werden. Die folgende Tabelle enthält hierzu eine Fallunterscheidung.

Die Frage, ob ein Stoff aus einem Material zurückgewonnen werden kann, ist nur relevant, wenn der Stoff der Hauptbestandteil des Materials ist, z. B. Eisen. Gleichsam ist die Wiedergewinnung von Gemischen relevant (z. B. Polymermischungen), wenn diese die Matrix des Materials/Produktes bilden.

Für die Bewertung des Rückgewinnungspotenzials gilt grundsätzlich, dass alle Beschichtungen, Kleber oder sonstige Chemikalien, die auf Materialien aufgebracht werden, nicht zurückgewonnen werden können (Bewertung mit rot), denn der Fokus des Recyclings liegt i. d. R. auf der Wiedergewinnung der „Haupt-“ Materialien. In einigen Fällen kann dennoch die Bewertung mit gelb erfolgen, wenn die Materialien in einem Downcycling diese Stoffe und Gemische noch enthalten.

²⁵ Da die Bewertung nur generisch möglich ist, wird jeweils von einem Potenzial und nicht der realen Rückgewinnung gesprochen.

Tabelle 33: Fallunterscheidungen für die Detailprüfung bzgl. des Einsatzes in Materialien

Bewertet wird	Verwendung	Beispiele	Bewertung
Stoff	Stoff, der zu einem Material „wird“	Eisen, Aluminium	Material = Stoff → grün
Stoff	Stoff im Gemisch, das zu Material wird	Pigment in Kunststoff, Legierungsmetall	Material → Detailprüfung
Gemisch	Gemisch, das zu einem Material wird	Kunststoffe, Metalle, Silizium/Glas	Material → Detailprüfung

Die Indikatoren für die Detailprüfung sind im Kapitel 3.8.4 beschrieben.

3.8.2 Unterkriterium Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren

Mit diesem Kriterium wird bewertet, ob ein Stoff (in einem Gemisch), während des Recyclings abgeschieden oder zerstört werden kann, oder ob er im Recyclingprozess in das Sekundärmaterial „verschleppt“ wird. Die Betrachtung der Gefahr, Materialströme zu kontaminieren beschränkt sich nur auf den zweiten Lebenszyklus. Das Unterkriterium ist mit dem Rückgewinnungspotenzial gekoppelt, denn eine Kontamination der Sekundärmaterialien ist nur dann möglich, wenn es auch eine Rückgewinnung gibt.

Die Bewertung ist nicht risikobezogen, d. h. die Frage wie wahrscheinlich ein Schaden für Mensch und Umwelt durch Exposition mit einem Sekundärmaterial ist, welches durch den bewerteten Stoff/das bewertete Gemisch verunreinigt ist, wird nicht betrachtet.

3.8.2.1 Bewertung von Chemikalien, die nicht zu Material/Produkt werden

Werden Stoffe oder Gemische bewertet, die als solche angewendet und zurückgewonnen werden, die also weder in der Verwendung verbraucht werden noch in/an/auf eine Matrix integriert werden, sind zwei Fälle zu unterscheiden:

1. Stoffe und/oder Gemische werden in der Anwendung nicht mit anderen Stoffen und/oder Gemischen vermischt. In diesem Fall ist eine Kontamination des Rezyklats ausgeschlossen (= grün), da dieses aus dem Stoff/dem Gemisch selbst besteht. In diesem Fall ist keine weitere, separate Bewertung notwendig.
2. Stoffe und Gemische werden in der Anwendung mit weiteren Stoffen und/oder Gemischen vermischt. In diesem Fall ist eine Kontamination des Rezyklats möglich. Hier wird die Bewertung wie folgt unterschieden:
 - a. Grün: eine Wiedergewinnung der Ursprungsstoffe und -gemische aus dem in der Anwendung entstandenen Gemisch ist möglich
 - b. Rot: eine Wiedergewinnung der Ursprungsstoffe- und -gemische ist aufgrund der Vermischung und geringen Trennbarkeit nach der Anwendung nicht möglich.

3.8.2.2 Bewertung von Chemikalien, die in/an Material/Produkt integriert werden

Das Potenzial, Sekundärmaterialien zu verunreinigen wird grundsätzlich mit grün bewertet, wenn Stoffe oder Gemische selbst ein Material werden (Hauptkomponenten).

Im Detail zu bewerten ist, ob Additive, die in Materialien „gelöst“ vorliegen oder Beschichtungen eine Verunreinigung des Sekundärmaterials hervorrufen können. Dies hängt u. a. von den „normalen“ Bedingungen des Recyclings und den Stoffeigenschaften ab. Hier ist lediglich eine generische Betrachtung möglich.

3.8.3 Bewertung von Gasen

Bei Gasen wird ein abgewandelter Bewertungsweg für die Kreislauffähigkeit angeboten. Hier wird lediglich geprüft, ob die Freisetzung von Gasen im Lebenszyklus beabsichtigt ist, was zu einer Bewertung des gesamten Kriteriums als „nicht relevant“ führt.

Ist dies nicht der Fall wird im nächsten Schritt geprüft, ob die freigesetzten Gase aufgefangen werden und somit prinzipiell einer Wiedergewinnung zur Verfügung stehen. Ist dies der Fall, wird das Potenzial zur Rückgewinnung mit grün bewertet, andernfalls mit rot.

Im letzten Schritt wird abgefragt, ob die Wiederverwendung des Gases eine Aufreinigung erfordert; ist dies der Fall wird das Potenzial zur Kontamination von Sekundärmaterialien (Gasen) mit rot bewertet, ist dies teilweise der Fall mit gelb und ist dies gar nicht der Fall mit grün.

3.8.4 Detailbewertung der Unterkriterien nach Materialart

In den folgenden Kapiteln sind die Bewertungsindikatoren nach Materialarten aufgeführt. Diese sind für die Bewertung von Gasen nicht relevant.

3.8.4.1 Keramik und mineralische Baumaterialien

Keramische Materialien und Bauschutt können zwar gesammelt werden aber das Recycling besteht in der Regel nur aus einer Zerkleinerung und Verwendung als „Füllmaterial“. Dies entspricht einer Verwendung mit einer geringerwertigen Funktion und kann mit gelb bewertet werden.

Im Bausektor gibt es in einigen Ländern bereits die Möglichkeit einer Sortierung in kleine (Norm-)Korngrößen, so dass auch ein Einsatz von mineralischen Abfällen in hoch-/gleichwertigen Anwendungen möglich ist. Dies ist allerdings (noch) ein Sonderfall und wird daher nicht berücksichtigt.

Eine Kontamination des Sekundärmaterials im engeren Sinne findet nicht statt, allerdings werden unerwünschte Stoffe auch nicht abgetrennt (keine Aufreinigung) und können insbesondere die Umwelt zu belasten.

Tabelle 34: Rückgewinnungspotenzial in/an/als Keramik oder für mineralischen Baumaterialien

	Verwendung	Grün	Gelb	Rot
Formulierer	Stoffe als Ausgangsmaterial für Keramik / Baumaterial		Füllgut	
Formulierer	Stoff, der (im Gemisch) auf Keramik aufgebracht wird			Findet nicht statt
Anwender	Gemisch als Ausgangsmaterial der Keramik		Füllgut	
Anwender	Gemisch, das auf Keramik aufgebracht wird			Findet nicht statt

Tabelle 35: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Keramik oder mineralischen Baumaterialien

Bewertung	Fälle/Stoffe/Produkte
Rot	SVHC – Stoffe, die nicht „fester“ Bestandteil von Keramik / Baumaterialien sind

Bewertung	Fälle/Stoffe/Produkte
Gelb	Stoffe/Gemische, die auf Keramik /Baumaterialien aufgebracht werden, aber keine SVHC sind oder SVHC enthalten
Grün	Feste Bestandteile in Keramik / Baumaterialien (wasserunlöslich gebunden)

3.8.4.2 Glas

Beim Glasrecycling wird Altglas unter hohen Temperaturen eingeschmolzen und erneut verwendet. Grundsätzlich kann Glas sehr lange im Kreislauf geführt werden. Die Prozesse des Recyclings unterscheiden sich je nach Art des recycelten Altproduktes.

Aufgrund der hohen Temperaturen werden organische Stoffe in der Regel zerstört („Reinigungsschritt“ beim Recycling). Metalle und andere Störstoffe können (teilweise) abgeschieden werden.

Tabelle 36: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Glas

	Verwendung	Grün	Gelb	Rot
Formulierer	Ausgangsstoffe Glas	Behälterglas	Fensterglas, Flachglas	Ceranglas, Borsilikatglas, Wirtschaftsglas (Trinkgefäße, Glasteller etc.)
Formulierer	Stoff (im Gemisch), der auf Glas aufgebracht wird			Beschichtungen werden nicht recycelt
Anwender	Ausgangsmaterialien für Glas	Behälterglas	Fensterglas, Flachglas	Ceranglas, Borsilikatglas, Wirtschaftsglas (Trinkgefäße, Glasteller etc.)
Anwender	Gemisch, das auf Glas aufgebracht wird			Beschichtungen werden nicht recycelt

Tabelle 37: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Glas

Bewertung	Fälle/Stoffe/Produkte
Rot	Anorganik / Schwermetalle, die auf Glas aufgebracht sind
Gelb	Pigmente (führt zu Downcycling) Glas aus PV-Anlagen, Bleioxidglas, Ceranglas / Glas aus Bauanwendungen Organische Stoffe, die keine SVHCs sind mit Zerfallstemperatur > 1100 °C
Grün	Organische Stoffe mit Zerfallstemperatur < 1100 °C

3.8.4.3 Metalle

Metalle und Legierungen können grundsätzlich gut und oft ohne nennenswerte Qualitätsverluste recycelt werden. Aufgrund des hohen Wertes von Metallen und Legierungen findet ein Recycling in der Regel auch statt, nur geringe Mengen werden deponiert, z. B. zusammen mit Bauabfällen, aus denen sie nicht getrennt werden können. Beschichtungen oder Materialien, die an metallische Erzeugnisse aufgebracht werden, werden nicht zurückgewonnen.

