

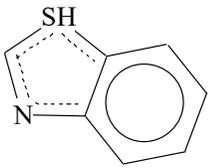
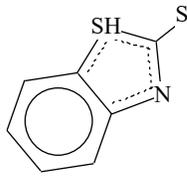
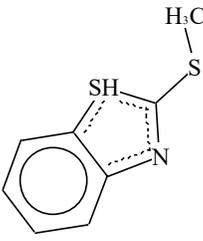
# Stoffdatenblattentwurf für Benzothiazole (Stand 24/05/2011, Einarbeitung des Gutachtens am 19/01/2012)

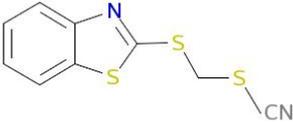
## Einführende Bemerkung

Dieses Stoffdatenblatt beinhaltet Informationen über die vier Benzothiazole 1,3-Benzothiazol (BT), 3H-1,3-Benzothiazole-2-thione (MBT), 2-Methylsulfanyl-1,3-Benzothiazol (MTBT) und 1,3-Benzothiazol-2-ylsulfanylmethyl thiocyanate (TCMTB). Die physikalischen Parameter sowie ein Vergleich der Ökotoxizität werden für alle vier Stoffe angegeben. Ein AA-EQS und MAC-EQS wird allerdings nur für 1,3-Benzothiazol hergeleitet, da dieser Stoff eine hohe Umweltrelevanz besitzt. Aufgrund der hohen Toxizität von TCMTB wäre eine Bestimmung der Umweltrelevanz zusätzlich zu empfehlen.

## Physikochemische Parameter

**Tab. 1:** Geforderte Identitäts- und physikochemische Parameter nach dem TGD for EQS für Benzothiazole. 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) 1,3-benzothiazole (BT) (b) 3H-1,3-benzothiazole-2-thione (MBT) (c) 2-methylsulfanyl-1,3-benzothiazole (MTBT) (d) 1,3-benzothiazol-2-ylsulfanylmethyl thiocyanate (TCMTB)	<a href="http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/">http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/</a>
<i>Chemische Gruppe</i>	Heterozyklische Thiazole	<a href="http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov">http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov</a>
Strukturformel	<div style="text-align: center;"> <p>(a) </p> <p>(b) </p> <p>(c) </p> </div>	US EPA 2008, <a href="http://esis.jrc.ec.europa.eu">http://esis.jrc.ec.europa.eu</a>

