



3-(Trifluoromethyl)phenol

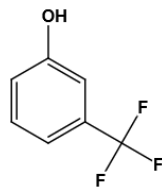
3-(Trifluoromethyl)phenol, teilweise auch als 3-Hydroxybenzotrifluorid oder α,α,α -Trifluoro-m-cresol bezeichnet, wird als Zwischenprodukt bei der Herstellung verschiedener chemischer

Verbindungen z. B. Pestizide verwendet.¹ Es ist nach der REACH-Verordnung registriert, wird im europäischen Wirtschaftsraum hergestellt und/oder eingeführt und wird in Industrieanlagen eingesetzt.²

Molare Masse:
162.11 g/mol

CAS: 98-17-9

$C_7H_5F_3O$



Die Messungen des LANUK 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

¹<https://www.ottokemi.com/research-essentials-chemicals/3trifluoromethylphenol-99-t-1889.aspx>; abgerufen am 03.11.2025

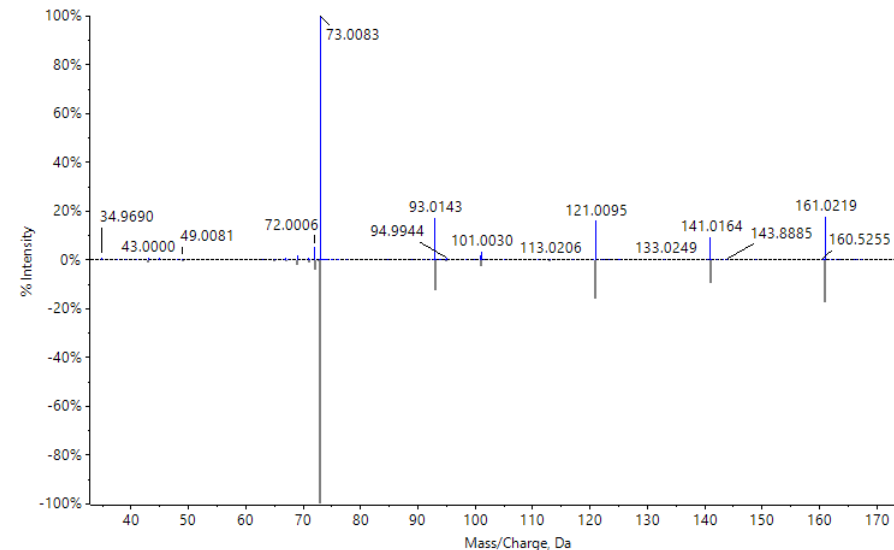


Abb. 1: Vergleich der Fragmentationenspektren (ESI negativ); blau: Kläranlagenablauf des Industriebetriebs; grau: Referenzsubstanz

Analytik und Vorkommen

Im Rahmen eines Messprogramms wird an ausgewählten Abwassereinleitungen in Nordrhein-Westfalen zusätzlich zur amtlichen Überwachung der Summenparameter AOF (adsorbierbares organisch gebundenes Fluor) analysiert. Dabei wurde im Kläranlagenablauf eines im Regierungsbezirk Köln ansässigen Industriebetriebs im Mai 2025 ein erhöhter AOF von 0,83 mg/L ge-

²<https://echa.europa.eu/mt/brief-profile/-/briefprofile/100.002.405>; abgerufen am 03.11.2025



messen. Die Probe wurde ebenfalls auf 30 Per- und polyfluorierte Alkylsubstanzen³ untersucht, wobei lediglich Perfluorbutansäure (0,078 µg/L), Perfluorbutansulfonsäure (0,089 µg/L) und Perfluorpentansäure (0,035 µg/L) oberhalb der unteren Anwendungsgrenze von 0,025 µg/L detektiert wurden. Die detektierten PFAS boten daher keine Erklärung für die hohe AOF-Konzentration. Infolgedessen wurde die Probe mittels des Non-Target-Screening (HPLC-HRMS) untersucht, wobei eine unbekannte Masse mit hoher Intensität detektiert wurde, welche durch einen Abgleich mit der Referenzsubstanz eindeutig als 3-(Trifluoromethyl)phenol identifiziert werden konnte. In der Abwasserprobe aus Mai 2025 wurde eine Konzentration von 406 µg/L 3-(Trifluoromethyl)phenol gemessen.

Relevanz

Für 3-(Trifluoromethyl)phenol liegen in der Datenbank der Europäischen Chemikalienagentur ECHA nur einzelne Versuchsergebnisse zur ökotoxikologischen Wirkung vor. Auf dieser Datengrundlage kann keine ökotoxikologische Bewertung erfolgen, zumal Ergebnisse aus chronischen Testsystemen fehlen.

Informationen aus der ECHA-Datenbank weisen 3-(Trifluoromethyl)phenol als nicht leicht biologisch abbaubar aus. Ein hohes Bioakkumulationspotential ist nicht zu erwarten.

³Umfang der gemessenen PFAS:

<https://www.lanuk.nrw.de/themen/themenebergreifende-aufgaben/gefahrstoffe/pfas/analytik>; abgerufen am 03.11.2025

⁴Umweltbundesamt (2021): Chemikalieneintrag in Gewässer vermindern – Trifluoressigsäure (TFA) als persistente und mobile Substanz mit vielen Quellen. https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/11850/publikationen/2021_hg_chemikalieneintrag_bf_v2.pdf; abgerufen am 03.11.2025

Für 3-(Trifluoromethyl)phenol gibt es keine gesetzlich verbindlichen Grenzwerte für das Trinkwasser. Zur Bewertung für das Schutzgut Trinkwassergewinnung wird deshalb der allgemeine Vorsorgewert von 0,1 µg/L verwendet.

In der Datenbank der Europäischen Chemikalienagentur ECHA wird der Stoff als nicht leicht biologisch abbaubar eingestuft. Weitere Daten zu Stoffeigenschaften oder dem Verhalten in der Trinkwasseraufbereitung sind derzeit nicht verfügbar. Auf Grundlage einer möglichen Bildung des trinkwasserrelevanten Stoffs Trifluoressigsäure (TFA, CAS-Nr.: 76-05-1) durch die vorhandene C-CF₃-Gruppe wird der Stoff 3-(Trifluoromethyl)phenol vorläufig als potenziell trinkwasserrelevant eingestuft.^{4; 5}

Sofern sich die Datenbasis hinsichtlich der Stoffeigenschaften und dem Umweltverhalten verbessert, ist die Einstufung des Stoffes zu überprüfen.

Weiteres Vorgehen:

Die zuständigen Wasserbehörden wurden über den Befund informiert und die zuständige Bezirksregierung wurde gebeten, den Verursacher über die Ergebnisse zu informieren. Der Kläranlagenablauf des Industriebetriebs wird weiter beprobt und untersucht, um zu klären, ob es sich um einen kontinuierlichen oder diskontinuierlichen Eintrag ins Abwasser handelt.

⁵Nachweis für die Bildung von Trifluoressigsäure aus Diflufenican (Quelle: The Danish Environmental Protection Agency: Geological Survey of Denmark and Greenland (2024): TriFluPest Trifluoressigsäure (TFA) fra pesticider. <https://www2.mst.dk/Udgiv/publikationer/2024/12/978-87-7038-688-3.pdf>; abgerufen am 03.11.2025)