

2016

EQS - Vorschlag des Oekotoxentrums für: *Methylbenzotriazole*

Ersterstellung: 12.03.2010 (Stand der Datensuche)
02.08.2010 (Einarbeitung des Gutachtens)
Aktualisierung: 17.08.2016 (Stand der Datensuche)
20.02.2017 (Einarbeitung des Gutachtens)

1. Qualitätskriterien-Vorschläge

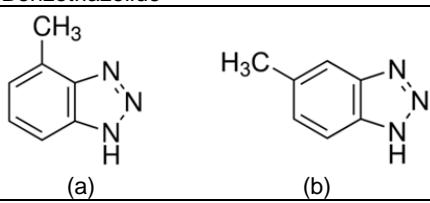
CQK (AA-EQS):	20 µg/L	(vor Aktualisierung 75 µg/L)
AQK (MAC-EQS):	425 µg/L	(vor Aktualisierung 200 µg/L)

Das chronische Qualitätskriterium (CQK \triangleq AA-EQS) und das akute Qualitätskriterium (AQK \triangleq MAC-EQS) wurden nach dem TGD for EQS der Europäischen Kommission (EC, 2011) hergeleitet. Damit die Dossiers international vergleichbar sind, wird im Weiteren die Terminologie des TGD verwendet.

2. Physikochemische Parameter

In Tabelle 1 werden Identität sowie chemische und physikalische Parameter der Methylbenzotriazole angegeben. Wo bekannt, wird mit (exp) spezifiziert, dass es sich um experimentell erhobene Daten handelt, während es sich bei mit (est) gekennzeichneten Daten um abgeschätzte Werte handelt. Wenn keine dieser beiden Angaben hinter den Werten steht, fand sich in der zitierten Literatur keine Angabe.

Tab. 1: Geforderte Identitäts- und physikochemische Parameter nach dem TGD for EQS für Methylbenzotriazole. Es handelt sich dabei um die Isomere 4-Methyl-1H-Benzotriazol (kurz **4-Me-BT**) und 5-Methyl-1H-Benzotriazol (kurz **5-Me-BT**), sowie deren Gemischen die als Methyl-1H-Benzotriazol bzw. Tolyltriazol (kurz **Me-BT**) benannt werden. Tolyltriazol ist auch als Natrium-Salz verfügbar (**Na-Me-BT**). Zusätzliche Eigenschaften wurden kursiv angegeben. Die angegebenen Werte wurden soweit möglich zwischen experimentellen Werten (exp) und abgeschätzten, modellierten Werten (est) unterschieden.

Eigenschaften	Wert	Referenz
IUPAC Name	(a) 4-methyl-1H-benzotriazole, (b) 5-methyl-1H-benzotriazole, (c) methyl-1H-benzotriazole, (d) Natrium 4 (oder 5)-methyl-1H-benzotriazolide	ECHA: https://echa.europa.eu/search-for-chemicals
<i>Produktgruppe</i>	Industrie und Haushaltschemikalien	
<i>Chemische Gruppe</i>	Benzotriazolide	
Strukturformeln	 <p>(a) (b)</p>	Sigma-Aldrich website: www.sigma.com
CAS-Nummer	(a) 29878-31-7 (b) 136-85-6 (c) 29385-43-1 (d) 64665-57-2	https://echa.europa.eu/search-for-chemicals
EINECS-Nummer	(a) 249-921-1 für 4-Me-BT (b) 205-265-8 für 5-Me-BT (c) 249-596-6 für Me-BT (d) 265-004-9 für Natrium (Na)-Me-BT	https://echa.europa.eu/search-for-chemicals , Pubchem (2016)
Summenformel	(a, b, c) C ₇ N ₃ H ₇ (d) C ₇ N ₃ H ₆ Na	https://echa.europa.eu/search-for-chemicals ,

Eigenschaften	Wert	Referenz
		EPI Suite 4.0 (US EPA 2008)
SMILES-code	(a) <chem>c12c(c(C)ccc1)N=NN2</chem> (b) <chem>CC1=CC2=NNN=C2C=C1</chem> (c) <chem>c(ccc1N2C)cc1NN2</chem> (d) <chem>c12c(cc(C)cc1)N([Na])N=N2</chem>	OECD Tool Box 1.1, EPI Suite 4.0 (US EPA 2008), Pubchem (2016)
Molekulargewicht (g·mol ⁻¹)	(a, b, c) 133.15 (d) 155.13	OECD Tool Box 1.1, EPI Suite 4.0 (US EPA 2008)
Schmelzpunkt (°C)	(a, b, c) 76-87 (exp) (d) 217.8 (est)	EPI Suite 4.0 (US EPA 2008)
Siedepunkt (°C)	(a, b, c) 160 (exp) (d) 511.2 (est)	OECD Tool Box 1.1, Epi-Suite 4.0
Dampfdruck (Pa)	(a, b, c) 100-142 (est) (d) 1.67E-08 (est)	EPI Suite 4.0 (US EPA 2008)
Henry's-Konstante (Pa·m ³ ·mol ⁻¹)	(a, b, c) 0.0164 (est); 4.344 (est) (d) 4.7 E-11 (est)	EPI Suite 4.0 (US EPA 2008)
Wasserlöslichkeit (mg·L ⁻¹)	(a) 3069 (est) für 4-Me-BT (b, c) 10100 (est) (d) 11768 (est); 55000 (est)	EPI Suite 4.0 (US EPA 2008)
pK _a	(a) 9.15 (est) (b) 8.85 (est) nicht verfügbar für Me-BT & Na-Me-BT (b) 8.5 (exp) für 5-Me-BT	ECHA: https://echa.europa.eu/de/registriert-on-dossier/-/registered-dossier/14272/4/22 Hart <i>et al.</i> 2004
<i>n</i> -Octanol/Wasser Verteilungskoeffizient (log K _{ow})	(a, b) 1.71 (est) (d) 0.14 (est) (b) 1.89 (exp)	EPI Suite 4.0 (US EPA 2008) Hart <i>et al.</i> 2004
Verteilungskoeffizient zwischen dem organischen Kohlenstoff im Boden/Sediment und Wasser (log K _{oc})	1.94 (est) (b) 1.59 - 2.04 (exp) (d) 3.13 (est)	EPI Suite 4.0 (US EPA 2008) Hart <i>et al.</i> 2004 EPI Suite 4.0 (US EPA 2008)
Verteilungskoeffizient zwischen suspendierter Materie und Wasser (log K _{susp-water})	(a, b) zwischen 0.59 und 1.04 (d) 2.13 (est) berechnet nach TGD for EQS; K _{susp-water} = K _{oc} x F _{oc,susp} , TGD	TGF for EQS, EC 2011, S. 131, A1.2.3.3. K _p , susp-water

3. Allgemeines

Anwendung: Bei den Methylbenzotriazolen handelt es sich um eine Substanzgruppe, die wie das verwandte Benzotriazol, vor allem als Korrosionsschutz in Spülmitteln, Kühlflüssigkeiten, Frostschutzmitteln und Enteisungsmitteln eingesetzt werden (Hem et al. 2003, Hinterbuchner 2006).