Eigenschaften	Wert	Referenz
	<p><b>(d)</b></p> 	
CAS-Nummer	(a) 95-16-9 (b) 149-30-4 (c) 615-22-5 (d) 21564-17-0	<a href="http://esis.jrc.ec.europa.eu">http://esis.jrc.ec.europa.eu</a>
EINECS-Nummer	(a) 202-396-2 (b) 205-736-8 (c) 210-417-1 (d) 244-445-0	<a href="http://esis.jrc.ec.europa.eu">http://esis.jrc.ec.europa.eu</a>
Summenformel	(a) C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> NS (b) C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> NS <sub>2</sub> (c) C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> NS <sub>2</sub> (d) C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> S <sub>3</sub>	<a href="http://esis.jrc.ec.europa.eu">http://esis.jrc.ec.europa.eu</a>
SMILES-code	(a) <chem>c1c(sc(n1)cccc2</chem> (b) <chem>c1c(sc(n1)S)cccc2</chem> (c) <chem>c1c(sc(n1)SC)cccc2</chem> (d) <chem>c1c(sc(n1)SCSC#N)cccc2</chem>	<a href="http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/">http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/</a>
Molekulargewicht (g·mol <sup>-1</sup> )	(a) 135.18 (b) 167.24 (c) 181.27 (d) 238.34	US EPA 2008
Schmelzpunkt (°C)	(a) 2 (exp) (b) 181 (exp) (c) 44 (exp) (d) 153.22 (est, mean or weighted MP)	<a href="http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus">http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus</a> (a,b,c); US EPA 2008 (d; MPBPVP v1.43)
Siedepunkt (°C)	(a) 231 (exp); 248.94 (est, adapted Stein & Brown method) (b) 301.80 (est, adapted Stein & Brown method) (c) 310.03 (est, adapted Stein & Brown method) (d) 404.84 (est, adapted Stein & Brown method)	<a href="http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus">http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus</a> (a); US EPA 2008 (a,b,c,d; MPBPVP v1.43);
Dampfdruck (Pa)	(a) 9.89 (est, mean VP of Antoine & Grain methods) (b) 3.00E-04 (exp, according to OECD 104); 5.61E-03 (est, modified Grain method) (c) 0.102 (est, modified Grain method) (d) 4.16E-005 (est, modified Grain method)	US EPA 2008 (a,b,c,d; MPBPVP v1.43) <a href="http://esis.jrc.ec.europa.eu">http://esis.jrc.ec.europa.eu</a> (b)
Henry's-Konstante (Pa·m <sup>3</sup> ·mol <sup>-1</sup> )	(a) 3.79E-02 (est, Bond Method) und 7.941E-01 (est) (b) 1.727E-003 (est, Bond Method) und 3.67E-03 (est) (c) 1.10E-03 (est, Bond Method) und 1.675E-01 (est) (d) 6.58E-07 (est, Bond Method) und 2.379E-04 (est)	US EPA 2008 (HENRYWIN v3.20)
Wasserlöslichkeit (mg·L <sup>-1</sup> )	(a) 3000 (exp); 4300 (exp) and 1684 (est, log Kow used: 2.01) (b) 120 (exp); 543.4 (est, log Kow used: 2.42) (c) 125 (exp); 110.8 (est, log Kow used: 3.15)	Brownlee 1992 (a,b,c,d); US EPA 2008 (a,b,c,d; WSKOW v1.41)

Eigenschaften	Wert	Referenz
	(d) 40 (exp); 41.67 (est, log K <sub>ow</sub> used: 3.30)	
pK <sub>a</sub>	(a) 1.75 (est) (b) 6.93 (exp); 1.01/2.22 (est) (c) 0.30 (est) (d) -0.67 (est)	<a href="http://sparc.chem.uga.edu/sparc/">http://sparc.chem.uga.edu/sparc/</a> (a,b,c,d); <a href="http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus">http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus</a> (b)
<i>n</i> -Octanol/Wasser Verteilungskoeffizient (log K <sub>ow</sub> )	(a) log K <sub>ow</sub> = 2.01 (exp); log K <sub>ow</sub> = 1.99 (exp) (b) log K <sub>ow</sub> = 2.42 (exp); log K <sub>ow</sub> = 2.41 (exp) (c) log K <sub>ow</sub> = 3.15 (exp); log K <sub>ow</sub> = 3.10 (exp) (d) log K <sub>ow</sub> = 3.3 (exp); log K <sub>ow</sub> = 3.12 (exp)	US EPA (a,b,c,d); Brownlee 1992 (a,b,c,d)
Sediment/ Wasser Verteilungskoeffizient (log K <sub>oc</sub> or log K <sub>p</sub> )	(a) log K <sub>oc</sub> = 1.744 (est, K <sub>ow</sub> method) und log K <sub>oc</sub> = 2.928 (est, MCI method) (b) log K <sub>oc</sub> = 2.1 (est, K <sub>ow</sub> method) und log K <sub>oc</sub> = 3.133 (est, MCI method) (c) log K <sub>oc</sub> = 2.733 (est, K <sub>ow</sub> method) und log K <sub>oc</sub> = 3.414 (est, MCI method) (d) log K <sub>oc</sub> = 3.528 (est, K <sub>ow</sub> method) und log K <sub>oc</sub> = 3.143 (est, MCI method)	US EPA 2008 (KOCWIN v2.00)

## **Allgemeines**

### **Anwendung**

Von den vier Benzothiazolen haben vor allem 3H-1,3-benzothiazole-2-thione (MBT) und 1,3-benzothiazol-2-ylsulfanylmethyl thiocyanate (TCMTB) Anwendungsbedeutung. MBT wird hauptsächlich als Vulkanisationsbeschleuniger in der Gummiherstellung verwendet sowie als Korrosionsinhibitor (Reemtsma et al. 1995). TCMTB wird aufgrund seiner antimikrobiellen Eigenschaften als Biozid in diversen Materialien, Industrierwasserbehandlung und als Pestizid appliziert (US EPA 2006; Nawrocki et al. 2005). Weitere Anwendungsgebiete von Benzothiazolen sind Farbherstellung, Pharmakologie, Photographie, Frostschutzmittel, Erzgewinnung, (Reemtsma et al. 1995; Evans et al. 2000).

