

Endbericht des Forschungsprojekts im Auftrag des Thinktank Industrielle Ressourcenstrategien

# PFAS: ANWENDUNG, TECHNISCHE FUNKTIONEN UND SUBSTITUTIONSMÖGLICHKEITEN IN DER INDUSTRIE

Autoren

Prof. Dr.-Ing. Claus Lang-Koetz  
Dr. Ulrich Hutschek, Marius Heil



**PFAS**

# Inhaltsverzeichnis

1. Einführung und Zielsetzung	04
2. Einführung zu PFAS-Substanzen und deren Anwendung in der Industrie	06
3. Identifikation möglicher PFAS-Substitute	08
<b>3.1 Identifikation zu ersetzender PFAS-Funktionalitäten</b>	<b>08</b>
<b>3.2 Vorgehensweise zur Identifikation und Bewertung alternativer Materialien</b>	<b>10</b>
4. Identifizierte Materialien mit PFAS-Substitutionspotenzial	14
5. Bewertung des Substitutionspotenzials der identifizierten Materialien anhand konkreter Use Cases	17
<b>5.1 Anwendungsbeispiel Halbleitertechnik:</b>	
Optische Fotolithografie zur Herstellung von Mikrochips	18
<b>5.2 Anwendungsbeispiel Automobilindustrie</b>	<b>20</b>
<b>5.3 Anwendungsbeispiel Medizintechnik:</b>	
Resektoskop für minimalinvasive Prostata-Operationen	21
<b>5.4 Anwendungsbeispiel Pharmaindustrie:</b>	
Therapie des schweren trockenen Auges	23
6. Fazit und Ausblick	24
7. Literatur	27

# Vorwort

## **Wird mit dem angestrebten PFAS-Verbot der europäischen Kommission nicht gleich das „Kinde mit dem Bade ausgeschüttet“?**

Es ist unbestritten, dass einige PFAS (per- und polyfluorierte Alkylsubstanzen = PFAS) aufgrund ihrer persistierenden und bioakkumulierenden Eigenschaften Risiken für Gesundheit und Umwelt bergen. Zugleich gehört diese Substanzklasse mit über 10.000 Verbindungen aufgrund ihrer einzigartigen Merkmale – darunter chemische Stabilität, Wasser- und Fettresistenz, Gleitfähigkeit, Antihafteigenschaften sowie ihre Beständigkeit gegen Feuer und Hitze – zu den Eckpfeilern zahlreicher industrieller Anwendungen und Konsumentenprodukte.

Besonders betroffen von einem potenziellen Verbot wären Schlüsselindustrien, die für Zukunftstechnologien wie Energiewende und E-Mobilität, aber auch für Kernsektoren wie Chemie, Maschinenbau, Automobilindustrie und Medizintechnik von essentieller Bedeutung sind. Vor diesem Hintergrund stellt sich die Frage: Gibt es bereits oder in naher Zukunft adäquate Substitute, die PFAS ersetzen könnten, ohne Kompromisse in Leistung und Sicherheit einzugehen?

Um diese Frage zu erörtern, wurde eine eigens entwickelte künstliche Intelligenz eingesetzt, die umfassend für diese Aufgabe trainiert wurde. Nach der Analyse von 35.246 wissenschaftlichen Dokumenten und Open-Source-Publikationen weltweit, vermochte unser KI-basiertes System 420 Materialien und deren Zusammenfassung in 32 Klassen für die fünf beteiligten namhaften Unternehmen aus Baden-Württemberg, die Carl Zeiss AG, Karl Storz SE & Co. KG, Mercedes-Benz AG, Novaliq GmbH und Richard Wolf GmbH identifizieren.

Dieses auf den ersten Blick vielversprechende Ergebnis erbrachte nach genauerer Analyse der Anforderungen der beteiligten Unternehmen eine nur sehr begrenzte Anzahl potenzieller Ersatzstoffe, die PFAS nach heutigem Stand partiell substituieren könnten. Gerade die gleichzeitige Kombination verschiedener Funktionen machen PFAS so einzigartig. In einem Fall haben zwei bis drei identifizierte Materialien das Potenzial, die PFAS nach heutigem Stand partiell zu substituieren. In den anderen Fällen konnte kein adäquater Ersatz gefunden werden.

Angesichts dieser Ergebnisse wird eine Selektion von PFAS gemäß einer differenzierten Nutzen-Risiko-Bewertung unabdingbar. Insbesondere in der Medizintechnik stellt der Einsatz von PFAS kein unmittelbares Gesundheitsrisiko dar, und auch in anderen Industriezweigen verbleiben sie in geschlossenen Prozessen, ohne die Umwelt zu belasten.



Die vorliegenden Erkenntnisse liefern wichtige Ansatzpunkte für die zukünftige strategische Ausrichtung von Forschung und Entwicklung, inklusive der Förderungsmaßnahmen, sowie für tiefer gehende Untersuchungen zum Einsatz von PFAS und der Suche nach alternativen Materialien.

### **Dr. Christian Kühne**

Geschäftsführer

THINKTANK Industrielle Ressourcenstrategien

# 1 EINFÜHRUNG UND ZIELSETZUNG

Per- und polyfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS) sind organische Verbindungen aus Kohlenstoffketten, bei denen die Wasserstoffatome vollständig oder teilweise durch Fluoratome ersetzt sind.<sup>1</sup>

Die starken chemischen Bindungen zwischen Kohlenstoff- und Fluor-Atomen in PFAS führen zu sehr stabilen Substanzen mit besonders nützlichen Eigenschaften wie chemische Inertheit, Wasserabweisung, Schmierwirkung, Antihafwirkung, Feuerbeständigkeit und Hitzebeständigkeit. Sie sind jedoch nur schwer biologisch abbaubar und lassen sich daher in der Umwelt nur schwer zersetzen [Ye et al. 2015].

PFAS werden in vielen Anwendungsfeldern in der Industrie und in Endprodukten eingesetzt, wie z. B. in der industriellen Produktion, in Dichtungen, Schmierstoffen, Verpackungen, Metallbeschichtung, in Medizinprodukten, elektronischen Geräten, Solarzellen, Brennstoffzellen, Batterien, im Baubereich und auch in Konsumer-Produkten in Textilien, Kochgeschirr und Kosmetik [Glüge et al. 2020, ECHA 2023].

Aufgrund ihrer Wirkungen auf Umwelt und Menschen und ihrer Persistenz in der Umwelt werden PFAS aktuell stark diskutiert und auf EU-Ebene wurde der Vorgang hin zu möglichen Stoffverboten angestoßen [ECHA 2023].

Unternehmen aus Baden-Württemberg und ganz Europa suchen daher Substitute für die Anwendung von PFAS, um bei einem möglichen Stoffverbot Alternativen zur Verfügung zu haben.

Ziel dieser Metastudie ist, eine Übersicht über mögliche Stoffe und Stoffgruppen zu schaffen, die das Potenzial besitzen, die technischen Funktionen von PFAS zu ersetzen. Dies wird an ausgewählten Beispielen aus den Branchen Automobilindustrie, Halbleitertechnologie, Medizintechnik, und Pharmaindustrie vertieft untersucht.

---

<sup>1</sup> siehe <https://www.bmu.de/faqs/per-und-polyfluorierte-chemikalien-pfas>, letzter Zugriff 08. 12. 2023

### **Im Mittelpunkt stehen folgende Fragen:**

- 1.** Wo werden PFAS bisher eingesetzt/angewendet? Welche technischen Funktionen stellen PFAS zur Verfügung?
- 2.** Durch welche anderen Stoffe könnten PFAS substituiert werden?
- 3.** Welche Schlussfolgerungen leiten sich daraus für die Innovationsentwicklung der Industrie in Deutschland und insbes. Baden-Württemberg ab?

Unter Nutzung von Softwaretools auf Basis von Künstlicher Intelligenz werden mögliche Substitute identifiziert und strukturiert ausgewertet.

Im Rahmen der vorliegenden Studie wurde dabei mit den folgenden Unternehmen aus Baden-Württemberg zusammengearbeitet:

- > Carl Zeiss AG (Technologieunternehmen der optischen und optoelektronischen Industrie)
- > Karl Storz SE & Co. KG (Medizintechnik-Hersteller, insbesondere Endoskopie)
- > Mercedes-Benz AG (Automobilhersteller)
- > Novaliq GmbH (Pharmazie-Hersteller, insbesondere Augentherapeutika)
- > Richard Wolf GmbH (Medizintechnik-Hersteller, insbesondere Endoskopie)

Diese Unternehmen stellten Expertinnen und Experten mit Anwendungs-Know How zur Verfügung und übernahmen die Bewertung der ermittelten Substitute.

### **Die Studie ist folgendermaßen aufgebaut:**

Zunächst wird eine Einführung zu PFAS-Substanzen und deren Anwendung in der Industrie gegeben [Kap. 2]. Dann wird die gewählte methodische Vorgehensweise zur Identifikation möglicher PFAS-Substitute erläutert [Kap. 3]. Die so identifizierten Materialien mit PFAS-Substitutionspotenzial werden in Kapitel 4 vorgestellt. Schließlich wird das Substitutionspotenzial der identifizierten Materialien anhand von Use Cases, die von kooperierenden Unternehmen stammen, dargestellt [Kap. 5]. Die Studie schließt dann mit einem Fazit und einem Ausblick ab [Kap. 6].

