



Mitteilungen der Fachgruppe

Umweltchemie und Ökotoxikologie

Gesellschaft Deutscher Chemiker

- Umweltrisikobewertung von Chemikalien
- Schwermetallbelastung von Sedimenten im Oderhaff
- Bodensubstanz und Hydrophobizität
- Tagungsberichte
UFIPOLNET-Konferenz,
POP's in Gebirgsregionen,
Umweltchemiekonferenz in Inverness
- Personalia



1/2008

14. Jahrgang, März 2008 ISSN 1618-3258

Editorial: Gruß des Vorstands

R. V. Battersby, T. Knacker, G. Lammel, W. Lorenz, A. Schäffer, M. Scheringer, B. Schwarz-Schulz, J. Tolls

Liebe Mitglieder,

Ihnen allen wünscht der Vorstand ein glückliches und beruflich erfolgreiches Jahr.

Der Vorstand möchte das Editorial der ersten Ausgabe des Mitteilungsblattes dazu nutzen, den Mitgliedern die für dieses Jahr geplanten Aktivitäten vorzustellen. Angeregt durch das Ergebnis einer Klausur zum Thema „Derzeitiger Stand der Verankerung der Fächer Umweltchemie und Ökotoxikologie in der Hochschullandschaft“ hat der Vorstand beschlossen, eine Statuserhebung der Forschungsaktivität auf den Gebieten Umweltchemie und Ökotoxikologie durchzuführen. Damit soll für zwei Zeitpunkte im Abstand von 15 Jahren untersucht werden, wie sich der Beitrag von Forschung aus dem deutschsprachigen Raum im internationalen Vergleich entwickelt hat. Ein weiterer Schwerpunkt betrifft die Zusammenarbeit mit dem Umweltbundesamt. Das UBA ist daran interessiert, dass UBA-Mitarbeiter verstärkt in der universitären Lehre mitwirken und in Projekte mit wissenschaftlichen Forschungsinstitutionen eingebunden werden. Darüber hinaus möchte der Vorstand im Austausch mit allen Fachgruppen-Mitgliedern den Vorschlag des UBA aufgreifen, schon frühzeitig zukunftsweisende Fragestellungen in der Umweltforschung zu identifizieren. Entsprechende Initiativen sind z.B. bereits im Diskussionsbeitrag der Mitt. Umweltchem. Ökotox. (3) 2007 dokumentiert.

Der Mitgliederstand der Fachgruppe hat im vergangenen Jahr abgenommen. Er beträgt nunmehr 803 in Folge von 69 Austritten und Sterbefällen gegenüber 43 Eintritten. Insbesondere die Anzahl unserer jüngeren Mitglieder bis drei Jahre nach der Promotion (bzw. nach der ersten Anstellung) gibt Anlass zur Sorge: Mit 47 ist sie unbefriedigend gering. Der Vorstand möchte generell eine bessere Mobilisierung der Mitglieder erreichen und die Attraktivität der Fachgruppe vor allem für Studierende erhöhen. Daher wurde beschlossen, eine Umfrage unter den jüngeren Mitgliedern durchzuführen, welche die Erwartungen an die Fachgruppe und ihre Motive beim Eintritt erkennbar machen soll. Außerdem soll als konkretes Angebot eine Praktikumsbörse organisiert werden.

Höhepunkt des Jahres wird auch 2008 wieder die Tagung der Fachgruppe sein, die in diesem Jahr zusammen mit der SETAC-GLB in Frankfurt am Main, 23.-26.9., organisiert wird. Als Schwerpunktthemen schlägt das gemeinsame Organisationskomitee der veranstaltenden Gesellschaften eine Reihe von derzeit in der Umweltforschung aktuellen Stoffen bzw. Stoffgruppen vor, so halogenierte Flammschutzmittel, per- und polyfluorierte Chemikalien, Vorläufer organischer Aerosole, Pharmaka und Körperpflegemittel. Um allen Beiträgen gerecht werden zu können, werden die Sessionthemen erst nach Einreichungsschluss benannt werden. Dabei wird besonderes Augenmerk darauf gelegt werden, eine möglichst fruchtbare Fachdiskussion auf Prozess- oder Stoffebene zu ermöglichen. Bitte bringen Sie Ihre Themen und Beiträge und sprechen Sie auch gegebenenfalls Kollegen darauf an.



Impressum

Mitteilungen der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie

Herausgegeben von der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie der Gesellschaft Deutscher Chemiker
www.gdch.de/umweltchemie

Redaktion:

Prof. Dr. Dr. Klaus Fischer
Analytische und Ökologische Chemie
FB VI – Geografie/ Geowissenschaften –
Universität Trier
Campus II, Behringstr. 21, D-54296 Trier
Tel. und Fax: 0651/ 201-3617
Sekretariat: 0651/ 201-2243
E-Mail: fischerk@uni-trier.de

Abkürzung:

Mitt Umweltchem Ökotox

Design/ Technische Umsetzung:

Dr. Matthias Kudra, Universität Leipzig
E-Mail: kudra@uni-leipzig.de

ISSN: 1618-3258

Das vorliegende Heft der Mitteilungen wurde sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Herausgeber, Autoren und Redakteure für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen sowie für eventuelle Druckfehler keine Haftung.

Titelbild:

Gerhard Lammel erhält aus den Händen des tschechischen Staatspräsidenten Václav Klaus die Ernennungsurkunde zum „Full Professor“.

Editorial

- 1 Gruß des Vorstands

Originalbeiträge

- 3 Datenprobleme und Datenbedarf in der Umweltrisikobewertung von Chemikalien
- 11 Hintergrundwerte und Schwermetallbelastung von Sedimenten im Bereich von Fließgewässern am Beispiel des Oderhaffes
- 15 Zusammensetzung der organischen Bodensubstanz und ihre Wirkung auf die Hydrophobizität

Kurz vorgestellt

- 19 Research Centre for Environmental Chemistry and Ecotoxicology
- 20 Arbeitsgruppe Organische Umweltschadstoffe am Department für Umweltgeowissenschaften der Universität Wien
- 20 International Panel on Chemical Pollution (IPCP)

Informationen

Tagungsberichte

- 21 Europäische Umweltchemie-Konferenz in Inverness, Schottland
- 22 UFIPOLNET Conference
- 24 Persistent Organic Pollutants in Mountainous Areas', Salzburg, 26.-27.11.2007

Tagungsankündigungen

- 25 35. IAEAC-Tagung in Danzig
- 26 1st Int. Workshop on "New Developments of fluorinated surfactants", 26-28.06., Idstein
- 26 4th Summer School of Environmental Chemistry and Ecotoxicology, RECETOX, Brno
- 27 Umweltbeobachtungskonferenz 8.–10.10.08 im Zentrum Paul Klee, Bern, Schweiz

Tagungsanzeige

- 30 GDCh-Konferenz und Workshop zur Nachhaltigen Chemie in Aachen

Personalia

- 28 Ernennung des Vorsitzenden der Fachgruppe, PD Dr. Gerhard Lammel, zum „Full Professor“
- 28 Geburtstagsliste 2. Quartal 2008



Datenprobleme und Datenbedarf in der Umweltrisikobewertung von Chemikalien

Martin Schering (schering@chem.ethz.ch), Konrad Hungerbühler (hungerb@chem.ethz.ch), Zürich

Präambel

Der vorliegende Artikel beruht auf einem Beitrag, den die Autoren im Rahmen eines Kolloquiums des Beratergremiums Altstoffe (BUA) zum Thema „**QSAR-Methoden in der Chemikalienbewertung und ihre Bedeutung für REACH**“ Ende 2006 präsentiert haben.

Infolge der Implementierung von REACH wurde das BUA-Projekt am 20.04.2007 im Rahmen einer Jubiläumsveranstaltung zu dessen 25-jährigem Bestehen offiziell beendet.

In den „Mitteilungen Umweltchemie Ökotoxikologie“ werden im Laufe dieses Jahres 3 weitere Beiträge aus diesem Kolloquium in folgender Reihenfolge veröffentlicht werden:

M. Matthies, J. Klasmeier: Multimediale Modellierung zur Identifizierung von persistenten Stoffen mit Ferntransportpotenzial

B. Simon-Hettich: Toxizitätsmodellierung mit kommerziellen (Q)SAR-Systemen: praktische Aspekte für die regulatorische Anwendung

E. Jacob: QSAR-Ansätze für die toxikologische Bewertung von Industriechemikalien

Zusammenfassung

In der Umweltrisikobewertung von Chemikalien sind Multikompartiment-Modelle ein wichtiges Instrument, weil sie es ermöglichen, für viele Stoffe mit relativ geringem Rechenaufwand die zu erwartenden Umweltkonzentrationen abzuschätzen. Wir illustrieren, wie sich diese Modelle konkret einsetzen lassen, in welcher Richtung sie zurzeit weiterentwickelt werden, und welche Stoffdaten sie als Eingabeparameter benötigen. Wir stellen zunächst Modelle zur Berechnung von Persistenz und Ferntransport-Potential vor und gehen dann auf ein höher aufgelöstes globales Verteilungsmodell und Modelle zur Erfassung von Umwandlungsprodukten ein. Anschließend diskutieren wir die Verfügbarkeit der Stoffdaten, die als Eingabeparameter für die Modelle benötigt werden: physikalisch-chemische Eigenschaften, Halbwertszeiten des chemischen und biologischen Abbaus in den verschiedenen Umweltmedien, sowie Angaben zu Emissionsmengen und ihrer räumlichen und zeitlichen Verteilung. Während physikalisch-chemische Eigenschaften für viele organische Substanzen relativ gut verfügbar sind, bestehen bei Halbwertszeiten große Lücken. Hier besteht erheblicher Forschungsbedarf, insbesondere auch, um Abschätzmethoden für Halbwertszeiten zu verbessern. Auch Emissionsdaten sind oft mit erheblichen Unsicherheiten

behaftet und müssen in Zukunft systematischer erhoben und dokumentiert werden.

1. Zur Chemikalienbewertung unter REACH

Die Risikobewertung von Industriechemikalien befindet sich durch die Vorbereitung der neuen europäischen Chemikaliengesetzgebung (REACH) im Umbruch /1, 2/. Die bisher gültige Aufteilung der Substanzen in Alt- und Neustoffe hat bei der Bewertung der Altstoffe, für welche die Behörden hauptverantwortlich sind, einen Stau bewirkt.

REACH wird es erforderlich machen, dass die Stoffbewertung erheblich effizienter wird. Die Hauptaufgabe liegt dabei auf Seiten der Industrie, die für die Registrierung aller Substanzen, die auf dem Markt bleiben oder neu vermarktet werden sollen, eine Risikobewertung durchführen muss. Dadurch wird der Bedarf an Stoffdaten, aber auch an Methoden zur Erhebung von Stoffdaten und zur Abschätzung von Exposition und Effekten stark ansteigen. Damit die Anzahl der erforderlichen Tierversuche möglichst niedrig gehalten werden kann, werden dabei auch Methoden zur Abschätzung von Stoffeigenschaften aus der Molekülstruktur eine erhebliche Bedeutung erhalten (quantitative Struktur-Eigenschafts- und quantitative Struktur-Aktivitäts-Beziehungen, QSPR und QSAR). Essentiell wird es auch sein, vorhandene Daten effizient zu nutzen, d.h. ihre Qualität zu beurteilen und verlässliche Daten möglichst vielen Anwendern zugänglich zu machen.

Im vorliegenden Beitrag behandeln wir Multikompartiment-Modelle als essentielles Instrument zur Abschätzung der Stoffkonzentration in der Umwelt. Die zu erwartende Konzentration einer Substanz in der Umwelt (PEC, predicted environmental concentration) ist – neben den Daten zur toxischen Wirkung – ein zentrales Element der Risikobewertung. Zurzeit wird in den Risikobewertungen in der EU das Modell EUSES (European Uniform System for the Evaluation of Substances) verwendet /3/. EUSES hat jedoch einige Beschränkungen (relativ generische Abbildung der Umwelt, keine Behandlung von Umwandlungsprodukten), und es wird gegenwärtig diskutiert, wie EUSES für die Verwendung unter REACH verbessert werden kann. Um den Stand der Forschung im Bereich der Multikompartiment-Modelle zu illustrieren, stellen wir verschiedene Modelle und ihre Verwendungszwecke im Rahmen von Gefährdungsbewertung und Risikobewertung vor (Abschnitt 2) und diskutieren in Abschnitt 3 die benötigten Substanzdaten und Umweltparameter.

2. Multikompartiment-Modelle

2.1. Überblick

Multikompartiment-Modelle bilden die Hauptreservoir ab, in denen sich ein Stoff in der Umwelt befindet, und quantifizieren die Austausch-, Verlust- und Transportprozesse, denen ein Stoff in diesen Reservoiren unterworfen ist. Häufig behandelte Umweltkompartimente sind Wasser, Luft, Boden, Vegetation und Sediment; Prozesse sind z.B. gasförmiger Austausch, Deposition mit Partikeln, biotischer und abiotischer Abbau sowie Transport von einer Modellregion in benachbarte Regionen, s. Abbildung 1.

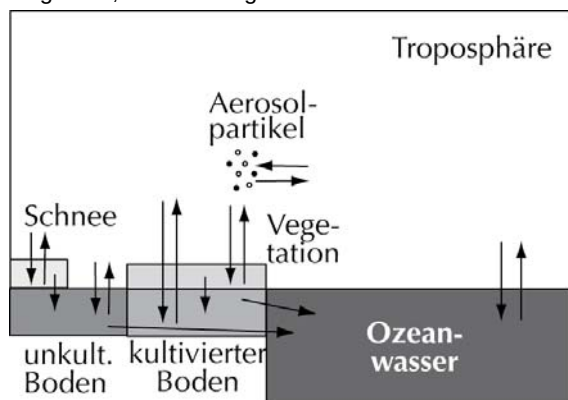


Abb.1: Struktur eines Multikompartiment-Modells mit Austauschprozessen.

Dabei wird angenommen, dass die Reservoirs homogen durchmischt sind und dass alle Prozesse nach einer Kinetik erster Ordnung ablaufen. Dies ermöglicht es, für alle Kompartimente gemeinsam ein System von gekoppelten Massenbilanzgleichungen aufzustellen. In diesem systematischen und quantitativen Rahmen ist es relativ einfach, weitere Umweltkompartimente oder Prozesse hinzuzufügen, Transformationsprodukte einer Ausgangssubstanz in die Berechnungen mit einzubeziehen sowie Unsicherheitsanalysen durchzuführen. Diesen Vorteilen gegenüber steht die oft relative geringe räumliche und zeitliche Auflösung von Multikompartiment-Modellen.

Neben Multikompartiment-Modellen gibt es Verteilungsmodelle, welche die Transportprozesse von Chemikalien in Boden, Wasser und Luft präziser beschreiben, als dies in Multikompartiment-Modellen der Fall ist. Wenn die Daten zum betrachteten Umweltsystem vorhanden sind, die für die Parameterisierung und Kalibrierung solcher Modelle nötig sind, erlauben solche Modelle genaue und hochaufgelöste Berechnungen des Transportverhaltens von Schadstoffen. Oft erfordern solche höher aufgelösten Modelle aber auch einen wesentlich höheren Rechenaufwand als Multikompartiment-Modelle, z.B. Klimamodelle, die für die Behandlung organischer Schadstoffe erweitert wurden /4/.

Verschiedentlich werden Multikompartiment-Modelle und höher aufgelöste Transportmodelle einander gegenübergestellt mit der Frage, ob einer der beiden Modelltypen grundsätzlich vorzuziehen sei. Diese Frage lässt sich in

dieser Form jedoch nicht beantworten; vielmehr gilt es, das für den Zweck einer Untersuchung geeignete Modell zu entwickeln. Modelle gewinnen ihre Bedeutung dadurch, dass sie zweckmäßig sind, um eine bestimmte Fragestellung zu untersuchen. Für die Abschätzung des Umweltverhaltens organischer Substanzen mit relativ ungenau bekannten Stoffeigenschaften und Emissionsdaten haben sich Multikompartiment-Modelle als gut geeignet erwiesen, auch im Vergleich der Modellresultate mit Felddaten /5, 6/.

Das Spektrum der heute verfügbaren Multikompartiment-Modelle reicht von einfachen "unit-world"-Modellen mit Boden, Wasser und Luft als Umweltmedien über regionale Modelle, die typischerweise die Umweltmedien Ackerboden, Vegetation, un bebauter Boden, Süßwasser, Sediment, Meerwasser und Luft umfassen /7, 8, 9/, bis hin zu globalen Modellen /10, 11, 12/. Weiterhin gibt es Modelle, die primär entwickelt wurden, um die Humanexposition gegenüber Substanzen, die in der Umwelt zirkulieren, abzuschätzen /13, 14/.