MBT und TCMTB werden relativ schnell zu den persistenten Derivaten 1,3-benzothiazole (BT) und 2-methylsulfanyl-1,3-benzothiazole (MTBT) abgebaut (Brownlee et al. 1992).

BT findet ausserdem direkte Anwendung als Geschmacksstoff oder Zusatzstoff, Antibiotikum und Vulkanisationsbeschleuniger in der Gummiherstellung (TOXNET).

### **Wirkungsweise:**

Benzothiazole bewirken generell eine Inhibition der Atmung und Nitrifikation/Denitrifikation in gemischten Bakterienkulturen wie sie in Kläranlagen oder Sedimenten vorkommen (Reemtsma et al. 1995; De Wever and Verachtert 1997).

Die toxischen Effekte von MBT konnten De Wever and Verachtert (1997) den komplexbildenden Eigenschaften des Stoffes und/oder, im speziellen, der Beeinträchtigung von membrangebundenen (Co)enzymen zuordnen.

Die im Vergleich zu den übrigen Benzothiazolen relativ hohe Toxizität von TCMTB basiert vermutlich auf der Beeinträchtigung des Sauerstoffaustausches in Fischen durch Schädigung der Kiemen (Nikl und Farrell 1993), eine relativ hohe Toxizität wurde jedoch auch in Kleinkrebsen beobachtet (Nawrocki et al. 2005).

### **Analytik**

Die Nachweisgrenzen von BT und MTBT durch GC/GC-TOF-MS in Oberflächenwasser liegt derzeit bei 5 resp. 6 ng/L und bei 10 resp. 12 ng/L in Abwasser (Jover et al. 2009). Das Detektionslimit für TCMTB durch LC-MS-ES liegt für Oberflächengewässer bei 1 ng/L (Mezcua et al. 2002).

## Ökotoxikologische Parameter

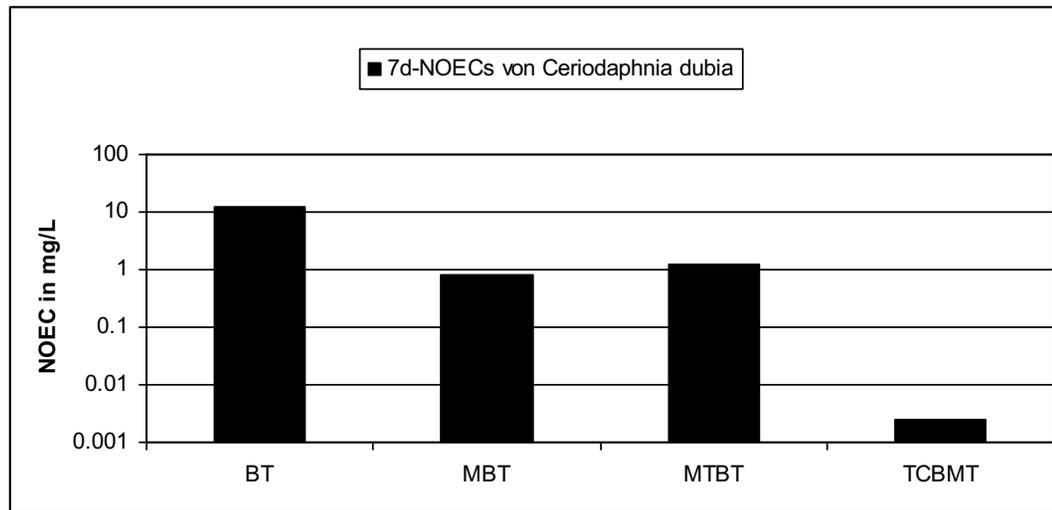
**Tab.2:** Effektdatensammlung für 1,3-Benzothiazol (BT). Literaturdaten die in grau dargestellt wurden können nach dem TGD for EQS nicht direkt zur EQS-Herleitung verwendet werden, sollen aber als zusätzliche Information genannt werden. Eine Bewertung der Validität wurde nach den Klimisch-Kriterien (Klimisch et al. 1997) durchgeführt. Eine Unterscheidung in nominale und tatsächliche Testkonzentration wurde in der Tabelle nicht vollzogen, aber für die EQS-relevanten Studien (siehe Tab. 4 und 5) wurden nur Studien verwendet bei denen eine signifikante Abweichung unwahrscheinlich ist.