## 2 EINFÜHRUNG ZU PFAS-SUBSTANZEN UND DEREN ANWENDUNG IN DER INDUSTRIE

PFAS sind organische Verbindungen aus Kohlenstoffketten, bei denen die Wasserstoffatome durch Fluoratome ersetzt sind (vollständig: perfluoriert, oder teilweise: polyfluoriert). Als genauere Beschreibung kann die Definition der Europäischen Chemikalienagentur ECHA genutzt werden. Demnach ist ein PFAS "jeder Stoff, der mindestens ein vollständig fluoriertes Methyl- [-CF<sub>3</sub>] oder Methylen [-CF<sub>2</sub>] Kohlenstoffatom (ohne daran gebundenes H/Cl/Br/I) enthält." [ECHA 2023]

Dies umfasst eine sehr große Stoffgruppe mit schätzungsweise über 10.000 -Verbindungen. Wichtige Teilgruppen sind Perfluoralkylsäuren und ihre Vorläufersubstanzen, fluorinierte Gase und PFAS-Polymere [ECHA 2023].

PFAS sind kostspielig in der Herstellung und werden daher dort eingesetzt, wo andere Stoffe die erforderliche Leistung nicht erbringen können, oder sie in wesentlich geringerer Menge die gleiche Leistung wie eine größere Menge nicht-fluorinierter Chemikalien ermöglichen können. Beispiele sind Anwendungen, die über große Temperaturbereichen arbeiten oder Verwendungen, die extrem stabile und nicht reaktive Stoffe erfordern [Glüge et al. 2020].

Die vielfältigen Anwendungsmöglichkeiten von PFAS in der Breite wurden erstmals in einem Fachartikel 2020 von Glüge und Ko-Autoren analysiert [Glüge et al. 2020]. Es zeigt sich, dass PFAS in fast allen Industriezweigen und vielen Verbraucherprodukten verwendet werden. So wurden mehr als 200 Verwendungen in 64 Kategorien für mehr als 1400 einzelne PFAS identifiziert. Kategorien mit mehr als 100 identifizierten PFAS sind Fotoindustrie, Halbleiterindustrie, Beschichtungen, Farben und Lacke, Dichtungsschäume, medizinische Geräte, Körperpflegeprodukte und Druck [Glüge et al. 2020].

Sie beruhen auf den besonderen technischen Eigenschaften von PFAS. Diese können folgendermaßen vereinfacht in sogenannten Nutzendimensionen zusammengefasst werden:

- Niedrige Oberflächenspannung
- Dielektrische Eigenschaften bei niedrigen Temperaturen
- Korrosionsbeständige, nicht reaktive Materialien
- Hydrophobe und oleophobe Beschichtungen
- Langfristige Stabilität von Gasen oder Materialien
- Geringe Entflammbarkeit von Polymeren und Geweben

Im Jahr 2020 wurden in der Europäischen Union zwischen 140.000 und 310.000 Tonnen PFAS in den Markt eingebracht [ECHA 2023].

Aus Umweltsicht ist der Hauptkritikpunkt an PFAS die sehr hohe Persistenz von ihnen und/oder ihren Abbauprodukten: sie können länger in der Umwelt verbleiben als alle anderen vom Menschen hergestellten Chemikalien. PFAS sind in der Umwelt bereits allgegenwärtig: in Organismen, Trinkwasserquellen und Nahrungsmitteln sowie in abgelegenen und unberührten Gebieten. Viele PFAS reichern sich fortwährend in Organismen an und es werden bei einigen Stoffen auch (öko)toxikologische Auswirkungen gesehen. Eine weitere Freisetzung würde zur Erhöhung der Konzentration in der Umwelt führen, da kein Abbau unter natürlichen Bedingungen erfolgt; daraus folgend werden negative Umwelt- und Gesundheitsauswirkungen erwartet. Auch ist die Entfernung von PFAS aus Oberflächenwasser, Grundwasser, Boden, Sediment und Biota technisch äußerst schwierig und sehr kostspielig, wenn überhaupt möglich [ECHA 2023].

So wird aktuell über ein Verbot von PFAS- in der EU diskutiert: Mehrere europäische Länder haben Anfang 2023 einen Verbots-Vorschlag bei der Europäischen Chemikalienagentur (ECHA) eingereicht<sup>2</sup>. Demnach sollen Herstellung, Inverkehrbringen und Verwendung von PFAS beschränkt werden. Es wurde absichtlich ein breiter Fokus gewählt, um die Substitution eines PFAS durch einen anderen PFAS (der möglicherweise noch nicht einmal technisch hergestellt ist) zu vermeiden. Für die meisten PFAS wurde ein vollständiges Verbot mit einer 18-monatigen Übergangsfrist mit verwendungs-spezifischen, zeitlich begrenzten Ausnahmen und zusätzlich einer Ausnahmeregelung für 5 oder 12 Jahre vorgeschlagen. Die Einordnung beruht anderem im Wesentlichen auf der Verfügbarkeit möglicher Substitutionen für PFAS-Stoffe in den betrachteten Anwendungen aus technischer und ökonomischer Sicht [ECHA 2023]. Jedoch ist unklar, wie diese Möglichkeiten genau ermittelt wurden.

---

<sup>2</sup> Der Verbotsvorschlag befindet sich nach einer öffentlichen Konsultationsphase nun in der Evaluierung.

# 3 IDENTIFIKATION MÖGLICHER PFAS-SUBSTITUTE

Im folgenden Kapitel wird der Prozess der Identifikation möglicher PFAS-Substitute eingehender betrachtet. Dabei wird zunächst der Status Quo der Verwendung von PFAS in industriellen Anwendungen untersucht, wobei besonderes Augenmerk auf die beteiligten Unternehmen und die Anwendungen gelegt wird, in denen PFAS aktuell noch eine bedeutende Rolle spielen. Anschließend wird die empirische Identifikation alternativer Materialien durch eine KI-gestützte Recherche beschrieben. Dabei wird ein umfangreicher Datenpool von Materialforschungsveröffentlichungen als Grundlage genutzt, und ein speziell entwickeltes KI-System wird eingesetzt, um relevante Informationen zu extrahieren. Die identifizierten Materialien werden auf ihre Eignung als potenzielle Substitute für PFAS in industriellen Anwendungen bewertet.

Dieses Kapitel bildet den Grundstein für das Verständnis der angewandten Methoden und die Identifikation der Materialien, die in den folgenden Abschnitten näher erläutert werden. Es wird eine umfassende Übersicht über den Prozess der Suche nach PFAS-Substituten und die spezifischen Kriterien, die bei der Bewertung dieser Substanzen eine Rolle spielen, gegeben.

Im vorangegangenen Kapitel wurde der Bedarf an einem möglichen Ersatz für poly- und perfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS) verdeutlicht: Diese Stoffgruppe ist in verschiedenen industriellen Anwendungen weit verbreitet und gleichzeitig wegen ihrer potenziellen Gesundheitsrisiken und ihrer Umweltauswirkungen in den Fokus gerückt. Daher wird im Folgenden der aktuelle Stand der Verwendung von PFAS in industriellen Anwendungen betrachtet. Dabei wird besonderes Augenmerk auf die an der vorliegenden Studie beteiligten Unternehmen und die Anwendungen gelegt, in denen PFAS eine bedeutende Rolle spielen.

## 3.1 Identifikation zu ersetzender PFAS-Funktionalitäten

Die beteiligten Unternehmen [Carl Zeiss, Mercedes-Benz, Karl Storz, Novaliq und Richard Wolf] sind Akteure in den Branchen Medizintechnik, Halbleiterfertigungstechnologie, Automobilindustrie und Pharmaindustrie. Sie sind maßgeblich von der geplanten Einschränkung oder einem möglichen Verbot von PFAS betroffen, da sie in ihren Produkten und Prozessen auf die einzigartigen Eigenschaften dieser Substanzen angewiesen sind.



Die Anwendungen, in denen poly- und perfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS) eine erhebliche Präsenz aufweisen und daher als besonders betroffen betrachtet werden, sollen in diesem Abschnitt genauer betrachtet werden. Dies ist von wesentlicher Bedeutung, da es dazu beiträgt, das Ausmaß der Herausforderungen zu verstehen, die mit einer potenziellen Substitution von PFAS in industriellen Prozessen und Produkten einhergehen.

Die besonders betroffenen Anwendungen wurden auf Grundlage einer umfangreichen Literaturrecherche in gemeinsamen Workshops mit dem Industriekonsortium identifiziert bzw. erarbeitet. Dabei wurden auch die wirtschaftliche Bedeutung und die potenziellen Auswirkungen einer PFAS-Substitution in den jeweiligen Anwendungen berücksichtigt.

Poly- und perfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS) weisen einzigartige Funktionalitäten auf. Diese sind in vielen industriellen Anwendungen von entscheidender Bedeutung. Diese Funktionalitäten tragen maßgeblich dazu bei, dass sich PFAS als unverzichtbare Bestandteile in verschiedenen Produkten und Prozessen etabliert haben.