Aufgrund der hohen Temperaturen beim Recycling werden organische Stoffe in der Regel zerstört und können Sekundärmaterialien nicht kontaminieren. Anorganische Stoffe sowie „andere“ Metalle können in der Regel (mit erhöhtem Aufwand) abgetrennt werden.

Tabelle 38: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Metalle /Legierungen

	Verwendung	Grün	Gelb	Rot
Formulierer	Stoff (im Gemisch), der zu Legierung wird	Alle Legierungen		
Formulierer	Stoff der (im Gemisch) auf Metallerzeugnis aufgebracht wird			Beschichtungen werden nicht recycelt
Anwender	Ausgangsgemisch einer Legierung	Legierungen		
Anwender	Gemisch, das auf ein Metallerzeugnis aufgebracht wird			Beschichtungen werden nicht recycelt

Tabelle 39: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Metallen

Bewertung	Fälle/Stoffe/Produkte
Rot	Metalle, die nicht in die Schlacke überführt werden
Gelb	Anorganik; Organische Stoffe mit Zerfallstemperatur > 1200 °C, Metalle, die in die Schlacke überführt werden
Grün	Organische Stoffe mit Zerfallstemperatur < 1200 °C

3.8.4.4 Papier

Beim Papierrecycling werden im Wesentlichen die Fasern des Papiers zurückgewonnen. Tinten, Pigmente, Beschichtungen u. ä. werden durch Waschen abgetrennt und müssen zur Herstellung von Recyclingpapier erneut zugegeben werden. Zusatzstoffe und Beschichtungen, können als Verunreinigungen an den Fasern haften verbleiben und / oder abgetrennt und mit dem Abwasser entsorgt werden.

Tabelle 40: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Papier

	Verwendung	Grün	Gelb	Rot
Formulierer	Stoff im Gemisch, das zu Papier wird	Papierfasern		Additive, Beschichtungen
Formulierer	Stoff der (im Gemisch) auf Papier aufgebracht wird			Beschichtungen o.ä.
Anwender	Gemische, die bei der Herstellung im Papier integriert werden			Additivmischungen
Anwender	Gemisch, das in der Anwendung auf Papier aufgebracht wird			Beschichtungen o.ä.

Tabelle 41: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Papier

Bewertung	Fälle/Stoffe/Produkte
Rot	Mineralöle, Bisphenole Stoffe mit einer Löslichkeit von < 0,01 mg/l
Gelb	Pigmente, andere Additive, Kleber, Beschichtungen Stoffe mit einer Wasserlöslichkeit von 0,01 mg/l – 1 mg/l

Bewertung	Fälle/Stoffe/Produkte
Grün	Stoffe mit einer Wasserlöslichkeit von > 1 mg/l, anorganische Stoffe

3.8.4.5 Holz

Holz ist keine Chemikalie und Chemikalien, die auf/an Holz aufgebracht werden, werden nicht zurückgewonnen. Daher wird das Kriterium Rückgewinnung für Holz als „nicht relevant“ gewertet. Das Kriterium „Kontamination von Sekundärmaterialien“ wird mit gelb gewertet, da nicht belastetes Holz zu Platten verarbeitet werden kann. Hier würden Verunreinigungen verschleppt.

3.8.4.6 Leder

Das Recycling von Leder besteht aus den Schritten „Zerkleinerung von Altleder“ und „Zusammenfügen bzw. -kleben“. Stoffe, die im Originalleder enthalten sind, werden somit vollständig in das Sekundärmaterial überführt.

Tabelle 42: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Leder

	Verwendung	Grün	Gelb	Rot
Formulierer	Stoff, der (im Gemisch) auf Leder aufgebracht wird	Stoff bleibt mit Funktion erhalten		
Anwender	Gemisch, das auf Leder aufgebracht wird		Bleibt erhalten, Funktion unklar	

Tabelle 43: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Leder

Bewertung	Fälle/Stoffe/Produkte
Rot	
Gelb	Alle Stoffe und Gemische
Grün	

3.8.5 Polymer / Kunststoff / Plastik

Es gibt verschiedene Verfahren für das Recycling von Kunststoffen: mechanisch (Zerkleinerung und Extrusion), lösemittelbasiert (ohne Zerstörung der Polymerstruktur), chemisch (Pyrolyse, Rückgewinnung von Monomeren etc.) oder eine thermische Verwertung. Des Weiteren können Kunststoffe auch verbrannt oder deponiert werden oder in der Umwelt verbleiben (Littering). Eine Rückgewinnung einzelner Additive aus Kunststoff mit dem Ziel einer erneuten Verwendung findet normalerweise nicht statt.

Die Art der „üblichen“ Verwertung hängt von der Art des Kunststoffs, dem Endprodukt²⁶, in dem er verwendet wird und weiteren Faktoren ab. Aufgrund der Vielfalt der Polymere, Endprodukte und Verwertungswege, werden in ChemSelect nur generische Indikatoren formuliert, die anhand der vorhandenen Kenntnisse über das Lebensende der Endprodukte ausgewählt werden müssen.

²⁶ Polymere in Gemischen werden hier nicht berücksichtigt (s. Kapitel 3.8.1.3 und 3.8.2.1).

Tabelle 44: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Kunststoff

	Verwendung	Grün	Gelb	Rot
Formulierer	Stoff (im Gemisch), der im Polymer integriert wird	Kunststoff wird (mit Additiv) für gleichwertigen Einsatz wiedergewonnen (z. B. PET-Flaschen)	Kunststoff wird (mit Additiv) nicht funktional wiedergewonnen (z. B. Parkbank, Bauelement für Straßenverkehr)	Kunststoff wird (mit Additiv) verbrannt, gelittert oder deponiert (z. B. flammgeschützte Bauteile von EEE)
Formulierer	Stoff (im Gemisch), der an Kunststoff-erzeugnisse aufgebracht wird			Keine Wiedergewinnung
Anwender	Polymergemisch, das zu Kunststoff wird	Kunststoff wird für gleichwertigen Einsatz wiedergewonnen (z. B. PET-Flaschen)	Kunststoff wird nicht funktional wiedergewonnen (z. B. Parkbank, Bauelement für Straßenverkehr)	Kunststoff wird verbrannt, gelittert oder deponiert (z. B. Spezialkunststoffe)
Anwender	Gemisch, das auf Kunststoff aufgebracht wird			Keine Wiedergewinnung

Für den Fall, dass der Formulierer oder der Anwender eines compounds direkte Kenntnisse über die Abfallbehandlung hat, wird eine direkte Abfrage zum Recycling in ChemSelect vorgesehen.²⁷

Tabelle 45: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Plastik

Bewertung	Fälle/Stoffe/Produkte
Rot	Gelöste Additive
Gelb	
Grün	Additive die kovalent im Kunststoff gebunden sind

3.8.5.1 Polymer / synthetische und natürliche Fasern / Textilien

Natürliche und synthetische Fasern werden derzeit nur in geringem Ausmaß recycelt. Hierbei werden mechanische Verfahren zur Rückgewinnung der Fasern angewendet, die auch Reinigungsschritte enthalten (können). Während z. B. Pigmente erhalten bleiben können, wird die Ausrüstung und andere Additive nicht mit den Fasern wiedergewonnen. Diese können dann als Verunreinigungen im Sekundärmaterial enthalten sein, wenn sie im Recyclingprozess nicht entfernt werden.

Tabelle 46: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Textilien (Fasern)

	Verwendung	Grün	Gelb	Rot
Formulierer	Monomer synthetische Fasern, Additiv	Fasern		Additive, Monomere

²⁷ Z. B. Wird das compound in ihrer Wertschöpfungskette Endprodukten angewendet, die im geschlossenen Kreislauf geführt werden?

	Verwendung	Grün	Gelb	Rot
Formulierer	Additiv in Textil integriert		Wenn keine Mischfaser	Textil wird nicht wiedergewonnen
Formulierer	Stoff der (im Gemisch) auf Textilie aufgebracht wird			Wird nicht wiedergewonnen
Anwender	Gemisch, das zu Textilie wird		Wenn keine Mischfaser	
Anwender	Gemisch, das auf Textilie aufgebracht wird			Wird nicht wiedergewonnen

Tabelle 47: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Textilien

Bewertung	Fälle/Stoffe/Produkte
Rot	Gelöste Additive
Gelb	
Grün	Additive die kovalent im Kunststoff gebunden sind

3.8.5.2 Polymer / Gummi

Die Vulkanisierung von Gummi ist ein unumkehrbarer Prozess, daher ist eine Wiedergewinnung der Monomere nicht möglich. Beim Recycling gibt es zwar einige neuere Verfahren, die hochwertige, stoffliche Anwendungen ermöglichen, diese sind jedoch nicht Stand der Technik. Das „Standardrecycling“ besteht aus einer Zerkleinerung und entweder Nutzung als Füllgut oder nach Verklebung z. B. als Matten. Des Weiteren wird Gummi thermisch verwertet bzw. als Ersatzbrennstoff genutzt.

Tabelle 48: Rückgewinnungspotenzial für Chemikalien in/an/als Gummi

Bewerter	Verwendung	Grün	Gelb	Rot
Formulierer	Stoffe (im Gemisch) die zu Gummi werden		Gummi, das stofflich verwertet wird	Gummi, das verbrannt oder deponiert wird
Formulierer	Stoff der (im Gemisch) auf Gummi aufgebracht wird			Beschichtungen werden nicht zurückgewonnen
Anwender	Gemisch, das zu Gummi wird		Gummi, das stofflich verwertet wird	Gummi, das verbrannt oder deponiert wird
Anwender	Gemisch, das auf Gummi aufgebracht wird			Beschichtungen werden nicht zurückgewonnen

Tabelle 49: Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren in/an Gummi

Bewertung	Fälle/Stoffe/Produkte
Rot	
Gelb	Alle Stoffe
Grün	

3.8.5.3 Verbundmaterialien

Da Verbundmaterialien in der Regel kaum trennbar sind, werden Anwendungen in diesem Materialtyp generell bzgl. des Rückgewinnungspotenzials mit rot bewertet. Da nicht von einer Rückgewinnung ausgegangen wird, ist die Kontamination von Sekundärmaterialien nicht relevant (hellblau).