EFFEKTDATENRECHERCHE 1,3-BENZOTHIAZOL										
Sammel-bezeichnung	Organismus	Endpunkt	Dauer	Dimension	Para-meter	Ope-rator	Wert	Einheit	Vali-dität	Literaturquelle
<b>akute Effektdaten</b>										
Bakterien	<i>Vibrio fischeri</i>	Lumineszenz	30	min	EC 50	=	4	mg/L	2	Fiehn et al. 1997
Bakterien	<i>Vibrio fischeri</i>	Lumineszenz	30	min	EC 50	=	4.33	mg/L	2	Reemtsma et al. 1995
Bakterien	<i>Vibrio fischeri</i>	Lumineszenz	30	min	EC 50	=	1.31	mg/L	2	UBA 1996c
Bakterien	<i>Vibrio fischeri</i>	Lumineszenz	30	min	EC 50	=	2.09	mg/L	2	Kaiser 1991
Protozoa	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	Wachstum	24	h	EC 50	=	160	mg/L	2	Yoshioka et al. 1986a and Yoshioka 1985
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Zellvermehrungshemmung (Biomasse)	78	h	EC 50	=	44	mg/L	2	UBA 1996b
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Zellvermehrungshemmung (Wachstumsrate)	3	d	EC 50	=	137	mg/L	2	UBA 1996b
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Immobilisierung	48	h	EC 50	=	24.6	mg/L	2	Nawrocki et al. 2005
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Immobilisierung	48	h	NOEC	=	10.62	mg/L	2	Nawrocki et al. 2005
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Immobilisierung	48	h	LOEC	=	18.6	mg/L	2	Nawrocki et al. 2005
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Immobilisierung	24	h	NOEC	=	17.3	mg/L	2	UBA 1996a
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Immobilisierung	24	h	EC 50	=	ca. 26	mg/L	2	UBA 1996a
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Immobilisierung	48	h	NOEC	=	12.4	mg/L	2	UBA 1996a
Krebstiere	<i>Daphnia magna</i>	Immobilisierung	48	h	EC 50	=	24.7	mg/L	2	UBA 1996a
Fische	<i>Cyprinodon variegatus</i>	Mortalität	7	d	LOEC	=	60	mg/L	3	Evans et al. 2000
Fische	<i>Danio rerio</i>	Mortalität	96	h	NOEC	=	65.5	mg/L	2	Bayer 1995
Fische	<i>Oryzias latipes</i>	Mortalität	48	h	LC 50	=	110	mg/L	2	Yoshioka et al. 1986a and Yoshioka et al. 1986b
Fische	<i>Oryzias latipes</i>	Mortalität	96	h	LC 50	=	63	mg/L	2	Yoshioka und Ose 1993
Fische	<i>Pimephales promelas</i>	Mortalität	96	h	LC 50	=	64	mg/L	4	Geiger et al. (1990) as cited in US-EPA Ecotox
<b>subchronische und chronische Effektdaten</b>										
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Zellvermehrungshemmung (Wachstumsrate)	72	h	EC 10	=	26	mg/L	2	UBA 1996b
Algen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	Zellvermehrungshemmung (Biomasse)	72	h	EC 10	=	9.9	mg/L	2	UBA 1996b
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Reproduktion	7	d	LOEC	=	24.28	mg/L	2	Nawrocki et al. 2005
Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Reproduktion	7	d	NOEC	=	11.92	mg/L	2	Nawrocki et al. 2005

