



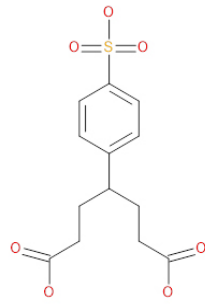
### 4-(4-Sulfophenyl)heptandisäure

4-(4-Sulfophenyl)heptandisäure gehört zu den Sulfophenylalkyldicarbonsäuren (SPADCs). Aufgrund der unzureichenden Datenlage ist nicht viel zur Verwendung bekannt. Es wird der Gruppe der Tenside zugeordnet und als Abbauprodukt von linearen Alkylbenzolsulfonaten (LAS) beschrieben.

Molare Masse:  
316.33 g/mol

CAS: -

C<sub>13</sub>H<sub>16</sub>O<sub>7</sub>S



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

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

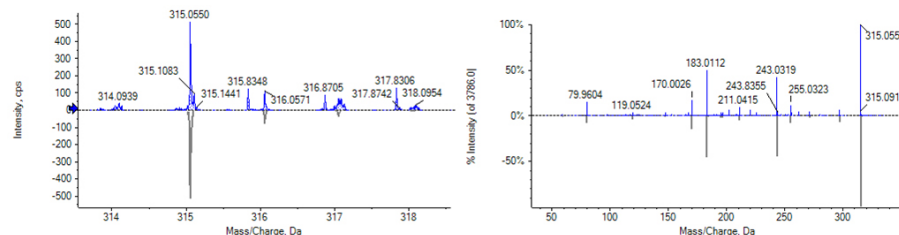


Abb. 1: links: Vergleich Isotopenpattern, blau: Probe Rhein bei Bad Honnef, grau: theoretisches Isotopenpattern; rechts: Vergleich Fragmentationenspektren, blau: Probe Rhein bei Bad Honnef, grau: Referenzsubstanz

### Analytik und Vorkommen

4-(4-Sulfophenyl)heptandisäure lässt sich mit der vorhandenen Messmethode im negativen Modus nachweisen. Es konnte mit unterschiedlicher Intensität in fast allen untersuchten Gewässern (Rhein, Sieg, Ruhr, Emscher, Lippe) nachgewiesen werden und zählt somit zu den ubiquitären Stoffen.

Im Rhein steigt die Konzentration von 4-(4-Sulfophenyl)heptandisäure über die Wintermonate an und sinkt in den Sommermonaten wieder, ein eindeutiger Einfluss der Abflussmengen konnte über die letzten drei Jahre nicht beobachtet werden. Es könnte sich möglicherweise um einen saisonalen Einsatz oder einen produktionsbedingten Anstieg handeln. Im Rhein beträgt die durchschnittliche Konzentration der Grundbelastung 0.1  $\mu\text{g/L}$  und steigt mindestens um den Faktor fünf in den Wintermonaten (s. Abb. 2).

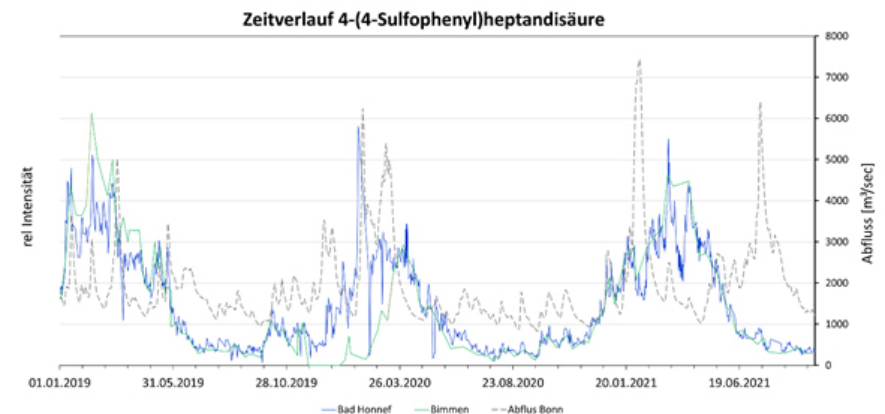


Abb. 2: Zeitverlauf 2019-2021 von 4-(4-Sulfophenyl)heptandisäure im Rhein bei Bad Honnef und Bimmen mit Abfluss<sup>1</sup> des Rheins bei Bonn

<sup>1</sup> Wasserstraßen- und Schifffahrtsverwaltung des Bundes (WSV), bereitgestellt durch die Bundesanstalt für Gewässerkunde (BfG). Dies gilt für Erst-, Zweit- und jedwede Nachnutzung.



Einzelmessungen des Rheins zwischen Rheinkilometer 697 bis 852 zeigen, dass die höher belastete Emscher einen kurzzeitigen Anstieg der Konzentrationen im Rhein verursacht.

### Relevanz

Für 4-(4-Sulfophenyl)heptandisäure gibt es keine gesetzlich verbindlichen Grenzwerte für das Trinkwasser. Zur Bewertung wird deshalb der allgemeine Vorsorgewert von 0.1 µg/L verwendet. Bislang liegen keine Daten zum Verhalten in der Trinkwasseraufbereitung vor. Aufgrund nicht bzw. kaum verfügbarer Daten zu Stoffeigenschaften und zur Toxizität ist für den Stoff bis dato keine Bewertung hinsichtlich der Trinkwasserrelevanz möglich.

Es liegen keine ökotoxikologischen Daten für den Stoff vor. Der modellierte log P weist nicht auf ein erhöhtes Bioakkumulationspotential hin. Daten zur Bewertung der Persistenz von 4-(4-Sulfophenyl)heptandisäure liegen nicht vor.

### Weiteres Vorgehen:

4-(4-Sulfophenyl)heptandisäure zählt zu den ubiquitären Stoffen, da es in allen untersuchten Gewässern nachgewiesen werden konnte. Trotz der Einträge durch die verschiedenen Nebenflüsse, deutet der Vergleich der Zeitverläufe an der Messstation in Bad Honnef (Eintritt des Rheins in NRW) und in Bimmen (Ende des Rheins in NRW) nach Durchmischung daraufhin, dass es keinen nennenswerten Einfluss auf die Grundbelastung des Rheins durch Nebenflüsse gibt.

Um einen möglichen Einleiter zu ermitteln und den Anstieg der Grundbelastung in den Wintermonaten aufzuklären werden im entsprechenden Zeitraum weitere Messungen geplant.