Identität: Als Methylbenzotriazole werden zusammenfassend die beiden Isomere 4-Methyl-1H-Benzotriazol (CAS: 29878-31-7; kurz 4-Me-BT) und 5-Methyl-1H-Benzotriazol (CAS: 136-85-6; kurz 5-Me-BT) bezeichnet. Das Gemisch der Isomere ist auch als Methyl-1H-Benzotriazol und unter dem Namen Tolyltriazol (CAS: 29385-43-1) bekannt. Als Natrium-Salz besitzt Tolyltriazol die CAS: 64665-57-2.

Vorgehen: Im vorliegenden Dossier wurden verfügbare Daten zur Ökotoxikologie der Methylbenzotriazole zusammengetragen. Wo möglich wurde unterschieden, ob die einzelnen Isomere, oder Tolyltriazol/-Na-Salz getestet wurde. Aufgrund der wenigen existierenden Effektdaten ist ein aussagekräftiger statistischer Vergleich der Toxizität der Isomere und Isomer-Gemische allerdings nicht möglich. Effektdaten werden daher gleichermassen zur Herleitung von Umweltqualitätskriterien verwendet. Jedoch wurden Effektdaten nicht zusammengefasst (e.g. zu geometrischen Mittelwerten), wenn sie nicht von der selben Substanz stammen. In diesen Fällen wurde, dem Vorsorgeprinzip entsprechend, jeweils der niedrigste Effektwert für die EQS-Herleitung verwendet.

Wirkungsweise: Methylbenzotriazole bilden starke Komplexe mit Metallen. Seeland *et al.* (2012) vermuten, dass Methylbenzotriazole aufgrund ihrer chemischen Struktur in Mitochondrien den Elektronenfluss während der oxidativen Phosphorylierung inhibieren und so Atmung und Energieversorgung der Organismen beeinflussen. Des Weiteren wird spekuliert, dass Methylbenzotriazole aufgrund der Strukturähnlichkeit zu den Phytohormonen (Auxine und Cytokinine) in den Pflanzlichen Hormonhaushalt eingreifen, und so zu Wachstumsinhibition und Wurzelschädigung führen könnten.

Analytik: Die Bestimmung der Methylbenzotriazole erfolgt meist mittels Flüssigkeitschromatographie und Tandemmassenspektrometrischer Detektion (HPLC-MS/MS) ohne vorhergehende Anreicherung. Die Bestimmungsgrenzen nach Festphasen-Extraktion betragen 10 ng/L für Grundwasser und 25 ng/L für Rohabwasser (Weber et al. 2009).

Stabilität und Abbau: Methylbenzotriazole sind relativ stabil gegenüber abiotischem und biotischem Abbau und weisen eine niedrige Eliminierungsrate in Kläranalgen auf (Seeland et al. 2012). Es wurde jedoch berichtet, dass sich die Abbaubarkeit der Tolyltriazol-Isomere signifikant unterscheidet. In Laborversuchen war 5-Methyl-benzotriazol im Gegensatz zu 4-Methyl-Benzotriazol vollständig biologisch abbaubar (Weiss und Reemtsma 2008).

Liu et al. 2013 zeigten, dass 5-methyl-benzotriazol in der Umwelt durch Mikroorganismen sowohl unter aeroben als auch unter anaeroben Bedingungen abgebaut werden kann. Für 5-methyl-benzotriazol wurde eine Halbwertszeit von 31 Tagen unter aeroben Bedingungen in Grundwasserleitern berichtet. Die Halbwertszeit für 4-Methyl-Benzotriazol liegt also vermutlich noch höher. Der mikrobielle Abbau wird insgesamt aber als eher langsam eingeschätzt (Janssen et al. 2015). Es wurde ausserdem gezeigt, dass 5-methyl-Benzotriazol durch metabolische Demethylierungsprozesse zu Benzotriazol transformiert werden kann (Liu et al. 2013). Aufgrund der niedrigen Affinität zu organischer Substanz (niedriger $\log K_{ow}$ und $\log K_{oc}$), ist ausserdem eine geringe Entfernung von Methylbenzotriazolen aus der Wasserphase durch Sorption an Sedimentpartikel zu erwarten (Janssen et al. 2015). Ein weiterer möglicher Abbaupfad wäre über die Photolyse. Hierzu liegen allerdings nur wenige Daten vor. Im IUCLID (2001b) wird für Methyl-1H-Benzotriazol eine Halbwertszeit 3.9 Tagen angegeben. Seeland und Kollegen (2012) untersuchten den Abbau von 4- und 5-Methylbenzotriazol in Photoreaktoren mit simuliertem Sonnenlicht und ermittelte Halbwertszeiten zwischen 1.4 und 1.6 Tagen. Weidauer *et al.* (2016) verwendete ebenfalls Photoreaktoren (Strahlung von 280-800 nm mit 784 W/m^2) und ermittelte Halbwertszeiten von 6.7 bis 13.9 Stunden, woraus Halbwertszeiten in der Umwelt von 2.5 und 5.2 Tagen für 5-Methyl-Benzotriazole und 4-Methyl-Benzotriazole, respektive, errechnet wurden. Die verwendete Strahlung beinhaltete kurzwellige und dadurch energiereiche UV-Strahlung, die in Standard-Biotests nicht verwendet wird. In Biotests ist daher ein weitaus geringerer Photoabbau anzunehmen. Bei Kurzzeit-Expositionen (gewöhnlich bis zu 96 h) und Tests in denen die Testsubstanz regelmässig erneuert wurde (semi-statischer Ansatz und Durchflusssysteme), ist die analytische Überprüfung der Testsubstanz somit nicht als zwingendes Kriterium für die Validität anzusehen.

Methylbenzotriazole weisen einen pKa im Bereich von 8.5 auf und sind ionisierbar. Mit steigendem pH werden Methylbenzotriazole zunehmend anionischer (Reemtsma *et al.* 2010).

Datenquellen: Für Methylbenzotriazole liegt noch kein Bericht mit unabhängig geprüften ökotoxikologischen Effektdaten vor. Die Datensammlung der IUCLID (*International uniform chemical information database*) enthält zwar teilweise Validitätsbewertungen, da aber unklar ist, ob die Daten unabhängig von kompetenter Stelle (Behörde) innerhalb eines regulatorischen Regimes geprüft wurden (Vgl. TGD for EQS, EC 2011, S. 23), sind die Daten als nicht bewertbar eingestuft worden.