3.9 Verantwortung des Lieferanten

Das Hauptkriterium Verantwortung des Lieferanten besteht aus den Unterkriterien Übernahme von Verantwortung für Arbeiter, Übernahme von Verantwortung für die Umwelt, Übernahme von Verantwortung für das soziale Umfeld. Die Indikatoren wurden basierend auf einer „logischen“ Abstufung von messbaren Aktivitäten definiert, die anzeigen ob und in welchem Ausmaß ein Unternehmen Verantwortung im jeweiligen Bereich übernimmt.

3.9.1 Übernahme von Verantwortung für den Arbeitsschutz mit Bezug zum Produkt

Tabelle 50: Indikatoren für die Übernahme von Verantwortung für den Arbeitsschutz

ROT	GELB	GRÜN
Im Sicherheitsdatenblatt sind keine, nicht plausible oder nicht verständliche Informationen enthalten oder der Lieferant beantwortet keine Anfragen zum Arbeitsschutz bezüglich eines Produktes oder es ist bekannt, dass es bei dem Unternehmen zu Problemen im Arbeitsschutz kommt.	Im Sicherheitsdatenblatt finden sich überwiegend „Standardsätze“ zum Arbeitsschutz beim Umgang mit dem Produkt. Der Lieferant gibt zu Fragen hierzu nur wenig Auskunft.	Im Sicherheitsdatenblatt des Produktes sind ausführliche und gut verständliche Informationen zum Arbeitsschutz enthalten. Der Lieferant antwortet auf diesbezügliche Nachfragen umgehend und fundiert. .

3.9.2 Übernahme von Verantwortung für die Umwelt

Tabelle 51: Indikatoren für die Übernahme von Verantwortung für die Umwelt

ROT	GELB	GRÜN
Probleme im Umweltschutz sind bekannt oder Der Lieferant antwortet nicht auf Anfragen zum Umweltschutz	Der Lieferant hat bestätigt, ein (nicht zertifiziertes) Umweltmanagementsystem zu betreiben oder Es gibt Hinweise auf Probleme im Umweltschutz	Der Lieferant hat ein zertifiziertes Umweltmanagementsystem oder Der Lieferant veröffentlicht einen Umwelt- oder Nachhaltigkeitsbericht

3.9.3 Übernahme von Verantwortung für das soziale Umfeld

Tabelle 52: Indikatoren für die Übernahme von Verantwortung für das soziale Umfeld

ROT	GELB	GRÜN
Der Lieferant antwortet nicht auf Anfragen zum sozialen Engagement des Unternehmens. Fälle von Kinderarbeit beim Lieferanten sind dokumentiert.	Der Lieferant bestätigt, einen sozialen „Code of Conduct“ umzusetzen. Es gibt Hinweise auf Kinderarbeit beim Lieferanten.	Der Lieferant hat einen sozialen „Code of Conduct“, dessen Umsetzung unabhängig überprüft wird oder Der Lieferant bildet aus oder Der Lieferant beteiligt sich an sozialen Projekten außerhalb des Unternehmens

3.10 Substituierbarkeit

Das Kriterium Substituierbarkeit wird nur dann abgefragt, wenn die Ergebnisse der Bewertung der vorhergehenden Kriterien andeuten, dass der Stoff eine hohe Substitutionspriorität hat. Dies wird anhand der Ergebnisse der Zusammenfassung der Hauptkriterien auf der Ebene 2 entschieden.

- ▶ Die Substituierbarkeit wird bewertet, wenn mindestens eines der drei Kriterien „Besondere Besorgnis“, „Risikohinweise“ und „Wirkungen im Lebenszyklus“ als Ergebnis die Farbe Rot hat.
- ▶ Die Substituierbarkeit wird nicht bewertet, wenn diese Kriterien als Ergebnis nur die Farbe Grün haben oder die Farbe Gelb. Bei der Farbe Gelb wird ein Hinweis angezeigt, dass eine Substitution erwogen werden sollte, allerdings mit niedrigerer Priorität als bei Stoffen und Gemischen, die eine rote Bewertung haben.
- ▶ Wenn eines oder mehrere dieser drei Kriterien die Farbe „Rosa“ haben, sollte zuerst in einer Vertiefung versucht werden, die hier bestehenden Datenlücken zu schließen. Von dem Ergebnis diese Vertiefung hängt dann ab, ob das Kriterium „Substituierbarkeit“ bewertet wird oder nicht.

Durch dieses Vorgehen wird sichergestellt, dass bei der Bewertung zunächst die Fälle Vorrang haben, in denen es zu mindestens zu einem Ergebnis „Rot“ bei den aggregierten Kriterien kommt.

Für die Bewertung der Substituierbarkeit werden Leitfragen genutzt. Sie unterscheiden sich für Stoffe und Gemische.

- ▶ Formulierer werden eine Substitution von einzelnen Stoffen in ihrem Gemisch prüfen;
- ▶ Anwender eines Gemisches bzw. Händler werden eher prüfen, ob das Gemisch als Ganzes ersetzt werden kann.

Das Hauptkriterium Substituierbarkeit hat drei Unterkriterien, die eine Einschätzung über die Verfügbarkeit von Alternativen sowie die technischen Herausforderungen einer Substitution beziehen.

Verfügbarkeit von Alternativen: Eine Substitution wird erleichtert, wenn auf dem Markt bereits Alternativen (Stoffe, Gemische, aber auch nicht chemische Alternativen) für die jeweilige Anwendung verfügbar sind. Dies wird im ersten Unterkriterium geprüft. Ist dies der Fall (Ergebnis: Grün), brauchen die Unterkriterien 2 und 3 nicht mehr angewendet werden.

Charakteristika der Anwendung: Grundsätzlich (Ausnahmen bestätigen die Regel) ist eine Substitution schwieriger, wenn einer der folgenden Fälle vorliegt.

1. Der Stoff/das Gemisch ist ein
 - a. Verbrauchergemisch,
 - b. Prozesshilfsmittel oder
 - c. Soll in ein Erzeugnis integriert werden
2. Der Stoff/das Gemisch wird in Materialien/Erzeugnissen verwendet, die kompliziert aufgebaut sind. Je komplexer das „Gesamtsystem“ und je mehr Wechselwirkungen zwischen den Bestandteilen vorliegen, desto schwieriger wird es, einzelne Chemikalien auszutauschen.

3. Die Anwendungsbedingungen des „Endproduktes“ sind extrem (z. B. hohe Temperaturen oder starke mechanische Belastungen). Hieraus ergeben sich hohe Anforderungen an den Stoff und seine Ersatzstoffe bzw. das Gemisch und dessen Ersatzgemische.
4. Die Funktion eines Stoffes/Gemisches ist sehr spezifisch und wird (insgesamt gesehen) selten gebraucht. Dann werden vermutlich nur wenige Stoffe für diese Verwendung zur Verfügung stehen.

Regulatorischer Druck: Das Vorhandensein von Alternativen ist unwahrscheinlicher, je weniger ein Stoff in regulatorischen Aktivitäten berücksichtigt wurde, z. B. Stoffprüfungen oder Beschränkungen. In einigen Fällen, z. B. bei halogenierten Flammschutzmitteln, bezieht sich die Diskussion zu Ersatzstoffen zwar zunächst auf den Stoff. „Betroffen“ davon ist dann aber naturgemäß auch das Produkt als solches, das als „bromiertes Flammschutzmittel“ auf den Markt gebracht wird – und zu dem halogenfreie Alternativen angeboten werden.

Tabelle 53: Indikatoren für die Substituierbarkeit von Stoffen

Bewertung Unterkriterien	ROT	GELB	GRÜN
Verfügbarkeit von Alternativen	Keine Hinweise auf Alternativen (in Datenbanken etc.)	Vereinzelte Nennung von Alternativen in Datenbanken / Literatur	Informationen über direkt anwendbare Alternativen
Charakteristika der Verwendung ²⁸	<ul style="list-style-type: none"> Stoff wird in Gemisch eingesetzt mit >10 Inhaltsstoffen und/oder Endanwendung im Erzeugnis oder sehr spezifischen Prozesshilfsmitteln und/oder Sehr hohe Anforderungen durch die Einsatzbedingungen (z. B. sehr hohe Temperaturen, sehr hohe mechanische Belastungen) und/oder Stoff ist nicht verzichtbar und/oder Es gibt langwierige externe Prüf- und Freigabeverfahren für den Prozess oder das Erzeugnis und/oder Sehr spezifische oder sehr seltene Funktion 	<ul style="list-style-type: none"> Stoff wird in Gemisch eingesetzt mit 5-10 Inhaltsstoffen und/oder Endanwendung im Erzeugnis oder Prozesshilfsmittel aber potenziell ersetzbar Hohe Anforderungen durch Einsatzbedingungen (z. B. hohe Temperaturen, mechanische Belastungen) und/oder Es gibt kurze, externe Prüf- und Freigabeverfahren für Erzeugnis/Prozess und/oder Funktion wird in verschiedenen Verwendungen genutzt 	<ul style="list-style-type: none"> Stoff wird als solcher oder in Gemisch eingesetzt mit < 5 Inhaltsstoffen und/oder Einsatz als Stoff oder Gemisch ohne Integration in Erzeugnis und/oder keine besonderen Einsatzbedingungen (z. B. Raumtemperatur, keine mechanischen Belastungen) und/oder Keine externen Prüf- und Freigabeverfahren und/oder Sehr häufige Verwendung
Regulatorischer Druck	Der Stoff steht nicht auf der Kandidatenliste oder vergleichbaren regulatorischen Listen und wird nicht als Problemstoff diskutiert. / Die Substanzgruppe wird bisher	Der Stoff bzw. die Substanzgruppe werden seit 1 – 2 Jahren als problematisch diskutiert.	Der Stoff bzw. die Substanzgruppe werden seit mehr als 2 Jahren als Problemstoff diskutiert und/oder Der Stoff bzw. die Substanzgruppe steht

²⁸ Die Frage nach der Anzahl der Inhaltsstoffe wird lediglich den Formulierern gestellt, nicht den Anwendern. Allerdings ist unklar, ob die ein guter Indikator für die Schwierigkeit der Substitution ist.