Das Verhältnis der NOEC-Werte für *Ceriodaphnia dubia* zwischen 48h- und 7d-Reproduktion zeigt eine Toxizitätsverringern auf. Diese wurde von den Autoren durch Adsorption von Benzothiazolen an Nahrungspartikeln erklärt (Nawrocki et al. 2005), daher wurde der 7d Test als ausreichend valide bewertet. Trotz des, systematischen Einflusses, lassen sich die Toxizitätsunterschiede der 4 Substanzen, bzw. Benzothiazolspeziationen vergleichend gegenüberstellen.

**Tab.3:** Gegenüberstellung chronischer Toxizität aller vier Benzothiazolspeziationen auf *Ceriodaphnia dubia*.

STOFF	SAMMEL-BEZEICHNUNG	ORGANISMUS	ENDPUNKT	DAUER	DIMENSION	PARAMETER	OPERATOR	WERT	EINHEIT	LITERATURQUELLE
BT	Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Reproduktion	7	d	NOEC	=	11.92	mg/L	Nawrocki et al. 2005
MBT	Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Reproduktion	7	d	NOEC	=	0.839	mg/L	Nawrocki et al. 2005
MTBT	Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Reproduktion	7	d	NOEC	=	1.21	mg/L	Nawrocki et al. 2005
TCMTB	Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Reproduktion	7	d	NOEC	=	0.0025	mg/L	Nawrocki et al. 2005
BT	Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Reproduktion	7	d	LOEC	=	24.28	mg/L	Nawrocki et al. 2005
MBT	Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Reproduktion	7	d	LOEC	=	1.43	mg/L	Nawrocki et al. 2005
MTBT	Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Reproduktion	7	d	LOEC	=	2.79	mg/L	Nawrocki et al. 2005
TCMTB	Krebstiere	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	Reproduktion	7	d	LOEC	=	0.0056	mg/L	Nawrocki et al. 2005



**Abb. 1** Reproduktionstoxizität von *Ceriodaphnia dubia* für vier Benzothiazole.

BT weist die höchsten NOEC und LOEC-Werte (siehe Tab. 3 und Abb. 1) auf während die Toxizität von MBT und MTBT etwa eine Grössenordnung höher liegt. TCBMT weist eine 1000 – 10000 mal höhere Toxizität auf als die übrigen Benzothiazole. Die Aussage zur relativ hohen Toxizität von TCBMT wird auch durch die Early Life Stage Test (ELS) Ergebnisse mit *Oncorhynchus mykiss* gestützt. Für die Endpunkte Wachstum und Schlupfrate wurde ein NOEC von 0.00034 mg/L angegeben (US EPA 2006).

## Graphische Darstellung der akuten Toxizitätsdaten

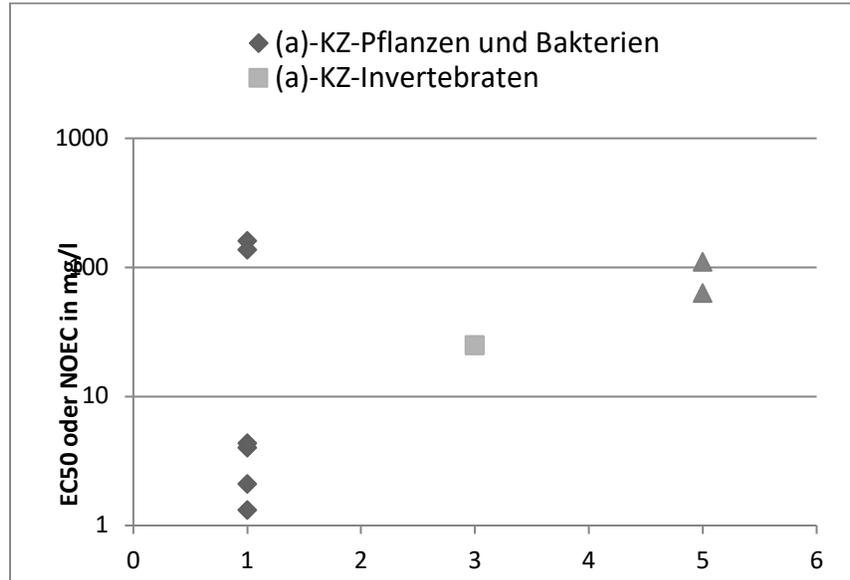


Abb. 2: Kurzzeit (KZ)-Effektwerte von 1,3-Benzothiazol für aquatische Organismen.