In der Diskussion mit den teilnehmenden Unternehmen wurden die folgenden sechs Hauptdimensionen der PFAS-Funktionalitäten identifiziert:

- > **Chemische Stabilität, Säure- und Hydrolysebeständigkeit:** Ihre außergewöhnliche chemische Stabilität macht PFAS resistent gegenüber aggressiven Chemikalien und Säuren. Weiterhin ist ihre Fähigkeit, Hydrolyseprozessen zu widerstehen von entscheidender Bedeutung für viele Anwendungen.
- > **Langzeit-Stabilität:** PFAS bieten eine bemerkenswerte Langzeitstabilität: sie halten über einen längeren Zeitraum ihre Leistungsfähigkeit bei, ohne signifikanten Abbau oder Verschlechterung.
- > **Temperatur-Stabilität, geringes Outgasing-Verhalten:** Die Temperaturstabilität von PFAS ermöglicht ihren Einsatz in extremen Temperaturumgebungen, ohne dass sie ihre Funktionalität einbüßen. Darüber hinaus sind sie bekannt für ihr geringes Outgasing-Verhalten, was in Anwendungen mit hohen Vakuumanforderungen von Vorteil ist.
- > **Gleiteigenschaften (Anti-Haft, kein Stick-Slip, easy-to-clean, nicht benetzend, nicht klebend, sehr geringe Oberflächenspannung):** PFAS zeichnen sich durch ihre hohen Gleiteigenschaften und Anti-Haft-Eigenschaften aus, die in vielen Bereichen, einschließlich der Lebensmittelverarbeitung und der Medizintechnik, unerlässlich sind. Sie weisen auch eine sehr geringe Oberflächenspannung auf, was sie wasser- und ölabweisend macht.
- > **Witterungsbeständigkeit, UV- und Lichtstabilität:** PFAS sind äußerst witterungsbeständig und weisen eine hohe UV- und Lichtstabilität auf. Dadurch sind sie für den Einsatz im Freien und in Umgebungen mit intensiver Sonneneinstrahlung besonders geeignet.
- > **Biokompatibilität:** In einigen Anwendungen, insbesondere in der Medizintechnik und der Pharmazie, ist die Biokompatibilität entscheidend. Viele PFAS sind bekannt für ihre geringe Toxizität, was ihre Verwendung in medizinischen Geräten und Arzneimittelformulierungen unterstützt.



Diese PFAS-Funktionalitäten dienen als Leitprinzipien bei der Suche nach potenziellen Substituten. Ersatzmaterialien sollten vergleichbare Leistungseigenschaften bieten, um die Anforderungen der Industrie zu erfüllen. Schlussendlich muss im Einzelfall entschieden werden, inwiefern ein ermitteltes Material die benötigten Funktionalitäten erfüllt und daher aus technischer Perspektive als Substitut dienen kann.

Die Bewertung erfolgte durch die Expertinnen und Experten der beteiligten Unternehmen auf Basis einer qualitativen Bewertungsskala [5: sehr gut/hoch, 1: sehr niedrig/schlecht].

### 3.2 Vorgehensweise zur Identifikation und Bewertung alternativer Materialien

Im Folgenden wird beschrieben, wie bei der empirischen Identifikation alternativer Materialien vorgegangen wurde. Ziel dabei war, eine umfassende Datenbasis zu schaffen, um potenzielle PFAS-Substitute zu identifizieren, die die oben festgelegten Kriterien erfüllen können.

Der Prozess der Identifikation alternativer Materialien erfolgt auf der Grundlage aktueller Materialforschungsveröffentlichungen und wird durch den Einsatz von künstlicher Intelligenz (KI) unterstützt. Dies ermöglicht eine systematische und umfassende Exploration der verfügbaren wissenschaftlichen Erkenntnisse. Damit können potenzielle Ersatzstoffe identifiziert werden, die eine vielversprechende Basis für zukünftige Forschungs- und Entwicklungsarbeiten darstellen.

Mit einem von TIM Consulting in Eigenentwicklung aufgebauten KI-System wird im Zuge dieser Untersuchung ein innovativer Ansatz verwendet, um eine breite Palette von Materialien zu erfassen, die möglicherweise als PFAS-Substitute in Frage kommen. Die sorgfältige Auswahl und Analyse dieser Materialien bildet die Grundlage für die nachfolgende Bewertung ihrer Eignung und ihres Anwendungspotenzials.

Die Identifikation potenzieller Ersatzstoffe für poly- und perfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS) erfordert eine hochgradig präzise und systematische Vorgehensweise. Um diese Anforderungen zu erfüllen, wurde das von TIM Consulting entwickelte KI-Tool "CumulusAI" weiterentwickelt und speziell auf die Bedürfnisse dieses Projekts zugeschnitten.

Im Folgenden wird der Prozess der empirischen Identifikation alternativer Materialien dargestellt und aufgezeigt, wie moderne Technologien wie künstliche Intelligenz dazu beitragen können, eine umfassende Datenbasis für die Suche nach PFAS-Substituten bereitzustellen.



Konkret wurde zunächst ein umfangreicher Datenpool aufgebaut. Der Datenpool wurde auf Basis der zuvor beschriebenen PFAS-Funktionalitäten ermittelt. Dazu wurde eine umfassende Übersicht über aktuelle Materialforschungsveröffentlichungen erstellt, wobei eine Vielzahl von Quellen berücksichtigt wurde, darunter wissenschaftliche Zeitschriften, Konferenzbeiträge und Forschungsberichte. Grundlage dafür war die Clarivate-Datenbank „Web of Science“ (Zugriff im Juli 2023). Dieser Ansatz ermöglichte die Erfassung eines breiten Spektrums von Forschungsergebnissen aus verschiedenen Fachrichtungen und Forschungsbereichen.

Es folgte die Auswahl von Publikationen auf der Grundlage vordefinierter Kriterien: Sie orientierten sich eng an den identifizierten PFAS-Funktionalitäten und dienten der Überprüfung, ob die erfassten Materialien die benötigten Leistungsmerkmale (s. o.) aufweisen.

Insgesamt wurden so 35.246 einzelne Dokumente ermittelt und in den Datenpool aufgenommen. Dies bildet die Grundlage für die weitere Untersuchung und Analyse der identifizierten Materialien im Hinblick auf ihre Eignung als PFAS-Substitute.

Für die Analyse des Datenpools wurde die TIM-Consulting-Eigenentwicklung CumulusAI genutzt. CumulusAI, ein fortschrittliches Analysetool für große Datenmengen, nutzt transformer-basierte Sprachmodelle für effizientes Datenhandling und tiefere Einblicke. Es unterstützt als KI-Assistent die Informationsaufbereitung, wobei Patente und Publikationen von Espacenet und OpenAlex als Datenquellen dienen. Eine spezifische Suchstrategie extrahiert relevante Datenteile, in denen automatisiert Themencluster und Trends identifiziert werden. Die Clusterbildung basiert auf einer multikriteriellen Vektorisierung, die Wörter in ihrem spezifischen Kontext bewertet, was zu homogeneren und klar definierten Clustern führt. Zusätzlich werden Metadaten genutzt, um Trends und Fachexperten zu identifizieren (siehe Abbildung 1).

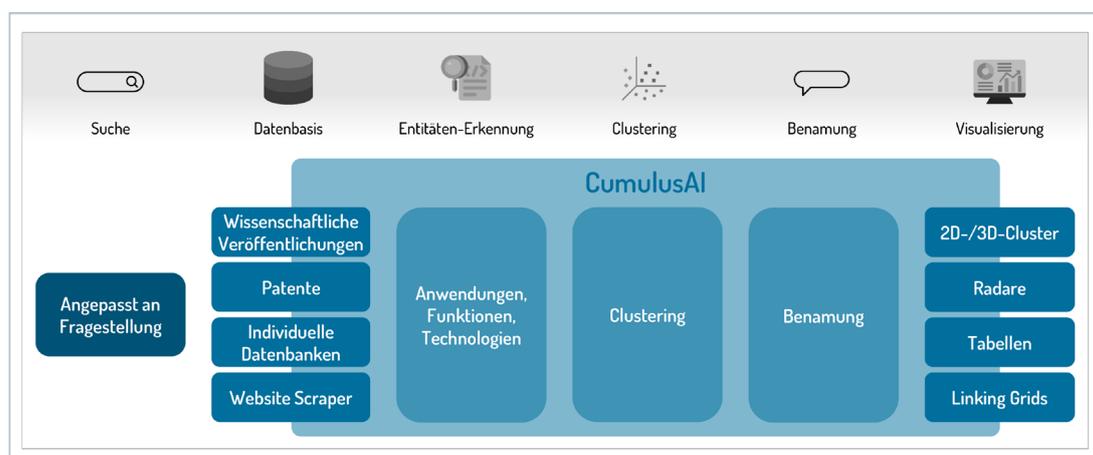


Abbildung 1: CumulusAI



Für die vorliegende Studie wurde CumulusAI mit einem spezifischen Material-Algorithmus ausgerüstet. Dieser Algorithmus wurde entwickelt, um innerhalb des zuvor beschriebenen Datenpools Materialien zu identifizieren, die potenziell als Ersatz für PFAS in Betracht kommen könnten. Der Einsatz des Algorithmus, der auf Prinzipien des maschinellen Lernens basiert, erlaubte eine präzise und effiziente Durchforstung des umfangreichen Datenpools. Dabei wurden fortgeschrittene Techniken der Textanalyse und Mustererkennung genutzt, um relevante Informationen zu extrahieren, insbesondere im Hinblick auf die Entität „Material“.

CumulusAI wurde speziell daraufhin trainiert, Materialien in wissenschaftlichen Publikationen, Forschungsberichten und Fachliteratur zu identifizieren. Dabei wurden spezifische, vorab festgelegte Kriterien und Funktionalitäten berücksichtigt, wie beispielsweise chemische Stabilität, Temperaturbeständigkeit und Gleiteigenschaften. Dies wurde erreicht, indem ein NER-Modell (Named Entity Recognition) auf der Grundlage umfangreicher Textdaten aus dem Bereich der Materialwissenschaften eingesetzt wurde. Ziel war es, mithilfe neuronaler Netzwerke die Erkennung und Klassifizierung von Materialnamen und deren zugehörigen Eigenschaften in Texten zu erlernen, um so präzise materialbezogene Entitäten zu identifizieren.

Ein Bewertungsschema wurde entwickelt, das dazu dient, die ermittelten Materialien in Bezug auf ihre Eignung als potenzielle Ersatzstoffe für poly- und perfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS) zu bewerten. Es baut auf Bewertungssystemen des Technologiemanagement auf (siehe z. B. [Warschat et al. 2015]) und nutzt Kriterien, mit denen ermittelt werden kann, ob die identifizierten Materialien die Anforderungen der Industrie erfüllen und als tragfähige Alternativen in Betracht gezogen werden können.