Bewertung Unterkriterien	ROT	GELB	GRÜN
	nicht als problematisch diskutiert.		auf der Kandidatenliste, in REACH Anhang XIV, XVII oder vergleichbaren Listen

Tabelle 54: Indikatoren für die Substituierbarkeit von Gemischen

Bewertung Unterkriterien	ROT	GELB	GRÜN
Verfügbarkeit von Alternativen	Keine Hinweise auf Alternativen in Brancheninfos, bei Herstellern und/oder Händlern	Vereinzelte Nennung von Alternativen bei Herstellern und Händlern	Informationen über direkt anwendbare Alternativen sind vorhanden
Charakteristika der Verwendung	<ul style="list-style-type: none"> Anwendung als integraler Bestandteil im Erzeugnis oder spezifischem Prozesshilfsmittel und/oder Sehr hohe technische Anforderungen durch Einsatzbedingungen als Gemisch oder im Erzeugnis, z. B. sehr hohe Temperaturen, mechanische Belastungen und/oder Verwendung ist unverzichtbar Es gibt langwierige externe Prüf- und Freigabeverfahren für den Prozess oder das Erzeugnis und/oder Sehr spezifische oder sehr seltene Funktion des Gemisches 	<ul style="list-style-type: none"> Weniger bedeutender Bestandteil eines Erzeugnisses; Anwendung als für Prozesse wichtiges Prozesshilfsmittel und/oder Hohe Anforderungen durch die Einsatzbedingungen (z. B. hohe Temperaturen, mechanische Belastungen und/oder Verwendung ist wahrscheinlich verzichtbar Es gibt kurze, externe Prüf- und Freigabeverfahren für den Prozess oder das Erzeugnis und/oder Nicht sehr häufige Funktion 	<ul style="list-style-type: none"> Verwendung als nicht-maschinengebundenes Prozesshilfsmittel oder Verbrauchergemisch Und/oder Keine besonderen Einsatzbedingungen (z. B. Raumtemperatur) und/oder Verwendung ist verzichtbar Es gibt keine, externen Prüf- und Freigabeverfahren für den Prozess und/oder Häufige Funktionalität
Regulatorischer Druck	Stoff(e)/Stoffgruppen im Gemisch stehen nicht auf der Kandidatenliste oder vergleichbaren regulatorischen Listen und wird/werden nicht als Problemstoff diskutiert.	Stoff(e)/Stoffgruppen im Gemisch werden seit 1 – 2 Jahren als problematisch diskutiert.	Stoff(e)/Stoffgruppen im Gemisch werden seit mehr als 2 Jahren regulatorisch diskutiert und/oder Stehen auf einer regulatorischen Liste (z.B. REACH Kandidatenliste, Anhang XIV, XVII)

Umgang mit dem Ergebnis bei der Gesamtbewertung

Eine Zusammenführung der Substituierbarkeit mit den Ergebnissen anderer Kriterien ist nicht sinnvoll. Das Kriterium gibt im Fall kritischer Stoffe und Gemische eine Zusatzinformation, als wie aufwändig die Substitution eingeschätzt wird.

4 Weitere Erläuterungen zum Bewertungskonzept

4.1 Mangelnde Kenntnis über die Identität von Inhaltsstoffen in Gemischen

Im Sicherheitsdatenblatt nach EU-Einstufungs- und Kennzeichnungsverordnung bzw. global harmonisiertem System müssen nur die Bestandteile eines Gemisches aufgeführt werden, die als gefährlich eingestuft sind und deren Konzentrationen über den, für das Gefährlichkeitsmerkmal definierten, Berücksichtigungsgrenzen liegen. Formulierer kennen die Zusammensetzung ihrer Gemische nur dann nicht vollständig, wenn sie selber Gemische zur Formulierung ihrer Produkte einsetzen. Endanwender von Gemischen kennen hingegen in der Regel nur die Identität der als gefährlich eingestuften Inhaltsstoffe ihrer Gemische.

Damit sind den Möglichkeiten, die Nachhaltigkeit von Gemischen zu bewerten schon an der Basis – der Kenntnis der Inhaltsstoffe, enge Grenzen gesetzt. Die Farbe Rosa, die für Kriterien vergeben wird, für die Informationen fehlen, soll dazu motivieren, hier Informationen zu suchen und einzufordern. Allerdings gibt es für die Bereitstellung von Informationen über die Zusammensetzung von Gemischen keine rechtlichen Pflichten für die Lieferanten, wenn die Inhaltsstoffe nicht zur Einstufung des Gemisches beitragen. Dieses Problem ist nur politisch zu lösen.

Im Folgenden ist beschrieben, wie ChemSelect mit diesen Informationslücken umgeht.

4.1.1 Hauptkriterien mit Bezug zur Gefährlichkeit von Stoffen

Inhaltsstoffe, die nicht als gefährlich eingestuft sind, sind für die Bewertung der Stoffsicherheit grundsätzlich nicht von Bedeutung; daher sind hier die Informationslücken zunächst einmal hinnehmbar.

Allerdings bedeutet eine fehlende Einstufung eines Stoffes nicht notwendigerweise, dass er keine gefährlichen Eigenschaften hat. Eine fehlende Einstufung kann auch durch das Fehlen von Testdaten begründet sein, die Nichtbefolgung gesetzlicher Vorgaben durch die Hersteller bzw. Lieferanten, oder das Fehlen von Vorgaben zur Einstufung (z. B. Länder, in denen das GHS nicht umgesetzt ist). Diese Ungewissheit über das Vorhandensein kann von ChemSelect nicht verringert werden.

Bei der Ergebnisausgabe wird angegeben, welcher Anteil des Gemisches bewertet ist, bzw. welcher Anteil nicht in der Bewertung berücksichtigt wurde (Anteil von Stoffen, die potenziell gefährliche Eigenschaften haben könnten, als Maß für die Unsicherheit in der Bewertung (ohne Wasser)).

4.1.2 Lebenswegbezogene Hauptkriterien

Nicht als gefährlich eingestufte Stoffe sind für die Bewertungen der Wirkungen entlang des Lebensweges wichtig. So kann z. B. Glukose (nicht als gefährlich eingestuft), Treibhausgasemissionen entlang seines Lebensweges verursachen.

Bei den Hauptkriterien, für die alle Inhaltsstoffe eine Wirkung haben können, ist in der Regel eine „vollständige“ Bewertung von Gemischen, d. h. die Bewertung aller Inhaltsstoffe des Gemisches²⁹, für die Anwender von Gemischen nicht möglich, da die Inhaltsstoffe nicht vollständig bekannt sind (s.o.).

²⁹ Beim Unterkriterium „Ozonschädigende Wirkung“ führen kritische Werte zu einer Einstufung des Stoffes als Gefahrstoff. Daher sind diese Stoffe aufgrund der Einstufung bekannt und können bewertet werden.

Grundsätzlich sollten bei den lebenswegbezogenen Kriterien alle Stoffe bewertet werden, für die Informationen vorliegen (also auch diejenigen, welche keine chemikalienrechtlichen Einstufungen haben). Während Formulierer i.d.R. ausreichend über die Identität der Inhaltsstoffe ihrer Gemische haben, könnten Unternehmen, die die Gemische anwenden ihre Lieferanten nach weitergehenden Informationen über die Inhaltsstoffe des Gemisches zu fragen, z. B. nach der Komponente mit dem größten Prozentanteil, und dann einen höheren Anteil des Gemisches bzw. der Inhaltsstoffe in die Bewertung einbeziehen.

Allerdings ist davon auszugehen, dass dies nur selten geschieht. Um den Arbeitsaufwand einzugrenzen (und damit zu erreichen, dass die Kriterien überhaupt bewertet und nicht übersprungen werden), wird daher für die lebenswegbezogenen Hauptkriterien vorgeschlagen:

- ▶ die Bewertung auf Stoffe einzugrenzen, die mindestens einen Anteil von 10% an den Bestandteilen eines Gemisches haben (bezogen auf die Masse der Inhaltsstoffe des Gemisches ohne Wasser);
- ▶ Wenn mehr als 25% der Inhaltsstoffe eines Gemisches (bezogen auf die Masse der Inhaltsstoffe ohne Wasser) nicht bewertet werden können, ist keine Aussage zum Gemisch möglich; das jeweilige Unterkriterium wird mit rosa bewertet
- ▶ Falls in einem Gemisch viele Inhaltsstoffe enthalten sind mit Anteilen unter 10%, wird darauf hingewiesen und es sollte versucht werden, die mengenmäßig bedeutenderen Stoffe zu bewerten und dadurch die 75% Marke zu erreichen.

4.2 Fehlende Kenntnis der genauen Konzentration von Inhaltsstoffen

Sind die genauen Konzentrationen der Inhaltsstoffe eines Gemisches bekannt so werden diese in ChemSelect für alle Berechnungen verwendet.