2.2. Modelle zur Bestimmung von Persistenz und Ferntransport-Potential

Persistenz und Ferntransport-Potential beschreiben die Tendenz einer Substanz, lange in der Umwelt zu verbleiben und sich weiträumig zu verteilen /15/. Diese beiden Indikatoren sind ein Element der Gefährdungsbeurteilung (hazard assessment), nicht der Risikobewertung. Die Gefährdungsbeurteilung erfasst kritische Eigenschaften einer Substanz wie Persistenz und Toxizität, die unabhängig vom konkreten Verwendungsmuster und den tatsächlichen Emissionsmengen bestehen. Unter REACH ist eine Gefährdungsbeurteilung in Form der PBT-Bewertung (Bewertung hinsichtlich Persistenz, Bioakkumulationspotential und Toxizität) vorgesehen. Dort wird die Persistenz anhand von Halbwertszeiten in den einzelnen Umweltmedien bewertet. Daneben besteht auch die Möglichkeit, mit einem Multikompartiment-Modell die Gesamtpersistenz einer Substanz zu berechnen. Bei der Berechnung der Gesamtpersistenz werden die Halbwertszeiten mit den Massenanteilen in den Umweltkompartimenten gewichtet, so dass die Gesamtpersistenz das Zusammenspiel von Verteilungsverhalten und Halbwertszeiten widerspiegelt. Inwieweit die Gesamtpersistenz unter REACH als Ergänzung zu den Einzelmedien-Halbwertszeiten herangezogen werden kann, wird zurzeit diskutiert.

Ein Modell, das eigens zur Berechnung von Gesamtpersistenz und Ferntransport-Potential entwickelt wurde, ist "ChemRange" /16/. Dieses Modell liefert keine realistischen Konzentrationswerte, sondern ein räumliches Konzentrationsprofil entlang eines "Schlauches" von der Länge des Erdumfangs. Die Erstreckung dieses Konzentrationsprofils wird anhand der räumlichen Reichweite R beschrieben (Distanz, die 95% der Fläche unter der Konzentrationskurve enthält), s. Abbildung 2.

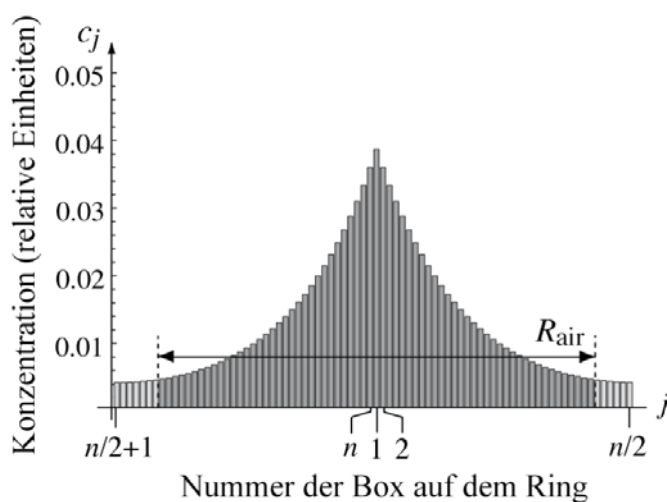
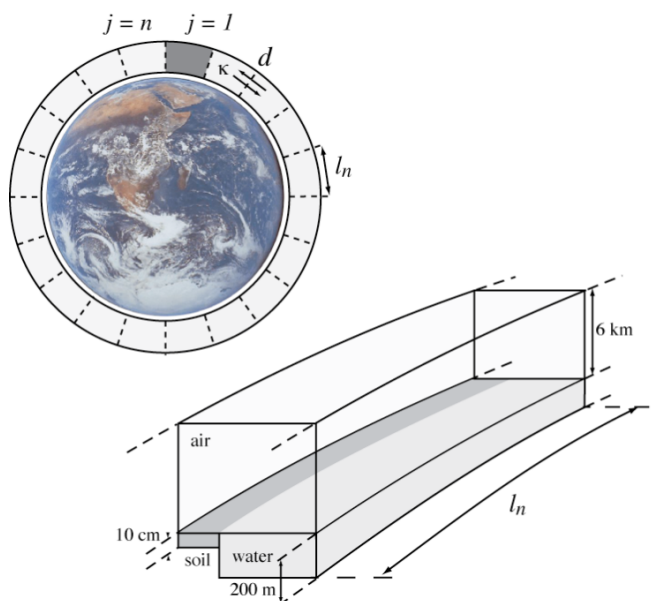


Abb. 2: Geometrie des Modells ChemRange (links) und räumliches Konzentrationsprofil, wie es das Modell für Perchlorethylen liefert (rechts).

Die mit ChemRange berechneten Konzentrationen sind steady-state-Konzentrationen, d.h. bei diesen Konzentrationen ist der gesamte Stoffverlust durch Abbau im Modell genauso groß wie der Emissionsfluss ins Modell. Aus diesen Konzentrationen lässt sich die Persistenz t als die Aufenthaltszeit der Substanz im Modellsystem berechnen.

Mittels Persistenz und Reichweite lassen sich Stoffe in einem zweidimensionalen Diagramm anordnen und vergleichen. Abbildung 3 zeigt Modellresultate für 1200 Substanzen; dabei gelten Reichweiten von mehr als 20% des Erdumfangs und Persistenzen von mehr als 90 Tagen als hoch. Die konkrete Wahl dieser Zahlenwerte ist in gewissem Ausmaß subjektiv, aber auch mit anders gewählten Zahlenwerten lässt sich derselbe Zweck erreichen: die Identifizierung von Substanzen mit besonders hohem Potential für langdauernde und weiträumige Umweltexposition.

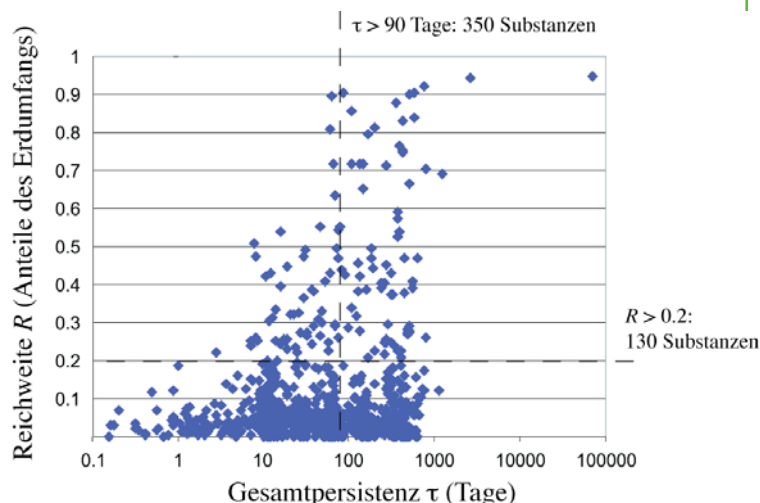


Abb. 3: Reichweite-Persistenz-Graphik mit Resultaten aus ChemRange für 1200 organische Substanzen /17/.

Auch ein stark vereinfachtes Modell wie ChemRange kann durch Bezug auf empirische Daten überprüft werden. Ansatzpunkt hierzu sind bei ChemRange keine in der Umwelt gemessenen Stoffkonzentrationen, sondern die so genannte "Junge-Beziehung" /18/. Diese Beziehung besagt, dass die atmosphärische Aufenthaltszeit einer Substanz einerseits und die Variabilität der Konzentration, mit der diese Substanz in der Atmosphäre gemessen wird, umgekehrt proportional sind: Substanzen mit langer Aufenthaltszeit sind in der Atmosphäre homogen verteilt und zeigen kleine Variabilität, Substanzen mit kurzer Aufenthaltszeit sind inhomogen verteilt und zeigen eine größere Konzentrationsvariabilität. Diese Beziehung wurde empirisch bestätigt, und das Modell ChemRange reproduziert sie in guter Übereinstimmung mit den empirischen Daten /19/. Damit ist gezeigt, dass die langfristige und weiträumige atmosphärische Transportdynamik im Modell ChemRange in angemessener Weise abgebildet wird.

Datenbedarf: Die stoffspezifischen Eingabedaten für ChemRange sind zwei Verteilungskoeffizienten und drei Halbwertszeiten: Henrykonstante und Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizient (K_{ow}), um das Verteilungsgleichgewicht zwischen den drei Medien Boden, Wasser und Luft zu beschreiben, sowie summarische Halbwertszeiten für die drei Medien, welche den Gesamteffekt von biologischem und chemischem Abbau darstellen. Henrykonstante und K_{ow} sind für viele Stoffe verfügbar; unter REACH werden K_{ow} , Dampfdruck und Wasserlöslichkeit für alle Produktionsvolumina ab 1 t/a verlangt. Halbwertszeiten sind deutlich schlechter verfügbar als Verteilungskoeffizienten; in vielen Fällen müssen sie aus der molekularen Struktur abgeschätzt werden. Die Unsicherheiten sind daher deutlich größer als bei den Verteilungskoeffizienten, s. Abschnitte 3.1 und 3.2.

2.3 Globale Verteilungsmodelle

Ein globales Modell, mit dem sich realistische Konzentrationen in den verschiedenen Umweltmedien berechnen lassen, ist das Modell "CliMoChem" (Climate Zone Model for Chemicals) /11/. Ähnlich wie das Modell Globo-POP /10/ besteht CliMoChem aus einer Sequenz von Breitenzonen vom Nordpol bis zum Südpol, s. Abbildung 4.

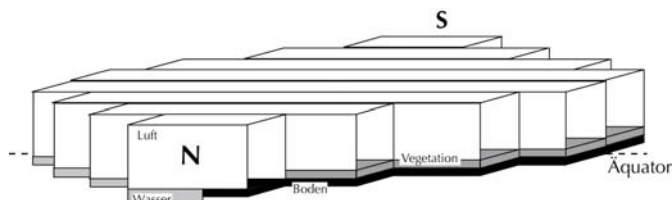


Abb. 4: Geometrie des Modells CliMoChem. N: Nordpolarzone, S: Südpolarzone.

Diese Breitenzonen unterscheiden sich im Jahresverlauf der Temperatur, in den Anteilen von Wasser und Land und in den Vegetationstypen. Die Struktur des Modells beruht auf der Annahme, dass Transport West-Ost-Richtung deutlich schneller ist (Zeitskala von ca. 2 Wochen) als Transport in Süd-Nord-Richtung (Zeitskala von 6 Monaten bis zu einem Jahr). Diese Annahme steht im Zusammenhang mit dem Zweck des Modells: Das Modell CliMoChem dient dazu, den Transport persistenter Substanzen aus den Tropen und gemäßigten Breiten bis in die Arktis zu untersuchen und insbesondere das Phänomen der "globalen Fraktionierung" zu analysieren. Globale Fraktionierung steht dafür, dass Substanzen mit unterschiedlichen Eigenschaften eine unterschiedliche Tendenz haben, bis in die Polargebiete transportiert zu werden, und dass sich daher ein Gemisch aus Substanzen, die in der selben Gegend freigesetzt werden, z.B. PCBs, während des Ferntransports in verschiedene Fraktionen aufspaltet /20/. So plausibel diese Hypothese ist, so vielschichtig ist das Phänomen der globalen Fraktionierung in der Realität. Das Ausmaß und die Geschwindigkeit, mit der eine Substanz bis in die Arktis transportiert wird, hängt von dem Zusammenspiel aller Stoffeigenschaften (Verteilungskoeffizienten, Abbauraten sowie deren Temperaturabhängigkeiten) mit einer Vielzahl von Umweltbedingungen ab. Zudem ist das Emissionsmuster der in der Arktis gefundenen Substanzen nicht einheitlich, so dass Unterschiede im Emissionsmuster tatsächlich vorhandene Fraktionierungseffekte überdecken können. In der Realität konnte ein Fraktionierungsmuster in einigen Fällen festgestellt werden /21/, in anderen Fällen hingegen nicht /22/. Aufgrund dieser Komplexität ist es hilfreich, den Einfluss der verschiedenen Faktoren mit einem Transportmodell zu untersuchen. Damit lässt sich auch mechanistisch verstehen, welche Stoffeigenschaften die Unterschiede in der Transporteffizienz bestimmen.

In einer ersten Simulationsrechnung mit dem Modell CliMoChem hat sich gezeigt, dass das Modell die empirisch beobachtete Fraktionierung von PCBs gut reproduziert, s. Abbildung 5. Damit ist gewährleistet, dass der zu unter-

suchende Effekt im Modell überhaupt beobachtet werden kann. In weiteren Schritten sind wir gegenwärtig dabei, den Einfluss einzelner Stoffeigenschaften auf das Fraktionierungsmuster aufzuschlüsseln.

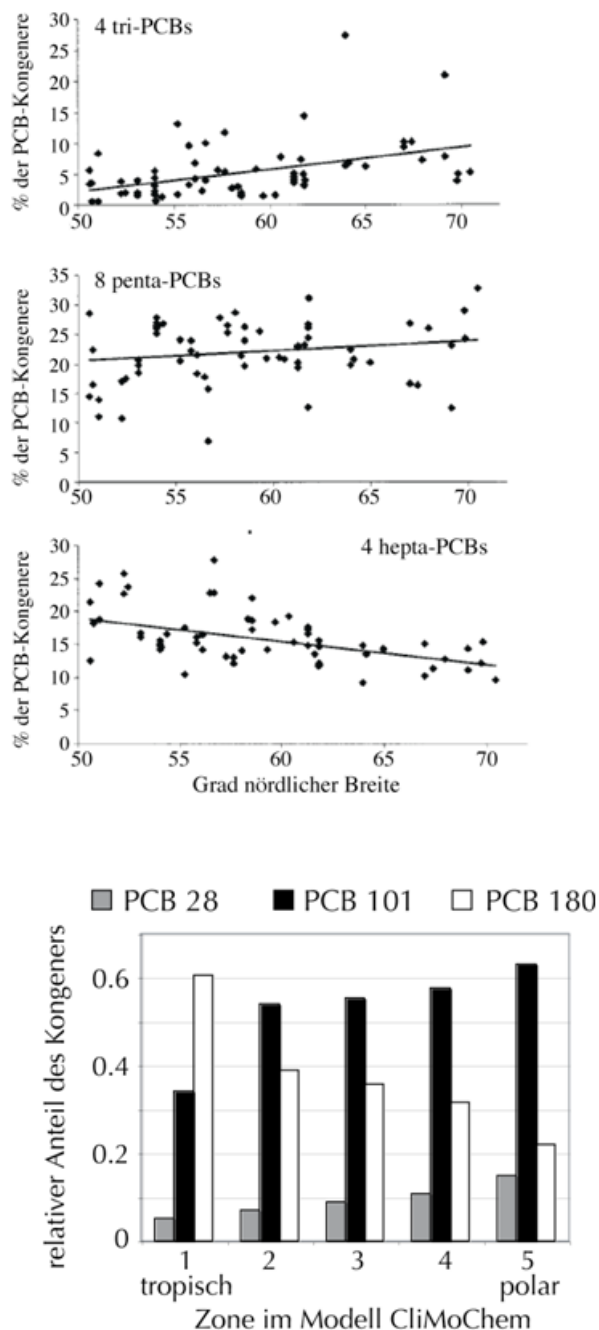


Abb. 5: Globale Fraktionierung von PCBs in nordeuropäischen Böden (Messdaten, oben) und im Modell CliMoChem (unten). Quelle der Graphik links: Environ. Sci. Technol. 36 (2002), 2151 /21/.

Validieren lässt sich das Modell CliMoChem durch den Vergleich der berechneten Konzentrationen mit in der Umwelt gemessenen Werten. Damit die Modellresultate in Beziehung zu gemessenen Werten gesetzt werden können, müssen historische Emissionsdaten in das Modell eingespeist werden. Für viele Substanzen sind langfristige und globale Emissions-

daten jedoch nicht verfügbar, s. Abschnitt 3.3, was diese Art der direkten Validierung bei globalen Modellen erheblich erschwert. Für DDT sind mittlerweile relativ verlässliche Emissionsdaten verfügbar /23–26/, und in einem derzeitigen Projekt analysieren wir, wie gut das Modell CliMoChem die in verschiedenen Regionen der Welt gemessenen Konzentrationen in Wasser, Boden und Luft reproduziert, und zwar für DDT selbst und seine Umwandlungsprodukte DDE und DDD /6/.

Datenbedarf: Die Datenanforderungen im Modell CliMoChem und ähnlichen globalen Modellen sind höher als bei evaluativen Modellen wie ChemRange, weil mehr Umweltkompartimente und mehr Regionen abgebildet werden. Neben den Verteilungskoeffizienten und Halbwertszeiten werden auch die Temperaturabhängigkeiten dieser Größen benötigt. Für die Abbaureaktionen sind dies entweder Aktivierungsenergien oder Angaben zur Zu- oder Abnahme der Reaktionsgeschwindigkeit bei einer bestimmten Temperaturänderung; für die Verteilungskoeffizienten müssen die Enthalpien des Phasenübergangs zwischen Wasser und Luft sowie Oktanol und Luft bekannt sein.

Für "realistische" Modellrechnungen werden neben den Stoffeigenschaften auch Daten zur räumlichen und zeitlichen Verteilung der Emissionen benötigt, s.o. Wenn solche Emissionsdaten nicht vorliegen, lassen sich immerhin noch idealisierte Berechnungen durchführen, bei denen für alle Stoffe eine Einheitsemission verwendet wird. Auch wenn diese Berechnungen keine realistischen Bedingungen repräsentieren, sind sie oft sehr hilfreich, um das Stoffverhalten prinzipiell zu verstehen.