4. Ökotoxikologische Parameter

Tab.2: Effektdatensammlung für Methylbenzotriazole. Unter „Bemerkung“ wurde, nach Möglichkeit, angegeben, ob die Isomere 4-Me-BT oder 5-Me-BT, oder die Isomergemische Me-BT oder Na-Me-BT getestet wurden (Vgl. Tab. 1). Literaturdaten die in grau dargestellt wurden können nach dem TGD for EQS (EC, 2011) nicht direkt zur EQS-Herleitung verwendet werden, sollen aber als zusätzliche Information genannt werden. Eine Bewertung der Validität^a wurde nach den Klimisch-Kriterien (Klimisch et al. 1997) durchgeführt, bzw. nach den CRED-Kriterien für Studien die im Zuge der Aktualisierung herangezogen wurden (Moermond et al. 2016). Validitätsbewertungen aus dem IUCLID Bericht (2001) wurden, sofern vorhanden, angegeben, allerdings sind alle Daten aus diesem Bericht als Klimisch 4 (nicht bewertbar) anzusehen und daher in grau dargestellt. Die sensitivsten und relevantesten Effektkonzentrationen einer Art sind der Übersichtlichkeit halber unterstrichen. Im Falle von Algen wird nach TGD for EQS die Wachstumsrate vor Biomasse bevorzugt. Liegen für einen Endpunkt aus einer Studie ein valider EC10 und NOEC vor, so wird der robustere Wert vorgezogen. Sind die Werte ähnlich robust, oder nicht überprüfbar, wird der niedrigere Wert ausgewählt und unterstrichen. Die Effektdaten der Isomere (siehe Tab. 1) wurden nicht unterschieden und bei einer bekannter Verwendung des Natriumsalzes wurde auf die Konzentration des Wirkstoff-Anion umgerechnet und der Wert in Klammern angegeben. Eine Unterscheidung in limnische und marine Arten wurde nicht vorgenommen, da lediglich Daten für einen marinen Organismus vorliegen (*A. fischeri*).

EFFEKTDATENSAMMLUNG													
Sammel-bezeichnung	Organismus	Endpunkt	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (mg/L)	Chemische Analyse	Testsystem	Reinheit	Bemerkungen	Validität ^a	Referenz
Akte Effektdaten für Methylbenzotriazole aus Tab.1													
Bakterien	<i>Allivibrio fischeri</i> (<i>Vibrio fischeri</i>)	Lumineszenzinhibition	5	min	EC50	=	5.69	kA	S	kA	5-Me-BT	2	Cancilla et al. 1997
Bakterien	<i>Allivibrio fischeri</i> (<i>Vibrio fischeri</i>)	Lumineszenzinhibition	15	min	EC50	=	5.91	kA	S	kA	5-Me-BT	4	Cancilla et al. 1997
Bakterien	<i>Allivibrio fischeri</i> (<i>Vibrio fischeri</i>)	Lumineszenzinhibition	15	min	EC50	=	<u>4.25</u>	E	S	98%	5-Me-BT	2	Cancilla et al. 2003
Bakterien	<i>Allivibrio fischeri</i> (<i>Vibrio fischeri</i>)	Lumineszenzinhibition	15	min	EC50	=	6.08	kA	S	kA	Me-BT	2	Corsi et al. 2006
Bakterien	<i>Allivibrio fischeri</i> (<i>Vibrio fischeri</i>)	Lumineszenzinhibition	15	min	EC50	=	21	A	S	ka	4-Me-BT	4	Pillard et al. 2001
Bakterien	<i>Allivibrio fischeri</i> (<i>Vibrio fischeri</i>)	Lumineszenzinhibition	15	min	EC50	=	8.7	A	S	ka	5-Me-BT	4	Pillard et al. 2001
Bakterien	<i>Allivibrio fischeri</i> (<i>Vibrio fischeri</i>)	Lumineszenzinhibition	15	min	EC50	=	7.3	A	S	kA	45:55% Gemisch aus 4- und 5-Me-BT; 20%Salinität	4	Pillard et al. 2001

^a Nach Moermond *et al.* (2016) wird die Validität unterteilt in Verlässlichkeit (R) und Relevanz (C), wobei die zu vergebenen Klassen (R1-4 bzw. C1-4) mit denen nach Klimisch (1-4) übereinstimmen. Ein als nicht relevant (C3) eingestufteffektwert wurde nicht zusätzlich aufgrund seiner Verlässlichkeit hin untersucht.

EFFEKTDATENSAMMLUNG													
Sammel- bezeichnung	Organismus	Endpunkt	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (mg/L)	Chemische Analyse	Testsystem	Reinheit	Bemerkungen	Validität ^a	Referenz
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstum	72	h	EC50	=	57.5	A	S	k.A.	pH = 7.5 – 9, T = 23°C	2 ^b	Baumann et al. 2013
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i> (<i>Scenedesmus subspicatus</i>)	Wachstum	72	h	EC50	=	62	A/B	kA	99.9%	Me-BT	1	IUCLID 2001b, S 13
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Biomasse	72	h	EC50	=	32	A/B	kA	99.9%	Me-BT	1	IUCLID 2001b, S 13
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> (<i>Selenastrum capricornutum</i>)	Wachstum	96	h	EC50	=	26.2 (22.5)	A/B	S	50%	Na-Me-BT	1	IUCLID 2001a, S. 14
Plattwürmer (Plathelminthes)	<i>Dugesia japonica</i>	Mortalität	24	h	EC50	=	152.4	C	S	> 99 %	T = 25 ± 1°C, pH: 7.8	R2/C2	Li 2013
Plattwürmer (Plathelminthes)	<i>Dugesia japonica</i>	Mortalität	48	h	EC50	=	90.5	C	S	> 99 %	T = 25 ± 1°C, pH: 7.8	R2/C2	Li 2013
Plattwürmer (Plathelminthes)	<i>Dugesia japonica</i>	Mortalität	72	h	EC50	=	80.8	C	S	> 99 %	T = 25 ± 1°C, pH: 7.8	R2/C2	Li 2013
Plattwürmer (Plathelminthes)	<i>Dugesia japonica</i>	Mortalität	96	h	EC50	=	74.0	C	S	> 99 %	T = 25 ± 1°C, pH: 7.8	R2/C2	Li 2013
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Mortalität	48	h	LC50	=	81.3	kA	kA	98%	5-Me-BT	2	Cancilla et al. 2003
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i> (<24 h)	Immobilisation	48	h	EC50	=	79	A	S	kA	5-Me-BT	4	Pillard et al. 2001
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i> (<24 h)	Immobilisation	48	h	EC50	=	118	A	S	kA	4-Me-BT	4	Pillard et al. 2001
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i> (<24 h)	Immobilisation	48	h	EC50	=	108	A	S	kA	45:55% Gemisch aus 4- und 5-Me-BT	4	Pillard et al. 2001
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Immobilisation	48	h	EC50	=	102	A2	S	kA	G	4	Cornell et al. 2000
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Immobilisation	48	h	EC50	=	108	A2	S	kA	G	4	Cornell et al. 2000
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Immobilisation	48	h	EC50	=	80.7	E	R	kA	Me-BT	2	Corsi et al. 2006
Krebstiere	<i>Daphnia galeata</i>	Immobilisation	48	h	EC50	=	8.58	C	S	≥ 98 %	5-Me-BT O2: >3 mg/L, pH: 7.3, bei 20°C	R2/C1	Seeland et al. 2012
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Immobilisation	48	h	EC50	=	44	A	S	k.A.	4-Me-BT T = 20°C	2 ^b	Baumann et al. 2013
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Immobilisation	48	h	EC50	=	49	A	S	k.A.	5-Me-BT T = 20°C	2 ^b	Baumann et al. 2013
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Immobilisation	48	h	EC50	=	51.6	C	S	≥ 98 %	5-Me-BT O2: >3 mg/L, pH: 7.34±0.32, T = 20±1°C	R2/C1	Seeland et al. 2012
		Geom. Mittelwert	48	h	EC50	=	50.3						
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	kA	48	h	EC50	=	74	kA	kA	kA	kA	4	PMC 1996, zitiert in