Sind die genauen Konzentrationen nicht bekannt, muss mit den in den Sicherheitsdatenblättern enthaltenen Bandbreiten gearbeitet werden. Werden Konzentrationsbandbreiten eingegeben sind, so werden diese in ChemSelect wie folgt verwendet:

- ▶ Bei Kriterien, die einen Bezug zu Gefährlichkeitsmerkmalen haben, werden die maximalen Konzentrationen verwendet. Dies zu einer Überschätzung der Gefahr führen, ist aber im Sinne einer Vorsorgeorientierung und konservativen so gewollt.
- ▶ Bei Kriterien, die sich auf weitere Umweltwirkungen beziehen wird mit den Mittelwerten der Konzentrationen gerechnet. Dies kann sowohl zu einer Unter- als auch einer Überschätzung der Wirkung führen, je nachdem ob die reale Konzentration höher oder niedriger als der Mittelwert der Bandbreite liegt.³⁰

Sollte die Summe der Mittelwerte der Konzentrationen den Wert von 100 überschreiten, gibt ChemSelect eine Fehlermeldung aus und bittet um manuelle Eingabe/Korrektur der Konzentrationen.

Bei der Angabe der Ergebnisse berechnet ChemSelect den Anteil des Gemisches, für den Informationen fehlen. Dies erfolgt im Sinne einer konservativen Abschätzung jeweils anhand der minimalen Konzentrationen der Stoffe im Gemisch, um die Unsicherheit in der Bewertung aufzuzeigen.

³⁰ Es wurde davon abgesehen den worst case abzubilden (Konzentrationsobergrenze), da in diesem Bereich die insgesamt mehr Unsicherheiten bestehen.

Wenn ein Stoff nicht oder nur aufgrund relativ wenig gefährlicher Eigenschaften (z. B. lokale, reversible Gesundheitswirkung) eingestuft ist, wird er als „ungefährlich“ oder „inhärent sicher“ bezeichnet. Nicht für alle Verwendungen stehen solche, inhärent sicheren Stoffe zur Verfügung. Bei der vergleichenden Bewertung von Stoffen kommt der Anwesenheit oder dem Fehlen gefährlicher Eigenschaften eine große Bedeutung zu. Darum wird an ChemSelect bei mehreren Kriterien auf das Thema „Chemische Sicherheit“ geachtet. Dies wird in den folgenden Abschnitten dargestellt.

4.3 „Inhärente Sicherheit“ in den Haupt- und Unterkriterien

Die hohe Bedeutung der inhärenten Sicherheit von Chemikalien wird durch die Anzahl der Kriterien deutlich, welche die Stoffeigenschaften adressieren oder berücksichtigen. Insgesamt beziehen sich vier Hauptkriterien auf die inhärente Stoffsicherheit:

1. Stofflisten
2. Physikalisch-chemische Eigenschaften
3. Humantoxizität und
4. Umwelttoxizität.

Auch das Hauptkriterium „Kreislauffähigkeit“ adressiert problematische Stoffeigenschaften im Unterkriterium „Potenzial, Sekundärmaterialien zu kontaminieren“. Allerdings wird hier nicht das Prinzip des „Vorrangs von Rot“ angewendet, sondern es ist möglich, eine rote Bewertung durch z. B. eine grüne im Bereich des Potenzials, zurückgewonnen zu werden, auszugleichen.

4.4 „Vorrang von Rot“ bei gefährlichen Eigenschaften bei Gemischen

Grundsätzlich werden für die Bewertung von Gemischen die gleichen Kriterien angewendet wie für die Bewertung von Einzelstoffen.

Auch bei Gemischen wird sichergestellt, dass kritische Bewertungen („rot“) bei einem Unterkriterium oder einem Stoff nicht durch gute Bewertungen („grün“) verdünnt werden können. Das Prinzip des „Vorrangs von Rot“ gilt auch hier. Es wird bei den Hauptkriterien angewendet, bei denen es um die gefährlichen Eigenschaften des Gemisches geht (Nennung auf Problemstofflisten, Humantoxizität, Umwelttoxizität).

Bei der Ermittlung von Rängen im Nachhaltigkeitsvergleich werden die Konzentrationen der Stoffe im Gemisch berücksichtigt. Im Vergleich sind die Gemische weniger gefährlich, die gefährliche Inhaltsstoffe in niedrigeren Konzentrationen enthalten. Sie bekommen einen besseren Rang bei den oben genannten vier Kriterien, die sich auf die gefährlichen Eigenschaften der Stoffe und des Gemisches beziehen.

A Anhänge

A.1 Formeln zur Berechnung des Expositionspotenzials

In der folgenden Tabelle sind die jeweils spezifischen Formeln für die Ermittlung der detaillierten Expositionspotenziale aufgeführt. Je nach Schutzgut, Lebenszyklusschritt und Expositionspfad sind bestimmte Faktoren für die Beeinflussung der Exposition relevant. Nicht relevante Faktoren sind in der jeweiligen Formel nicht aufgeführt.

Tabelle 55: Formeln zur Berechnung des Expositionspotentials

Schutzgut, Lebenszyklusschritt	Formel	Kommentar
Arbeiter Formulierung, dermal	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_T * F_M$	
Arbeiter Formulierung, inhalativ	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_T * F_M$	Wenn NICHT Gas oder Flüssigkeit → F_{mob} = Staubigkeit, sonst Dampfdruck
Arbeiter Verwendung Gemisch, dermal	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_M * F_T$	
Arbeiter Verwendung Gemisch, inhalativ	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} → Wenn Fest --> Staubigkeit, sonst Dampfdruck
Arbeiter Verarbeitung Erzeugnis, dermal	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_T$	
Arbeiter Verarbeitung Erzeugnis, inhalativ	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_T$	F_{mob} aus Dampfdruck
Arbeiter Service life, dermal	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_T$	
Arbeiter Service life, inhalativ	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_{mob} * F_T$	F_{mob} aus Dampfdruck
Arbeiter Abfall, dermal	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc}$	
Arbeiter Abfall, inhalativ	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_{mob}$	F_{mob} aus Dampfdruck
Verbraucher, Verwendung Gemisch, dermal	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_M * F_T$	
Verbraucher, Verwendung Gemisch, inhalative	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} aus Staubigkeit (wenn fest) oder Dampfdruck
Verbraucher, Verwendung Gemisch, oral	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_M * F_T$	
Verbraucher, Service life, dermal	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_T$	
Verbraucher, Service life, inhalative	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_{mob} * F_T$	F_{mob} ableiten aus Dampfdruck
Verbraucher, Service life, oral	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{conc} * F_T$	
Umwelt, Formulierung, Wasser	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Wasserlöslichkeit F_M aus Formulierungsmenge F_T aus Abbaubarkeit

Schutzgut, Lebenszyklusschritt	Formel	Kommentar
Umwelt, Formulierung, Luft	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Dampfdruck F_M aus Formulierungsmenge F_T aus Halbwertszeit Luft
Umwelt, Formulierung, Boden	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Dampfdruck
Umwelt, Verwendung Gemisch, Wasser	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Wasserlöslichkeit F_M aus Formulierung/Anwendung F_T aus Abbaubarkeit
Umwelt, Verwendung Gemisch, Luft	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Dampfdruck F_M aus Formulierung/Anwendung F_T aus Halbwertszeit Luft
Umwelt, Verwendung Gemisch, Boden	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Dampfdruck F_M aus Formulierung/Anwendung F_T aus Abbaubarkeit
Umwelt, Verarbeitung Erzeugnis, Wasser	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Wasserlöslichkeit F_M aus Anwendung F_T aus Abbaubarkeit
Umwelt, Verarbeitung Erzeugnis, Luft	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Dampfdruck F_M aus Anwendung F_T aus Halbwertszeit Luft
Umwelt, Verarbeitung Erzeugnis, Boden	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Dampfdruck F_M aus Anwendung F_T aus Abbaubarkeit
Umwelt, Service Life, Wasser	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Wasserlöslichkeit F_M aus Anwendung F_T aus Abbaubarkeit
Umwelt, Service Life, Luft	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Dampfdruck F_M aus Anwendung F_T aus Halbwertszeit Luft
Umwelt, Service Life, Boden	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Dampfdruck F_M aus Anwendung F_T aus Abbaubarkeit
Umwelt, Abfall, Wasser	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Wasserlöslichkeit F_M aus Anwendung F_T aus Abbaubarkeit
Umwelt, Abfall, Luft	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Dampfdruck F_M aus Anwendung F_T aus Halbwertszeit Luft
Umwelt, Abfall, Boden	$EP_{T,S} = R_{T,S} * F_{mob} * F_M * F_T$	F_{mob} = Dampfdruck F_M aus Anwendung F_T aus Abbaubarkeit

A.2 Auswahl von Freisetzungsszenarien

Die Auswahl und Ermittlung der Anwendungsszenarien unterscheidet sich für die drei Schutzgüter. Für die Anwendung von Stoffen und Gemischen werden die jeweils relevanten Expositionstreiber abgefragt. Auch für die Umwelt werden in einem Nutzerdialog für das Anwendungsszenario die zentralen Parameter abgefragt. Für den Verbraucherschutz werden für die Anwendung von Gemischen sowie die Nutzung von Erzeugnissen (service life) jeweils einige, generisch beschriebene Szenarien zur direkten Auswahl angeboten.

A.2.1 Arbeitsplatz

Die folgenden prozessbedingten Expositionstreiber, die nicht als Faktoren in der Formel zur Ermittlung des Expositionspotenzials eingehen werden abgefragt und zur Ermittlung des Freisetzungspotenzials verwendet:

1. Einhausung des Prozesses: offen, halb-offen, geschlossen
2. Grad der Automatisierung bzw. Anteil manueller Tätigkeiten
3. Temperatur und/oder Input mechanischer Energie (Reibung)
4. Bildung von Aerosolen oder Stäuben

Sind Felder weiß belassen, sind die jeweiligen Faktoren für die Exposition nicht relevant. Sind mehrere Faktoren eingefärbt, werden die jeweils striktesten Ergebnisse genutzt.