2.4 Modelle zur Erfassung von Transformationsprodukten

Da sich die mathematische Struktur von Multikompartiment-Modellen relativ einfach um Massenbilanzgleichungen für weitere Substanzen erweitern lässt und weil der Rechenaufwand der Modelle relativ niedrig ist, können mit diesen Modellen auch Kaskaden aus Ausgangssubstanz und Umwandlungsprodukten untersucht werden /27, 28/. Die größte Herausforderung besteht bei solchen Untersuchungen darin, die relevanten Umwandlungsprodukte zu identifizieren sowie Daten zur Kinetik ihrer Bildung und zu ihren physikalisch-chemischen Eigenschaften zu finden. In vielen Fällen sind diese Daten nur ansatzweise vorhanden und müssen mit Abschätzmethoden gewonnen werden, s. Abschnitt 3.2. Andererseits wird das Problem dadurch etwas entschärft, dass oft nur Umwandlungsprodukte der ersten und allenfalls zweiten Generation relevant sind (hinsichtlich Menge und/oder toxischen Eigenschaften) /28/.

In einigen Fällen sind Umwandlungsprodukte auch auf globaler Ebene von Bedeutung, so z. B. bei einigen der unter der Stockholm-Konvention regulierten persistenten organischen Schadstoffe (POPs). Ein wichtiger Fall ist DDT, das

sich in die ebenfalls persistenten Substanzen DDE und DDD umwandelt, welche weltweit nachgewiesen werden können /6/.

3 Datenbedarf

Multikompartiment-Modelle benötigen zwei Sorten von Daten: Umweltparameter und Stoffeigenschaften. Umweltparameter beschreiben z.B. den Gehalt des Bodens an organischem Kohlenstoff, die Regenintensität, die Konzentration von Aerosolpartikeln in der Luft u.v.a.m. Bei Modellen mit geringer räumlicher Auflösung werden für diese Umweltparameter großräumige oder globale Mittelwerte verwendet. Bei Modellen mit höherer Auflösung hingegen werden zunehmend auch hochaufgelöste Umweltdaten aus Bodenmessstationen oder Satellitenmessungen verwendet, z.B. für Temperatur, Vegetationstypen, Niederschlagsintensität und Aerosolkonzentrationen. In Zukunft werden hochaufgelöste Umweltdaten, auch auf der Basis geographischer Informationssysteme, für die Weiterentwicklung von Multikompartiment-Modellen weiter an Bedeutung gewinnen. Diese umfassende Thematik können wir hier jedoch nicht weiter ausführen; wir betrachten im Folgenden die zweite Parametergruppe, die substanzbezogenen Daten. Diese umfassen physikalisch-chemische Eigenschaften (Abschnitt 3.1), Geschwindigkeitskonstanten für chemischen und biologischen Abbau (Abschnitt 3.2) sowie Angaben zum Emissionsmuster (Abschnitt 3.3).

3.1 Physikalisch-chemische Eigenschaften

Um das Verteilungsgleichgewicht zwischen den verschiedenen Modellkompartimenten zu beschreiben, werden Henrykonstante (Luft-Wasser), K_{ow} (Boden-Wasser; organisches Material im Boden wird durch Oktanol beschrieben) und K_{oa} (Boden-Luft) benötigt. Alle drei Verteilungskoeffizienten können direkt gemessen werden, zudem kann einer der drei aus den beiden anderen berechnet werden. Weiterhin kann jeder der drei Verteilungskoeffizienten aus den jeweiligen beiden Löslichkeiten bestimmt werden (die "Löslichkeit" in Luft ergibt sich aus dem Dampfdruck). Insgesamt stehen für eine gegebene Substanz somit maximal sechs gemessene Größen zur Verfügung, die zudem untereinander in Beziehung stehen. Wenn alle drei Komponenten einer solchen Beziehung, z.B. Dampfdruck, Löslichkeit in Oktanol und K_{oa} , gemessen wurden, kann die theoretische Beziehung zwischen den drei Größen benutzt werden, um festzustellen, ob die gemessenen Werte vom theoretischen Zusammenhang abweichen. Wenn Abweichungen bestehen, was aufgrund von Messungenauigkeiten meistens der Fall ist, können diese Abweichungen durch Anpassung der gemessenen Werte korrigiert werden. Diese Anpassungen werden anhand eines Verfahrens zur Minimierung der kleinsten Quadrate vorgenommen /29/. Auf der Web-Seite www.sust-chem.ethz.ch/downloads steht eine Excel-Datei zur Verfügung, welche das Anpassungsverfahren und angepasste physikalisch-chemische Daten für diverse Substanzen enthält.

Unter REACH werden drei der sechs physikalisch-chemischen Basisgrößen für alle registrierten Stoffe verlangt, nämlich Wasserlöslichkeit, Dampfdruck und K_{ow} . Für viele Stoffe lassen sich in der Literatur weitere gemessene oder abgeschätzte Werte finden, zudem werden weiterhin verbesserte Schätzverfahren für physikalisch-chemische Eigenschaften entwickelt /30/. Trotz erheblichen Unsicherheiten in den physikalisch-chemischen Daten insbesondere für mittelflüchtige Substanzen kann die Datenlage in diesem Bereich als einigermaßen gut bezeichnet werden. Dennoch sind – angesichts der bestehenden Lücken und Unsicherheiten – weitere systematische Messungen der physikalisch-chemischen Eigenschaften umweltrelevanter Substanzen notwendig.

Weniger gut verfügbar sind Angaben zur Temperaturabhängigkeit der physikalisch-chemischen Eigenschaften. Die Temperaturabhängigkeiten der einzelnen Größen werden durch Verdampfungs- und Lösungsenthalpien beschrieben. Für einige Substanzen und Substanzgruppen sind Verdampfungs- und Lösungsenthalpien relativ gut charakterisiert, sie stehen jedoch nicht für die Gesamtmenge der unter REACH zu registrierenden Stoffe zu Verfügung. Die Verdampfungsenthalpie kann aus dem Dampfdruck abgeschätzt werden /31/. Die Enthalpie der Lösung in Oktanol kann für viele organische Substanzen – im Vergleich zur Verdampfungsenthalpie und der Lösungsenthalpie für Wasser – als klein angenommen werden. Die größte Unsicherheit besteht bei der Lösungsenthalpie für Wasser, die erheblich schwanken und sogar negative Werte annehmen kann.

Neben den erwähnten Verteilungskoeffizienten und Löslichkeiten, die sich auf Boden (Oktanol), Wasser und Luft beziehen, werden für andersartige Umweltkompartimente weitere Verteilungskoeffizienten benötigt. Beispiele sind Vegetation, Eis- oder Schneeoberflächen und mineralische Oberflächen. Um Verteilungskoeffizienten für die Adsorption an Oberflächen zu bestimmen, haben Goss et al. in den letzten Jahren die so genannte Abraham-Gleichung auf umweltrelevante Systeme übertragen /32/. Für viele Substanzen mit einfacher Molekülstruktur sind Abraham-Parameter vorhanden und tabelliert, bei komplizierteren Molekülen (Pestizide, Pharmaka) fehlen sie hingegen oft bzw. sind nicht in der offenen Literatur verfügbar.

Aufgrund ihrer mechanistischen Fundierung und allgemeinen Anwendbarkeit hat die Abraham-Gleichung ein großes Potential für die systematische Beschreibung von Phasengleichgewichten im Rahmen der Expositionsanalyse. Damit dieses Potential auch genutzt werden kann, müssen jedoch unbedingt mehr Messungen der Abraham-Parameter für ein breites Spektrum umweltrelevanter Substanzen durchgeführt werden. Man vergleiche hierzu auch Schüürmann et al. /30/.

3.2 Daten zu chemischem und biologischem Abbau

Um Abbauprozesse in Multikompartiment-Modellen zu beschreiben, werden zumindest Daten zum aeroben biologischen Abbau und zur Gasphasenreaktion mit OH-Radikalen benötigt. Bereits diese Prozesse sind für viele Substanzen nur unzureichend charakterisiert; die umfassende Reaktivität einer Substanz in der Umwelt umfasst eine ganze Reihe weiterer Reaktionen (Hydrolyse, direkte Photolyse, diverse Oxidations- und Reduktionsreaktionen). Somit ist die Datenlage bezüglich Abbauprozessen deutlich schlechter als bezüglich physikalisch-chemischen Eigenschaften. Es ist dringend erforderlich, die verschiedenen Abbauprozesse in umfassenden Forschungsprogrammen experimentell zu untersuchen und systematisch Daten zu erheben.

Unter REACH ist zunächst (ab 1 t/a Produktionsvolumen) nur der Test auf leichte biologische Abbaubarkeit gefordert, welcher keine Angaben über die Kinetik des Abbaus liefert. Ab 10 t/a kommen Angaben zur Hydrolyse hinzu, und erst ab 100 t/a müssen Halbwertszeiten in Simulationstests bestimmt werden (vor allem für Wasser und bei starker Adsorption an organisches Material auch für Boden). Die Reaktivität in der Gasphase wird unter REACH gar nicht betrachtet. Für Substanzen mit Produktionsvolumina unter 100 t/a – das sind ca. 20 000 Substanzen – stehen somit keine Halbwertszeiten für die Hauptabbauprozesse in Boden, Wasser und Luft zur Verfügung. Dies erschwert erstens die Berechnung der zu erwartenden Umweltkonzentration (PEC) mittels Multikompartiment-Modellen, und zweitens verunmöglicht es die Anwendung der Halbwertszeit-Kriterien aus Anhang XIII von REACH, die im Rahmen der für alle Substanzen vorgesehenen PBT-Bewertung vorgeschrieben ist.

Für viele Substanzen besteht der einzige Ausweg zurzeit darin, die benötigten Halbwertszeiten aus der molekularen Struktur abzuschätzen. Dies ist möglich mit den Schätzverfahren des Programmpakets EpiSuite (Estimation Program Interface), das von der US EPA zur Verfügung gestellt wird (BioWin für biologischen Abbau, AOPWin für Reaktionen mit OH-Radikalen) /33/. Bei diesen Abschätzungen bestehen jedoch erhebliche Unsicherheiten. BioWin liefert zunächst einen Zahlenwert zwischen 0 und 5, der anschließend in eine Halbwertszeit umgerechnet werden muss /34/. Fenner et al. haben für die Unsicherheit dieser Umrechnung einen Faktor von mindestens 5 in den resultierenden Halbwertszeiten bestimmt /35/. Eine Implikation dieser Unsicherheit ist, dass unter den ca. 20 000 Substanzen mit Produktionsvolumina unter 100 t/a die Zahl der möglicherweise falsch positiven und der möglicherweise falsch negativen Resultate der Persistenz-Bewertung bei einigen 100 bis einigen 1000 Substanzen liegt /2/.

AOPWin liefert verlässliche Werte für Verbindungen mit einfacher Molekülstruktur, weil die zugrunde liegende Struktur-Reaktivitäts-Beziehung nur anhand einfacher Strukturen entwickelt wurde. Komplizierte Moleküle hingegen liegen

außerhalb der Anwendungsdomäne von AOPWin, und die Unsicherheiten der Resultate für solche Moleküle sind erheblich. Es wäre daher geboten, dass für mittelflüchtige Substanzen die Reaktivität mit OH-Radikalen experimentell untersucht und die Anwendungsdomäne von AOPWin vergrößert wird.

Bei Umwandlungsprodukten schließlich ist die Datenlage noch fragmentarischer. Im Bereich der Industriechemikalien wurden Umwandlungsprodukte bisher nur vereinzelt betrachtet und in Risikobewertungen einbezogen. Unter REACH wird sich das insofern ändern, als wichtige Umwandlungsprodukte bei Substanzen mit Produktionsvolumina über 100 t/a identifiziert werden müssen. Solange Umwandlungsprodukte nicht experimentell identifiziert werden, kann man das Spektrum möglicher Umwandlungsprodukte mit Expertensystemen wie CATABOL oder der *Biocatalysis/Biodegradation Database* der Universität Minnesota untersuchen [36, 37]. Diese Systeme liefern bisher jedoch nur erste Anhaltspunkte, da in ihrer Datenausgabe viele nicht relevante Umwandlungsprodukte enthalten sind oder aber auch einige relevante Umwandlungsprodukte fehlen.

3.3 Emissionsdaten

Die Untersuchung von Breivik et al. zu PCB-Emissionen [38] hat gezeigt, wie schwierig es sein kann, für Substanzen, die in vielen Produkten und Prozessen, an vielen Orten und über längere Zeiten angewendet werden, die Emissionen in die Umwelt abzuschätzen. Dementsprechend fehlen bisher umfassende Emissionsinventare für die meisten Industriechemikalien. Bei Pestiziden sind die Unsicherheiten tendenziell geringer; im Vergleich zu einem Faktor von ca. 100, um den die jährlichen weltweiten PCB-Emissionen bei Breivik et al. unsicher sind, haben wir einen Faktor von ungefähr 10 für unser Emissionsinventar für DDT gefunden. Dies beruht darauf, dass die Anwendungsform, -periode und -region von Pestiziden i. a. weniger heterogen und besser bekannt ist als bei einer Substanzgruppe wie den PCBs. Bei regionalen Betrachtungen, bei denen die relevanten Quellen besser eingegrenzt werden können, sind die Unsicherheiten auch bei Industriechemikalien geringer als im Fall der globalen PCB-Emissionen. Dennoch ist festzuhalten, dass es oft die Unsicherheiten der Emissionsdaten sind, welche die Unsicherheiten der Modellresultate dominieren. Je weiter die Entwicklung der Modelle zu höherer Realitätstreue voranschreitet und je besser die Stoffeigenschaften bekannt sind, desto wichtiger wird es, auch die Emissionsdaten systematischer zu erheben und zu dokumentieren. Idealerweise würde der unter REACH geforderte Informationsaustausch entlang der Wertschöpfungskette dazu beitragen.

4 Schlussfolgerungen

Multikompartiment-Modelle sind ein zweckmäßiges Instrument, um die weiträumige Verteilung von Chemikalien, die zwischen mehreren Umweltmedien hin- und herwechseln, zu untersuchen; dies wird zunehmend auch durch den Vergleich mit Felddaten bestätigt. Die Modelle dieses Typs haben sich in den letzten Jahren stark weiterentwickelt und können nun mehr Umweltkompartimente (neben Boden, Wasser und Luft auch Vegetation, Schnee u.a.m.) sowie neben den Ausgangssubstanzen auch Umwandlungsprodukte beschreiben. Im regulatorischen Kontext können die Modelle eingesetzt werden, um expositionsbezogene Gefährdungs-Indikatoren wie Persistenz und Ferntransportpotential zu berechnen, und um in der Risikobewertung Schadstoffkonzentrationen in der Umwelt (PEC-Werte) abzuschätzen.

Multikompartiment-Modelle ermöglichen es, das umweltchemische Wissen zum Verteilungs- und Umwandlungsverhalten einer Substanz in einer Massenbilanz zu bündeln. Dadurch können die wichtigsten Massenflüsse, welche Transport und Verteilung bestimmen, identifiziert werden; es wird auch erkennbar, in welchen Bereichen die größten Unsicherheiten bestehen und wie sich diese Unsicherheiten auf die Modellresultate auswirken.

Bei den Stoffeigenschaften, die in die Modelle eingegeben werden müssen, bestehen große Unterschiede hinsichtlich ihrer Verfügbarkeit. Dampfdruck, Wasserlöslichkeit und K_{ow} sind i. a. vorhanden und werden auch unter REACH gefordert. Halbwertszeiten oder Geschwindigkeitskonstanten des chemischen oder biologischen Abbaus sind viel weniger umfassend verfügbar und werden auch unter REACH nicht in genügender Weise verlangt. Damit die hier bestehenden Unsicherheiten vermindert werden können, müssen zumindest die Abschätzmethoden für Halbwertszeiten des biologischen Abbaus und der Reaktion mit OH-Radikalen verbessert werden. Zu diesem Zweck wiederum sind gezielte Messungen an verschiedenen Substanzklassen erforderlich, damit die Trainingsdatensätze für die Abschätzmethoden erweitert werden können.

Multikompartiment-Modelle haben weiteres Entwicklungspotential, das für die Chemikalienbewertung genutzt werden kann. So wird es z.B. die weitere Anwendung der Abraham-Gleichung ermöglichen, weitere Umweltkompartimente einzubeziehen. Weiterhin wird sich durch die Verfügbarkeit hoch aufgelöster Umweltdaten die Auflösung der Modelle erhöhen lassen. Aufgrund ihres relativ geringen Bedarfs an Rechenleistung sind Multikompartiment-Modelle vor allem geeignet für die vergleichende Untersuchung vieler Substanzen, für umfassende Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen, und für die systematische Analyse des Einflusses, den die einzelnen Stoffeigenschaften auf die Modellresultate haben. Dies unterstützt ein mechanistisches Verständnis des Stoffverhaltens und hilft, besonders problematische Kombinationen von Stoffeigenschaften zu erkennen und zu vermeiden.