^b Aus der ETOX Datenbank und vom Umweltbundesamt (UBA) als valide eingestuft. In der Datenbank ist hinter einem einzelnen Wert (*D. magna* NOEC (28d)) die Testbonität Klimisch 2 vermerkt. Da unklar ist, ob alle anderen Endpunkt ebenfalls Klimisch 2, oder Klimisch 1 sind, wurde Klimisch 2 für alle Endpunkte aus dieser Publikation verwendet.

EFFEKTDATENSAMMLUNG													
Sammel-bezeichnung	Organismus	Endpunkt	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (mg/L)	Chemische Analyse	Testsystem	Reinheit	Bemerkungen	Validität ^a	Referenz
													Cornell et al. 2000
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Immobilisation	48	h	EC50	=	280 (240)	kA	S	50%	Na-Me-BT	1	IUCLID 2001a, S. 12
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Immobilisation	48	h	NOEC	=	100 (85.8)	kA	S	50%	Na-Me-BT	1	IUCLID 2001a, S. 12
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Immobilisation	48	h	EC50	=	245.7 (211)	kA	kA	kA	Na-Me-BT	kA	IUCLID 2001a, S. 13
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Immobilisation	48	h	EC50	=	73.7	kA	kA	>99%	Me-BT	kA	IUCLID 2001b, S 13
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Immobilisation	48	h	EC50	=	35.4	A/B	kA	99.9%	Me-BT; EC50 als geom. Mittelwert aus LC0 und LC100	2	IUCLID 2001b, S 13
Fische	<i>Danio rerio</i>	Entwicklung (Fish-Embryo-Test)	48	h	EC50	=	<u>53</u>	A	S	k.A.	4-Me-BT pH = 7, T = 26°C	2 ^b	Baumann et al. 2013
Fische	<i>Danio rerio</i>	Entwicklung (Fish-Embryo-Test)	48	h	EC50	=	68	A	S	k.A.	5-Me-BT pH = 7, T = 26°C	2 ^b	Baumann et al. 2013
Fische	<i>Danio rerio</i> (<i>Brachydanio rerio</i>)	Mortalität	96	h	LC50	=	65	E	S	>98%	Me-BT	1	IUCLID 2001b, S 11
Fische	<i>Danio rerio</i> (<i>Brachydanio rerio</i>)	Mortalität	96	h	LC50	=	122 (105)	kA	kA	50%	Na-Me-BT	kA	IUCLID 2001a, S. 11
Fische	<i>Lepomis macrochirus</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	<u>31</u>	E	kA	>99%	Me-BT	1	IUCLID 2001b, S 11
Fische	<i>Lepomis macrochirus</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	191.2 (164)	kA	kA	50%	Na-Me-BT	kA	IUCLID 2001a, S. 11
Fische	<i>Lepomis macrochirus</i>	Mortalität	96	h	NOEC	=	34 (29.2)	kA	S	50%	Na-Me-BT	1	IUCLID 2001a, S. 9
Fische	<i>Lepomis macrochirus</i>	Mortalität	96	h	LC50	>	173 (148)	kA	S	50%	Na-Me-BT	1	IUCLID 2001a, S. 9
Fische	<i>Lepomis macrochirus</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	31	kA	kA	kA	kA	4	PMC 1996, zitiert in Cornell et al. 2000
Fische	<i>Oncorhynchus mykiss</i> (<i>Salmo gairdneri</i>)	Mortalität	96	h	LC50	=	25 (21.5)	E	S	50%	Na-Me-BT	1	IUCLID 2001a, S. 10
Fische	<i>Oncorhynchus mykiss</i> (<i>Salmo gairdneri</i>)	Mortalität	96	h	LC50	=	23.7 (20.3)	kA	kA	50%	Na-Me-BT	kA	IUCLID 2001a, S. 11
Fische	<i>Oncorhynchus mykiss</i> (<i>Salmo gairdneri</i>)	Mortalität	96	h	LC50	=	21.4	E	kA	>99%	Me-BT	1	IUCLID 2001b, S 12
Fische	<i>Pimephales promelas</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	<u>22</u>	kA	kA	98%	5-Me-BT	2	Cancilla et al. 2003
Fische	<i>Pimephales promelas</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	63	A	R	kA	4-Me-BT	4	Pillard et al. 2001
Fische	<i>Pimephales promelas</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	22	A	R	kA	5-Me-BT	4	Pillard et al. 2001
Fische	<i>Pimephales promelas</i>	Mortalität	96	h	EC50	=	38	A	R	kA	45:55% Gemisch aus 4- und 5-Me-BT	4	Pillard et al. 2001