Tabelle 56: Parameter für generische Freisetzungs- und Kontaktszenarien – Arbeiter

Parameter	Prozess offen		Prozess halb-offen		Prozess geschlossen	
Expositionsweg	Inhalation	Dermal	Inhalation	Dermal	Inhalation	Dermal
Kaum manuelle Tätigkeiten						
Überwiegend manuelle Tätigkeiten						
Temperatur >> Raumtemperatur						
Temperatur > Raumtemperatur						
Raumtemperatur						
Hohe Reibung / Einsatz hoher mechanische Energie						
Reibung existiert / Einsatz von mechanischer Energie						
Keine Reibung, keine mechanischen Prozesse						
Bildung von Aerosolen						
Bildung von Stäuben						
Verwendung im Labor oder unter strikt kontrollierten Bedingungen						

A.2.2 Verbraucher

Die Anwendungsbedingungen bei Stoffen und Gemischen für Verbraucher sind in der Regel durch die Art des Gemisches determiniert. Zu den Faktoren, die die Freisetzung bestimmen, die nicht über Faktoren der Formel zur Berechnung des Expositionspotenzials mit ChemSelect abgedeckt sind, gehören:

1. Anwendung mit Bildung von Aerosolen (Sprays) oder Dämpfen (hohe Temperatur, große Oberflächen)
2. Intendierter oder indirekter Hautkontakt

3. Produkte, die langfristig in der direkten Umgebung von Verbrauchern verbleiben

Die folgende Tabelle zeigt die Bewertung verschiedener Produktarten, die teilweise nach Expositionspfaden und/oder Anwendungsbedingungen unterschieden sind für Stoffe und Gemische. Der Anwender kann eine Option auswählen, die bewerteten Produkt am nächsten kommt.

Tabelle 57: Freisetzungs- und Kontaktzentarien für das Schutzgut Verbraucher (Stoffe/Gemische)

Besonderheiten von Produkt und Anwendungsbedingungen	Inhalation	Dermal	Oral
Gasförmige Produkte (z.B. Feuerzeuggas)			
Sprays (z.B. Haarspray; Spraylacke) und/oder feine, staubende Pulver (z.B. Puder) sowie Gemische die während der Verwendung zerstäubt werden (z.B. Glasreiniger)			
Gemische, die großflächig (> 3 m ²) in Innenräumen (auch z. B. in Verkehrsmitteln (Autos)) verwendet werden, mit langer Verweildauer im Innenraum, z.B. Wandfarben, Lacke von Möbeln, Fußbodenkleber			
Gemische, die bei hoher Temperatur angewendet werden (Heißkleber, Ofenspray etc.)			
Gemische, die kleinflächig (< 3m ²) in Innenräumen verwendet werden, mit kurzer Verweildauer, z.B. Möbelpolitur, Lederpflegemitteln für Autositze			
Kosmetische Produkte und Gemische, bei denen vorgesehen ist, dass sie mit direktem Hautkontakt verwendet werden (z.B. Fingerfarben, Knete)			
Gemische, bei deren Verwendung es zum Kontakt der Haut auf einer Fläche von mindestens beiden Händen kommt, z.B. Reinigungsmittel			
Gemische, bei denen in der Verwendung direkter, kleinflächiger Hautkontakt (weniger als 2 Hände) besteht oder möglich ist (Klebstoffe, Tinten), aber kein direkter oder indirekter Kontakt zu Lebensmitteln möglich ist			
Gemische, bei denen in der Verwendung direkter, kleinflächiger Hautkontakt besteht oder möglich ist, und wo ein Kontakt mit Lebensmitteln möglich / wahrscheinlich ist (Geschirrspülmittel, Reinigungsmittel für den Ofen)			
Gemische, wo ein Hautkontakt möglich ist, weil es auf zugänglichen Oberflächen aufgetragen wird oder auf Anhaftungen unbeabsichtigt verbleibt (z.B. Beschichtungen für Gartenmöbel, Waschmittel auf Textilien)			
Gemische die für den Kontakt mit dem Mundraum oder Lebensmitteln vorgesehen sind (z.B. Lebensmittelfarben, Atemsprays)			

Bei den Erzeugnissen begründen sich die Unterscheidungen bei Expositionsmuster und -intensität durch:

1. Vorhandensein von Lebensmittelkontakt
2. Körpernähe der Anwendung des Erzeugnisses
3. Nutzung in Innenräumen oder draußen
4. Größe der Oberfläche, aus der Stoffe aus Erzeugnissen migrieren können
5. Einkapselung von Stoffen/Gemischen
6. Anwendungstemperatur

Der Anwender kann eine der angezeigten Optionen auswählen

Tabelle 58: Freisetzungs- und Kontaktzentarien für Erzeugnisse für das Schutzgut Verbraucher

Das Erzeugnis ...	Inhalation	Dermal	Oral
Beinhaltet den bewerteten Stoff (im Gemisch) innerhalb des Produktes so, dass es nicht mit dem Verbraucher in Kontakt kommen kann (z. B. Elektronische Bauteile in Produkten, Motorbestandteile im Auto, Gase in Neonröhren, Kuhlflüssigkeit im Kühlschrank)			
Wird im Lebensmittelkontakt verwendet und a) hat eine Oberfläche > 10cm ² oder b) wird bei > 50°C angewendet oder c) wird normalerweise direkt in den Mund genommen Beispiele: Verpackungen, Pfannen, Babyflaschen			
Wird im Lebensmittelkontakt verwendet und a) hat eine Oberfläche < 10cm ² und b) wird bei < 50°C angewendet und c) wird normalerweise nicht in den Mund genommen Beispiel: Dichtungen in Flaschendeckeln, Kühlschrankinterieur			
Kinderspielzeuge			
Wird im direkten Hautkontakt und/oder nah am Körper verwendet, z.B. Bekleidung, Sanitärpapiere, Matratzen, Armbanduhr, Schmuck			
Hat eine kurze Lebensdauer (< 0,5 Jahre) und wird durch Verbraucher gelegentlich/ über einen kurzen Zeitraum angefasst, z. B. Zeitung, Verpackungen (nicht im Lebensmittelbereich)			
Hat eine längere Lebensdauer (> 0,5 Jahre) und wird im Innenraum verwendet (einschließlich z.B. im Innenraum eines Autos) und hat eine Oberfläche > 3 m ²			
Hat eine längere Lebensdauer (> 0,5 Jahre) und wird entweder draußen verwendet / aufbewahrt (ohne Hautkontakt), oder hat eine Oberfläche < 3m ² und wird im Innenraum verwendet			

A.2.3 Umwelt

Die Exposition der Umwelt gegenüber Stoffen als solchen, in Gemischen und in Erzeugnissen kann nach den folgenden expositionsbestimmenden Parametern differenziert werden:

1. Einsatz in wenigen Industrieanlagen oder weitverbreitet (gewerbliche Anwendung und/oder durch Verbraucher)
2. Vorhandensein von Wasserkontakt, Bildung von Stäuben und/oder Dämpfen
3. Bindung an Matrices (Erzeugnisse)
4. Verbleib in der Umwelt

Die relevanten Lebenszyklusschritte ergeben sich aus dem Anwendungsszenario. Die Abfrage wird für jeden Lebenszyklusschritt separat durchgeführt. Wird ein Stoff/Gemisch in gewerblichen Anwendungen eingesetzt, wird die industrielle Verwendung nicht abgefragt, da hierdurch der worst case bzgl. der Umweltemissionen abgebildet wird. Die Indikatoren basieren auf Expert*innenbewertung und lehnen sich an die Regeln der Umweltrisikobewertung auf EU-Ebene an.

Grundsätzlich werden industrielle Anwendungen wie gewerbliche bewertet, jedoch das Expositionspotenzial eine Farbkategorie „besser“ angenommen. Besteht Wasserkontakt, wird der Wasserpfad mit rot bewertet. Erhöhte Temperaturen oder Aerosolbildung führen zu einer gelben Bewertung der Luft, ansonsten wird diese meist mit grün bewertet. Direkte Anwendungen in der Umwelt führen zur Bewertung mit rot.

Die Bewertungslogik ist in der folgenden Abbildung dargestellt.

In der folgenden Abbildung ist der Nutzerdialog dargestellt. Die erste Spalte beinhaltet eine Referenznummer; nach Beantwortung einer Frage “springt” der Dialog zu der Nummer, die entweder in der Spalte “TrueStep” steht (Antwort ist “Ja”) oder in der Spalte “FalseStep” (Antwort ist “Nein”). In den letzten 6 Spalten sind die Ergebnisse bzgl. der Freisetzung als Zahl und Farbe dargestellt für jeweils die Antwort “Ja” (True) oder “Nein” (False). Eine schwarze Null bedeutet, dass die Bewertungszahl erst in einem späteren Schritt ermittelt wird.