Literatur

- /1/ C. De Avila, E. Sandberg: *Chimia* **60** (2006), 645
- /2/ M. Scheringer, S. Böschen, K. Hungerbühler: *Chimia* **60** (2006), 699
- /3/ T.G. Vermeire, D.T. Jager, B. Bussian, J. Devillers, K. den Haan, B. Hansen, I. Lundberg, S. Robertson, H. Tyle, P.T.J. van der Zandt: *Chemosphere* **34** (1997), 1823
- /4/ A. Leip, G. Lammel: *Environ. Pollut.* **128** (2004), 205
- /5/ F. Wania, D. Mackay: *Environ. Pollut.* **100** (1999), 223
- /6/ U. Schenker, M. Scheringer, K. Hungerbühler: *Environ. Sci. Technol.* **42** (2008), im Druck
- /7/ D. Mackay, S. Paterson, A. Di Guardo, C.E. Cowan: *Environ. Toxicol. Chem.* **15** (1996), 1627
- /8/ M. MacLeod, D.G. Woodfine, D. Mackay, T.E. McKone, D.H. Bennett, R. Maddalena: *Environ. Sci. Pollut. Res.* **8** (2001), 156
- /9/ A. Beyer, M. Matthies: *Criteria for Atmospheric Long-range Transport Potential and Persistence of Pesticides and Industrial Chemicals*. UBA Berichte Nr. 7/02, E. Schmidt-Verlag, Berlin, 2002
- /10/ F. Wania, D. Mackay: *The Global Distribution Model. A Non-Steady-State Multi-Compartmental Mass Balance Model of the Fate of Persistent Organic Pollutants in the Global Environment; Technical Report and Computer Program on CD-ROM*, 2000
- /11/ M. Scheringer, F. Wegmann, K. Fenner, K. Hungerbühler: *Environ. Sci. Technol.* **34** (2000), 1842
- /12/ M. MacLeod, W.I. Riley, T.E. McKone: *Environ. Sci. Technol.* **39** (2005), 6749
- /13/ T.E. McKone, K.G. Enoch: *CalTOX, A Multimedia Total Exposure Model Spreadsheet User's Guide, Version 4.0; Lawrence Berkeley National Laboratory Report LBNL-47399; 2002; <http://eetd.lbl.gov/ied/era/>*
- /14/ T.E. McKone, M. MacLeod: *Ann. Rev. Environ. Resources* **28** (2003), 11
- /15/ M. Scheringer: *Persistence and Spatial Range of Environmental Chemicals*. Wiley-VCH, Weinheim, 2002
- /16/ M. Scheringer: *Environ. Sci. Technol.* **31** (1997), 2891
- /17/ V. Maeder: *Characterization of the Persistence, Bioaccumulation and Environmental Toxicity of Organic Chemicals Using a Customized Database for Substance Properties*. Dissertation No. 15404, Swiss Federal Institute of Technology Zürich, 2004
- /18/ C.E. Junge: *Tellus* **26** (1974), 477
- /19/ M. Stroebe, M. Scheringer, K. Hungerbühler: *Sci. Total Environ.* **367** (2006), 888
- /20/ F. Wania, D. Mackay: *Environ. Sci. Technol.* **30** (1996), 390A
- /21/ S.N. Meijer, E. Steinnes, W.A. Ockenden, K.C. Jones: *Environ. Sci. Technol.* **36** (2002), 2146
- /22/ A.F.H. ter Schure, P. Larson, J. Merilä, K.I. Jönsson: *Environ. Sci. Technol.* **36** (2002), 5057
- /23/ Y.F. Li, T.F. Bidleman: *Canadian Arctic contaminants assessment report II*. Ottawa: Canada, 2003
- /24/ Y.F. Li, R.W. Macdonald: *Sci. Total Environ.* **342** (2005), 87
- /25/ S. Semeena, G. Lammel: *Fresenius Environ. Bull.* **12** (2003), 925
- /26/ F. Wegmann: *The Global Dynamic Multicompartment Model CliMoChem for Persistent Organic Pollutants*. Dissertation No. 15427, Swiss Federal Institute of Technology Zürich, 2004
- /27/ K. Fenner, M. Scheringer, K. Hungerbühler: *Environ. Sci. Technol.* **34** (2000), 3809
- /28/ K. Fenner, M. Scheringer, K. Hungerbühler: *Risk Anal.* **23** (2003), 35
- /29/ U. Schenker, M. MacLeod, M. Scheringer, K. Hungerbühler: *Environ. Sci. Technol.* **39** (2005), 8434
- /30/ G. Schüürmann, R.-U. Ebert, R. Kühne: *Chimia Band-Nr.* **60** (2006), 691
- /31/ K.U. Goss, R.P. Schwarzenbach: *Environ. Sci. Technol.* **33** (1999), 3390
- /32/ K.U. Goss: *Crit. Rev. Environ. Sci. Technol.* **34** (2004), 339
- /33/ US EPA: *Epi Suite 3.12*, available from the US EPA Office of Pollution Prevention and Toxics, www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm
- /34/ D. Aronson, R.S. Boethling, P. Howard, W. Stiteler: *Chemosphere* **63** (2006), 1953
- /35/ K. Fenner, S. Canonica, B.I. Escher, L. Gasser, H. Tülp: *Chimia* **60** (2006), 683
- /36/ B.K. Hou, L.B.M. Ellis, L.P. Wackett: *J. Ind. Microbiol. Biotechnol.* **31** (2004), 261
- /37/ J. Jaworska, S. Dimitrov, N. Nikolova, O. Mekenyan: *SAR QSAR Environ. Res.* **13** (2002), 307
- /38/ K. Breivik, A. Sweetman, J.M. Pacyna, K.C. Jones: *Sci. Total Environ.* **290** (2002), 181

Korrespondenzadresse:

PD Dr. Martin Scheringer
 Institut für Chemie- und Bioingenieurwissenschaften
 ETH Zürich, HCI G 127
 Wolfgang-Pauli-Str. 10
 CH-8093 Zürich
 Tel: ++41-44-632 30 62
 Fax: ++41-44-632 11 89

Hintergrundwerte und Schwermetallbelastung von Sedimenten im Bereich von Fließgewässern am Beispiel des Oderhaffes

Dieter Wolfram Zachmann (d.zachmann@tu-bs.de), Cornelia Tripke (c.tripke@uni-muenster.de), Susanna Müller (susanna.mueller@tu-bs.de), Braunschweig

Zusammenfassung

Die Bestimmung des lokalen natürlichen (geogenen) Zustands (Hintergrundwert) von Böden und Sedimenten ist sehr aufwendig und teilweise unsicher. Sie ist jedoch Voraussetzung zur Erfassung der „Belastung“ im Sinne einer anthropogen verursachten, schädlichen Veränderung. Die mittels sequentieller Elution bestimmten Konzentrationen von Spuren-Schwermetallen im Residualanteil belasteter Sedimente können zur Abschätzung des konkreten geogenen Anteiles verwendet werden. Der Ansatz wird an Sedimenten des Stettiner Haffes durch den Abgleich mit unbelasteten Proben gleicher Herkunft überprüft. Auf dieser Grundlage wird die Gesamtbelastung der Haffsedimente an Schwermetallen quantifiziert. Darüber hinaus lassen die gleichzeitig mit dem Elutionsverfahren bestimmten Bindungsformen eine Abschätzung der Schwermetallfreisetzung bei Milieuänderungen zu.

Geogene Grundgehalte und anthropogene Belastung

Während sich in industrialisierten Gebieten die Wasserqualität der Flüsse in den letzten Jahren meist deutlich verbessert hat, stellen vor allem die in Überschwemmungsaueu liegenden rezenten Böden und Sedimente einen Langzeitspeicher für dort über Jahrzehnte mit den Flussfrachten eingetragene Schadstoffe dar. Ebenso sind die ausgedehnten fluvialen Sedimentablagerungen in Küstenbereichen durch erhöhte Schadstoffgehalte geprägt. Sowohl Flussebenen als auch Mündungsgebiete sind daher als kritische Zonen der Umweltbelastung und –gefährdung einzuschätzen.

Der Begriff „Belastung“ reflektiert grundsätzlich eine anthropogen verursachte, schädliche Veränderung der Böden und Sedimente [1]. Grundlage zur Erfassung einer Veränderung ist somit zunächst die Definition des unveränderten, natürlichen (geogenen) Zustands der Sedimente und Böden. Die einfachste Möglichkeit ist der Vergleich mit Daten von überregionalem Hintergrundmaterial, wie z.B. die häufig genutzten Werte für durchschnittlichen Tonstein und Flusssedimente [2, 3]. Unabhängig hiervon lassen sich lokale Hintergrundwerte ermitteln, indem in Sedimentkernen Tiefenstufen aus vorindustrieller Zeit beprobt werden [4, 5]. Als weitere Möglichkeit zur Ermittlung von lokalen Hintergrundwerten sind statistische Methoden geeignet, die eine möglichst hohe Zahl von Sedimentproben und Elementmessungen voraussetzen [6].

Die beiden zuletzt genannten Ansätze sind sehr aufwendig und das Resultat entspricht nicht grundsätzlich dem „lokalen“ Hintergrundwert. Erforderlich ist somit ein Verfahren zur Abschätzung des konkreten geogenen Anteiles belasteter Sedimente. Als „belastet“ sollen nachfolgend Substrate

gelten, welche einen Geoakkumulationsindex nach Müller [7] von 2 und größer aufweisen (2 entspricht 3-fachem Hintergrundwert).

Bei einer Untersuchung der Sedimente längs der Flüsse Szamos und Theiss (Ungarn), die im Zuge des Cyanidunfalles der Erzaufbereitung von Baia Mare (Rumänien) auf Schwermetallbelastungen durchgeführt wurde [8], zeigten sich erwartungsgemäß mit zunehmender Entfernung von der Kontaminationsquelle abnehmende Schwermetall-Gesamtgehalte der Auensedimente. Das gleichzeitig vorgenommene Verfahren der sequentiellen Elution (SE) belegte jedoch für die stabilen Substratkomponenten (Residualphase; SE VI) auf der untersuchten Strecke von ca. 300 km nahezu konstante Gehalte von z.B. Zn mit 150 mg/kg (± 41 mg/kg). Dieses und ähnlich gelagerte Beispiele [9 – 11] legen nahe, dass mittels des Verfahrens der sequentiellen Elution der geogene Anteil im Bereich belasteter fluvialer Sedimente und entsprechender Bodenbildungen diskriminiert werden kann.

Seit der grundlegenden Arbeit von Tessier et al. [12] zur SE wurden zahlreiche weitere Methoden vorgeschlagen. Eine Übersicht und Gegenüberstellung verschiedener Verfahren findet sich in [13]. Das Verfahren nach Tessier et al. erlaubt die Probenaufbereitung unter Schutzgasatmosphäre (Handschuhkasten) und somit die Beibehaltung eines ursprünglichen Ablagerungsmilieus. Die hier verwendete Methode ist ebenfalls nach Tessier modifiziert und nachfolgend zusammengefasst (vgl. auch [9, 11]):

Schrittphase	Bindungsform	pH [-]	Schüttelzeit [h]	Feststoff/Lösungsverhältnis	Extraktionsmittel
SE I	austauschbar	7	2	1:20	Ammoniumacetat
SE II	carbonatisch	5	5	1:20	Natriumacetat
SE III	leicht reduzierbar	2	12	1:100	Hydroxylammoniumchlorid
SE IV	stärker reduzierbar	3	24	1:100	Ammoniumoxalat-Oxalsäure
SE V	organisch und sulfidisch	3	24	1:100	H ₂ O ₂ -Digerierung + Ammoniumoxalat-Oxalsäure
SE VI	residual	-	-	1:40	Flusssäure-Aufschluss

Tab. 1: Schema der sequentiellen Elution [SE; Schritte 1 – 4 im Handschuhkasten (Argon)]

Die Bearbeitung unter Schutzgas (SE I - IV) ist erforderlich, weil Auenböden und –sedimente häufig in reduzierendem Milieu vorliegen [14]. Als eindeutig geogen ist die mit SE VI ermittelte Residualphase zu betrachten.

Geogene Schwermetallgehalte und Arsen in Oderhaff-sedimenten

Das Verfahren zur Abschätzung des geogenen Anteiles höher belasteter Sedimente wurde an Sedimenten des Oderhaffes weiter überprüft. Abgegrenzt durch die Inseln Usedom und Wolin schaltet sich das Oderhaff mit einer Fläche von ca. 680 km² als natürliches „Klärbecken“ zwischen Oder und Ostsee ein. Die mittlere Tiefe beträgt 3,8 m. 60 % der Oberflächensedimente bestehen aus Schlack (Korngröße < 63µm), die als geschlossene Fläche in den zentralen Bereichen des Haffes vorliegen. Der Schiffsverkehr zwischen Oder und Ostsee erfordert die Freihaltung einer Fahrrinne im Haff (Piastkanal).

Auf mehrere Traversen verteilt wurden mittels gravity corer (Fa. UWITEC, Mondsee) [15] an 37 Lokationen im Haff Sedimentkerne genommen (ca. 50 cm; luftdicht verschlossen). Sie wurden im Labor in 2-cm-Scheiben segmentiert und mittels ICP-OES und ICP-MS analysiert. In der Residualfraktion der Oberflächensedimente wurden As und Schwermetalle gemessen (Tab. 2).

	MW-SE-VI Residual- gehalte Oderhaff	s-SE-VI Oderhaff	MW- Oberfl. Oderhaff	Durch- schnitt Tonstein	Durch- schnitt Fluss- schlamm
As	3,00	1,85	28,5	12,4	8,4
Cd	1,31	1,39	5,03	0,14	0,26
Cu	21,4	12,0	57,3	29	32
Ni	23,7	15,0	38,5	27	32
Pb	15,1	13,0	84,0	31	23
Zn	71,2	39,9	588	103	78

Tab. 2: Mittelwerte (MW) und Standardabweichung (s) der Residualgehalte sowie der Gesamtgehalte von Oberflächensedimenten des Oderhaffes (0 - 30 cm; n = 37), verglichen mit dem Durchschnitt von Tonstein und Flussschlamm (Angaben in mg/kg)

Zur Absicherung einer Übereinstimmung der Residualgehalte mit den lokalen geogenen Gehalten wurden Kontrolluntersuchungen an Tiefenprofilen vorgenommen. Die meisten im Haff genommenen Profile zeigen den für anthropogene Kontaminationen üblichen Verlauf eines Abklingens der Schwermetalle zur Tiefe. In der Tiefe konvergieren die Konzentrationen zu einem einheitlichen Wert.

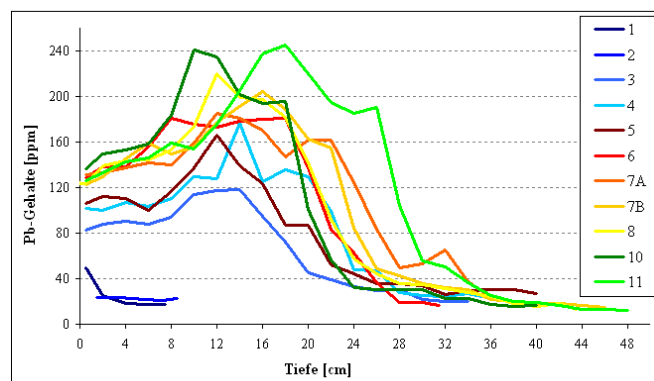


Abb. 1: Tiefenverteilung am Beispiel von Pb (mg/kg) im südlichen Stettiner Haff (Nähe Odermündung); 1 – 11: Probenlokationen auf einem E-W-Transekt mit jeweils ca. 2 km Abstand

Da in einigen Fällen nicht eindeutig ersichtlich ist, in welcher Tiefenstufe geogene Verhältnisse erreicht sind, wurde über Elementkorrelationen das Einsetzen des anthropogenen Einflusses nachgeprüft. Grundsätzlich zeigt sich beim Übergang vom anthropogen geprägten oberen Profilabschnitt zur geogen dominierten Basis für die meisten Elemente neben der raschen Konzentrationsabnahme ein Wechsel der Elementvergesellschaftungen. Als Beispiel ist nachfolgend der Tiefenverlauf der Elemente Pb und P dargestellt.

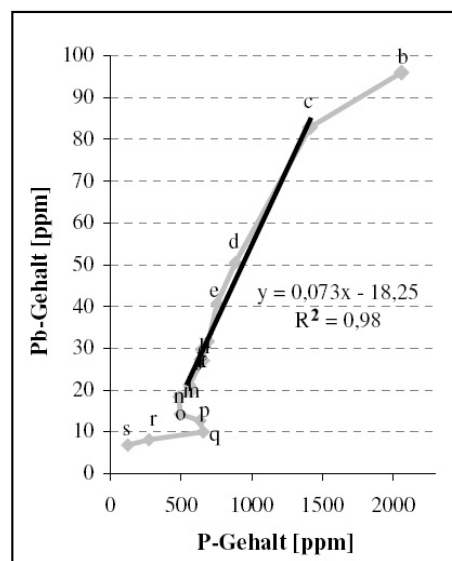


Abb. 2: Verlauf der Pb- und P-Gehalte im Tiefenprofil GHN 8; jeder Buchstabe entspricht einem Tiefensegment von 2 cm in absteigender Folge

Wie nachfolgende Tabelle belegt (Tab. 3), stimmen die Gehalte in den Basisschichten sehr gut mit den Residualwerten aus der SE, aber auch den Literaturwerten von durchschnittlichem Flussschlamm [3] überein. Für die Spuren-Schwermetalle können somit die Gehalte der Residualfraktion des SE-Verfahrens als gute Annäherung an den lokalen Hintergrundwert verwendet werden.