Das Bewertungsschema baut auf folgenden Hauptkriterien auf:

- > **Technische Leistungsfähigkeit:** Damit wird die Fähigkeit des Materials dargestellt, die spezifischen PFAS-Funktionalitäten technisch zu replizieren. Es umfasst damit Aspekte wie Oberflächenaktivität, Wasser- und Ölabweisung, Temperaturbeständigkeit und andere für die jeweilige Anwendung relevante Leistungseigenschaften. Hierbei wird ermittelt, inwieweit die Ersatzstoffe in der Lage sind, die Funktionen von PFAS effektiv zu übernehmen.
- > **Umweltauswirkungen:** Die Auswirkungen auf die Umwelt sind ein entscheidendes Kriterium, da sie die ökologischen Konsequenzen der eingesetzten Materialien berücksichtigen. Es werden Faktoren wie die biologische Abbaubarkeit, die Toxizität und das Potenzial für Umweltbelastungen bewertet, um sicherzustellen, dass die Substitute umweltfreundlicher sind als PFAS.
- > **Kosten:** Die wirtschaftlichen Aspekte spielen eine wichtige Rolle bei der Auswahl von Ersatzstoffen. Es werden die Kosten für die Herstellung und den Einsatz der Materialien sowie mögliche Auswirkungen auf die Gesamtkosten der Produktion berücksichtigt.



- > **Verfügbarkeit:** Die Verfügbarkeit der identifizierten Materialien auf dem Markt ist von entscheidender Bedeutung, da sie Einfluss auf die praktische Umsetzbarkeit hat. Es wird geprüft, ob das betrachtete Material in ausreichender Menge und Qualität verfügbar ist, um den erwarteten Bedarf zu decken.
- > **Regulatorische Konformität:** Die Einhaltung der geltenden Vorschriften und Regulierungen ist ein zentrales Kriterium, um sicherzustellen, dass die identifizierten Materialien den rechtlichen Anforderungen entsprechen. Dies umfasst die Erfüllung von Umweltauflagen, Sicherheitsnormen und anderen gesetzlichen Bestimmungen sowie von Zulassungsaufgaben im medizinischen Bereich.

Die Festlegung dieses Bewertungsschemas bietet eine strukturierte Grundlage, um die identifizierten Materialien systematisch zu analysieren und ihre Eignung als PFAS-Substitute zu bewerten.

# 4 IDENTIFIZIERTE MATERIALIEN MIT PFAS-SUBSTITUTIONSPOTENZIAL

Die systematische Exploration des Datenpools mit CumulusAI ermöglichte es, Materialien zu identifizieren, die den zuvor definierten Anforderungen entsprechen und somit als vielversprechende Kandidaten für PFAS-Substitute in Betracht gezogen werden können. Der Ansatz, CumulusAI mit dem Material-Algorithmus zu integrieren, stellt sicher, dass die Suche nach alternativen Materialien auf einer datengesteuerten und evidenzbasierten Grundlage stattfindet. Dies ermöglicht eine umfassende Untersuchung des Datenpools und die Identifikation von Materialien, die das Potenzial haben, die Funktionen von PFAS in industriellen Anwendungen zu übernehmen, wodurch eine hohe Präzision und Effizienz bei der Identifizierung relevanter Materialien gewährleistet wird.

Durch die Anwendung des KI-Tools "CumulusAI" in Verbindung mit dem umfangreichen Datenpool wurden insgesamt 420 Materialien identifiziert, die das Potenzial haben, poly- und perfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS) in verschiedenen industriellen Anwendungen zu ersetzen (siehe Abbildung 2). Diese Materialien wurden sorgfältig analysiert und in 32 Materialkategorien strukturiert, um ihre Vielfalt und ihren Anwendungsbereich besser zu verstehen.

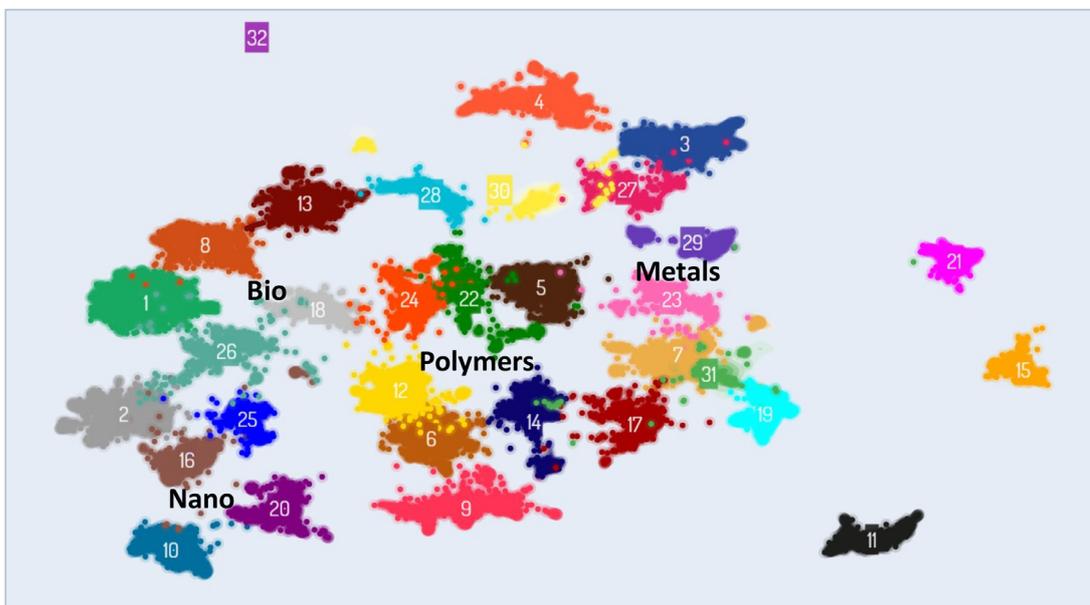


Abbildung 2: Übersicht über die mit CumulusAI identifizierten 420 Materialien

Die identifizierten Materialien erstrecken sich über folgende Klassen und Typen:

- > **Polymerbasierte Materialien:** Diese Kategorie umfasst eine breite Palette von polymeren Verbindungen, darunter Silikonmaterialien und andere Hochleistungspolymere. Diese Materialien zeichnen sich durch ihre Vielseitigkeit und Anpassungsfähigkeit aus.
- > **Keramische Materialien:** Keramische Materialien, einschließlich Oxide und Nitride, wurden als potenzielle Ersatzstoffe identifiziert. Sie bieten besondere Eigenschaften wie hohe Temperaturbeständigkeit und chemische Stabilität.
- > **Metallische Materialien:** In dieser Kategorie sind verschiedene Metalle und Legierungen enthalten, die aufgrund ihrer einzigartigen mechanischen und thermischen Eigenschaften als vielversprechende Substitute betrachtet werden.
- > **Biomaterialien:** Diese Gruppe umfasst biokompatible Materialien, die in medizinischen Anwendungen relevant sein können. Biomaterialien können eventuell eine sichere Alternative zu PFAS in biologischen Umgebungen bieten.
- > **Nanomaterialien:** Nanomaterialien, darunter Nanopartikel und Nanoröhren, wurden ebenfalls identifiziert. Diese Materialien können aufgrund ihrer geringen Größe und speziellen Eigenschaften in verschiedenen Anwendungen nützlich sein.

Die Identifikation und Strukturierung dieser Materialien in verschiedene Kategorien ermöglichen eine gezielte Analyse und Bewertung ihrer Eignung als PFAS-Substitute. Jede Materialkategorie kann spezifische Anforderungen und Vorteile in Bezug auf die definierten PFAS-Funktionalitäten bieten. Dies bildet die Grundlage für die nachfolgende Phase der Bewertung, bei der die Leistungsfähigkeit und Eignung dieser Materialien im Detail untersucht wird.

Die Ergebnisse der Analyse bieten wertvolle Einblicke in die Vielfalt der Anwendungen, die von einem möglichen PFAS-Verbot betroffen sein könnten, und legen den Grundstein für die weitere Untersuchung der Herausforderungen und Chancen im Zusammenhang mit der Suche nach alternativen Materialien und Technologien in diesen Bereichen.



Die umfassende Analyse der mit CumulusAI identifizierten Materialien führt zu bedeutenden Erkenntnissen hinsichtlich ihres Potenzials als PFAS-Substitute. Durch die gemeinsame Auswertung aller nutzenspezifisch erstellten Datensätze konnte ein detailliertes Funktionalitätenprofil für jedes Material erstellt und mittels Spider-Diagrammen visualisiert werden (s. beispielhaft Abbildung 3 und für die vollständige Liste siehe Anhang). Diese Profile bzw. Diagramme dienen als entscheidende Basis für die Bewertung der Eignung spezifischer Materialien in Bezug auf ihre Anwendbarkeit und die erzielbaren Vorteile im Vergleich zu PFAS.