Abbildung 5: Nutzerdialog zur Ermittlung der Freisetzung in die Umwelt: Formulierung und Verwendung von Gemischen als Prozesshilfsmittel

ID	Thema	Text	TrueStep	FalseStep	Water	Soil	Air	Water	Soil	Air
1900	A Formulierung	Behandeln Sie in ihrem Betrieb Abwasser und Abgas aus der Formulierung bevor sie in Kanalisation und Luft abgegeben werden?	1910	1920	0	1	0	0	1	0
1910	A Formulierung	Wenn ja, Gibt es bei den Verfahren Wasserkontakt?	2000	2000	2	1	1	1	1	1
1920	A Formulierung	Wenn nein, gibt es bei den Verfahren Wasserkontakt?	2000	2000	3	1	3	1	1	3
2000	B1 Verwendung von Gemischen	Wird der Stoff/das Gemisch direkt in der Umwelt verwendet (Bsp. Chemikalien für Kläranlagen, Baumaterialien, die außen an Gebäuden verwendet werden, Straßen)	9999	2010	5	5	3	0	0	0
2010	B1 Verwendung von Gemischen	Werden Stoff/Gemisch nach Gebrauch mit dem Abwasser entsorgt (z. B. Geschirrspülmittel, Shampoo)?	9999	2011	5	1	1	0	0	0
2011	B1 Verwendung von Gemischen	Wird der Stoff/das Gemisch während/nach Gebrauch größtenteils in die Luft freigesetzt?	9999	2020	1	1	5	0	0	0
2020	B1 Verwendung von Gemischen	Werden Stoff/Gemisch direkt in/auf den Boden aufgebracht (z. B. Düngemittel)?	9999	2030	3	3	3	1	1	1
2030	B1 Verwendung von Gemischen	Wird der Stoff/das Gemisch von gewerblichen Anwendern in (kleinen, nicht-industriellen Anlagen) als Prozesshilfsmittel verwendet?	2040	2060	0	3	0	0	1	0
2040	B1 Verwendung von Gemischen	Ist der Prozess wasserbasiert?	6002	2050	3	0	3	1	0	0
2050	B1 Verwendung von Gemischen	Ist der Prozess geschlossen / in der Regel eingehaust?	6002	6002	0	0	1	0	0	3
2060	B1 Verwendung von Gemischen	Ist der Prozess wasserbasiert?	6002	2070	1	0	1	1	0	0
2070	B1 Verwendung von Gemischen	Ist der Prozess geschlossen / in der Regel eingehaust?	6002	6002	0	0	1	0	0	3

Abbildung 6: Nutzerdialog zur Ermittlung der Freisetzung in die Umwelt: Verwendung von Gemischen und Verarbeitung von Erzeugnissen

ID	Thema	Text	TrueStep	FalseStep	Water	Soil	Air	Water	Soil	Air
3002	B2 Verwendung von Gemischen mit Integration in Erzeugnisse	Wird der Stoff / das Gemisch von Verbrauchern verwendet?	3010	3040	0	0	0	0	0	0
3010	B2 Verwendung von Gemischen mit Integration in Erzeugnisse	ALS VERBRAUCHER: Werden Stoff/Gemisch zur Herstellung von Erzeugnissen im Innenraum und/oder zur Renovierung, Bauen im Innenraum verwendet?	3020	3040	0	1	1	3	3	3
3020	B2 Verwendung von Gemischen mit Integration in Erzeugnisse	ALS VERBRAUCHER: Kommen die hergestellten Produkte/Flächen regelmäßig mit Wasser in Kontakt?	3040	3040	3	0	0	1	0	0
3040	B2 Verwendung von Gemischen mit Integration in Erzeugnisse	Wird der Stoff/das Gemisch von gewerblichen Anwendern in (kleinen, nicht-industriellen Anlagen) angewendet und dabei Teil eines Erzeugnisses, inklusive als Beschichtung oder Kleber?	3050	3080	0	0	0	0	0	0
3050	B2 Verwendung von Gemischen mit Integration in Erzeugnisse	Ist der Verarbeitungsprozess wasserbasiert?	4002	3060	4	2	2	3	0	0
3060	B2 Verwendung von Gemischen mit Integration in Erzeugnisse	Ist der Prozess geschlossen / in der Regel eingehaust?	4002	3070	0	1	1	0	0	0
3070	B2 Verwendung von Gemischen mit Integration in Erzeugnisse	Wird der Prozess bei Temperaturen > 100 °C durchgeführt und/oder werden große Oberflächen hergestellt / bearbeitet?	4002	4002	0	1	3	0	2	2
3080	B2 Verwendung von Gemischen mit Integration in Erzeugnisse	Ist der Prozess wasserbasiert?	4002	3090	3	1	1	1	0	0
3090	B2 Verwendung von Gemischen mit Integration in Erzeugnisse	Ist der Prozess geschlossen / in der Regel eingehaust?	4002	3100	0	1	1	0	0	0
3100	B2 Verwendung von Gemischen mit Integration in Erzeugnisse	Wird der Prozess bei Temperaturen > 100 °C durchgeführt und/oder werden große Oberflächen hergestellt / bearbeitet?	4002	4002	0	1	2	0	1	1
4002	C Verarbeitung von Erzeugnissen	Wird das Erzeugnis, das den Stoff/das Gemisch enthält von gewerblichen Anwendern in (kleinen, nicht-industriellen Anlagen) ver-/bearbeitet?	4010	4030	0	1	0	0	1	0
4010	C Verarbeitung von Erzeugnissen	Ist der Prozess wasserbasiert?	5002	4020	4	0	1	2	0	0
4020	C Verarbeitung von Erzeugnissen	Entstehen bei dem Prozess Stäube oder wird bei Temperaturen > 100 °C gearbeitet?	5002	5002	0	0	3	0	0	1
4030	C Verarbeitung von Erzeugnissen	Ist der Prozess wasserbasiert?	5002	4040	2	0	1	1	0	0
4040	C Verarbeitung von Erzeugnissen	Ist der Prozess geschlossen / in der Regel eingehaust?	5002	4050	0	0	1	0	0	0
4050	C Verarbeitung von Erzeugnissen	Entstehen bei dem Prozess Stäube oder wird bei Temperaturen > 100 °C gearbeitet?	5002	5002	0	0	2	0	0	1

Abbildung 7: Nutzerdialog zur Ermittlung der Freisetzung in die Umwelt: Service life von Erzeugnissen und Behandlung von Chemikalienabfällen

ID	Thema	Text	TrueStep	FalseStep	Water	Soil	Air	Water	Soil	Air
5002	D Service life	Wird das Produkt/Erzeugnis direkt in der Umwelt/draußen verwendet und verbleibt dort sehr lange (Bsp. Erdkabel, Zäune, Parkbänke)?	9999	5010	5	5	5	0	0	0
5010	D Service life	Wird das Erzeugnis, das den Stoff/das Gemisch enthält in Innenräumen verwendet?	5020	5050	0	0	0	0	0	0
5020	D Service life	Sind Stoff/Gemisch im Erzeugnis fest gebunden (Stoff/Gemisch sind das Material (z. B. Polymere); Additive, die mit der Matrix reagieren, Metalle)?	6020	5030	1	1	1	0	0	0
5030	D Service life	Kommt das Erzeugnis regelmäßig intensiv mit Wasser in Kontakt (z. B. Waschen von Textilien)?	6020	5040	3	1	1	0	0	0
5040	D Service life	Kommt das Erzeugnis gelegentlich mit Wasser in Kontakt (z. B. Reinigung von Fußböden)?	6020	6020	2	1	1	1	1	1
5050	D Service life	Sind Stoff/Gemisch im Erzeugnis fest gebunden (Stoff/Gemisch sind das Material (z. B. Polymere; Additive, die mit der Matrix reagieren, Metalle)?	6020	5060	2	2	2	0	0	0
5060	D Service life	Kommt das Erzeugnis regelmäßig intensiv mit Wasser in Kontakt (z. B. Nutzung von Erzeugnissen im Wasser oder im Freien, Regenrinnen, Hausfassaden etc.)?	6020	6020	3	1	1	1	2	2
6002	E Abfallbehandlung Chemikalien	Wird der Stoff / das Gemisch zur erneuten Verwendung aufbereitet?	9999	6010	3	1	1	0	0	0
6010	E Abfallbehandlung Chemikalien	Wird das Gemisch als gefährlicher Abfall entsorgt?	9999	9999	1	1	1	3	3	3
6020	E Abfallbehandlung Chemikalien	Wird das Erzeugnis mit dem Stoff / dem Gemisch einem Recycling zugeführt?	6030	9999	0	0	0	3	3	3
6030	E Abfallbehandlung Chemikalien	Sind die Produkte, in denen der Stoff/das Gemisch enthalten sind, einfach, d. h. bestehen aus wenigen Teilen/Materialien, und/oder gibt es etablierte Verfahren und einen standardisierten oder „geregelten“ Entsorgungsweg für den Produkttyp (z. B. Papier, Glasflaschen, Metallbehälter)?	6040	9999	0	0	0	3	3	3
6040	E Abfallbehandlung Chemikalien	Handelt es sich bei dem Material um Papier?	9999	6050	3	1	1	0	0	0
6050	E Abfallbehandlung Chemikalien	Handelt es sich bei dem Material um Glas oder Metall?	9999	9999	1	1	1	3	3	3
9999	Ende / Finish	Ende des Dialogs	9999	9999	0	0	0	0	0	0

A.3 Treibhausgasemissionen von Stoffen

Die folgende Tabelle nennt für einige häufig eingesetzte Stoffe die Höhe der Treibhausgasemissionen. Angegeben wird sie als Kilogramm CO₂-Äquivalente, die mit der Herstellung von einem Kilogramm des Stoffes verbunden sind. Die Werte stammen aus der Ökobilanzdatenbank ProBas des Umweltbundesamtes. Es wird folgende Bewertung vorgenommen:

- ▶ Werte unter 1 kg CO₂-Äquivalenten/kg Stoff: Farbe Grün.
- ▶ Werte zwischen 1 und 10 kg CO₂-Äquivalenten/kg Stoff: Farbe Gelb.
- ▶ Werten über 10 kg CO₂-Äquivalenten/kg Stoff: Farbe Rot.