EFFEKTDATENSAMMLUNG													
Sammelbezeichnung	Organismus	Endpunkt	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (mg/L)	Chemische Analyse	Testsystem	Reinheit	Bemerkungen	Validität ^a	Referenz
Fische	<i>Pimephales promelas</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	25.5	E	kA	>99%	Me-BT	1	IUCLID 2001b, S 12
Fische	<i>Pimephales promelas</i>	Mortalität	96	h	LC50	=	30.1	E	R	kA	Me-BT	2	Corsi et al. 2006
Subchronische und chronische Effektdaten für Methylbenzotriazole aus Tab.1													
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstum	72	h	NOEC	=	7.5	A/B	kA	99.9%	Me-BT	1	IUCLID 2001b, S 13
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Biomasse	72	h	EC10	=	10	A/B	kA	99.9%	Me-BT	1	IUCLID 2001b, S 13
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstumsrate	72	h	EC10	=	24	A/B	kA	99.9%	Me-BT	1	IUCLID 2001b, S 13
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstumsrate	72	h	EC10	=	2.9	C	S	≥ 98 %	5-Me-BT; T = 23 ± 1°C	R2/C1	Seeland et al. 2012
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstumsrate	72	h	NOEC	=	2.5	C	S	≥ 98 %	5-Me-BT, T = 23 ± 1°C	R2/C1	Seeland et al. 2012
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstumsrate	72	h	NOEC	=	7.5	A	S	k.A.	5-Me-BT; T = 23°C	2 ^b	Baumann et al. 2013
		Geom. Mittelwert	72	h	NOEC	=	4.2						
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Wachstumsrate	72	h	NOEC	=	7	A	S	k.A.	4-Me-BT; T = 23°C	2 ^b	Baumann et al. 2013
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> (<i>Selenastrum capricornutum</i>)	Wachstum			EC25	=	23.8	kA	R	kA	Me-BT	4	Corsi et al. 2006
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> (<i>Selenastrum capricornutum</i>)	Wachstum	96	h	EC25	=	23.2	kA	kA	98%	5-Me-BT	2	Cancilla et al. 2003
Algen	<i>Raphidocelis subcapitata</i> (<i>Selenastrum capricornutum</i>)	Wachstum	96	h	NOEC	=	10 (8.58)	kA	kA	50%	Na-Me-BT	1	IUCLID 2001a, S. 14
Pflanzen	<i>Lemna minor</i>	Wachstum	7	d	NOEC	=	10	C	S	≥ 98 %	5-Me-BT; Substanzverlust >20% möglich, da 7d-statische Exposition	R4/C1	Seeland et al. 2012
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Reproduktion	7	d	EC25	=	5.7	kA	R	kA	Me-BT	4	Corsi et al. 2006
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Reproduktion	21	d	NOEC	=	18.4	A/B	kA	99.9%	Me-BT, bezogen auf Testsubstanz	1	IUCLID 2001b, S 15
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Reproduktion	21	d	NOEC	=	11.5	A/B	kA	99.9%	Me-BT, bezogen auf Gesamtkohlenstoff	1	IUCLID 2001b, S 15
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Reproduktion	21	d	NOEC	=	7.5	A	R	k.A.	4-Me-BT; pH = 7.5 – 8.5, T = 20°C	2 ^b	Baumann et al. 2013
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Reproduktion	21	d	NOEC	=	10	A	R	k.A.	5-Me-BT; T = 20°C	2 ^b	Baumann et al. 2013
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Reproduktion	21	d	NOEC	=	1	C	R	≥ 98 %	5-Me-BT; O2: >3 mg/L, pH: 7.34, T = 20±1°C	R2/C1	Seeland et al. 2012
		Geom. Mittelwert	21	d	NOEC	=	3.16						
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Reproduktion	21	d	EC10	=	5.93	C	R	≥ 98 %	5-Me-BT;	R2/C1	Seeland et al. 2012

EFFEKTDATENSAMMLUNG													
Sammel-bezeichnung	Organismus	Endpunkt	Dauer	Dimension	Parameter	Operator	Wert (mg/L)	Chemische Analyse	Testsystem	Reinheit	Bemerkungen	Validität ^a	Referenz
											O2: >3 mg/L, pH: 7.34, T = 20±1°C		
Krebstiere	<i>Daphnia galeata</i>	Reproduktion	21	d	NOEC	=	1	C	R	≥ 98 %	5-Me-BT; O2: >3 mg/L, pH: 7.34, T = 20±1°C	R2/C1	Seeland et al. 2012
Krebstiere	<i>Daphnia galeata</i>	Reproduktion	21	d	EC10	=	0.4	C	R	≥ 98 %	5-Me-BT; H O2: >3 mg/L, pH: 7.34, T = 20±1°C	R4/C1	Seeland et al. 2012
Fische	<i>Pimephales promelas</i>	Mortalität	7	d	LC25	=	21.5	kA	R	kA	Me-BT	4	Corsi et al. 2006

Notizen:

- A** Basierend auf der gemessenen Konzentration
A2 Höchste Konzentration wurde gemessen. Niedrigere Konzentrationen wurden als Teil von 100% der gemessenen höchsten Konzentration berechnet.
B Basierend auf der nominalen Konzentration – gemessene Konzentration lag bei 80-120% der nominalen Konzentration
C Basierend auf der nominalen Konzentration – es fand keine Nachmessung statt
D Eine begleitende chemische Analyse hat stattgefunden, es ist aber nicht angegeben, ob sich das Ergebnis auf nominale oder die gemessene Konzentration bezieht.
E nominale Konzentration wird angenommen, da keine Angaben zum analytischen Monitoring vorliegen.
G Werte in Cornell et al. 2000 und in Pillard et al. 2001 scheinen sich teilweise auf dieselben Testergebnisse zu beziehen (Werte und Konfidenzintervalle sind identisch). In Cornell et al. 2000 wurde angegeben, dass Methylbenzotriazole getestet wurden. Pro Testorganismus und Endpunkt sind zwei Testergebnisse angegeben. Jeweils eines dieser Ergebnisse ist bei Pillard et al. 2001 allerdings unter Benzotriazol aufgeführt. Ergebnisse lassen sich demnach nicht zweifelsfrei zuordnen. Zudem fehlen in den Publikationen Dosis-Wirkungskurven. Werte sind lediglich tabellarisch aufgeführt. Des Weiteren wurde nicht angegeben, ob Validitätskriterien der Tests erfüllt wurden. Ergebnisse aus beiden Studien daher als nicht bewertbar (Klimisch 4) bewertet.
H EC10 wird als weniger verlässlich als der NOEC eingestuft, da sich nur Effekte bei der höchsten getesteten Konzentration von 2 mg/L zeigten. Die Regression für eine Dosis-Wirkungskurve (liegt nicht vor) dürfte demnach mit einiger Unsicherheit behaftet sein.

Testsystem

- F** Durchfluss
R semi-statisch
S statisch
T Temperatur

5. Graphische Darstellung der Toxizitätsdaten

Abbildung 1 zeigt alle validen Kurzzeit- und Langzeiteffektwerte aus Tabelle 2. Da nicht genügend marine Daten vorhanden sind um einen aussagekräftigen statistischen Vergleich zwischen marinen und limnischen Daten zu erzielen, können nach TGD for EQS (EC, 2011) die beiden Datensätze zusammengefasst werden.

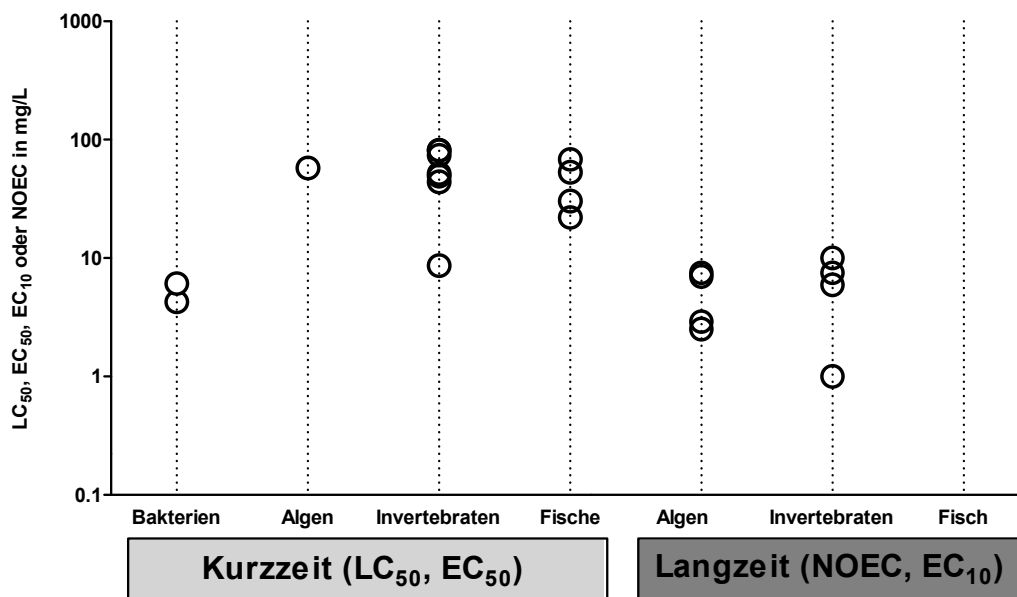


Abbildung 1: Kurzzeit- und Langzeit-Effektdaten von Methylbenzotriazolen für aquatische Organismen. Bei den Kurzzeit-Tests mit Bakterien konnten nur marine Bakterien berücksichtigt werden. Es wurde nicht zwischen den verschiedenen Isomeren und Isomer-Gemischen unterschieden.