## Graphische Darstellung der Langzeit-Toxizitätsdaten

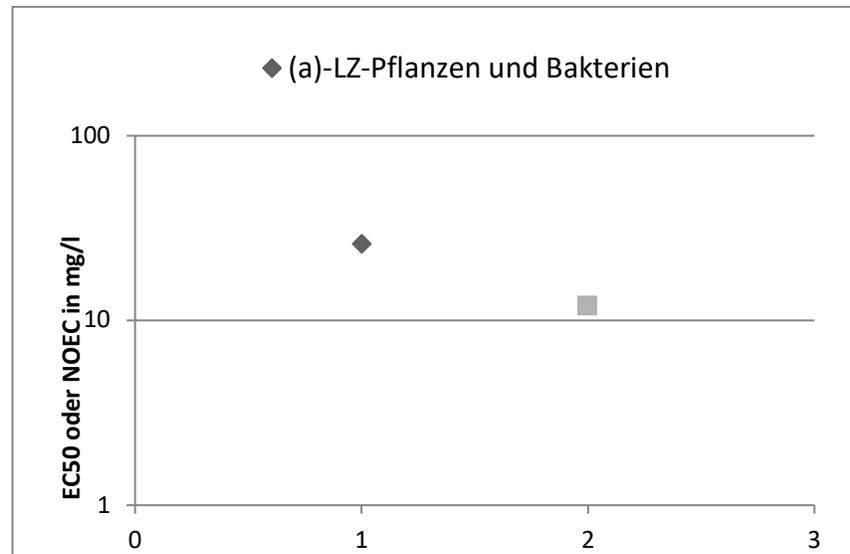


Abb. 3: Langzeit (LZ)-Effektdaten von 1,3-Benzothiazol für aquatische Organismen.

## Zusammenstellung der kritischen Toxizitätswerte für 1,3-Benzothiazol

## Stabilität des Benzothiazols

Benzothiazol ist relativ gut wasserlöslich und ist ein stabiles Abbauprodukt anderer Benzothiazole (Brownlee et al 1992 und De Wever and Verachert 1997), damit ist eine signifikante Abweichung zwischen der nominalen und der Expositions-konzentration bei den akuten Kurzzeittests unwahrscheinlich. In den längeren Versuchsansätzen, wie z.B. mit *Ceriodaphnia dubia* und 7 tägiger Exposition wurde ein semistatischer Ansatz mit täglicher Testmediumerneuerung verwendet, was ebenfalls die Belastbarkeit der Versuchsergebnisse unterstützt.

## Langzeittoxizität

Tab. 4: Übersicht der kritischen Langzeittoxizitätswerte von 1,3-Benzothiazol auf Wasserorganismen.

Gruppe	Spezies	Wert	Konz. in mg/l	Literatur
Algen/ Wasserpflanzen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	EC10	9.9	UBA 1996b
Kleinkrebse	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	NOEC	11.92	Nawrocki et al. 2005
Fische	keine	-	-	-

Zwei belastbare Langzeiteffektdaten sind von zwei unterschiedlichen trophischen Ebenen vorhanden (Krebstiere und Algen). Nach TGD for EQS wird Wachstum als Endpunkt gegenüber der Biomasse bevorzugt. Da der EC10 Wert von 9.9 mg/L auf dem Wachstumsparameter Biomasse basiert und der Endpunkt Wachstumsrate bei 26 mg/L liegt, wird die nächst sensitivere Studie im Langzeitdatensatz zur EQS-Herleitung verwendet (Nawrocki et al. 2005), welche numerisch auch nur geringfügig vom Biomassenendpunkt der Algenstudie abweicht:

$$\text{AA-EQS} = 11.92 \text{ mg/l} / 50 = 238.4 \text{ } \mu\text{g/l}$$

## Kurzzeittoxizität

**Tab. 5:** Übersicht der kritischen akuten Toxizitätswerte von 1,3-Benzothiazol auf Wasserorganismen.

Gruppe	Spezies	Wert	Konz. in mg/l	Literatur
Algen/ Wasserpflanzen	<i>Desmodesmus subspicatus</i>	EC50	44	UBA 1996b
Kleinkrebse	<i>Ceriodaphnia dubia</i>	EC50	24.6	Nawrocki et al. 2005
Fische	<i>Oryzias latipes</i>	EC50	63	Yoshioka und Ose 1993
Sonstige	<i>Tetrahymena pyriformis</i>	EC50	160	Yoshioka et al. 1986a

Es liegen EC 50-Werte für die Organismengruppen der Algen, Kleinkrebse und Fische vor. Um Kurzzeit-Qualitätskriterien (MAC-EQS) herzuleiten kann die AF-Methode auf der Datenbasis von akuten Toxizitätsdaten verwendet werden. Da mindestens 3 valide EC50-Kurzzeittestergebnisse von Vertretern der 3 trophischen Ebenen (Fische, Krebse, Algen) vorhanden sind, wird ein Assessmentfaktor von 100 mit dem EC50 der sensitivsten Studie (in diesem Fall mit *Ceriodaphnia dubia*) errechnet:

$$\text{MAC-EQS} = 24.6 \text{ mg/l} / 100 = 246 \text{ } \mu\text{g/l}$$

**Tab. 6:** Risikoklassierung der akuten aquatischen Toxizität anhand der niedrigsten gemessenen EC 50-Werte nach der Kommission der europäischen Gemeinschaften 2001.

Risikoklasse	niedrigster EC50-Wert	erreichter Wert
nicht eingestuft	>100 mg/l	
schädlich	>10 mg/l; <100mg/l	X
giftig	<10 mg/l;>1mg/l	
sehr giftig	< 1mg/l	

## Bioakkumulationsabschätzung

Mit einem Wert von 2.01 liegt der  $\log K_{ow}$  von 1,3-Benzothiazol unter 3 und es liegen keine Bioakkumulationsstudien oder besondere Hinweise für Säugertoxizität vor. Damit ist eine Bioakkumulationsabschätzung nach dem TGD for EQS nicht relevant.

## Schutz der aquatischen Organismen

Der Effektdatensatz für 1,3-Benzothiazol umfasst alle 3 trophischen Ebenen bei der Kurzzeittoxizitäten. Langzeitstudien lieferten kritische Toxizitätswerte für die taxonomischen Gruppen der Algen und Daphnien. . Die hergeleiteten **AA-EQS von 238.4 µg/L** und **MAC-EQS von 246 µg/L** für 1,3-Benzothiazol sollten einen ausreichenden Schutz für aquatische Organismen unterschiedlicher trophischer Ebenen bieten. Das Biozid 1,3-Benzothiazol-2-ylsulfanylmethyl thiocyanat (TCBMT) ist um mehrere Konzentrationsgrößenordnungen toxischer ist als die übrigen Benzothiazole, daher müsste seine Umweltrelevanz in Oberflächengewässern geprüft werden. In aquatischer Umgebung und unter Sonneneinstrahlung hat TCBMT eine Halbwertszeit von wenigen Stunden und wird zu seinen stabilen (und weniger toxischen) Derivate 1,3-Benzothiazol (BT) und 2-Methylsulfanyl-1,3-Benzothiazol (MTBT) abgebaut (Brownlee, Carey et al. 1992). In Grundwasser und bei kontinuierlichem Eintrag in Oberflächengewässer kann TCBMT jedoch aufgrund seiner sehr hohen Toxizität eine Gefahr für die Umwelt darstellen. Daher wäre für TCBMT eine analytische Überwachung zu empfehlen.