	Cd	Cu	Ni	Pb	Zn
MW > 25 cm	0,92	23,7	31,8	23,4	67,7
MW SE VI	1,31	21,4	23,7	15,1	71,2
MW Oberfl. sediment	5,03	57,3	38,5	84	588

Tab. 3: Mittlere Gehalte (mg/kg) der unteren 3 Basisschichten von Tiefenprofilen (> 25 cm) verglichen mit MW von SE VI (Residualgehalte) sowie MW von Oberflächensedimenten

Schwermetallbelastung der Oderhaffsedimente

Von besonderer Bedeutung für die Schwermetallbindung ist neben S und C-org. das Hauptelement Fe. Wie aus Abb. 3 ersichtlich, tritt es überwiegend in oxidisch-hydroxidischer (SE IV) sowie sulfidischer Form auf (SE V).

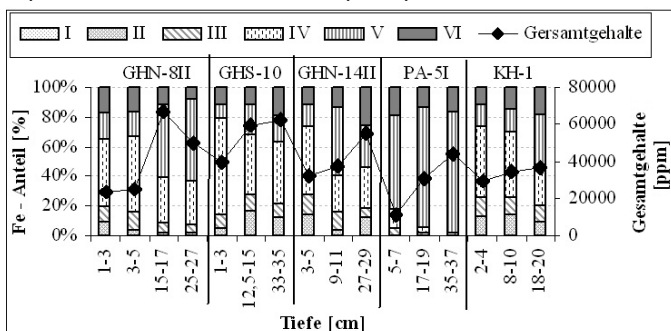


Abb. 3: Verteilung der Fe-Anteile [%] auf die Schritte I-VI der sequentiellen Extraktion

Wie Korrelationsanalysen belegen, sind an die oxidische Form zahlreiche Schwermetalle gekoppelt. Sie können bei Fe-Reduktion freigesetzt werden. Ebenso lässt sich über Korrelationsanalysen zeigen, dass Fe in den Haffsedimenten in der sulfidischen Form als Pyrit auftritt. Hierbei handelt es sich um Neubildungen aus bakteriell reduziertem Schwefel mit dem zugeführten Eisen. Mikrosondenuntersuchungen weisen diesen Pyrit als sehr arm an Spurenelementen aus (Abb. 4). Ändern sich jedoch die Ablagerungsbedingungen, wie beispielsweise durch Ausbaggerung des Piastenkanals (300 000 t/a; [16]) und Deponierung des Baggergutes an Land, wird durch die Oxidation des Pyrits Schwefelsäure freigesetzt. Der sinkende pH erhöht die Verfügbarkeit weniger stabil gebundener Schwermetalle, so dass z.B. die carbonatische Bindung von Cd (mit Mn^{2+} ; vgl. Abb. 5) dann in Lösung gehen kann.

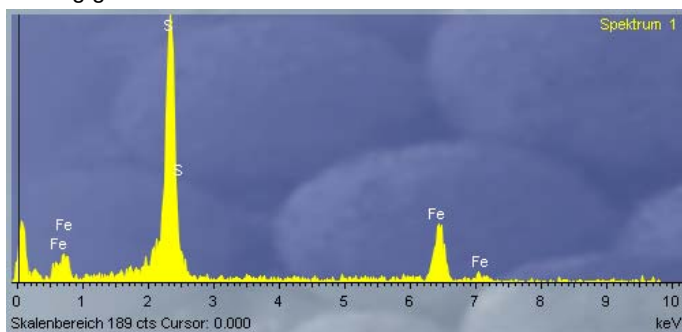


Abb. 4: Beispiel einer Mikrosondenuntersuchung von Pyrit aus dem Stettiner Haff

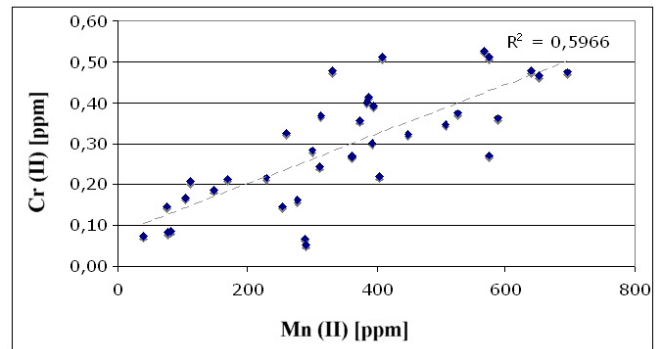


Abb. 5: Bezug Mn^{2+} (SE II) - Cd^{2+} (SE II) belegt das Auftreten von Cd in carbonatischer Form (Angaben in mg/kg (ppm))

Eine Mittelung der Bindungsformen von Schwermetallen der anthropogen überprägten, oberflächennahen Sedimente des Haffes ist nachfolgender Tabelle (Tab. 4) zu entnehmen. Die geogenen Anteile der meisten Schwermetallgehalte sind mit ca. 20 % recht gering. Die Oberflächensedimente des Oderhaffes sind daher ganz überwiegend als „belastet“ im eigentlichen Sinne zu definieren.

SE-Schritt	As	Cd	Cu	Ni	Pb	Zn
I	1,41	1,82	0,37	0,74	0,53	0,22
II	7,43	12,2	3,91	9,56	26,9	10,2
III	12,2	5,74	1,73	3,74	1,76	12,2
IV	26,1	30,3	9,4	29,4	31,5	49,6
V	40,1	20,7	50,0	35,0	18,1	13,2
VI	13,5	29,2	36,8	22,0	21,7	18,8

Tab. 4: Mittelung der Bindungsformen von Oberflächensedimenten (0 – 30 cm) des Haffes (29 Tiefenprofile; Angaben in %)

An der Gesamtfläche des Haffes von 650 km² kann ein Anteil der Schlickzone mit 60 % angenommen werden [17]. Auf der Basis der in Tab. 2 aufgelisteten mittleren Konzentrationen der Oberflächensedimente (n = 141) lassen sich die absoluten Gehalte an Schwermetallen abschätzen. Bei einem Wassergehalt von 78,7 % ($\pm 10,5\%$) und einer Sedimentmächtigkeit von 30 cm ergeben sich bei einem spezifischen Gewicht der Trockensubstanz von 2 kg/dm³ folgende mittleren Gesamt-Schwermetall- und As-Gehalte in der anthropogen geprägten Sedimentzone des Oderhaffes (Angaben in t):

	As	Cd	Cu	Ni	Pb	Zn
MW	1 368	241	2 750	1 848	4 032	28 224
s	528	144	1 296	1 248	2 592	19 344

Tab. 5: Abschätzung der Gesamtgehalte (in t) an As und Schwermetallen im anthropogen überprägten Sedimentanteil des Stettiner Haffes

Unter Verwendung der in Tab. 4 aufgelisteten Mittelwerte der Anteile verfügbarer Bindungsformen (Schritte I – V) sind hierbei als Belastung auszuweisen (Angaben in t; gerundet):

	As	Cd	Cu	Ni	Pb	Zn
anthropogen („Belastung“)	1 180	170	1 740	1 440	3 160	22 920

Tab. 6: Abschätzung der Belastung an As und Schwermetallen im anthropogen überprägten Sedimentanteil des Stettiner Haffes

Ausblick

Schließlich bleibt noch darauf hinzuweisen, dass im untersuchten Sedimentationsraum ein Gleichgewicht der wenig stabilen oxidierten und reduzierten Bindungsformen besteht. Die sehr hohen P- und N-Konzentrationen in den Oberflächenschichten tragen zu diesem Gleichgewicht bei (Eutrophierung und reduzierendes Milieu). Allerdings werden Probleme bei plötzlichem Milieuwechsel auftreten, wie diese bei Deposition in oxischem Milieu oder, im Falle von Auenböden, durch Drainagemaßnahmen, verursacht werden können. Zum Fragenkomplex „Milieuänderung“ sollen weitere Untersuchungen sowohl experimentell (Änderung der Bindungsformen über die Zeit) als auch mittels geochemischer Modellierung (z.B. [18]) oder aber auf der Grundlage verschiedener vergleichender Ökotoxtests mit geogenem und belastetem Material der gleichen Provenienz und Grundzusammensetzung vorgenommen werden.

Literatur

1. Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV) vom 12.07.1999. Bundesgesetzblatt I, 36, 1554 – 1582
2. Turekian K.K. & Wedepohl K.H. (1961) Distribution of the elements in some major units of the Earth's crust. Geol. Soc. Am. Bull. 72, 175 – 192.
3. Govindaraju K. (1994) Compilation of working values and sample description for 383 geostandards. Geostandard Newsletter 18, 1 – 158.
4. Matschullat J., Niehoff N. & Pörtge K.H. (1992) Bergbau- und Zivilisationsgeschichte des Harzes am Beispiel eines Auenlehmprofils der Oker (Niedersachsen). Neue Bergbautechnik, 8, 322 – 336.
5. Siewers U. & Roostai A.H. (1990) Verbundforschung Fallstudie Harz: Schadstoffbelastung, Reaktion der Ökosphäre und Wasserqualität. Teilvorhaben 2: Schwermetallbilanz aus Emissionen und geogenem Anteil im Einzugsgebiet der Sösetalsperre / Harz. – Abschlussbericht des Forschungsvorhabens BmFT-Pbe-0339069C. BGR Hannover, 104 S.
6. Albanese S., De Vivo B., Lima A. & Cicchell D. (2007) Geochemical background and baseline values of toxic elements in stream sediments of Campania region (Italy). Journal of Geochemical Exploration, 93 / 1, 21 – 34.
7. Müller G. (1978) Schwermetalle in den Sedimenten des Rheins; Veränderungen seit 1971. Umschau der Wissenschaft und Technologie, 79, 778 – 783.
8. Kraft C., von Tümpling W. & Zachmann D.W. (2003) Auswirkungen von Schwermetallemissionen nach

Unfällen im rumänischen Bergbau auf das Sediment der Flüsse Szamos und Theiß (Ungarn). Zbl. Geol. Paläont. Teil I, 1/2, 153 – 169.

9. Van der Veen A. (2003) Schwefelspeziation und assoziierte Metalle in rezenten Sedimenten. Dissertation. Braunschweiger geowiss. Arb., 26; 141 S.
10. Eggers, B. (2004) Verteilung und Bindungsverhalten ausgewählter Schwermetalle in Auenböden der Oker und Ecker (Harzvorland). Dissertation. Braunschweiger geowiss. Arb., 27; 125 S.
11. Kraft C. (2007) Schwermetallbelastung und Elementspeziation in Sedimenten der Mulde und Elbe unter besonderer Berücksichtigung von Arsen und Blei. Dissertation, Technische Univ. Braunschweig, 165 S.
12. Tessier A., Campbell P. & Bisson M. (1979) Sequential extraction procedures for the speciation of particulate trace metals. Anal. Chem., 51, 844 – 851.
13. Ure A.M. & Davidson C.M. (Eds.) (2002) Chemical Speciation in the Environment. Blackwell Science, Oxford, 2nd edition; 480 p.
14. Calmano, W. (1989) Schwermetalle in kontaminierten Feststoffen: chemische Reaktionen, Bewertung der Umweltverträglichkeit, Behandlungsmethoden am Beispiel von Baggerschlämmen. Verlag TÜV Rheinland, Köln; 237 S.
15. Mudroch A. & Azcue J.M. (1995) Manual of Aquatic Sediment Sampling. Lewis Publishers, Boca Raton, 219 p.
16. Löser, N. & Sekscinska, A. (2005) IKZM-Oder Berichte 14: Integriertes Küsten-Flusseinzugsgebiets-Management an der Oder/Odra: Hintergrundbericht; Leibniz-Institut für Ostseeforschung Warnemünde; 127 S.
17. Umweltministerium Mecklenburg-Vorpommern (2005) Bericht über die Umsetzung der Artikel 5 und 6 sowie der Anhänge II, III und IV der Richtlinie 2000/60/EG im deutschen Teil des Bearbeitungsgebietes Stettiner Haff (B-Bericht); 32 S.
18. Parkhurst D.L. & Appelo C.A.J. (1999) User's guide to PHREEQC (Version2)—A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations. U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 99-4259, 310 p.

Korrespondenzadresse

Prof. Dr. Dieter Wolfram Zachmann
Institut für Ökologische Chemie und Abfallanalytik
TU Braunschweig
Hagenring 30, 38106 Braunschweig
Tel.: 0531/3915971; Fax: 0531/391-5799



Zusammensetzung der organischen Bodensubstanz und ihre Wirkung auf die Hydrophobizität von drei Forstbodenproben

R.H. Ellerbrock¹ (rellerbrock@zalf.de), H.H. Gerke¹ (hgerke@zalf.de),
J. Bachmann² (bachmann@ifbk.uni-hannover.de), M.-O. Goebel²

¹Leibniz-Zentrum für Agrarlandschafts- und Landnutzungsforschung (ZALF) e.V., Müncheberg

²Universität Hannover, Institut für Bodenkunde, Herrenhäuser Strasse 2, 30419 Hannover

Abstract

Hydrophobe Bodeneigenschaften werden in der Regel aus dem Gehalt an organischer Bodensubstanz (OBS) abgeleitet. Die OBS enthält jedoch hydrophile und hydrophobe Komponenten. Deren Verhältnis kann die Benetzbarkeit von Böden maßgeblich mitbestimmen. Daher wurde das Verhältnis hydrophober zu hydrophilen OBS-Gruppen (A/B) mit FTIR Spektroskopie und die Bodenbenetzbarkeit mit der kapillaren Aufstiegsmethode bestimmt. Die Benetzbarkeit der untersuchten Forstböden ist mit dem C_{org} -Gehalt allein nicht erklärbar. Allerdings nimmt die Benetzbarkeit mit den A/B Verhältnissen für die Cambisol-Proben zu. Werden die A/B Verhältnisse abhängig von C_{org} /Ton Verhältnis gewichtet, wird eine lineare Beziehung zwischen Kontaktwinkel (CA) und A/B für alle Bodenproben gefunden. Entsprechend sollte die OBS Zusammensetzung ergänzend zum C_{org} Gehalt genutzt werden, um die Benetzbarkeit von Böden, insbesondere von C_{org} -armen Unterböden, zu beschreiben.

1. Einleitung

Gehalt und Zusammensetzung der Tonminerale und der organischen Bodensubstanz bestimmen wesentlich die physikochemischen Eigenschaften von Böden wie Benetzbarkeit oder Kationenaustauschkapazität. Die Benetzbarkeit der Böden mit Wasser ist z. B. eine Voraussetzung für die Kationenaustauschkapazität (z. B. Ermakova et al., 2001) und beeinflusst auch die Sorption von z. B. hydrophoben organischen Schadstoffen. Ist ein Boden hydrophob, wird der Wassertropfen von der Oberfläche abgestoßen und ein Kontaktwinkel (CA) kann an der Grenzfläche -Luft-Wasser-Feststoff- gemessen werden (Letey, 1969). Die meisten Böden haben CA-Werte zwischen 0° und 90° (u. a. Hallett & Young, 1999), sind also weder vollständig benetzbar noch vollständig hydrophob (subcritical range; Siebold et al., 1997). Die Wasser-Benetzbarkeit von Böden ist häufig positiv mit dem OBS-Gehalt korreliert (z. B. Chenu et al. 2000; Mataix-Solera & Doerr, 2004) – allerdings nicht immer (Horne & McIntosh, 2000). Negre et al. (2002) vermuten, dass dies auf Unterschiede in der OBS Zusammensetzung zurückzuführen ist. Die OBS-Zusammensetzung lässt sich mit Hilfe spektroskopischer Verfahren wie Fourier-Transform Infrarot (FT-IR) Spektroskopie erfassen. In den FTIR Spektren zeigen Absorptionsbanden um 1701 - 1698 cm^{-1} und 1600 - 1613 cm^{-1} Kationen-Austauschaktive C=O Gruppen an, während Absorptionsbanden im Bereich 2800 bis 2980 cm^{-1} hydrophobe aliphatische CH Gruppen anzeigen (Günzler & Böck 1990). Da die Intensität proportional dem Anteil der funktionellen Gruppen ist, spiegelt die Intensität der

Absorptionsbanden der C=O-Gruppen die Kationenaustauschkapazität der OBS (Ellerbrock et al., 2001), während die der CH-Gruppen genutzt werden kann, um den hydrophoben Charakter von Böden abzuleiten (McKissock et al., 2003).

