



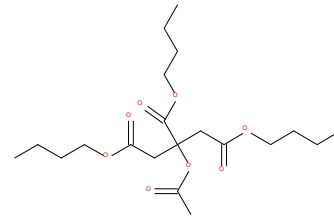
Acetyltributylcitrat

Acetyltributylcitrat wird als Weichmacher, z. B. in PVC-Folien eingesetzt. Außerdem findet es als Filmbildner Einsatz in Nagellacken und Cremes.

Molare Masse:
402.479 g/mol

CAS:
77-90-7

$C_{20}H_{34}O_8$



Die Messungen des LANUV erfüllen die folgenden zur eindeutigen Identifizierung notwendigen Kriterien:

- 1) Übereinstimmung der exakten Masse, ± 5 ppm
- 2) Übereinstimmung des Isotopenpattern, mind. 70 %
- 3) Übereinstimmung mit einem Vergleichsspektrum
- 4) Übereinstimmung der Retentionszeit mit der Referenzsubstanz

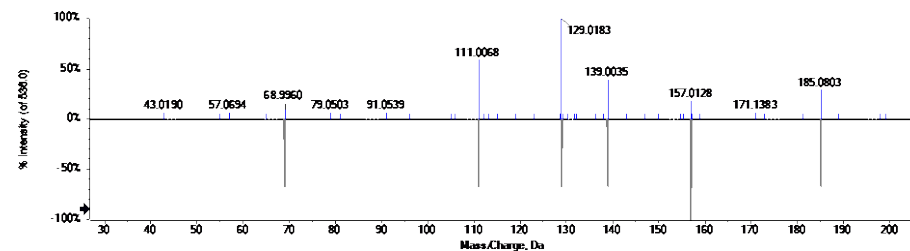


Abb. 1: Vergleich der Fragmentationenspektren, blau: Probe Wuppertal bei Opladen, grau: Referenzsubstanz

Analytik und Vorkommen

Acetyltributylcitrat lässt sich mit der vorhandenen Messmethode im positiven Modus nachweisen. Es konnte mit unterschiedlicher Intensität in fast allen untersuchten Gewässern (Rhein, Ruhr, Wupper) nachgewiesen werden und zählt somit zu den ubiquitären Stoffen. In einigen Gewässern wird der allgemeine Vorsorgewert von $0.1 \mu\text{g/L}$ überschritten.

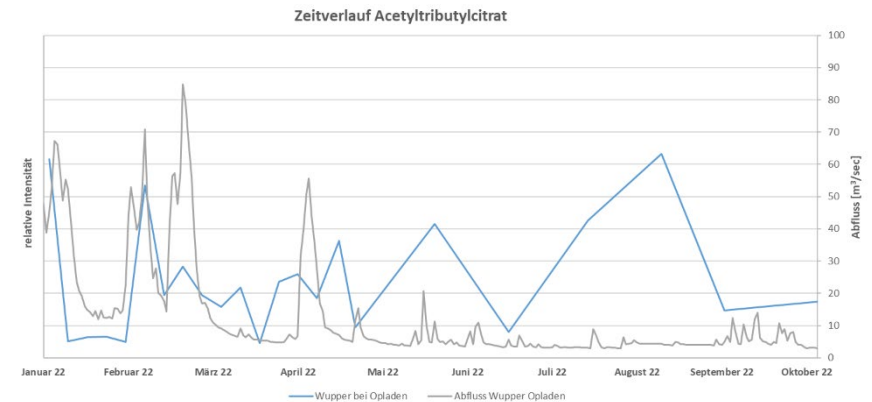


Abb. 2: Zeitverlauf von Acetyltributylcitrat in der Wupper bei Opladen

Relevanz

Für Acetyltributylcitrat gibt es keine gesetzlich verbindlichen Grenzwerte für das Trinkwasser. Zur Bewertung wird deshalb der allgemeine Vorsorgewert von $0.1 \mu\text{g/L}$ für das Schutzgut Trinkwasser verwendet. Aufgrund seiner (mo-



dellierten) Stoffeigenschaften (hohe Sorption an Bodenpartikel, geringe Mobilität, biologisch abbaubar^{1,2}) ist der Stoff bei der bisherigen Datenlage als nicht potenziell trinkwasserrelevant einzustufen. Bisher liegen keine Daten für Acetyltributylcitrat zum Verhalten in der Trinkwasseraufbereitung vor.

Für Acetyltributylcitrat sind Daten in der Datenbank der Europäischen Chemikalienagentur ECHA abrufbar. Es liegen akute Endpunkte für drei trophische Ebenen (Algen, Daphnien, Fische) vor, sowie chronische Daten für Algen und Daphnien. Die niedrigsten chronischen Ergebnisse für Algen und Daphnien liegen dabei im Bereich zwischen 0.1 – 1.1 mg/L. Die Ergebnisse variieren teilweise deutlich, ohne dass der Grund hierfür aus der Literatur nachvollziehbar ist. Deshalb wurde auch die in der ECHA Datenbank aufgeführte PNEC (Predicted No Effect Concentration) nicht übernommen.

Die in der ECHA Datenbank¹ aufgeführten Daten weisen Acetyltributylcitrat als biologisch abbaubar aus. Modellierete Bioakkumulationsfaktoren weisen auf ein geringes Bioakkumulationspotential hin.

Für Acetyltributylcitrat liegt nach der EU-Verordnung 1272/2008 (CLP-VO) keine gefahrstoff-rechtliche Einstufung vor³. Von der Europäischen Behörde für Lebensmittelsicherheit (EFSA) wurde 2005 eine erlaubte Tagesdosis in Höhe von 1 mg/kg KG/d abgeleitet⁴.

Weiteres Vorgehen:

Obwohl Acetyltributylcitrat ubiquitär ist und den Vorsorgewert von 0.1 µg/L in einigen Gewässern überschreitet, wird der Stoff nicht in die Regelüberwachung aufgenommen. Durch weitere Messungen ist kein zusätzlicher Erkenntnisgewinn zu erwarten.

¹ ECHA – registration dossier, <https://echa.europa.eu/de/registration-dossier/-/registered-dossier/13143/5/3/1>
(Abruf: 17.05.2022)

² http://www.chemspider.com/Chemical-Structure.6259.html?rid=c4721703-ebbe-44a6-af4c-52d255679290&page_num=0 (Abruf: 17.05.2022)

³ ECHA (2022), C&L-Inventory Database, Tributyl O-acetylcitrate, <https://echa.europa.eu/de/information-on-chemicals/cl-inventory-database/-/discli/details/111970> (Abruf: 20.05.2022)

⁴ EFSA (2005), Opinion of the Scientific Panel on food additives, flavourings, processing aids and materials in contact with food (AFC) on a request related to a 10th list of substances for food contact materials, The EFSA Journal (2005) 273, p 21 of 26, <https://efsa.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.2903/j.efsa.2005.273a>