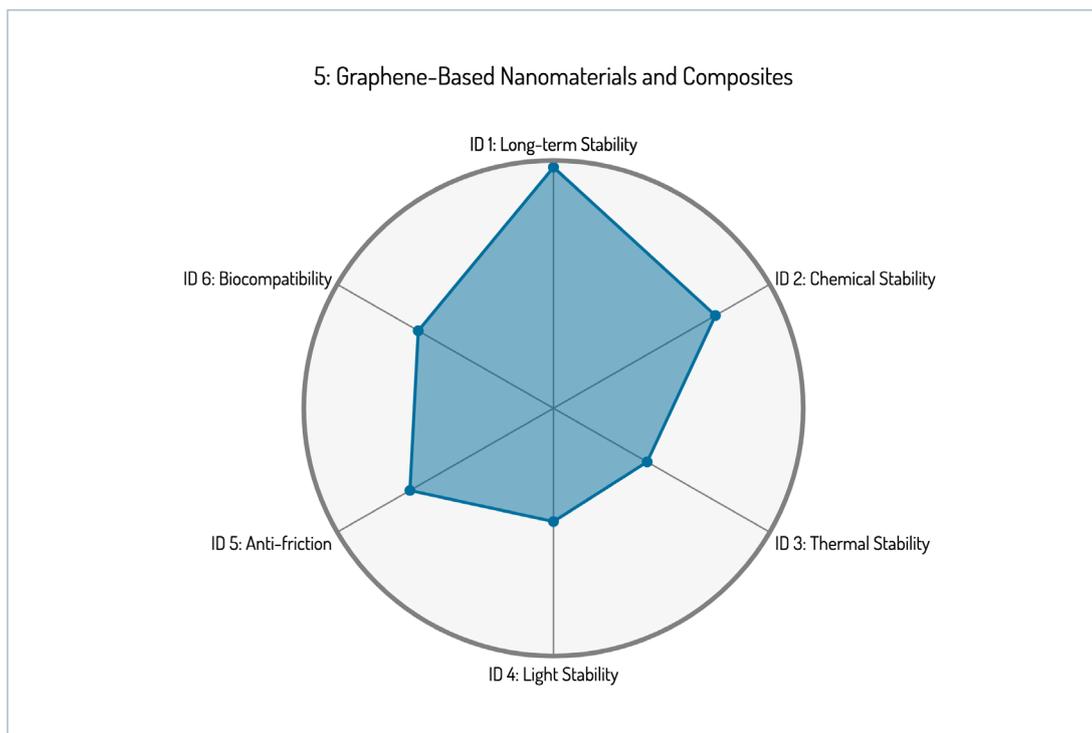


Abbildung 3: Beispielhaftes Funktionalitätenprofil für „Graphene-Based Nanomaterials and Composites“

# 5 BEWERTUNG DES SUBSTITUTIONSPOTENZIALS DER IDENTIFIZIERTEN MATERIALIEN ANHAND KONKRETER USE CASES

Das folgende Kapitel beschreibt die Bewertung des Substitutionspotenzials der zuvor identifizierten Materialien anhand konkreter Beispiele (Use Cases). Basis dafür sind spezifische Anwendungsfälle in den beteiligten Industrieunternehmen, die für die jeweiligen Unternehmen eine große Relevanz haben. Die so abgeleiteten Fallstudien sind in enger Zusammenarbeit mit den betreffenden Unternehmen entwickelt worden, um realistische Einschätzungen der Substitutionspotenziale für die genannten Materialien im Rahmen des Projekts zu erarbeiten und zu bewerten.

Nach Definition des Anwendungsfalls wurden aus der ermittelten Liste von Materialien nach den relevanten Nutzendimensionen gefiltert. Es resultierte eine für den jeweiligen Anwendungsfall spezifische Liste möglicher PFAS-Substitute mit Kurzbeschreibung und Verweis auf beschreibende Fachliteratur.

Die so ermittelten Materialien wurden dann durch Unternehmensexperten mit den oben dargestellten Bewertungskriterien auf Basis einer qualitativen Bewertungsskala (5: sehr gut/hoch, 1: sehr niedrig/schlecht) bewertet. Im Vordergrund stand dazu zunächst die Betrachtung der technischen Performance, um eine generelle Einordnung zu erhalten, ob ein Material als PFAS-Substitut einsetzbar ist. Danach wurden die anderen Kriterien (wo möglich) bewertet<sup>3</sup>. Der Ablauf ist in der Abbildung 4 für ein Anwendungsbeispiel aus der optischen Fotolithografie dargestellt (siehe dazu auch das folgende Kapitel 5.1)



<sup>3</sup> In vielen Fällen wurde von der Bewertung der weiteren Kriterien abgesehen, da den Expertinnen und Experten dazu zu wenig Informationen zur Verfügung standen. Daher wird von einer Darstellung in diesem Bericht abgesehen.

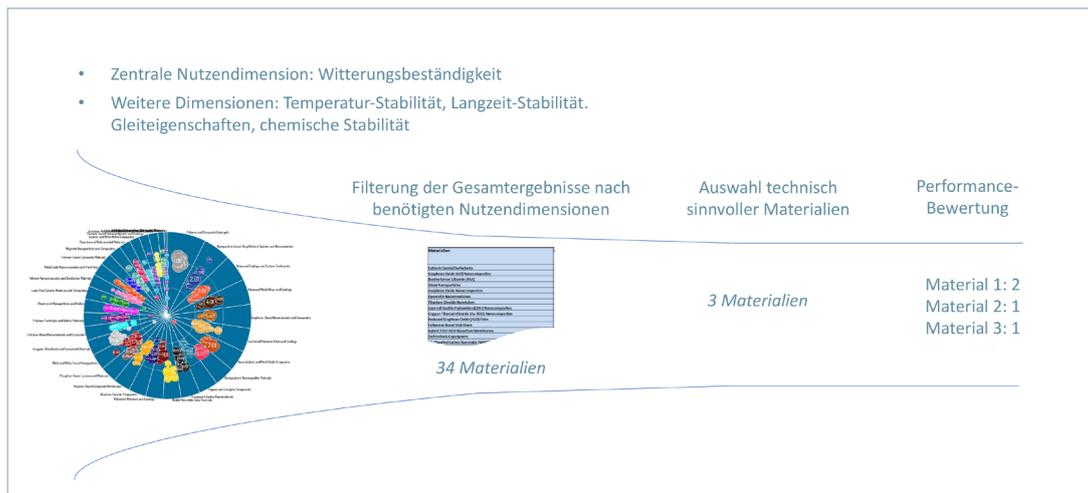


Abbildung 4: Filterung und Bewertung möglicher Materialien als PFAS-Substitute, dargestellt für ein Anwendungsbeispiel aus der optischen Fotolithografie (Bewertungsskala: 5: sehr gut/hoch, 1: sehr niedrig/schlecht)

## 5.1 Anwendungsbeispiel Halbleitertechnik: Optische Fotolithografie zur Herstellung von Mikrochips

### 5.1.1 PFAS-Einsatz: Status quo<sup>4</sup>

80% aller weltweit hergestellten Computerchips, insbesondere 100% der modernsten und leistungsfähigsten Chips, werden mit den Lithografieoptiken von ZEISS hergestellt.

Optische Fotolithografie (im Folgenden „Lithografie“) ist der kritische Produktionsschritt bei der Herstellung von Microchips. Mit ihm werden die Nanometer-Strukturen erzeugt, die die Transistoren im Chip bilden. Lithografieoptik ist deshalb eine der Schlüsseltechnologien im Bereich der Halbleiterherstellung, in denen Deutschland für die neuesten Optiken sogar weltweit ein Alleinstellungsmerkmal hat.

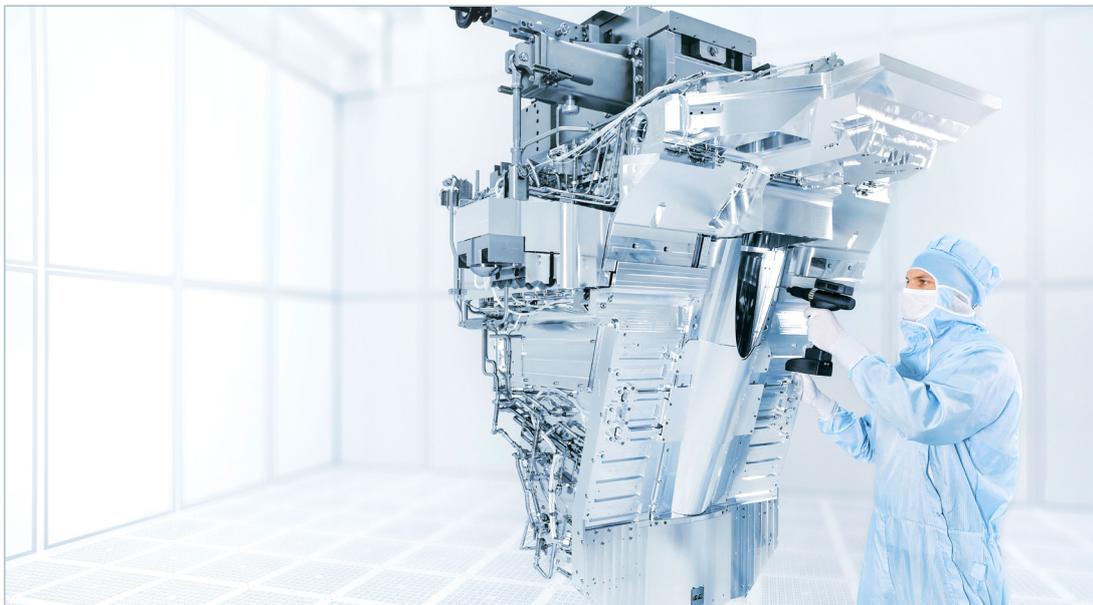
Diese neue Technologie des Extremen Ultraviolett (EUV, siehe Abbildung 5) ermöglicht u.a. die Computeranwendungen des nächsten Jahrzehnts wie autonomes Fahren, 5G oder Künstliche Intelligenz. Entsprechende Optiken werden z.B. in Oberkochen, Wetzlar und Jena gefertigt.