Tabelle 59: Treibhausgasemissionen von Stoffen in den Kategorien rot, gelb und grün

Stoffbezeichnung	kg CO ₂ -Äq/kg Stoff	Farbe
Anorganisch; Keine Information	1,9	Gelb
Asphalt	0,197	Grün
Bauxit – Importmix	0,195	Grün
Biozide	25,5	Rot
Calciumchlorid CaCl ₂ (hochrein)	0,535	Grün
Calciumhydroxid Ca(OH) ₂	0,802	Grün
Chlor	1,02	Grün
Chlor (Mix)	0,512	Grün
Destilliertes Wasser	0,528	Grün
Flußsäure (hochrein)	-0,457	Grün
Formaldehyd	0,452	Grün
Harnstoff	0,671	Grün
Industriediamanten	7603884	Rot
Kohlenmonoxid, CO	4,11	Gelb
Lösemittel (hochrein)	2,61	Gelb
Melamin	1,05	Gelb
Metallisierungspaste	0,0302	Grün
Methanol-Stoff	0,509	Grün
NaOH mix	0,441	Grün

Stoffbezeichnung	kg CO ₂ -Äq/kg Stoff	Farbe
Natriumsilikat	1,9	Gelb
NF3 (hochrein)	21,8	Rot
Organisch; Keine Information	1,9	Gelb
P4 (Phosphor)	8,67	Gelb
PEG+DPM (hochrein)	2,24	Gelb
Pflanzenschutzmittel	5,37	Gelb
Phenol	1,98	Gelb
Phosphorpaste	0,0543	Grün
Phosphorsäure	3,04	Gelb
Phosphortrichlorid	3,08	Gelb
POCl ₃ (hochrein)	4,79	Gelb
Polypropylen-Granulat	1,97	Gelb
Propylenglycol	1,8	Gelb
PVC		Grün
Russ	0,394	Grün
Salpetersäure	1,64	Gelb
Sauerstoff (flüssig)	0,408	Grün
Schwefelsäure	-0,367	Grün
SF ₆ (hochrein)	10,1	Gelb
SiC	1,19	Gelb
SiC (hochrein)	5,99	Gelb
SiCl ₄	4,58	Gelb
Silan (hochrein)	53,1	Rot
Silizium (technisch)	9,56	Gelb
Silizium-EG	61,5	Rot
Soda	1,13	Gelb
Stickstoff (flüssig)	0,4	Grün
Tetrachlorkohlenstoff	1,49	Gelb

Stoffbezeichnung	kg CO2-Äq/kg Stoff	Farbe
Thermo-Öl	7,15	Gelb
Toluol	1,71	Gelb
Tonerde	1,15	Gelb
Wasserstoff	1,7	Gelb
Wasserstoff, H2-Stoff	8,71	Gelb
Wasserstoffperoxid	5,46	Gelb
Xylol	1,71	Gelb

A.4 Energieverbrauch für die Herstellung von Stoffen

Die folgende Tabelle nennt für einige häufig eingesetzte Stoffe die Höhe des Energieverbrauchs, der mit der Herstellung verbunden ist. Angegeben wird der Energieverbrauch in der Einheit Mega-Joule/Kilogramm Stoff. Die Werte stammen aus der Ökobilanzdatenbank ProBas des Umweltbundesamtes. Es wird folgende Bewertung vorgenommen:

- ▶ Energieverbrauch unter 10 MJ/kg Stoff: Farbe Grün.
- ▶ Energieverbrauch zwischen 10 und 50 MJ/kg Stoff: Farbe Gelb.
- ▶ Energieverbrauch über 100MJ/kg Stoff: Farbe Rot.

Tabelle 60: Energieverbrauch für die Herstellung von Stoffen in den Kategorien rot, gelb und grün

Stoffbezeichnung	MJ/kg	Farbe
2-Propanol (hochrein)	10.8	Gelb
Aluminiumfluorid	0.65	Grün
Ammoniak	0.07	Grün
Ammoniumnitrat	0.18	Grün
Anorganisch; Keine Information	27.1	Gelb
Asphalt	6.28	Grün
Benzol	10	Gelb
Biozide	281	Rot
C2F6 (hochrein)	152	Rot
Calciumchlorid CaCl ₂ (hochrein)	0.01	Grün
Calciumhydroxid Ca(OH) ₂	0.17	Grün
CF ₄ (hochrein)	153	Rot
Chlor	16.7	Gelb
Chloroform	26.1	Gelb
CO	67	Gelb
Cumol	9.84	Grün
Destilliertes Wasser	0.13	Grün
Dünger-K	19.4	Gelb
Dünger-P,N,K	0.11	Grün
Essigsäure	14.3	Gelb
Ethanol (hochrein)	3.58	Grün

Stoffbezeichnung	MJ/kg	Farbe
Ethylen	7.06	Grün
Ethylenoxid	5.66	Grün
EVA	39.9	Gelb
Fluor	149	Rot
Flußsäure (hochrein)	negative KEV: -4636,2	Grün
Formaldehyd	negative KEV: -2840 TJ	Grün
Glyzerin	118	Rot
Harnstoff	12	Gelb
Industriediamanten	106021	Rot
Lösemittel (hochrein)	40.6	Gelb
Melamin	27.7	Gelb
Metallisierungspaste	213	Rot
Methanol-Stoff	9.74	Grün
NaOH (alle außer Membran)	11	Gelb
NaOH (Membran)	8.8	Grün
NaOH 50% (Mem.)	4.41	Grün
Natriumsilikat	20	Gelb
NF3 (hochrein)	351	Rot
Organisch; Keine Information	65	Gelb
P4 (Phosphor)	196	Rot
PEG+DPM (hochrein)	6.05	Grün
Pflanzenschutzmittel	198	Rot
Phenol	9.08	Grün
Phosphorpaste	0.75	Grün
Phosphorsäure	0.79	Grün
Phosphortrichlorid	64	Gelb
POCl3 (hochrein)	91	Gelb
Polypropylen-Granulat	29	Gelb

Stoffbezeichnung	MJ/kg	Farbe
Propylenglycol	15	Gelb
PVC	36	Gelb
Russ	4.89	Grün
Salpetersäure	0.07	Grün
Sauerstoff (flüssig)	7.07	Grün
Schwefelsäure	0.43	Grün
SF6 (hochrein)	167	Rot
SiC	13.8	Gelb
SiC (hochrein)	154	Rot
SiCl4	97	Gelb
Silan (hochrein)	1072	Rot
Silizium (technisch)	148	Rot
Silizium-EG	46	Gelb
Soda	13	Gelb
Stickstoff (flüssig)	7.5	Grün
Tetrachlorkohlenstoff	27	Gelb
Thermo-Öl	109	Rot
Toluol	0.66	Grün
Tonerde	18	Gelb
Wasserstoff	64	Gelb
Wasserstoffperoxid	40	Gelb
Xylol	0.66	Grün

A.5 Wasserverbrauch für die Herstellung von Stoffen

Die folgende Tabelle nennt für einige häufig eingesetzte Stoffe die Höhe des Wassereinsatzes, der mit ihrer Herstellung verbunden ist. Angegeben wird sie in der Einheit Liter/Kilogramm Stoff. Die Werte stammen aus der Ökobilanzdatenbank ProBas des Umweltbundesamtes. Es wird folgende Bewertung vorgenommen:

- ▶ Wasserverbrauch unter 5 l/kg Stoff: Farbe Grün.
- ▶ Wasserverbrauch zwischen 5 und 100 l/kg Stoff: Farbe Gelb.
- ▶ Wasserverbrauch über 100l/kg Stoff: Farbe Rot.

Tabelle 61: Wasserverbrauch für die Herstellung von Stoffen in den Kategorien rot, gelb und grün

Stoffbezeichnung	Liter / kg	Farbe
Aluminiumfluorid	6,4	Gelb
Ammoniumnitrat	99,4	Gelb
Anorganisch; Keine Information	46	Gelb
Asphalt	1,413	Grün
Bauxit - Importmix	0,17	Grün
Benzol	5,6	Gelb
Biozide	14,1	Gelb
C2F6 (hochrein)	272	Rot
Calciumchlorid CaCl ₂ (hochrein)	1,31	Grün
Calciumhydroxid Ca(OH) ₂	1,97	Grün
CF ₄ (hochrein)	282	Rot
Chlor (alle außer Diaphragma)	94,6	Gelb
Chlor (Diaphragma)	153	Rot
Chloroform	102	Rot
Cumol	5,7	Gelb
Destilliertes Wasser	1,03	Grün
Dünger-K	60,9	Gelb
Dünger-N	1,86	Grün
Dünger-P	234	Rot
Essigsäure	3,68	Grün
Ethanol (hochrein)	3,44	Grün

Stoffbezeichnung	Liter / kg	Farbe
Ethylen	5,6	Gelb
Ethylenoxid	4,48	Grün
EVA	6,1	Gelb
Fluor	155	Rot
Flußsäure (hochrein)	101	Rot
Formaldehyd	43,5	Gelb
Glyzerin	257	Rot
Harnstoff	80,6	Gelb
Industriediamanten	109723654	Rot
Kohlenmonoxid,CO	2,09	Grün
Lösemittel (hochrein)	2,45	Grün
Melamin	230	Rot
Metallisierungspaste	1,57	Grün
Methanol	2,49	Grün
NaOH (Diaphragma)	138	Rot
NaOH mix	41,9	Gelb
Natriumsilikat	56,8	Gelb
NF3 (hochrein)	270	Rot
Organisch; Keine Information	8	Gelb
P4 (Phosphor)	61,1	Gelb
PEG+DPM (hochrein)	4,75	Grün
Pflanzenschutzmittel	32,4	Gelb
Phenol	5,2	Gelb
Phosphorpaste	2,82	Grün
Phosphorsäure	172	Rot
Phosphortrichlorid	95,1	Gelb
POCl3 (hochrein)	103	Rot
Polypropylen-Granulat	42,6	Gelb

Stoffbezeichnung	Liter / kg	Farbe
Propylenglycol	6,6	Gelb
PVC	9091	Rot
Russ	2,16	Grün
Salpetersäure	126	Rot
Sauerstoff (flüssig)	3*10-5	Grün
Schwefelsäure	40,1	Gelb
SF6 (hochrein)	174	Rot
SiC	64,9	Gelb
SiC (hochrein)	34,2	Gelb
SiCl4	171	Rot
Silan (hochrein)	1819	Rot
Silizium (alle außer EG)	46,7	Gelb
Silizium-EG	207	Rot
Soda	65,5	Gelb
Stickstoff (flüssig)	3*10-5	Grün
Tetrachlorkohlenstoff	114	Rot
Thermo-Öl	34,6	Gelb
Toluol	5,3	Gelb
Tonerde	1	Grün
Tonerde - mix	8,6	Gelb
Wasserstoff	1,8	Grün
Wasserstoff, H2-Stoff	6,7	Gelb
Wasserstoffperoxid	13,2	Gelb
Xylol	5,3	Gelb