Um zu analysieren ob die Bodenbenetzbarkeit, wie vermutet (Ma'shum & Farmer, 1985), in charakteristischer Weise von Anteilen sowohl der hydrophoben als auch der hydrophilen Gruppen abhängt, wurde die funktionelle Zusammensetzung der OBS mit FTIR charakterisiert und mit der (Wasser-) Benetzbarkeit der jeweiligen Böden verglichen. Die Untersuchungen wurden an Forstböden durchgeführt. Ziel der Arbeit ist es die Effekte von OBS-Gehalt und –Zusammensetzung auf die Bodenbenetzbarkeit zu untersuchen, um Transport- und Retentionsvorgänge in Böden besser zu verstehen.

2. Material und Methoden

Von drei Forststandorten (Tabelle 1) wurden aus Bodenprofilen gestörte Bodenproben horizontweise entnommen. Die luftgetrockneten Proben wurden auf 2 mm gesiebt. Der pH Wert der Bodenproben wurde in 0.01 M Calciumchloridlösung bestimmt.

Der C_{org} Gehalt wurde nach DIN ISO 10694 (1994) bestimmt. Die Textur wurde durch Nass-Siebung und Sedimentation nach Zerstörung der OBS mit H_2O_2 und Dispersion in $Na_4P_2O_7$ – Lösung ermittelt (Hartge & Horn, 1992). Die funktionelle Zusammensetzung der OBS wurde mit Fourier-Transform-Infrarot-Spektroskopie (FTIR; Biorad FTS 135, Transmission, 0,5 mg Probe + 80 mg KBr) analysiert. Es wurden die Peakhöhen der Wellenzahlbereiche 1605-1650 cm^{-1} (C=O), 1700-1750 cm^{-1} (C=O) (als Maß für den Anteil an hydrophilen Gruppen) sowie die Peakhöhen im Bereich 2800-3020 cm^{-1} (C-H) (als Maß für den Anteil hydrophober Gruppen; Capriel et al., 1995) ausgewertet. Die Absorptionsbanden der C=O Gruppen werden im Folgenden als Absorptionsbande **B** und die der CH Gruppen als Absorptionsbande **A** bezeichnet. Die Auswertung der Spektren erfolgte mit Digilab Win-IR Pro™(3.4.2.025). Die Kontaktwinkel wurden nach Goebel et al. (2004) mit einem DCAT 11 (Data Physics; Auflösung: 0.00001 g) an luftgetrockneten Proben bestimmt.

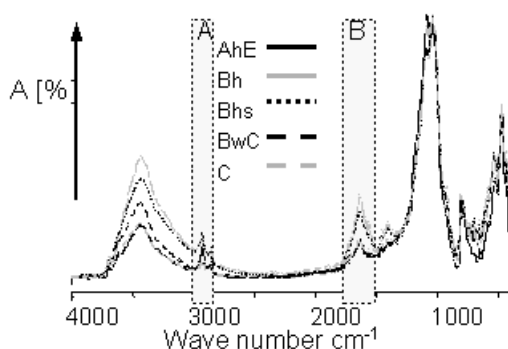
Standort / Lage / Vegetation / Bodentyp(FAO)	Horizont (Tiefe)	Tiefe
	(FAO)	Cm
Chorin / im Nordosten von Eberswalde / Laubwald: Buche / Cambisol	Ah1 (0-5 cm); Ah2 (5-10 cm); Ah(Bw) (10-13 cm); (Ah)Bw (13-18 cm); Bw (40-60 cm); Cg (60-70 cm)	
Steigerwald / im Nordwesten von Bayreuth / Laubwald: 70% Buche; 30% Eiche / Cambisol	Ah (0-5cm); Bw (5-24 cm); Bgw1 (24-50 cm); Bgw2 (13-18 cm); C (80-85 cm); 2C (120-140 cm)	
Waldstein / im Nordosten von Bayreuth / Nadelwald: 90% Kiefer / Podsol	AhE (0-10 cm); Bh (10-12 cm); Bhs (12-30 cm); BwC (30-50 cm); C (55-70 cm)	

Tabelle 1: Lage und Vegetation der Standorte sowie die Bezeichnung der beprobten Horizonte und deren Entnahmetiefe (Ellerbrock & Gerke 2005).

3. Ergebnisse und Diskussion

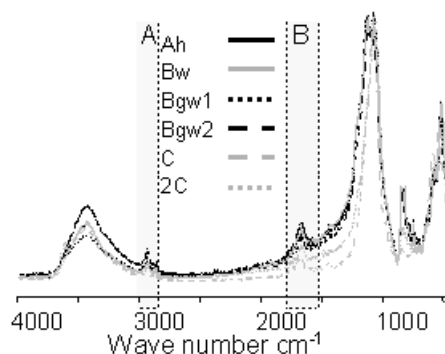
Die FT-IR Spektren der Bodenproben (Abb. 1) sind durch eine intensive Bande bei 1100 cm^{-1} , die für die Si-O-Si Gruppe (u.a. Quarzsand) charakteristisch ist, dominiert. Obwohl die Absorptionsintensitäten der CH- und CO-Banden visuell schwer erkennbar sind (Abb. 1), unterscheiden sich die A/B Verhältnisse der Proben deutlich (Abb. 2a+b). Die CA Werte der Bodenproben liegen zwischen 52.1° und 88.3° (Ellerbrock et al., 2005). Diese Werte zeigen, dass die Proben nicht vollständig benetzbar, aber auch nicht hydrophob sind (Siebold et al., 1997). Für Chorin werden die höchsten CA-Werte (78.1°) für den Ah1 Horizont mit dem höchsten C_{org} -Gehalt gefunden (Abb. 2 a).

Waldstein



□

Steigerwald



Chorin

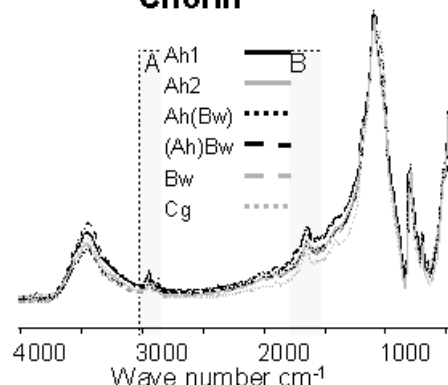


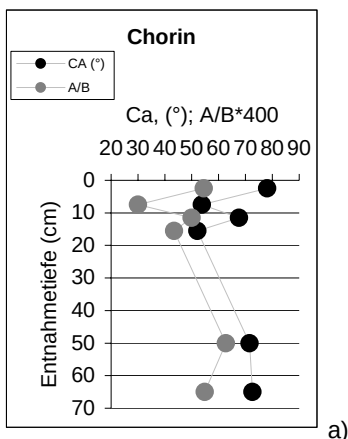
Abb. 1: FT-IR Spektren von Bodenproben aus den Mineral-Horizonten der Bodenprofile in Chorin, Steigerwald und Waldstein (Ellerbrock et al., 2005).

Für die untersuchten Bodenproben aus den tiefer liegenden Horizonten mit C_{org} -Gehalten $< 10\text{ g kg}^{-1}$ nimmt die Benetzbarkeit der Böden mit dem C_{org} -Gehalt zu (Ellerbrock et al., 2005), während sie für die humosen Bodenproben der oberen Horizonte (z.B., Ah, AhE, Bh, Bhs; Abb. 2), meistens abnimmt. Letzteres stimmt mit Ergebnissen von Chenu et al. (2000) überein. Die Ergebnisse weisen jedoch daraufhin, dass sich die Beziehung zwischen CA und C_{org} für die Oberböden ($C_{\text{org}} > 10\text{ g kg}^{-1}$) anders verhält als für die Unterböden ($C_{\text{org}} < 10\text{ g kg}^{-1}$). Bei Vergleich mit Literaturdaten ist zu beachten, dass diese in der Regel für Oberböden gelten (Chenu et al., 2000: untersuchte z. B. die Tonfraktion ($< 2\mu\text{m}$) lehmiger Oberböden mit C_{org} -Gehalten $> 20\text{ g kg}^{-1}$), während in der hier vorgestellten Studie Feinböden ($< 2\text{mm}$) aus Ober- und Unterböden mit C_{org} -Gehalten von $< 10\text{ g kg}^{-1}$ untersucht wurden. Obwohl die Intensitäten der hydrophilen Gruppen in den FT-IR Spektren der Bodenproben deutlich höher sind als die der hydrophoben Gruppen ($0.5 > A/B > 0.08$), zeigen die Böden eine reduzierte Benetzbarkeit (CA zwischen 88° und 52°). Für alle drei Bodenprofile ist das A/B-Verhältnis der Bodenproben nicht mit deren C_{org} -Gehalt korreliert (Ellerbrock et al., 2005). Theoretisch sollten Böden mit CA Werten von über 70° eigentlich A/B Verhältnisse $\gg 1$ aufweisen, da zu vermuten ist, dass der Anteil an hydrophoben Gruppen

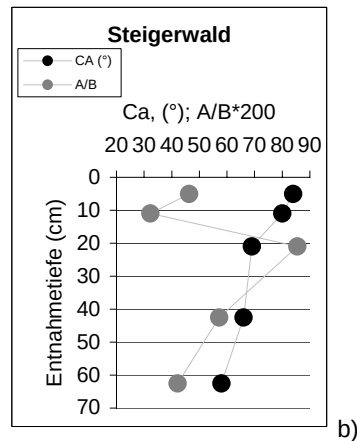
deutlich über dem der hydrophilen liegt. Die gefundenen A/B Werte sind kleiner als 0.5. Dies dürfte daran liegen, dass CH Gruppen in der Regel eine deutlich geringere Signalintensität aufweisen als die C=O Gruppen (Günzler & Böck, 1990). Zwar ist die Intensität der Absorptionsbanden proportional zum Gehalt der funktionellen Gruppen; allerdings ist die Intensität auch proportional einem Extinktionsfaktor ϵ , der von der Wellenzahl, bei der die Absorption erfolgt, abhängig ist (Lambert-Beer'sches Gesetz). Hinzu kommt, dass auch in hydrophoben Böden ($CA > 90^\circ$) größere Anteile an negativen Oberflächenladungen (C=O- Gruppen) enthalten sind (Bachmann et al., 2001). Entsprechend kann ein - mehr oder weniger - kontinuierlicher Wechsel im Benetzungsverhalten der Böden gegenüber Wasser bei variierendem A/B Verhältnis erwartet werden.

Vergleicht man die CA Werte mit den jeweiligen A/B Verhältnissen, so fällt auf, dass der CA wie erwartet mit steigenden A/B Verhältnissen zunimmt (Abb. 2a). Dies gilt jedoch nicht unbedingt für die Proben aus dem Podsol (Waldstein) (Abb. 2b). Diese Abweichung kann durch Unterschiede in (i) Gehalt an Kationen, (ii) aber auch durch Unterschiede in der Ausrichtung der hydrophoben und hydrophilen OBS-Gruppen an den Oberflächen der Bodenpartikel zustande kommen (Ellerbrock et al., 2005).

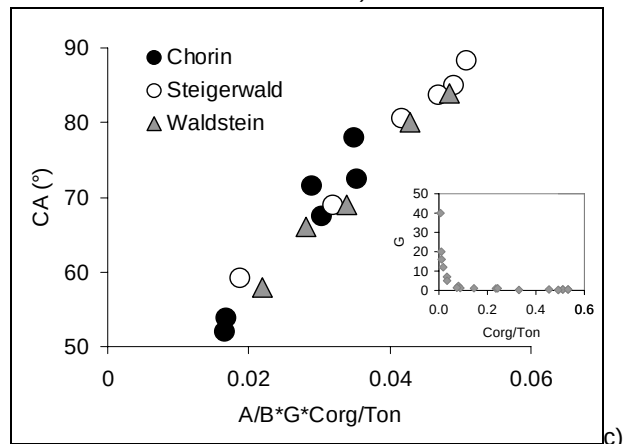
Die räumliche Ausrichtung der hydrophoben Gruppen auf der Oberfläche der Bodenpartikel kann vom C_{org}/Ton Verhältnis und Kationenbestand der Böden abhängig sein und sollte den CA mitbestimmen. Wird ein Wichtungsfaktor, G, eingeführt, der die spektralen Daten bezüglich des C_{org}/Ton Verhältnisses wichtet (Ellerbrock et al., 2005), findet man lineare Beziehungen zwischen den CA-Werten und den gewichteten A/B Verhältnissen (Abb. 2c). Der erwartete Anstieg des CA mit steigenden A/B-Werten scheint für die hier untersuchten Böden vergleichbar zu sein, ist jedoch für OBS Fraktionen, wie die pyrophosphat-lösliche Fraktion, deutlich komplexer (Ellerbrock et al., 2005).



a)



b)



c)

Abbildung 2: Kontaktwinkel (CA) und A/B-Werte in Abhängigkeit von der Entnahmetiefe a) für Chorin und b) für Steigerwald sowie c) CA als Funktion der gewichteten A/B Verhältnisse in den FTIR Spektren der Bodenproben aus Chorin, Steigerwald und Waldstein (Ellerbrock et al., 2005).

4. Ausblick

Obwohl der hier vorgestellten Beziehung sehr vereinfachende Annahmen zugrunde liegen, erlaubt sie eine bessere Beschreibung der Benetzungseigenschaften der Böden als der C_{org} -Gehalt allein. Allerdings sind detailliertere Analysen z.B. im Hinblick auf die räumliche Verteilung und Ausrichtung der funktionellen Gruppe an OBS-Mineral-Oberflächen erforderlich, um die Funktionen der OBS und ihre Beziehung zu physiko-chemischen Bodeneigenschaften besser zu verstehen.

Danksagung

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die finanzielle Unterstützung im Projekt EL 191/5 im DFG SPP1090: „Böden als Quelle und Senke für CO_2 “, Dr. M. Kaiser für die FTIR Analysen, Prof. Dr. G. Schaumann und J. Hurraß (TU- Berlin) für die Bodenproben von Chorin und PD Dr. K. Kalbitz (BITÖK Bayreuth) für die Bodenproben von Steigerwald und Waldstein.

Literatur

- Bachmann, J., S.K. Woche, M.-O. Goebel, and W.R. Fischer. 2001. Contact angle and surface charge of wettable and hydrophobic silt particles. *J. Soil Sci. Plant Nutr.* 1:26-33.
- Capriel, P., T. Beck, H. Borchert, J. Gronholz, and G. Zachmann. 1995. Hydrophobicity of the organic matter in arable soils. *Soil Biol. Biochem.* 27:1453-1458.
- DIN ISO 10694. 1994. Bestimmung des organischen Kohlenstoffgehaltes und des Gesamtkohlenstoffgehaltes nach trockener Verbrennung (Elementaranalyse). In: Deutsche Normen (ed. Fachnormenausschuß Wasserwesen im DIN Deutsches Institut für Normung e.V.), Beuth Verlag, Berlin.
- Ellerbrock, R.H., H.H. Gerke, J. Bachmann, and M.-O. Goebel. 2005. Composition of organic matter fractions for explaining wettability of three forest soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 69:57-66.
- Ellerbrock, R.H., A. Höhn, and H.H. Gerke. 2001. FT-IR studies on soil organic matter composition influenced by different land use. In: *Proceedings of the Soil Structure / Carbon Workshop: 4th Eastern Canada Soil Structure Workshop*, Leamington (eds. W.D. Reynolds, C.F. Drury, and C.S. Tan), pp. 211-219, National Library of Canada, Harrow, Ontario.
- Ermakova, L.E., A.A. Kiprianova, M.P. Sidorova, E.V. Gribova, I.A. Savina, and S.V. Timofeev. 2001. Structural and electrostatic characteristics of sulfonated cation-exchange perfluoropolymer membranes in 1 : 1 electrolyte solutions. *Colloid J.* 63:699-705.
- Goebel, M.-O., J. Bachmann, S.K. Woche, W.R. Fischer, and R. Horton. 2004. Water potential and aggregate size effects on contact angle and surface energy. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 68:383-393.
- Günzler, H., und H. Böck. 1990. IR-Spektroskopie. Verlag Chemie, Weinheim.
- Hallett, P.D., and I.M. Young. 1999. Changes to water repellence of soil aggregates caused by substrate-induced microbial activity. *Europ. J. Soil Sci.* 50:35-40.
- Hartge, K.H., und R. Horn, 1992. Die physikalische Untersuchung von Böden. 2. Aufl. 1989, 175 S. Ferdinand Enke, Stuttgart.
- Horne, D.J., and J.C. McIntosh. 2000. Hydrophobic compounds in sands in New Zealand - extraction, characterization and proposed mechanisms for repellency expression. *J. Hydrol.* 231-232:35-46.
- Letey, J., J. Osborn, and R.E. Pelishek. 1962. Measurement of liquid-solid contact angles in soil and sand. *Soil Sci.* 93:149-153.
- Mataix-Solera, J., and S.H. Doerr. 2004. Hydrophobicity and aggregate stability in calcareous topsoils from fire-affected pine forests in southeastern Spain. *Geoderma* 118:77-88.
- Ma'shum, M., and V.C. Farmer. 1985. Origin and assessment of water repellency of a sandy South Australian soil. *Aust. J. Soil Res.* 23:623-626.
- McKissock, I., R.J. Gilkes, and W. van Bronswijk. 2003. The relationship of soil water repellency to aliphatic C and kaolin measured using DRIFT. *Australian J. Soil Res.* 41:251-265.
- Negre, M., D. Vindrola, S. Spera, L. Ferrarsi, and M. Gennai. 2002. Effect of the chemical composition of soil humic acids on their viscosity, surface pressure, and morphology. *Soil Sci.* 167:636-651.
- Siebold, A., A. Walliser, M. Nardin, M. Oppliger, and J. Schultz. 1997. Capillary rise for thermodynamic characterization of solid particle surface. *J. Colloid Interface Sci.* 186:60-70.