<sup>4</sup> Der folgende Text entstammt aus Mutter und Mayer 2023 und wurde leicht gekürzt

Die für die Lithografiesysteme benötigten Spezialoptiken sind bis zu zehn Tonnen schwer. Sie bestehen aus bis zu 100.000 Teilen und müssen mit einer weltweit einmaligen Präzision gefertigt werden. Neben dieser Präzision ist auch eine extreme Sauberkeit erforderlich; weniger als ein Milliardstel Gramm Kontamination an der falschen Stelle zerstört die Funktion des gesamten Systems. Die Kombination aus UV-Licht, Präzision und dieser Sauberkeit macht es erforderlich, Materialien aus PFAS an verschiedenen Stellen im Lithografiesystem, so zum Beispiel als Dichtungsmaterial, Dämpfungselement, Isolierung und Schmiermittel einzusetzen.

Konventionelle Materialien und Kunststoffe, z.B. auf Basis von reinen Kohlenwasserstoffen oder Silikonen, sind viel weniger gegen UV-Licht beständig und zersetzen sich unter dem Einfluss der UV-Strahlung in kurzer Zeit. Außerdem gasen sie chemische Substanzen aus (Kontamination), die sich auf den Optiken niederschlagen und das System in seiner optischen Funktion nachteilig beeinflussen.



**Abbildung 5: Optische Fotolithografie über Extremes Ultraviolett (Foto: Carl Zeiss)**



### 5.1.2 PFAS-Substitutionspotenzial

Nach Filterung der Gesamtergebnisse nach benötigten Nutzendimensionen ergab sich eine Liste von 34 Materialien. Diese wurden von den Unternehmensexperten durchgesehen und dort 3 technisch sinnvolle Materialien identifiziert. Material 1 wurde mit einer technischen Performance von 2, Materialien 2 und 3 mit einer Einstufung von 1 bewertet. Das Feedback der Experten war, dass bei Material 1 unklar ist, ob es als Elastomermaterial für PFAS genügend UV-Stabilität hat. Eine erste Literaturrecherche zu UV-Absorptionsspektren zeigt mögliche erhebliche Absorption unterhalb einem bestimmten Wellenlängenbereich, die evtl. zu photochemische Folgeprozessen führen könnte. Bei Material 2 ist noch unklar, ob es auch in einer sehr dünnen Schicht funktioniert, was aber unbedingt nötig ist, damit es brauchbar in der Anwendung ist. Zu Material 3 gibt es bisher keine Erfahrungen, daher wurde hier erst einmal „skeptisch“ bewertet und es sind weitere Detailuntersuchungen nötig, um zu einer validen Einschätzung kommen zu können.

## 5.2 Anwendungsbeispiel Automobilindustrie

### 5.2.1 PFAS-Einsatz: Status quo<sup>5</sup>

In der Automobilindustrie spielen Fluorpolymer-Anwendungen eine wichtige Rolle, insbesondere in Dichtungen und Schläuchen:

- ▶ Dichtungen werden in vielen Bereichen von Fahrzeugen wie z. B. Motor und Antriebsstrangs verwendet. Fluorpolymer-Materialien wie PTFE (Polytetrafluorethylen) und FKM (Fluorkautschuk) werden dort aufgrund ihrer hohen chemischen Beständigkeit, Temperaturbeständigkeit und geringen Reibungseigenschaften eingesetzt. Sie gewährleisten eine zuverlässige Abdichtung auch bei hohen Temperaturen, aggressiven Chemikalien und Druckschwankungen.
- ▶ Kunststoffschläuche werden in Automobilen insbesondere in hydraulischen Bremsleitungen, Kühlsystemen und Kraftstoffleitungen eingesetzt. Fluorpolymer-Schläuche bieten hier eine hohe Temperaturbeständigkeit und weisen eine hohe Beständigkeit gegenüber Chemikalien auf.

Insgesamt tragen Fluorpolymer-Anwendungen in Dichtungen und Schläuchen so zur Zuverlässigkeit, Effizienz und Sicherheit von Fahrzeugen bei. Diese Anwendung stand im Fokus der Recherche.



---

<sup>5</sup> Der Text im folgenden Abschnitt basiert unter anderem auf Angaben der Mercedes-Benz AG

Weiterhin ist noch zu erwähnen, dass PFAS-Chemikalien auch in anderen Bereichen der Automobilindustrie eine wichtige Rolle spielen: So werden sie eingesetzt in Lithium-Ionen-Batterien, technischen Textilien, Elektrotechnik und Elektronik-Komponenten (u.a. in der Halbleiter-Fertigung). Sie werden als Schmier-/Trennmittel und Kältemittel sowohl in Produkten in allen Antriebstechnologien (sowohl bei Verbrenner- als auch Elektrofahrzeugen) als auch in der Produktion eingesetzt.

### 5.2.2 PFAS-Substitutionspotenzial

Nach Filterung der Gesamtergebnisse nach benötigten Nutzendimensionen ergab sich eine Liste von 16 Materialien. Diese wurden von Werkstoffexperten im Unternehmen durchgesehen und dort 2 technisch sinnvolle Materialien identifiziert. Zwar wäre der Einsatz der beiden Materialien vorstellbar, er bezieht sich jedoch nicht auf das zu ersetzende Ausgangsmaterial. Insofern konnten für das betrachtete Anwendungsbeispiel „Fluorpolymere“ keine geeigneten Alternativen oder nur Alternativen mit qualitativen Einbußen identifiziert werden.

## 5.3 Anwendungsbeispiel Medizintechnik: Resektoskop für minimalinvasive Prostata-Operationen

### 5.3.1 PFAS-Einsatz: Status quo<sup>6</sup>

Die Prostata sitzt unterhalb der Harnblase im männlichen Körper und ist ringförmig um die Harnröhre angeordnet. Sie kann sich insbesondere im Alter vergrößern, die Harnröhre einengen und so Beschwerden verursachen. Um diese Vergrößerung zu beseitigen, kann ein chirurgischer Eingriff nötig sein. Ein gängiges Verfahren ist die transurethrale Resektion der Prostata: Mit der Resektionstechnik wird minimalinvasiv gearbeitet und ein Instrument, das Resektoskop, über die Harnröhre bis zur vergrößerten Prostata in den Körper eingeführt (siehe Abbildung 6). Das Resektoskop ist ein medizinisches Instrument mit Drahtschlinge, das über Hochfrequenzstrom Gewebe abträgt. Über eine Kamera wird ein Bild der Prostata übertragen. Das abgetragene Gewebe wird dann über die Harnröhre entfernt.

Resektoskope werden auch für anderen Anwendungsfälle genutzt: zur Entfernung von Blasen-tumoren, bei Eingriffen in die Gebärmutter oder zur operativen Behandlung von Uterus-fehlbildungen. Im Jahr 2021 wurden mit minimalinvasiven Resektoskopen über 290.000 Eingriffe allein in Deutschland durchgeführt.



---

<sup>6</sup> Der Text im folgenden Abschnitt ist eine zusammenfassende Darstellung von Informationen der Firmen Karl Storz SE & Co. KG und Richard Wolf GmbH

In Resektoskopen kommen in fünf verschiedenen Funktionen Fluorpolymer-Komponenten (also PFAS) zum Einsatz: Eine davon ist die Nutzung von Hülsen aus PTFE zur elektrischen Isolierung der Elektroden: sie gewährleistet eine sehr hohe Durchschlagsfestigkeit von 20 kV/mm und muss thermisch stabil, chemisch resistent, antihaftend, relativ flexibel und zudem biokompatibel sein (siehe gelbe Komponente am linken Rand in Abbildung 6).

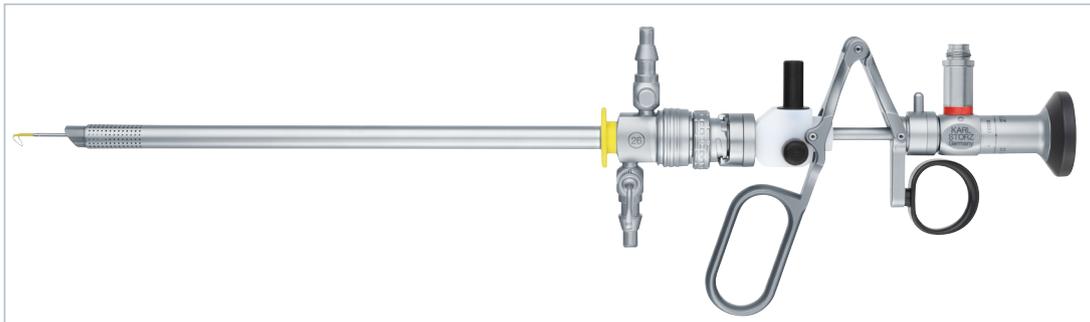


Abbildung 6: Resektoskop (Foto: Karl Storz SE & Co. KG)

### 5.3.2 PFAS-Substitutionspotenzial

Nach Filterung der Gesamtergebnisse nach benötigten Nutzendimensionen ergab sich bei Unternehmen 1 eine Liste von 36 Materialien. Diese wurden von den Unternehmensexperten durchgesehen und dort 5 zunächst technisch sinnvolle Materialien identifiziert. Jedoch wurden diese nach genauerer Betrachtung nicht als mögliche PFAS-Substitute eingestuft.

Bei Unternehmen 2 ergab sich eine Liste von 20 Materialien, darunter wurde kein Material als technisch sinnvoll erachtet.

Beide Unternehmen gaben an, dass eine Nutzung nach evtl. längerer F&E-Tätigkeit nicht auszuschließen wäre, was aber erst nach weiterer zeitintensiver Prüfung ermittelt werden könne.