Die Toxizitätsdaten bewegen sich in einer Konzentrationsspanne zwischen 1 und 100 mg/L. Im akuten Datensatz weisen marine Leuchtbakterien die niedrigsten Effektwerte auf. Der niedrigste Einzelwert im chronischen Datensatz stammt von einer Invertebraten-Spezies. Insgesamt liegen die chronischen Effektdaten der Primärproduzenten (nur durch Algen vertreten) und Invertebraten in einem ähnlichen Bereich. Die Langzeittoxizitätsdaten liegen erwartungsgemäss etwas niedriger als die Kurzzeittoxizitätsdaten.

6. Zusammenstellung der kritischen Toxizitätswerte für Methylbenzotriazole

Im Folgenden werden die kritischen Toxizitätswerte der Effektdatensammlung zusammengefasst. Um chronische und akute Qualitätsziele herzuleiten, kann die AF-Methode auf der Datenbasis von akuten und chronischen Toxizitätsdaten verwendet werden. Dabei wird mit dem tiefsten chronischen Datenpunkt ein AA-EQS (Annual-Average-Environmental-Quality-Standard) und mit dem tiefsten akuten Datenpunkt ein MAC-EQS (Maximal-Acceptable-Concentration- Environmental-Quality-Standard) abgeleitet. Wenn der Datensatz umfassend genug ist, können diese EQS zusätzlich mittels einer Speziessensitivitätsverteilung (SSD) bestimmt werden. Valide Mikro-/Mesokosmosstudien dienen einerseits zur Verfeinerung des AF, der durch eine SSD hergeleitet wurde. Andererseits können sie auch direkt zur Bestimmung eines EQS verwendet werden.

6.1. Chronische Toxizität

6.1.1. AA-EQS Herleitung mit AF-Methode

Tab. 3: Übersicht zu den kritischen Toxizitätswerten von Methylbenzotriazolen auf Wasserorganismen aus längerfristigen Untersuchungen.

Gruppe	Spezies	Wert	Konz. in mg/L	Literatur
Basisdatensatz				
Primärproduzenten	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	NOEC	4.2	Geom. Mittel aus: Seeland et al. 2012; Baumann et al. 2013
Krebstiere	<i>Daphnia galeata</i>	NOEC	1	Seeland et al. 2012
Fische	keine	NOEC	-	-

Es liegen NOEC-Werte für die Organismengruppen der Primärproduzenten und Krebstiere vor. Der empfindlichste belastbare Endpunkt stammt aus der Studie von Seeland *et al.* 2012 und liegt bei *Daphnia galeata* mit einem NOEC von 1 mg/L. Der Wert beruht zwar auf nominalen Konzentrationen, wurde aber in einem semi-statischen Versuchsansatz bestimmt und kann somit als verlässlich angesehen werden. Für den selben Endpunkt liegt noch ein EC10 von 0.4 mg/L vor, der aber im Vergleich zum NOEC als weniger verlässlich eingestuft wurde, da sich nur Effekte bei der höchsten getesteten Konzentration von 2 mg/L zeigten. Die Regression für eine Dosis-Wirkungskurve dürfte demnach mit einiger Unsicherheit behaftet sein. Der niedrigste Einzelwert für einen Vertreter der Organismengruppe der Algen (*Desmodesmus subspicatus*) ist ein NOEC von 2.5 mg/L. Der geometrische Mittelwert der relevantesten Werte für diese Alge beträgt 4.2 mg/L (siehe Tab. 3). Bei Benzotriazolen wird von einer spezifischen Wurzelwachstumstoxizität bei diversen Pflanzen berichtet (Wu et al. 1998), die vermutlich auf Strukturanalogien mit dem Phytohormon Auxin zurückzuführen ist (Davis 1954). Für die Wasserpflanze *Lemna minor* ist ein NOEC von 10 mg/L vorhanden, welcher aber als nicht-bewertbar (R4) eingestuft wurde, da unklar ist, ob ein signifikanter (>20%) Substanzverlust innerhalb der 7-tägigen Exposition unter

statischen Bedingungen stattfand. Weitere Toxizitätsdaten mit aquatischen Pflanzen sollten erhoben werden um auch eine mögliche spezifische Wurzelwachstumstoxizität genauer charakterisieren zu können (z.B. mit *Myriophyllum spec.*). Ein chronisches Effektdatum für Fische fehlt. Der niedrigste akute Toxizitätswert (LC50) für die Organismengruppe der Fische liegt bei 22 mg/L, und damit etwa im Bereich der EC50-Werte für die im chronischen Datensatz sensitivste Gruppe der Krebstiere. Es kann daher nicht mit Sicherheit ausgeschlossen werden, dass Fische bei Langzeituntersuchungen nicht zur sensitivsten Gruppe gehören könnten. Daher wird empfohlen einen Sicherheitsfaktor von 50 zu verwenden, woraus sich nach der AF-Methode folgendes Langzeit-Qualitätskriterium ergibt:

$$\text{AA-EQS} = 1 \text{ mg/L} / 50 = 0.02 \text{ mg/L} = \mathbf{20 \mu\text{g/L}}$$

6.1.2. AA-EQS Herleitung mit SSD-Methode

Es sind nicht genügend valide Daten vorhanden um ein AA-EQS mittels SSD abzuleiten.

6.1.3. AA-EQS Herleitung aus Mikro-/Mesokosmosstudien

Es sind keine validen Effektwerte aus Mikro- oder Mesokosmosstudien vorhanden, so dass ein AA-EQS basierend auf diesen Studien nicht direkt abgeleitet werden kann.

6.2. Akute Toxizität

6.2.1. MAC-EQS Herleitung mit AF-Methode

Tab. 4: Übersicht der kritischen akuten Toxizitätswerte von Methylbenzotriazolen auf Wasserorganismen.