Korrespondenzadresse:

Dr. Ruth H. Ellerbrock
Leibniz-Zentrum für Agrarlandschafts- und
Landnutzungsforschung (ZALF) e.V., Institut für
Bodenlandschaftsforschung, Eberswalder Strasse 84, 15374
Müncheberg
Tel.: 033432/82-238, Fax 033432/82-280
ZALF-Homepage: <http://www.zalf.de>

Research Centre for Environmental Chemistry and Ecotoxicology, Brno

Gerhard Lammel (lammel@recetox.muni.cz), Alice Dvorská, Brno



Das Research Centre for Environmental Chemistry and Ecotoxicology (RECETOX; <http://www.recetox.muni.cz/>) ist eines von insgesamt 13 Depart-

ments der Naturwissenschaftlichen Fakultät der Masaryk-Universität, Brno (Brünn), Tschechien. Es befindet sich auf dem modernen Campus im Stadtteil Bohunice, auf dem seit einigen Jahren mehr und mehr Universitätsteile in vorläufig etwa 30 neuen, im Endausbau etwa doppelt so vielen Gebäuderiegeln untergebracht werden. Die Masaryk-Universität ist mit ca. 30000 Studenten und ca. 250 Professoren nach der Karls-Universität (Prag) die zweitgrößte des Landes.



Der Lehrkörper von RECETOX besteht aus 4 Professoren (Ivan Holoubek, Jiří Hřebíček, Gerhard Lammel, Jiří Matousek), 4 Associate Professors (Luděk Bláha, Ladislav

Dušek, Zdeněk Šimek, Jan Žižka) und 6 Assistant Professors (Jakub Hofman, Jiří Jarkovský, Jana Klánová, Jiří Machát, Jaroslav Ráček, Adam Svobodník) und bildet in Umweltchemie, Ökotoxikologie, Computational Biology (jeweils BSc und MSc), sowie in Lehramtsstudiengängen aus. Insgesamt 50 Wissenschaftler und Techniker sind am Institut beschäftigt. Dazu gehören ferner mehr als 50 Doktoranden (davon 30 Frauen, 3 Ausländer), die zumeist auf der Basis eines Stipendiums ihre Promotion durch Mitarbeit in Forschungsprojekten binnen regulär nunmehr 4 Jahren anstreben. Das Lohnniveau und auch die Stipendienausstattung entspricht typischerweise einem Drittel des deutschen bei derzeit 5% realer jährlicher Steigerung. (Dem gegenüber liegen die Preise eher bei zwei Drittel und darüber.)

Das Forschungszentrum wird von Ivan Holoubek geleitet. Es umfasst Abteilungen für Umweltchemie (Schwerpunkte Analytisches Labor, Analytische und Probenahmemethoden, Phasengleichgewichte und Transportprozesse, Abiotische Umwandlungen), Ökotoxikologie (Arbeitsgruppen Biochemische, molekulare und Zelltoxikologie und Gentoxikologie, Aquatische Ökotoxikologie, Ökotoxikologie von Böden) und kleinere für Risikobewertung sowie Umweltinformatik und -modellierung. Wichtige Forschungsfelder sind die Interpretation umfangreicher Felddatensätze persistenter Stoffe, Photochemie organischer Chemikalien in Eis und Schnee, Wirkungen von Cyanotoxinen, passive Probenahmemethoden in Luft und Wasser und landesweite Datenbanken der Boden- und Wasserkontamination und damit verbundener biologischer Wirkungen.

Einer der höchsten Drittmittelanteile eines naturwissenschaftlichen Universitätsdepartments im Land basiert auf primär nationalen und in jüngeren Jahren EU-Fördergeldern.

In der Reihe von internationalen Konferenz- und Workshop-Veranstaltungen ist die europäische Summer School Environmental Chemistry and Ecotoxicology hervorzuheben: Auf der Basis eines von der europäischen Kommission geförderten Centre of Excellence wird sie seit 2005 jeweils im Juli bei großer Nachfrage durchgeführt.

Das nationale Referenzlaboratorium für Cyanotoxine und das nationale POPs-Zentrum sind am Forschungszentrum angesiedelt. RECETOX wurde als das Regionalzentrum der Stockholm-Konvention (UNEP) für Mittel- und Osteuropa nominiert.

Das Zentrum ist durch eine große Zahl wissenschaftlicher Zusammenarbeiten sehr gut auf europäischer Ebene verflochten und hat Koordinierungsaufgaben für Mittel- und Osteuropa und andere Regionen übernommen. Strategische und langjährige Kooperationen existieren insbesondere mit dem Institute for Biostatistics and Analyses (IBA) der selben Universität (und im selben Gebäude), dem staatlichen Health Institute, Ostrava, dem Institute of Preventive and Clinical Medicine, Medizinische Universität, Bratislava, Slowakei, und dem Hydrometeorologischen Institut der Tschechischen Republik. Seit 1988 werden an der von letzterem betriebenen Messstelle Košetice (ca. 80 km nordwestlich von Brno) persistente organische Schadstoffe in Luft und seit 1988 in Wasser, Boden und Vegetation gemessen, wobei die Analytik am RECETOX durchgeführt wird. Wegen des Kompartimentübergreifenden Ansatzes, seiner Länge und Dichte ist dieser Datensatz weltweit einzigartig.

Prof. Dr. Gerhard Lammel, Masaryk University, Research Centre for Environmental Chemistry and Ecotoxicology, Kamenice 3, 62500 Brno, Czech Republic

Arbeitsgruppe Organische Umweltschadstoffe am Department für Umweltgeowissenschaften der Universität Wien

C. Achten (christine.achten@univie.ac.at),
T. Hofmann (thilo.hofmann@univie.ac.at), Wien



Die Arbeitsgruppe Organische Umweltschadstoffe ist neben den Bereichen Hydrogeologie und Nanogeowissenschaften Teil des 2005 gegründeten Lehrstuhls Umweltgeowissenschaften (Prof. T. Hofmann). Der Lehrstuhl ist der erste und bisher einzige dieser Art in Österreich und bildet gemeinsam mit dem Lehrstuhl für Biogeochemie und Isotopen-Geochemie (Prof. S. Krämer) das Department für Umweltgeowissenschaften, welches in das Erdwissenschaftliche Zentrum der Universität Wien eingebettet ist. Durch die Gründung des Lehrstuhls wurde erstmals eine Erweiterung des geowissenschaftlichen Fachspektrums an der Universität Wien in den Bereich der Umweltgeowissenschaften erzielt. Zeitgleich mit Umstrukturierungen auf Grund fünf neu besetzter/ zu besetzender Professorenstellen des ehemaligen Institutes für Geologische Wissenschaften wird seit 2007 der Bachelor- und Masterstudiengang Erdwissenschaften mit einer breiten, auch umweltbezogenen Ausrichtung angeboten.

Das Ziel der umweltchemischen Forschung der Arbeitsgruppe ist die Erfassung und Charakterisierung von organischen Problemstoffen in Wasser und Boden sowie das Verständnis ihrer Interaktionen mit organischem Material und Organismen in der Umwelt. Im Mittelpunkt der derzeitigen Forschung stehen

- die Erfassung der Bedeutung von Steinkohle als Quelle von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (PAK), deren umweltforensische Charakterisierung und Desorption,
- biomimetische Methoden zur Bestimmung der Bioverfügbarkeit,
- die Bioverfügbarkeit von PAK in Gegenwart von Geosorbenten,

- das Verhalten von endokrin wirksamen Substanzen in Sedimenten und Fließgewässern und
- die Wechselwirkungen von Kolloiden und organischen Schadstoffen.

Weitere Informationen und unsere nationalen und internationalen Kooperationen sind unter der URL www.univie.ac.at/env-geo zu finden.

Dr. Christine Achten
Department für Umweltgeowissenschaften
Zentrum für Erdwissenschaften
Universität Wien
Althanstrasse 14
A-1090 Wien

Das International Panel on Chemical Pollution (IPCP)

Martin Scheringer (scheringer@chem.ethz.ch), Zürich

Mehrere tausend chemische Substanzen werden in einer Vielzahl von Produkten nutzbringend eingesetzt. Eine unerwünschte Folge der nutzbringenden Verwendung von Chemikalien ist jedoch, dass sich viele dieser Chemikalien weltweit sowohl in der Umwelt wie auch in der Nahrung, im Trinkwasser, in der Atemluft und in Gebrauchsgegenständen von Menschen finden. Beispiele sind Flammschutzmittel, Weichmacher und viele andere Industriechemikalien, Pflanzenschutzmittel, Pharmazeutika, Schwermetalle sowie unerwünschte Substanzen wie chlorierte Dibenzodioxine. In vielen Fällen sind jedoch die Emissionen der Substanzen, die Exposition von Mensch und Umwelt sowie die toxischen Effekte, die aus der Exposition resultieren können, nur unzureichend bekannt. Die weiträumige Verteilung von Chemikalien mit Luft- und Wasserströmungen führt dazu, dass die Exposition von Mensch und Umwelt oft ein grenzüberschreitendes Problem ist. Dieses Problem soll im Rahmen internationaler Abkommen wie der Stockholm-Konvention zu Persistenten Organischen Schadstoffen (www.pops.int) oder der Konvention über weiträumige grenzüberschreitende Luftverunreinigung www.unece.org/env/lrtap angegangen werden. Bei vielen Substanzen sind die verfügbaren wissenschaftlichen Kenntnisse jedoch so lückenhaft und fragmentiert, dass die Umsetzung der internationalen Abkommen erheblich erschwert wird. Es ist daher geboten, das vorhandene wissenschaftliche Wissen zu evaluieren und zu bündeln, die wichtigsten Unsicherheiten darzustellen und zu erläutern sowie Wissenslücken und Forschungsbedarf zu identifizieren.

Um diese Aufgaben anzugehen, wurde 2007 das *International Panel on Chemical Pollution* (IPCP) gegründet (Scheringer et al. 2006). Das IPCP ist ein globales Netzwerk von Wissenschaftlern aus den Gebieten Umweltchemie, Toxikologie und Ökotoxikologie, Umweltingenieurwissenschaften, Epidemiologie, Medizin u.a.m. Das IPCP möchte wissenschaftliche Kenntnisse zu Chemikalienproblemen bündeln und weltweit für Entscheidungsträger und die Öffentlichkeit in allgemeinverständlicher Form zur Verfügung stellen. Die Ziele des IPCP sind in einer Deklaration festgehalten, die unter www.ipcp.ch verfügbar ist und zur Unterschrift offen steht. Die Hauptaufgabe des IPCP wird darin bestehen, das verfügbare Wissen aus wissenschaftlicher Sicht zu evaluieren, d.h. es wird sich mit den verwendeten Methoden und ihren Unsicherheiten beschäftigen, die Ursachen für widersprüchliche Befunde untersuchen, Prioritäten für weitere Forschung herausarbeiten und die Implikationen bisheriger Befunde ausleuchten.

Für die konkrete Arbeit des IPCP ist geplant, Arbeitsgruppen zu ausgewählten Themen wie z. B. dem Einsatz von DDT zur Malaria bekämpfung einzurichten. Diese Arbeitsgruppen werden zu ihren Schwerpunktthemen Berichte abfassen, die im Rahmen des IPCP begutachtet und dann internationalen Institutionen, nationalen Behörden und der Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt werden sollen.

Das IPCP befindet sich zurzeit noch in der Aufbauphase; bisher wird das IPCP von Wissenschaftlern aus 34 Ländern unterstützt. Auf der Dioxin-Konferenz 2007 in Tokio wurden die Ziele und die Arbeitsform des IPCP diskutiert, und der Bedarf an internationaler Zusammenarbeit wurde anhand von Chemikalienproblemen in Afrika und Lateinamerika illustriert. Für das Jahr 2008 ist geplant, das Netzwerk des IPCP weiter auszubauen, die Kontakte zu nationalen Behörden und internationalen Organisationen zu verstärken, und erste IPCP-Arbeitsgruppen einzurichten. Vorschläge für die Arbeit des IPCP sind jederzeit willkommen (ipcp@chem.ethz.ch), und ausführliches Material zur IPCP-Initiative ist unter www.ipcp.ch zu finden.

Scheringer, M., Fiedler, H., Suzuki, N., Holoubek, I., Zetzsch, C., Bergman, A. (2006) Initiative for an International Panel on Chemical Pollution – IPCP, *Environ. Sci. Pollut. Res.* 13, 432–434.

Tagungsberichte

Bericht über die Europäische Umweltchemie-Konferenz (European Meeting on Environmental Chemistry, EMEC 08) in Inverness, Schottland
Roland Kallenborn (roland.kallenborn@unis.no), Longyearbyen

Vom 5 – 8.12.2007 wurde die 8. Europäische Konferenz für Umweltchemie (EMEC 08) in Inverness (Schottland) veranstaltet. Die jährliche EMEC Konferenzserie ist die offizielle Konferenz der europäischen Vereinigung für Umweltchemie (Association for Environmental Chemistry, ACE) die nun bereits zum 8. Mal stattgefunden hat. Zur Konferenz trafen sich 135 registrierte Teilnehmer, Umweltchemiker aus 25 Ländern, um aktuelle interdisziplinäre Herausforderungen im Fachgebiet Umweltchemie zu diskutieren. Neben 4 eingeladenen Plenarvorträgen wurden neue wissenschaftliche Resultate im Rahmen von 40 Vorträgen und 90 Postern präsentiert und diskutiert. Neben den europäischen Teilnehmern (einschließlich Slowenien, Rumänien, Tschechien, Albanien, Ungarn, etc), sorgten Teilnehmer aus Kanada, China, Japan, Südkorea, Usbekistan, Malaysia, Tunesien und Brasilien für den ausgeprägt internationalen Charakter der Tagung. Der inhaltliche Schwerpunkt der Konferenz war vor allem im Übergangsfeld zwischen synthetischer und analytischer Chemie angesiedelt. Die Bedeutung der umweltchemischen Forschung als wichtiger interdisziplinärer Beitrag zu Umweltforschung in Biologie, Physik, Meteorologie und Toxikologie wurde in zahlreichen Beiträgen und Diskussionsrunden unterstrichen. Die nächste EMEC-Konferenz findet Anfang Dezember 2008 in Girona (Spanien) statt.

Die EMEC Konferenzserie hat sich in den letzten Jahren als wichtiges europäisches Diskussionsforum für Umweltforscher und ACE-Mitglieder entwickelt. Neben der alljährlichen ACE-Mitgliederversammlung findet auch die Vorstandssitzung im Rahmen der EMEC Konferenzserie statt. Die ACE wurde im Jahr 2000 als ein wissenschaftliches Kommunikationsforum für europäische Umweltchemiker gegründet. Die ACE ist heute eine europäisch ausgerichtete, unabhängige und gemeinnützige Vereinigung mit offiziellem Sitz in Luxemburg, die sich zum Ziel gesetzt hat, interdisziplinäre Zusammenarbeit und Forschung im Bereich der Umweltchemie zu fördern und zu koordinieren. Somit ist die ACE sehr daran interessiert, mit nationalen und internationalen Interessensorganisationen im Bereich Umweltchemie einschließlich der GDCH oder FECS zusammenzuarbeiten mit dem gemeinsamen Ziel, umweltgerechte Produktionsverfahren und Überwachungsprogramme zu entwickeln sowie Effekte von Umweltextponierung zu erfassen und zu erforschen.



Detaillierte Informationen über die ACE und die EMEC Konferenzen können über die ACE Internetseite abgerufen werden:
<http://www.research.plymouth.ac.uk/ace/>

Bericht über die UFIPOLNET Conference on Ultrafine Particles in Urban Air 23.-24.10.2007 in Dresden

Holger Gerwig (holger.gerwig@smul.sachsen.de), Dresden

Ultrafeine (< 100 nm) Staubpartikel, tausendmal kleiner als der Durchmesser eines menschlichen Haares, standen vom 23.-24. Oktober 2007 im Mittelpunkt einer internationalen Konferenz, die das Sächsische Landesamt für Umwelt und Geologie anlässlich des Abschlusses des EU-Projektes UFIPOLNET veranstaltet hat. Über 120 Teilnehmer aus 14 Ländern, darunter führende europäische Experten aus den Bereichen Messtechnik sowie Gesundheit und Umweltschutz, waren nach Dresden gekommen, um sich auf den neuesten Stand der Technik und Untersuchungen im Bereich von Ultrafeinstaub zu bringen.