## 5.4 Anwendungsbeispiel Pharmaindustrie: Therapie des schweren trockenen Auges

### 5.4.1 PFAS-Einsatz: Status Quo<sup>7</sup>

Die Konjunktivitis sicca, das „Trockene Auge“ ist eine der häufigsten Oberflächenerkrankungen des Auges, unter der 5%-30% der über 50jährigen leiden. Symptome reichen dabei von mildem Unbehagen bis zu Schmerzen und Sehverschlechterung, sie reduzieren signifikant die Lebensqualität und die Produktivität am Arbeitsplatz [Kassumeh et al. 2022].

Es gibt bereits viele Augentropfen, die als Medizinprodukte für das Trockene Auge in Europa zugelassen sind. Sie basieren auf Wasser (Augentropfen) oder Paraffin (Salben) mit diversen Zusätzen. Sie haben jedoch meist nur einen kurzfristigen Effekt und lindern die Symptome, können aber keine statistisch signifikanten klinischen Effekte über die Zeit aufweisen [Pucker et al. 2016].

Die Firma Novaliq hat Augentropfen entwickelt, die Perfluorhexyloktan (F6H8) enthalten (in Europa unter den Handelsnamen Evotears, Hycosan Shield oder Hylo Lipid vertrieben).

Perfluorhexyloktan reduziert die exzessive Austrocknung durch Verdunstung des wässrigen Tränenfilms und hilft den natürlichen Tränenfilm wiederherzustellen, Es dringt im Gegensatz zu wässrigen Augentropfen, sogar in die Meibomschen Düsen in den Augenlidern ein und kann die Sekretion der dortigen Lipide verbessern. Die Lipide in den Meibomschen Düsen sind die einzige natürlich Quelle für den Lipidfilm des Tränenfilms, der das Auge vor Verdunstung schützt.

Perfluorhexyloktan lindert nachweislich die Symptome und hat gleichzeitig eine heilende Wirkung in trockenen Augen [Ballesteros-Sánchez et al. 2023], was die bisher verfügbaren Augentropfen so nicht leisten können.

In den USA wurde Perfluorhexyloktan kürzlich als Arzneimittel für die Behandlung der klinischen Anzeichen und Patientensymptome des Trockenen Auges nach umfangreichen Prüfungen von der Arzneimittelbehörde FDA zugelassen.

### 5.4.2 PFAS-Substitutionspotenzial

Nach Filterung der Gesamtergebnisse nach benötigten Nutzendimensionen ergab sich eine Liste von 33 Materialien. Diese wurden von den Unternehmensexperten durchgesehen und dort 2 technisch sinnvolle Materialien identifiziert, die mit einer technischen Performance von 2 bewertet wurden. Ihre Einsetzbarkeit in der Praxis wurde jedoch als bislang unwahrscheinlich eingestuft.

---

<sup>7</sup> Der Text im folgenden Abschnitt basiert auf Angaben der Novaliq GmbH

# 6 FAZIT UND AUSBLICK

In der vorliegenden Studie wurden mittels einer durch künstliche Intelligenz gestützten Recherche Substanzen gesucht, die die bisher eingesetzten PFAS ersetzen können und die gleichen Funktionen in industriellen Anwendungen erfüllen.

In das Projekt eingebunden waren die Unternehmen Carl Zeiss AG, Mercedes-Benz AG, Karl Storz SE & Co. KG, Richard Wolf GmbH und Novaliq GmbH. Betrachtete Anwendungsbeispiele stammten demnach aus dem Bereich optische Anlagentechnik, Automobilindustrie, Endoskope / Medizintechnik und Pharmazie / Augentherapeutika. Dies zeigt, dass die Anwendung von PFAS einen hohen Nutzen für die Gesellschaft ermöglicht.

## **Zur Ermittlung von Substituten wurden:**

- 1.** in den Unternehmen genutzte PFAS-Technologiefunktionalitäten ermittelt und sechs PFAS-Top-Technologiefunktionalitäten priorisiert,
- 2.** ein KI-System mit ca. 2.000 Proben [Fachliteratur] für die Fragestellung trainiert,
- 3.** über 35.000 weltweit veröffentlichte Artikel mit dem KI-System analysiert

Aus diesen identifizierte die KI-Software 420 bekannte und etablierte sowie sich in der Forschung und Entwicklung befindende Substanzen und strukturierte sie in 32 Clustern. Es wurden materialspezifische Funktionsprofile für die Unternehmen erstellt und das anwendungsspezifische Substitutionspotenzial der identifizierten Materialien durch die beteiligten Unternehmensexperten mittels einer qualitativen Bewertung beurteilt.

Der in dieser Studie gewählte Recherche-Ansatz ermöglichte eine sehr breite, weltweite Analyse verfügbarer Fachliteratur. Somit wurden umfangreich Informationen ermittelt, um mögliche Substitute zu identifizieren.

### **Zentrale Erkenntnisse sind:**

- Die in den betrachteten Anwendungen genutzten Eigenschaften von PFAS (als Kombination von Nutzendimensionen) sind einzigartig: Sie werden dort eingesetzt, wo eine besondere Kombination verschiedener Nutzendimensionen nötig ist.
- Für die beteiligten Unternehmen haben keine oder nur je 2 bis 3 identifizierte Materialien das Potenzial, PFAS zukünftig zu ersetzen. Ein adäquates, sofort oder in Kürze einsetzbares Substitut wurde in keinem der betrachteten Fälle gefunden.
- Diese potentiellen Substitute befinden sich gegenwärtig durchgängig im frühen F&E-Stadium und bedürfen noch umfangreicher Forschungs- und Entwicklungsarbeiten, die sehr wahrscheinlich deutlich länger sein werden als die gegenwärtig diskutierten Übergangsfristen von bis zu 13,5 Jahren.
- Die Projektergebnisse können neue Ansatzpunkte für ihre strategische Fokussierung sowie für die Ausrichtung ihrer Forschung und Entwicklungen aufzeigen.

Eine direkte Substitution erscheint heute nicht möglich, denn aktuell sind für die im Fokus dieses Projekts stehenden Anwendungen keine Alternativen verfügbar. Im Einzelfall gibt es zwar wenige mögliche Alternativen, aber eben noch im F&E-Stadium. Das bedeutet, dass sie noch genauer auf ihre Anwendbarkeit und Eignung für die spezifische Anwendung untersucht werden müssen. Dazu sind mitunter umfangreiche technische, sicherheits- und regulatorische Analysen nötig (die im Rahmen der vorliegenden Studie nicht durchgeführt werden konnten). Erst dann stellt sich final heraus, ob sie wirklich als vollwertiges Substitut einsetzbar sind.

### **Die aktuelle Situation stellt die Industrie vor große Herausforderungen. Die beteiligten Expertinnen und Experten sehen hier insbesondere:**

- 1. Identifikation, Substitution und Risikobewertung von PFAS:** Die Herausforderung besteht darin, alle PFAS-haltigen Materialien und Komponenten zu identifizieren und nach technisch geeigneten Alternativen zu suchen, die die heutigen PFAS-basierten Lösungen in Form, Passform, Verarbeitbarkeit und Funktion vollständig ersetzen können. Gleichzeitig ist das Risiko der PFAS-Substitute zu ermitteln, um nicht PFAS mit regulatorisch oder toxikologisch problematisch eingeschätzten Materialien zu ersetzen. Dies erfordert eine intensive Forschung nach alternativen, geeigneten Stoffen oder Technologien.
- 2. Lieferkettenmanagement:** Es ist von entscheidender Bedeutung, die Lieferketten für PFAS und andere kritische Materialien zu sichern. Darüber hinaus ist die Erfassung der gesamten Lieferkette für komplexe Produkte ein wichtiger Aspekt.
- 3. Ökologische und regulative Aspekte:** Die zunehmende Bedeutung ökotoxikologischer Themen verlangt ein proaktives Handeln der Industrie. Es ist aus Sicht der Expertinnen und Experten notwendig, das Konzept des essenziellen Gebrauchs zu etablieren und zu einem risikobasierten Ansatz zurückzukehren. Außerdem sollte demnach diskutiert werden, ob PFAS als Präzedenzfall für zukünftige Regulierungen anzusehen ist und wie Regulierungsbehörden die technischen Realitäten in ihre Entscheidungen einbeziehen.



Sollten in naher Zukunft keine Substitutionsmöglichkeiten gefunden werden, so entstehen der Industrie in Baden-Württemberg, aber auch der Gesellschaft Nachteile, da dann eben bestimmte, vielfach essentielle Hightech-Anwendungen nicht mehr (zumindest in der gewohnten Performanz) möglich sein werden.

Die ermittelten Ergebnisse können als Grundlage für den weiteren Entscheidungsprozess zu möglichen Stoffverboten dienen. Hier muss eine Abwägung zwischen dem Nutzen für Industrie und Gesellschaft auf der einen und Risiken für Umwelt und Gesundheit auf der anderen Seite erfolgen. Eine differenzierte Betrachtung sollte individuell auf die möglichen Risiken des jeweiligen Stoffs in der Umwelt, aber auch die Nachteile und Risiken eingehen, die durch ein Verbot einer für die Gesellschaft sinnvollen Anwendung, z. B. im Gesundheitsbereich entstehen können.

# 7 LITERATUR

Ballesteros-Sánchez, A.; De-Hita-Cantalejo, C.; Sánchez-González, M. C.; Jansone-Langine, Z.; Sotomayor, M. A. de; Culig, J.; Sánchez-González, J.-M. [2023]: Perfluorohexyloctane in dry eye disease: A systematic review of its efficacy and safety as a novel therapeutic agent. In: *The ocular surface* 30, S. 254–262. DOI: 10.1016/j.jtos.2023.10.001.

ECHA-European Chemicals Agency [Hg.] [2023]: ANNEX XV RESTRICTION REPORT Proposal for a restriction, substance name(s): Per- and polyfluoroalkyl substances (PFASs). Version Number 2, 22. 03. 2023.