## Literatur

- Bayer AG (1995): Bewertung wassergefährdender Stoffe: Benzothiazol. Bayer AG, DE.
- Brownlee B, Carey J H G, et al. (1992): Aquatic environmental chemistry of 2-(thiocyanomethylthio)benzothiazole and related benzothiazoles. *Environmental Toxicology and Chemistry* 11(8):1153-1168.
- De Wever H, Verachtert H (1997): Biodegradation and toxicity of benzothiazoles. *Water Research* 31(11):2673-2684.
- Evans J J, Shoemaker C A, et al. (2000): *In vivo* and *in vitro* effects of benzothiazole on sheepshead minnow (*Cyprinodon variegatus*). *Marine Environmental Research* 50(1-5): 257-261.

- Fiehn O, Vigelahn L, et al. (1997): Toxicity-directed fractionation of tannery wastewater using solid-phase extraction and luminescence inhibition in microtiter plates. *Acta Hydrochimica et Hydrobiologica* 25(1):11-16.
- Kaiser K L E, Palabrica V S (1991): *Photobacterium Phosphoreum* Toxicity Data Index. *Water Poll. Res. J. Canada* 26(3):361-431.
- Mezcua M, Hernando M D, et al (2002): Chromatography-mass spectrometry and toxicity evaluation of selected contaminants in seawater. *Chromatographia* 56(3-4):199-206.
- 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.
- Nawrocki S T, Drake K D, et al (2005): Comparative aquatic toxicity evaluation of 2-(thiocyanomethylthio) benzothiazole and selected degradation products using *Ceriodaphnia dubia*. *Archives of Environmental Contamination and Toxicology* 48(3):344-350.
- Reemtsma T, Fiehn O, et al (1995): Microbial transformations and biological effects of fungicide-derived benzothiazoles determined in industrial wastewater. *Environmental Science and Technology* 29(2):478-485.
- TGD for EQS (2010): CHEMICALS AND THE WATER FRAMEWORK DIRECTIVE: TECHNICAL GUIDANCE FOR DERIVING ENVIRONMENTAL QUALITY STANDARDS. Draft Version 6.0. European Commission.
- TOXNET Database. <http://toxnet.nlm.nih.gov>.
- UBA (1996a) Testprotokoll Benzothiazol (CAS-Nr. 95-16-2 mit demakuten Daphnientest. Studie vom 21.03.1996 durchgeführt von J. Schmindling, M. Patterd. Institut für Wasser-, Boden- und Lufthygiene, Berlin, DE.
- UBA (1996b): Testprotokoll Benzothiazol (CAS-Nr. 95-16-2 mit dem Scenedesmus-Zellvermehrungs-Hemmtest. Studie vom 27.12.1995 durchgeführt von J. Schmindling, M. Patterd. Institut für Wasser-, Boden- und Lufthygiene, Berlin, DE.

- UBA(1996c): Testprotokoll Benzothiazol (CAS-Nr. 95-16-2 mit dem Leuchtbakterientest. Studie vom 28.11.1995 durchgeführt von J. Schmindling, M. Patterd. Institut für Wasser-, Boden- und Lufthygiene, Berlin, DE.
- US EPA (2006): Reregistration Eligibility Decision for 2-(Thiocyanomethylthio)-benzothiazole (TCMTB).
- US-EPA (2008): EPI Suite, v. 4, EPA's office of pollution prevention toxics and Syracuse Research Corporation (SRC).
- US EPA ECOTOX Database. <http://cfpub.epa.gov/ecotox>.
- Yoshioka Y (1985): Testing for the toxicity of chemicals with *Tetrahymena pyriformis*. The Science of the Total Environment 43: 149-157.
- Yoshioka Y, Nagase H, et al. (1986a): Evaluation of the test method 'activated sludge, respiration inhibition test' proposed by the OECD. Ecotoxicology and Environmental Safety 12(3):206-212.
- Yoshioka Y, Mizuno T, et al. (1986b): The estimation for toxicity of chemicals on fish by physico-chemical properties. Chemosphere 15 (2): 195-203.
- Yoshioka Y, Ose Y (1993): A quantitative structure-activity relationship study and ecotoxicological risk quotient for the protection from chemical pollution. Environmental Toxicology and Water Quality 8(1):87-101.