Gruppe	Spezies	Wert	Konz. in mg/L	Literatur
Basisdatensatz				
Primärproduzenten	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	EC50	57.5	Baumann et al. 2013
Krebstiere	<i>Daphnia galeata</i>	EC50	8.58	Seeland et al. 2012
Fische	<i>Pimephales promelas</i>	LC50	22	Cancilla et al. 2003
Weitere				
Bakterien	<i>Aliivibrio fischeri (Vibrio fischeri)</i>	EC50	4.25	Cancilla et al. 2003
Plattwürmer	<i>Dugesia japonica</i>	EC50	74.0	Li et al. 2013

Tab. 5: Gefährlichkeitsklassierung der akuten aquatischen Toxizität von Methylbenzotriazolen anhand der niedrigsten gemessenen EC50-Werte (UN 2015).

Risikoklasse	niedrigster EC50-Wert	erreichter Wert
Nicht eingestuft	>100 mg/L	
3	10 mg/L – 100 mg/L	
2	1 mg/L – 10 mg/L	X
1	< 1mg/L	

Es liegen EC50-Werte für die Organismengruppen der Primärproduzenten, Krebstiere und Fische vor. Um Kurzzeit-Qualitätskriterien (MAC-EQS) herzuleiten kann die AF-Methode auf der Datenbasis von akuten Toxizitätsdaten verwendet werden. Allerdings müssen mindestens 3 valide EC50-Kurzzeittestergebnisse von Vertretern der 3 trophischen Ebenen (Fische, Krebse, Algen) vorhanden sein um einen Assessmentfaktor von 100 auf den EC50 der sensitivsten Studie verwenden zu können. Bakterienstudien können nach dem TGD for EQS (EC, 2011) nicht für die Herleitung von chronischen Qualitätszielen verwendet werden, allerdings können akute EC50-Werte für die Herleitung von kurzfristigen Qualitätskriterien berücksichtigt werden, auch wenn diese Studien der Trophieebenen nicht ersetzen können. *Aliivibrio fischeri* ist zwar für limnische Ökosysteme nicht direkt relevant, wird aber als Repräsentant für Bakterien im allgemeinen (limnische und marine) getestet. Da sich nicht zeigen lässt, dass limnische Bakterien weniger sensitiv gegenüber den Methylbenzotriazolen sind, wird der EC50 von 4.25 mg/L für die Herleitung eines MAC-EQS verwendet. Der AF kann gemäss TGD for EQS (2011) auf 10 erniedrigt werden, wenn entweder die Standardabweichung der logarithmierten EC50-Werte < 0.5 oder der Wirkmechanismus bekannt und ein Vertreter der empfindlichsten taxonomischen Gruppen im Effektdatensatz enthalten ist. Da die Standardabweichung der logarithmierten E(L)C50-Werte mit 0.45 (inklusive der marinen Bakterien) unter 0.5 liegt, wird ein AF von 10 verwendet, woraus sich folgendes Kurzzeit-Qualitätskriterium ergibt:

$$\text{MAC-EQS} = 4.25 \text{ mg/L} / 10 = 0.425 \text{ mg/L} \approx \mathbf{425 \mu\text{g/L}}$$

6.2.2. MAC-EQS Herleitung mit der SSD-Methode

Es sind nicht genügend valide Daten vorhanden um ein MAC-EQS mittels SSD herzuleiten.

6.2.3. MAC-EQS Herleitung aus Mikro-/Mesokosmosstudien

Es sind keine validen Effektwerte aus Mikrokosmosstudien vorhanden, so dass ein MAC-EQS basierend auf diesen Studien nicht direkt hergeleitet werden kann.

7. Bewertung des Bioakkumulationspotentials und der sekundären Intoxikation

Nach dem TGD for EQS (EC, 2011) soll zur Abschätzung des Risikos einer sekundären Intoxikation zunächst das Bioakkumulationspotential einer Substanz bestimmt werden. Dabei liefert ein gemessener Biomagnifikationsfaktor (BMF) von >1 oder ein Biokonzentrationsfaktor (BCF) >100 einen Hinweis auf ein Bioakkumulationspotential. Liegen keine verlässlichen BMF oder BCF Daten vor, kann stattdessen der $\log K_{OW}$ zur Abschätzung verwendet werden, welcher ab einem Wert von >3 auf ein Bioakkumulationspotential hinweist.

Es liegen keine Bioakkumulationsstudien oder besondere Hinweise für Säugertoxizität vor. Es wurden lediglich eine positive Korrelation zwischen der Konzentration von 5-Me-BT in kontaminiertem Flusswasser und der Konzentration in Fischen (*Pimephales promelas*) beobachtet (Cancilla et al. 2003, Abb. 6). Ein BCF wurde nicht bestimmt. Die $\log K_{OW}$ Werte für Methylbenzotriazole von 1.71 und 0.14 liegen jedoch unter dem Triggerwert von 3 und die Gefahr durch eine sekundäre Intoxikation kann daher als gering eingeschätzt werden.

8. Schutz der aquatischen Organismen

Der Effektdatensatz für Methylbenzotriazole umfasst alle 3 trophischen Ebenen bei den Kurzzeittoxizitäten und 2 trophische Ebenen bei den Langzeittoxizitäten. Bei den Kurzzeiteffektstudien stellen marine Leuchtbakterien die empfindlichste Organismengruppe dar. Die Sensitivität liegt aber in einem ähnlichen Bereich wie die der Krebstiere. Letztere stellen bei den Langzeiteffektstudien die empfindlichste Organismengruppe dar. Ein chronisches Effektdatum für Fische fehlt. Der niedrigste akute Toxizitätswert für die Organismengruppe der Fische liegt etwa im Bereich der EC50-Werte für die im chronischen Datensatz sensitivste Gruppe der Krebstiere. Es kann daher nicht mit Sicherheit ausgeschlossen werden, dass Fische bei Langzeituntersuchungen nicht zur sensitivsten Gruppe gehören könnten. Die Stoffklasse der Triazole, zu denen auch Benzotriazol gehört, ist ausserdem für andere spezifische Wirkmechanismen

relevant. So konnten z.B. für einige Fungizide, die z.B. auch zu den Triazolen gehören, reproduktionstoxische Effekte nachgewiesen werden, die vermutlich durch hormonaktive Wirkungen verursacht wurden. Da generell zu wenig Effektdaten für eine Abklärung vorliegen, wurde ein Assessmentfaktor von 50 beibehalten.

Die hergeleiteten **MAC-EQS** von **425 µg/L** und **AA-EQS** von **20 µg/L** sollten einen ausreichenden Schutz für aquatische Organismen unterschiedlicher trophischer Ebenen bieten, jedoch wäre eine Risikobewertung aufgrund einer breiteren Effekt-Datenbasis mit unterschiedlichen Arten zu empfehlen. Dabei wären vor allem die chronische Fischtoxizität und die Toxizität auf das Wurzelwachstum von Wasserpflanzen von Interesse. Ebenfalls weisen andere dimethylierte Benzotriazole oder Butylbenzotriazole teilweise um den Faktor 10 niedrigere Toxizitätswerte auf (siehe e.g. Cancilla *et al.* 1997 und Pillard *et al.* 2001), die Umweltrelevanz dieser Verbindungen sollte daher geklärt werden.