Glüge, J.; Scheringer, M.; Cousins, I. T.; DeWitt, J. C.; Goldenman, G.; Herzke, D. et al. [2020]: An overview of the uses of per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS). In: *Environmental science. Processes & impacts* 22 (12), S. 2345–2373. DOI: 10.1039/d0em00291g.

Kassumeh, S.; Priglinger, S. G.; Messmer, E. M. [2022]: Volkskrankheit: Das Trockene Auge. In: *MMW Fortschritte der Medizin* 164 (4), S. 36–39. DOI: 10.1007/s15006-022-0708-3.

Mutter, C.; Mayer, J. [2023]: PFAS-Verbot darf kein Hightech-Verbot werden. SPECTARIS-Position zum Pauschalverbot der Per- und Polyfluoralkylsubstanzen (PFAS). Hg. v. SPECTARIS • Deutscher Industrieverband für Optik, Photonik, Analysen- und Medizintechnik e. V. Berlin.

Pucker, A.; Ng, S. M.; Nichols, J. J.. [2016]: Over the counter [OTC] artificial tear drops for dry eye syndrome. In: *The Cochrane database of systematic reviews* 2 (2), CD009729. DOI: 10.1002/14651858.CD009729.pub2.

Warschat, J.; Schimpf, S.; Korell, M. [Hg.] [2015]: Technologien frühzeitig erkennen, Nutzenpotenziale systematisch bewerten. Fraunhofer-Institut für Arbeitswirtschaft und Organisation. Stuttgart: Fraunhofer-Verlag.

Ye, F.; Zushi, Y.; Masunaga, S. [2015]: Survey of perfluoroalkyl acids (PFAAs) and their precursors present in Japanese consumer products. In: *Chemosphere* 127, S. 262–268. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2015.02.026.

# ANHANG: DIE 32 IDENTIFIZIERTEN MATERIALKATEGORIEN

Die im Projekt identifizierten Materialkategorien finden sich in der folgenden Tabelle.

Tabelle: Identifizierte Materialkategorien

ID	Materialkategorie	Beschreibung
1	Polymer and Composite Hydrogels	Wassergequollene, ver-netzte Polymernetzwerke mit reaktionsfähigen und einstellbaren mechanischen Eigenschaften
2	Nanoparticle-based Drug Delivery Systems and Nanomaterials	Nanoskalige Träger, die für die gezielte Verabreichung von Medikamenten und vielseitige Materialanwendungen entwickelt wurden
3	Advanced Coatings and Surface Treatments	Innovative Schutzschichten, die die Oberflächeneigenschaften gegen Verschleiß, Korrosion oder Umwelteinflüsse verbessern
4	Advanced Metal Alloys and Coatings	Hochleistungs-Metallkombinationen, die überragende Festigkeit, Haltbarkeit oder spezifische Funktionen bieten
5	Graphene-Based Nanomaterials and Composites	Atomdicke Kohlenstoffschichten versprechen hohe elektrische Leitfähigkeit und mechanische Festigkeit
6	Functional Polymeric Films and Coatings	Polymerschichten, die bestimmte Funktionalitäten wie Barriereigenschaften, Leitfähigkeit oder Reaktionsfähigkeit bieten
7	Nanocatalysts and Metal Oxide Composites	Verbesserte Katalysatoren auf der Nanoskala in Kombination mit Metalloxiden für eine verbesserte Reaktionseffizienz
8	Biological and Biocompatible Materials	Materialien, die so konzipiert sind, dass sie ohne Schaden mit biologischen Systemen zusammenwirken und für medizinische Anwendungen geeignet sind
9	Organic and Energetic Compounds	Chemisch hergestellte Moleküle, die bei der Zersetzung Energie freisetzen und in Treib- und Sprengstoffen verwendet werden
10	Fluorescent Carbon Nanomaterials	Kohlenstoffstrukturen im Nanomaßstab, die bei Anregung Licht emittieren können
11	Halide Perovskite Solar Materials	Kristalline Materialien, die eine verbesserte solare Umwandlungseffizienz in photovoltaischen Geräten bieten
12	Polymeric Materials and Coatings	Breites Angebot an makromolekularen Materialien und Beschichtungen für unterschiedliche Anwendungen
13	Bioactive Ceramic Composites	Keramiken, die spezifische biologische Reaktionen hervorrufen, nützlich für Anwendungen wie Knochenimplantate
14	Polymer-Based Composite Membranes	Entwickelte Membranen, die Polymere für Filtrations-, Trennungs- oder kontrollierte Freisetzungsanwendungen integrieren
15	Phosphor-Based Luminescent Materials	Materialien, die in der Lage sind, Licht zu absorbieren und wieder zu emittieren, und die in der Anzeige- und Beleuchtungstechnik von Bedeutung sind

16	<b>Metal and Metal-Based Nanoparticles</b>	Nanoskalige Metallpartikel mit einzigartigen elektronischen, optischen oder magnetischen Eigenschaften
17	<b>Inorganic Adsorbents and Framework Materials</b>	Feste Materialien, die durch Adsorption Moleküle aus Gasen oder Flüssigkeiten einfangen können
18	<b>Cellulose-Based Nanomaterials and Composites</b>	Diese Nanomaterialien werden aus natürlicher Zellulose gewonnen und bieten Festigkeit, biologische Abbaubarkeit und Funktionalität
19	<b>Polymer Electrolyte and Battery Materials</b>	Materialien für eine effiziente Ladungsübertragung in Batteriesystemen
20	<b>Fluorescent Nanoparticles and Probes</b>	Nanoskalige Partikel, die Licht emittieren und sich für Anwendungen in den Bereichen Bildgebung, Sensorik und Diagnose eignen
21	<b>Lead-Free Ceramic Materials and Composites</b>	Keramik ohne Bleianteil, mit Schwerpunkt auf Umweltsicherheit unter Beibehaltung wesentlicher Eigenschaften
22	<b>Polymer Nanocomposites and Conductive Materials</b>	Polymere mit integrierten nanoskaligen Füllstoffen, die die Leitfähigkeit oder die mechanischen Eigenschaften verbessern
23	<b>Metal Oxide Nanocomposites and Thin Films</b>	Nanokomposit-Materialien und dünne Schichten, die sich die vielfältigen Funktionen von Metalloxiden zunutze machen
24	<b>Polymer-Based Composite Materials</b>	Verbundwerkstoffe, die die Eigenschaften von Polymeren und anderen Füll- oder Verstärkungsstoffen nutzen
25	<b>Magnetic Nanoparticles and Composites</b>	Nanoskalige Partikel mit magnetischen Eigenschaften, die für die Datenspeicherung und medizinische Anwendungen entscheidend sind
26	<b>Bioactive and Antimicrobial Materials</b>	Materialien, die so entwickelt wurden, dass sie mit Mikroorganismen interagieren oder deren Wachstum hemmen
27	<b>Ceramic and Metal Matrix Composites</b>	Verbundwerkstoffe, die die Vorteile von Keramiken und Metallen vereinen, z. B. hohe Temperaturbeständigkeit und Festigkeit
28	<b>Titanium-based Nanocomposites and Coatings</b>	Zusammensetzungen, die die Festigkeit und Korrosionsbeständigkeit von Titan im Nanomaßstab oder als Beschichtung nutzen
29	<b>Transition Metal Dichalcogenide (TMD) Nanomaterials</b>	Geschichtete Nanomaterialien mit potenziellen Anwendungen in Elektronik und Optik
30	<b>Functional Coatings and Surface Modifications</b>	Beschichtungen, die dazu bestimmt sind, Oberflächen bestimmte Funktionalitäten zu verleihen oder zu verändern
31	<b>Advanced Ceramic and Composite Materials</b>	Keramische Werkstoffe oder Verbundwerkstoffe, die für Hochleistungsanwendungen entwickelt wurden
32	<b>Modified Asphalt and Bitumen Composites</b>	Herkömmliche Straßenbaumaterialien, die im Hinblick auf Haltbarkeit, Flexibilität oder andere gewünschte Eigenschaften verbessert wurden

# Impressum

## **Titel**

PFAS: Anwendung, technische Funktionen und Substitutionsmöglichkeiten in der Industrie

## **Herausgeber**

Dr. Christian Kühne  
Geschäftsführer  
THINKTANK Industrielle Ressourcenstrategien  
angesiedelt am Karlsruher Institut für Technologie (KIT)  
c/o Unternehmer Baden-Württemberg e. V.  
Türnenstrasse 2, 70191 Stuttgart  
Homepage: [www.thinktank-irs.de](http://www.thinktank-irs.de)  
LinkedIn: THINKTANK Industrielle Ressourcenstrategien

## **Autoren**

- > Prof. Dr.-Ing. Claus Lang-Koetz  
Hochschule Pforzheim, Institut für Industrial Ecology (INEC)  
Tiefenbronner Str. 65, 75175 Pforzheim
  
- > Dr. Ulrich Hutschek
- > Marius Heil  
TIM Consulting  
Hohnerstrasse 25, 70469 Stuttgart

## **Stand**

Veröffentlicht 01/2024

## **Grafische Konzeption, Illustration, Satz**

unger+ kreative strategien GmbH, Stuttgart, [www.ungerplus.de](http://www.ungerplus.de)

## **DOI-Nummer**

10.60846/6hf7-nh56

## **Copyright**

Wiedergaben in jeglicher Form, auch in Auszügen, müssen mit Quellenangaben gekennzeichnet werden.

## **Verteilerhinweis**

Der THINKTANK Industrielle Ressourcenstrategien ist gefördert aus Mitteln des Ministeriums für Umwelt, Klima und Energiewirtschaft Baden-Württemberg.