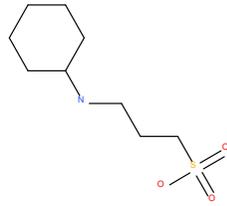




3-Cyclohexyl-1-propylsulfonsäure (CAPS)

CAPS ist eine Chemikalie, die in der Biochemie als Puffer-substanz verwendet wird.

Molare Masse:
221.317 g/mol
CAS: 1135-40-6
C₉H₁₉NO₃S



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

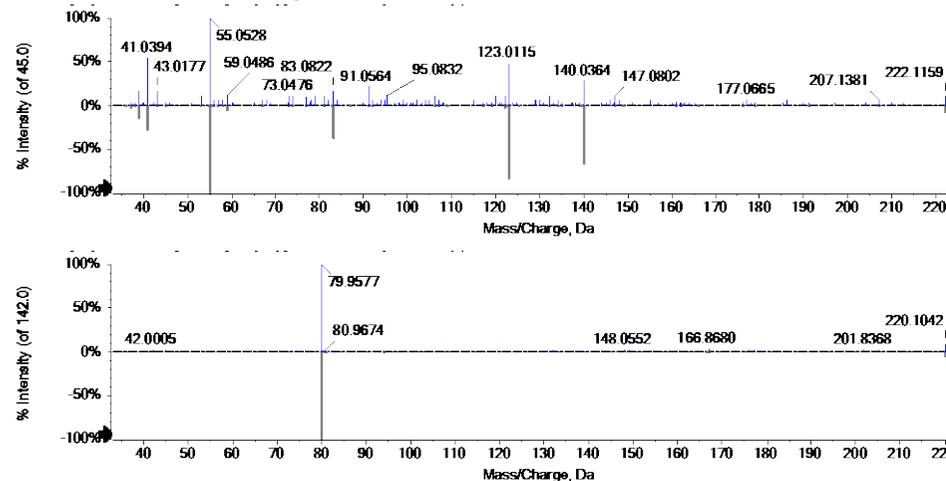


Abb. 1: Vergleich der Fragmentationenspektren, blau: Probe Rhein bei Flehe, grau: Referenzsubstanz; oben: ESI positiv; unten: ESI negativ

Analytik und Vorkommen

CAPS lässt sich mit der vorhandenen Messmethode (LC-ESI-HRMS) im positiven und negativen Modus nachweisen. Es konnte nur im Rhein nachgewiesen werden, in allen anderen untersuchten Gewässern (Ems, Emscher, Erft, Lippe, Ruhr und Wupper) konnte es nicht nachgewiesen werden. Im Rhein wird der allgemeine Vorsorgewert von 0.1 $\mu\text{g/L}$ immer wieder überschritten (siehe Zeitverlauf, $\Delta = 0.57 \mu\text{g/L}$).

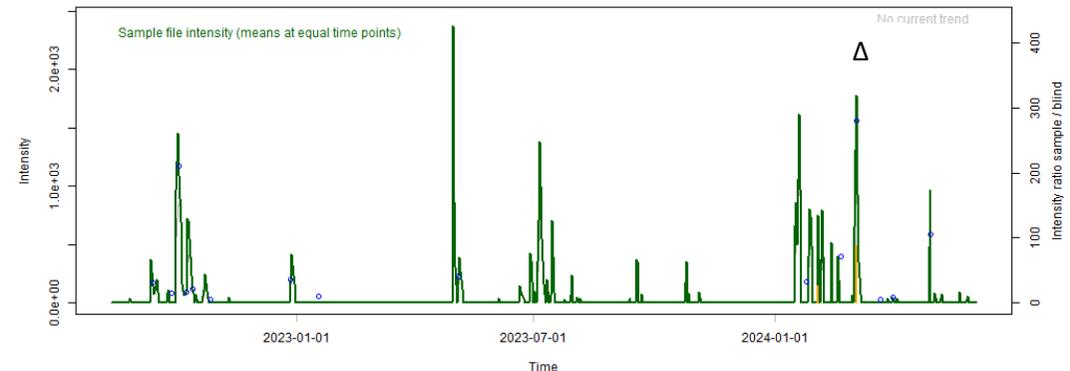


Abb. 2: Zeitverlauf von CAPS im Rhein bei Bad Honnef

Relevanz

Für CAPS liegt in der Datenbank der Europäischen Chemikalienagentur ECHA zur Ökotoxikologie ein akuter Datensatz vor. Die Ergebnisse zeigen für Mikroorganismen, Algen, Wasserflöhe und Fische keine akute Toxizität bis in den dreistelligen mg/L-Bereich.



Ergebnisse aus chronischen ökotoxikologischen Tests liegen nicht vor. ⁽¹⁾

Die bei der ECHA verfügbaren Daten zum Umweltverhalten weisen den Stoff als nicht leicht biologisch abbaubar aus. Ein hohes Bioakkumulationspotential ist nicht zu erwarten.

Weiteres Vorgehen:

Durch die Ergebnisse aus dem Rheinprojekt Non-Target-Screening (<https://www.iksr.org/de/iksr/rhein-2040/rhine-project-non-target-screening>) konnte die Einleitung auf die Region zwischen Karlsruhe und Koblenz eingegrenzt werden.

CAPS wird im Rahmen des regulären Non-Target-Screenings weiter beobachtet.

¹ ECHA: CAPS, <https://chem.echa.europa.eu/100.013.175/dossier-view/c271446d-ff85-44a5-80d8-eab76d81ecdf/4517f534-5bc3-4555-9f02-34ce2860abda> 4517f534-5bc3-4555-9f02-34ce2860abda, aufgerufen am: 27.03.2024