9. Änderungen gegenüber der Version vom 02.08.2010

Durch die im Zuge der Aktualisierung in den Effektdatensatz aufgenommenen Studien verringerte sich der AA-EQS von 75 µg/L auf 20 µg/L, da ein neuer sensitivster NOEC von 1 mg/L für *Daphnia galeata* gefunden wurde. Zudem liegen NOEC/EC10-Werte für Algen und andere Wasserpflanzen vor, der Sicherheitsfaktor konnte somit von 100 auf 50 herabgesetzt werden. Der Sicherheitsfaktor zur Herleitung des MAC-EQS konnte aufgrund neu aufgenommener Studien von 100 auf 10 herabgesetzt werden. Dadurch erhöhte sich der MAC-EQS von 200 µg/L auf 425 µg/L.

10. Literatur

- Baumann, M., Weiß, K., Schüssler, W. und Kopf, W. (2013). Ökotoxikologische Beurteilung von Benzotriazol, 4-Methyl-1H-Benzotriazol und 5-Methyl-1H-Benzotriazol für Binnengewässer. Vom Wasser Volume 111: 13-17
- Cancilla D A, Holtkamp A, Matassa L, Fang X (1997): Isolation and Characterisation of Microtox-active components from aircraft de-icing / anti-icing fluids. Environmental Toxicology and Chemistry 16, No. 3, 430-434.
- Cancilla D A , Baird J C , Geis S W, Corsi S R (2003): Studies of the environmental fate and effect of aircraft deicing fluids: Detection of 5-methyl-1H-benzotriazole in the fathead minnow (*Pimephales promelas*). Environmental Toxicology and Chemistry 22:134-140.
- Cornell J S, Pillard D A, Hernandez M T (2000): Comparative measures of the toxicity of component chemicals in aircraft deicing fluid. Environmental Toxicology and Chemistry Volume 19, Issue 6:1465-1472.
- Corsi, S. R., Geis, S. W., Loyo-Rosales, J. E., & Rice, C. P. (2006). Aquatic toxicity of nine aircraft deicer and anti-icer formulations and relative toxicity of additive package ingredients alkylphenol ethoxylates and 4, 5-methyl-1H-benzotriazoles. Environmental science & technology, 40(23), 7409-7415.
- Davis D (1954):Benzotriazole, a plant growth regulator. Science, 120:989.
- EC (2011): Technical Guidance For Deriving Environmental Quality Standards. Common Implementation Strategy for the Water Framework Directive (2000/60/EC), Guidance Document No. 27. Europäische Kommission (EC).
- Hart, D. S., Davis, L. C., Erickson, L. E., & Callender, T. M. (2004). Sorption and partitioning parameters of benzotriazole compounds. Microchemical Journal, 77(1), 9-17.
- Hem L J, Hartnik T, Roseth R, Breedveld G D (2003): Photochemical Degradation of Benzotriazole. Journal of Environmental Science and Health Part A—Toxic/Hazardous Substances & Environmental Engineering. Vol. A38, No. 3: 471–481
- Hinterbuchner (2006): Das Verhalten von Benzotriazolen in Abwasserreinigungsanlagen. Diplomarbeit eingereicht an der Fachhochschule Wels zur Erlangung des akademischen Grades Diplom-Ingenieur (FH).
- IUCLID Dataset der US-EPA (2001a) für *sodium 4(or 5)-methyl-1H-benzotriazolide*; 15-Jul-1999; Verfügbar unter: <http://www.epa.gov/HPV/pubs/summaries/benzo/c13456tc.htm>
- IUCLID Dataset der US-EPA (2001b) für *methyl-1H-benzotriazole*; 20-Mar-2000; Verfügbar unter: <http://www.epa.gov/HPV/pubs/summaries/benzo/c13456tc.htm>
- Janssen, E. M., Marron, E., & McNeill, K. (2015). Aquatic photochemical kinetics of benzotriazole and structurally related compounds. Environmental Science: Processes & Impacts, 17(5), 939-946.
- Klimisch H J, Andreae M, Tillmann U (1997): A Systematic Approach for Evaluating the Quality of Experimental Toxicological and Ecotoxicological Data. Regulatory Toxicology and Pharmacology 25:1-5.
- Li, M. H. (2013). Acute toxicity of industrial endocrine-disrupting chemicals, natural and synthetic sex hormones to the freshwater planarian, *Dugesia japonica*. Toxicological & Environmental Chemistry, 95(6), 984-991.
- Liu, Y. S., Ying, G. G., Shareef, A., & Kookana, R. S. (2013). Biodegradation of three selected benzotriazoles in aquifer materials under aerobic and anaerobic conditions. Journal of contaminant hydrology, 151, 131-139.
- Moermond C T A, Kase R, Korkaric M, Ågerstrand M (2016): CRED: Criteria for reporting and evaluating ecotoxicity data. Environmental Toxicology and Chemistry 35, 1297-1309.

OECD Toolbox 1.1 - <http://www.oecd.org/>

Pillard D A, Cornell J S, Dufresne D L, Hernandez M T (2001): Research Note: Toxicity of benzotriazole and Benzotriazole Derivates to three Aquatic Species. *Wat. Res.* Vol. 35, No. 2:557-560.

Pubchem (2016). 5-Methyl-1H-benzotriazole: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5-Methyl-1H-benzotriazole#section=Top>. (zuletzt abgerufen am 16.08.2016)

PMC Specialties Group. (1996): COBRATEC TT-100. Technical. Bulletin. Rocky River, OH, USA.

Reemtsma T, Mieke U, Duennbier U, Jekel M (2010) Polar pollutants in municipal wastewater and the water cycle: Occurrence and removal of benzotriazoles. *Water Research* 44: 596–604

Seeland, A., Oetken, M., Kiss, A., Fries, E., & Oehlmann, J. (2012). Acute and chronic toxicity of benzotriazoles to aquatic organisms. *Environmental Science and Pollution Research*, 19(5), 1781-1790.

UN (2015): Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS), 6th revised edition ed. United Nations, New York.

Weber W H, Seitz W, Schulz, W (2009): Eintragungspfade von Benzotriazolen in das Grundwasser des Donaurieds. Aus: *Kurzreferate*, 75. Jahrestagung der Wasserchemischen Gesellschaft, Stralsund, 18. – 20. Mai 2009, ISBN 978-3-936028-56-0.

Weidauer, C., Davis, C., Raeke, J., Seiwert, B., & Reemtsma, T. (2016). Sunlight photolysis of benzotriazoles– Identification of transformation products and pathways. *Chemosphere*, 154, 416-424.

Weiss S, & Reemtsma T (2008). Membrane bioreactors for municipal wastewater treatment–A viable option to reduce the amount of polar pollutants discharged into surface waters?. *Water research*, 42(14), 3837-3847.

Wu X; Chou N; Lupher D; Davis L C (1998): Benzotriazoles: toxicity and degradation, *Proceedings of the 13th annual Conference on Hazardous Waste Research*, Kansas State University Manhattan: Kansas, USA: 374–384.