Im Vordergrund des ersten von 5 Themenblöcken in der Sächsischen Aufbaubank standen die Ergebnisse von UFIPOLNET (ultrafine particle size distributions in air pollution monitoring networks, deutsch: Korngrößenverteilung von Nanopartikeln in Messnetzen zur Luftüberwachung). Die anderen Vorträge beinhalteten: Messungen von Ultrafeinstaub in städtischer Luft, Partikel und Gesundheit, Modellierung von Fein- und Ultrafeinstaub, Luftqualität in Richtlinien und deren Implementierung. Nach Einführung durch Herrn M. Böttger und den Grundsatzvorträgen von Herrn A. Wiedensohler und H. Herrmann informierte Frau D. Palenberg über das neue Förderinstrument LIFE+ der EU-Kommission.

Danach stellten Herr H. Gerwig, Herr A. Zschoppe, Herr A. Wiedensohler und Herr L. Hillemann das von der EU geförderte Projekt vor: Es zielt vor allem auf die Vereinfachung von Messsystemen zur Zählung ultrafeiner Staubpartikel ab. Entwickelt werden sollte ein Messgerät zu einem erschwinglichen Preis, das in den Routinebetrieb der Luftqualitätsmessnetze der Länder integriert werden kann. Der erste Prototyp des neuen Messgerätes läuft seit Januar 2007 am Schlesischen Platz in Dresden. Drei weitere Geräte werden seit März in Augsburg, Prag und Stockholm getestet. Erste Vergleichsmessungen mit Referenzgeräten waren erfolgreich: Die Messergebnisse eines durchschnittlichen Werktages zeigen vor allem zur morgendlichen Rushhour gegen 08:00 hohe Belastungen (ähnlich wie für Stickoxide und Ruß). Die Partikelanzahlkonzentrationen sind an den verschiedenen Standorten unterschiedlich: in Augsburg, wo der Messpunkt abseits stark befahrener Straßen liegt, am niedrigsten und in Stockholm, in einer viel befahrenen Straßenschlucht, am höchsten.

Im Vorraum des Konferenzsaals wurde das neuartige Messgerät zur Partikelanzahlmessung von Mitarbeitern der Dresdner Firma TOPAS vorgestellt und am Laptop die Daten der anderen 3 Messgeräte live gezeigt. Das UFP 330 braucht keine zusätzlichen Chemikalien oder radioaktive Bestandteile

für seinen Betrieb, um Partikel im Bereich von 20 bis 800 Nanometer zu zählen und in 6 Größenklassen darzustellen.

Im zweiten Teil wurden Messungen von Ultrafeinstaub in der Außenluft aus Großbritannien (A. Jones), Spanien (S. Rodriguez), Stockholm (C. Johansson) und Prag (J. Novak) vorgestellt. Es wurde gezeigt, dass 80-90% der Partikel kleiner als 100 nm sind und in der Nähe vom Straßenverkehr mit anderen Verkehrsimmissionen (CO, Kohlenwasserstoffe) korrelieren.

Im letzten Themenblock des ersten Tages sprachen Gesundheitsexperten über die Wirkungen von Ultrafeinstaub auf den Menschen. Z.B. wies Herr M. Krzyzanowski darauf hin, dass es einen toxikologischen Effekt von Ultrafeinstaub gibt, der jedoch noch durch zu wenige Daten abgesichert ist. Frau A. Peters wies auf die Auswirkungen auf das Herz-Kreislaufsystem hin und zeigte auf der Konferenz noch unveröffentlichte Auswertungen, wo zum ersten Mal gefunden wurde, dass die Partikelanzahl signifikant mit der Anzahl von Krankenhauseinlieferungen einhergeht. Auf die Wichtigkeit repräsentativer Messungen an Hintergrundstationen der Stadt für epidemiologische Untersuchungen wies Herr J. Cyrys in seinem Vortrag hin. Er konnte zeigen, dass auch mit nur einer Station im städtischen Wohngebiet repräsentative Messungen der Partikelanzahl gelingen können. Herr Dr. Franck zeigte, dass der Anstieg der Partikelanzahl um 1000 Partikel pro Kubikzentimeter einen Anstieg der Einlieferungen ins Krankenhaus bedeutet. Er prägte auch den Begriff der 3 "Ls" im Zusammenhang der Verhältnisse Innen- zu Außenluft: Less concentration; Larger diameter; Later (Zeitverzögerung). Herr N. Englert zeigte das Verhältnis zwischen Wissenschaft und Regulierungsbehörde vor dem Hintergrund von Fein- und Ultrafeinstaub auf. Er machte auch den Vorschlag, in der Routineüberwachung der Außenluft neben PM10 auch die Partikelanzahl zu messen. Herrn W. Kreyling vom GSF konnte anhand von diversen Bilddarstellungen zeigen, in welche Organe eingeatmete Ultrafeinstaub-Partikel im Körper gelangen können, nachdem sie durch das hauchdünne Lungen-Epithelium ($1-2 \mu\text{m}$; zum Vergleich rotes Blutkörperchen $7 \mu\text{m}$) gelangen könnten.

Am nächsten Tag wurde die Modellierung von Fein- und Ultrafeinstaub durchgeführt. Dort gaben W. Birmili, IFT, M. Ketzel, NERI und I. Düring Auskunft zu neuen Forschungsergebnissen, wobei für die Modellierung von Ultrafeinstaub im Gegensatz zu dem viel größeren Feinstaub die Partikelneubildung am Straßenrand essentiell ist. In dem darauf folgenden Block wurden weitere Beispiele zu Messungen von Ultrafeinstaub dargestellt. U. Quass konnte zeigen, dass zeitlich höher aggregierte Werte eine bessere Korrelation

zeigen, z. B. für Tagesmittel im Vergleich zu Stundenmittelwerten für Ultrafeinstaubpartikel im Vergleich zu NO_2 . A. Prevot und T. Gnauk zeigten die chemische Partikelzusammensetzung in Sachsen und der Schweiz.

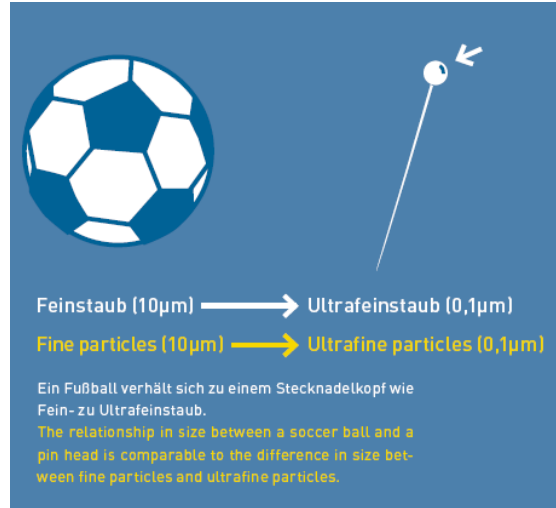
In der letzten Sitzung wurden dann die regulativen Aspekte berührt. Herr P. Bruckmann stellte den Gesamtzusammenhang und die aktuelle Entwicklung der Luftqualitätsrichtlinien dar und verwies auf deren erneute Revision in 2013, nachdem die aktuelle Novellierung 2008 in Kraft treten wird. Die dort geregelten Reduktionsmaßnahmen sind aufgrund epidemiologischer Studien getroffen worden, die davon ausgehen, dass die akute Sterblichkeit in der EU pro Jahr aufgrund von PM_{10} bei 350.000 Menschen und Ozon bei 21.400 Menschen liegt. Mehrere konkrete Maßnahmen zur Feinstaubreduktion zeigte W. Hafner auf. Mit wässrigen Calciummagnesiumacetetat (CMA) Lösungen wurden Versuche zur Staubbinding auf der Straße durchgeführt, um einen Teil des durch Aufwirbelung entstehenden Feinstaubs - der über 20 % ausmacht - zu reduzieren. Herr F. Palmgren zeigte die Situation in Kopenhagen, wo der Anteil der DieselfKfz bald 25 % erreichen wird. Frau Gömer aus Hamburg zeigte Ergebnisse des deutsch/türkischen EU-Twinning-Projektes zum Aufbau eines Luftmessnetzes in der Türkei. Im letzten Beitrag erklärte Herr Wolf die Vorgehensweise zur Erstellung einer straßenfeinen Modellierung von PM_{10} und NO_2 in sächsischen Städten.

Während der Konferenz wurden Teilnahmefragebögen verteilt. Die Auswertung ergab, dass mehr als zwei Drittel der Teilnehmer die Thematik und deren Präsentation sowie die Vorträge interessant fanden. Für über 80 % der Teilnehmer war die Konferenz gut gelungen und empfehlenswert.

Für all diejenigen, die die Konferenz nicht besuchen konnten gibt es eine gute Nachricht: Der Kurzfassungsband, alle 31 Vorträge und 15 Poster sowie Fotoimpressionen und die Auswertung des Fragebogens sind auf der Projektwebseite (www.ufipolnet.eu) frei zugänglich.

Das Projekt UFIPOLNET wurde mit Unterstützung des Finanzierungsinstruments LIFE der Europäischen Gemeinschaft LIFE04 ENV/D/000054 kofinanziert.

Holger Gerwig, Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie (LfUG)
Referat 22 – Luftqualität
Abteilung 2 - Integrativer Umweltschutz, Klima, Luft, Strahlen
Postanschrift: Postfach 80 01 32, 01101 Dresden
Besucheradresse: Zur Wetterwarte 11, 01109 Dresden



Größenvergleich Feinstaub zu Ultrafeinstaub



Tagungsteilnehmer im Kongresssaal der Sächsischen Aufbaubank



Vortrag von Dr. Krzyzanowski im Rahmen der UFIPOLNET-Tagung (Quelle: H. Gerwig)

Konferenzbericht "Persistent Organic Pollutants in Mountainous Areas", Salzburg, 26.-27.11.2007

Gerhard Lammel (lammel@recetox.muni.cz)



Mit einem Fokus auf den Alpen und Berichten aus anderen Hochgebirgen (nord-, zentral- und südamerikanische Kordillieren, Himalaya) fand 26.-

27.11.2007 in Salzburg das Symposium 'Persistent Organic Pollutants in Mountainous Areas' auf Einladung des Umweltbundesamtes, Wien, statt. Insgesamt 19 wissenschaftliche Beiträge wurden von insgesamt 29 Institutionen in 12 europäischen und 6 außereuropäischen Ländern beigesteuert. Die meisten Forschungsbeiträge zur Alpenregion arbeiten im von der europäischen Kommission geförderten Projekt MONARPOP (<http://www.monarpop.at/>) zusammen. Das Symposium war das zweite dieser Art; das erste fand 2004 in Mailand statt (Ecotox. Environ. Safety 63, 1-174, 2006).

Zentrale Fragestellung dieses Forschungsgebietes ist, ob und wenn ja, warum es zu einer systematischen Anreicherung persistenter Stoffe in Gebirgen kommt. Dieses Themengebiet wurde wesentlich durch Befunde hoher Belastungen von Fischen in Bergseen der Pyrenäen und der Tatra vor einigen Jahren stimuliert (Grimalt et al., Environ. Sci. Technol. 35, 2690-2699, 2001). „What goes up must come down“? Obwohl sogar im Titel eines Beitrags behauptet – die Wirklichkeit ist komplexer: Nicht nur mit der Höhe sondern auch örtlich kleinräumig variieren Abbau- und Verflüchtigungsraten aufgrund von Temperatur und Strahlung, nasse und trockene Depositionsflüsse, sowie Rückhaltekräfte aufgrund von Boden- und Vegetationseigenschaften. Schneeschmelze und Hangneigung (Sonnenscheindauer und -intensität) etwa haben starken Einfluss und verursachen Spitzen in den Stoffflüssen. Der Einfluss der Topographie, kleinskalig (Ausrichtung von Hängen, Tremolada, Milano) wie großskalig (Ausrichtung von Gebirgsketten, Offenthaler, Wien) wurde mit gezielten Studien untersucht. Dass die Luftströmungen nicht einmal im Langzeitmittel immer intuitiven Erwartungen entsprechen, zeigte sehr anschaulich eine meteorologische Herkunftsanalyse für hochalpine Monitoringstationen (Kaiser, Wien). Immerhin korreliert die Nähe zu Ausbringungsorten von Pestiziden mit deren Depositionsfluss in nahegelegenen Hochgebirgen Nordamerikas. Dies gilt für wenig flüchtige Pestizide, z.B. Dieldrin, sogar noch viel Jahre nach einem Ausbringungsverbot, weil eine geringe Ausgasung aus Ackerböden anhält (Simonich, Corvallis). Ähnliche Konzentrationen wie auf dem nordamerikanischen Kontinent werden im Himalaya gefunden. Diese werden von Emissionen Südasiens dominiert, sind aber auch im Winter, wenn diese den Himalaya nicht erreichen können, noch messbar (Loewen, Winnipeg; Zhu, Beijing).

Ob positive Konzentrationsgradienten mit der Höhe in Gebirgen tatsächlich durch die bei abnehmender Temperatur zunehmende Kondensationsneigung der Stoffe erklärt werden kann („Destillations“-Hypothese) ist weiter offen. Dies wurde zwar durch weitere Befunde aus dem atmosphärischen Transport nachgeordneten Kompartimenten (Fichtennadeln, Böden, Fischen; Grimalt, Barcelona; Wania, Toronto) erhärtet. Gegenüber Einflüssen der Gebirgsmeteorologie auf die Standorte konnten diese Ergebnisse aber noch nicht abgegrenzt werden. Bei passiver Probenahme aus Luft werden vorwiegend positive Konzentrationsgradienten mit der Seehöhe gefunden. Die Interpretation dieser Daten ist aber noch nicht zweifelsfrei, weil möglicherweise von Sammelartefakten überlagert.

Die Modellierung greift diese Frage zunächst mit alpinen Umweltbedingungen angepassten Multimediamodellen (Ketten von Boxen) auf (Westgate und Wania, Toronto). Der Einsatz eines zur Untersuchung komplexen Terrains hinreichend hoch auflösenden Atmosphären-Modelles, das dann der spezifischen und komplexen atmosphärischen Vorgänge gerecht werden könnte, eingebettet in ein Multikompartiment- (Multi-media-)Modell, steht hingegen noch aus. Die Modellierung bedürfte detaillierterer Prozessuntersuchungen, denn sie nutzt mangels Kenntnis stark vereinfachende Prozessparameterisierungen. Dies betrifft etwa den Austausch zwischen Atmosphäre und Schnee, bzw. Eis. Tatsächlich sind Laboruntersuchungen in diesem Forschungsgebiet noch kaum entwickelt. Vorgestellt wurden Ergebnisse zur (photo-induzierten) Hydroxylierung und Dehalogenierung von PCB (Klánová, Brno) und zum Abbau von Organophosphor-Pestiziden (Halsall, Lancaster).

Aufsehen erregte der Bericht über erstmalige Befunde der Anreicherung von polychlorierten Paraffinen (CP) in Koniferen-Nadeln und, auffallend stark, im Humus in den Alpen (Iozza, Dübendorf). Interessanterweise finden sich die höchsten Konzentrationen in mittleren Höhen, 1300-1500 m. CPs werden seit den 1930er Jahren zur Verwendung in der Brandbekämpfung, als Weichmacher und zu anderen Zwecken hergestellt. Die Weltjahresproduktion wird auf 0.3 Mt geschätzt.

Als Abendprogramm lud der Veranstalter zum Essen auf die Burg, was mit einem Bummel bei winterlichem Bilderbuchwetter über den Weihnachtsmarkt eingeleitet wurde.

Die Ergebnisse werden voraussichtlich in einem Sonderheft der Zeitschrift Environ. Poll. zusammengefasst werden.

Tagungsankündigungen

35th International Symposium on Environmental Analytical Chemistry ISEAC 35

Gdansk, Poland, June, 22–26, 2008



Aims and scope

The ISEAC 35 is organized by the International Association of Environmental Analytical Chemistry (IAEAC), in cooperation with the Committee on Analytical Chemistry of the Polish Academy of Science (PAS), and the Chemical Faculty of Gdańsk University of Technology (GUT). This joint venture aims at bringing together a broad range of scientists who develop and apply analytical techniques to investigate the impact of man's activities on different environmental compartments. Developments in this field of research will be illustrated through lectures, posters and workshops, and will cover both the fundamental and practical aspects of environmental analyses and monitoring, together with novel applications of protocols.

The Symposium program will include a number of invited lectures treating frontier topics of environmental analytical chemistry, such as:

- Miniaturized spectroscopic tools for environmental survey analysis,
- Remote sensing in marine research,
- Xenobiotics in specific compartments of the environment,
- Sampling and sample handling for environmental analysis.

It is intended to publish the scientific contributions after peer reviewing in the International Journal of Environmental Analytical Chemistry (IJEAC).

The best poster presented at the Symposium by a young scientist will be honoured with the "Roland W. Frei Award". A limited number of travel grants for IAEAC student members can be made available in case a qualified application according to the conditions found on www.iaeac.ch is submitted.

Chairman: Prof. Dr. Jacek Namieśnik, Gdańsk University of Technology, Chemical Faculty, Department of Analytical Chemistry, G. Narutowicza 11/12, 80-952 Gdańsk, POLAND, e-mail: chemanal@pg.gda.pl

Co-Chair: Prof. Dr. Dieter Klockow, President, IAEAC; Dortmund, Germany

Registration:

Registration can be made by submission of the completed registration form (to be downloaded from the homepage of the Symposium <http://www.pg.gda.pl/chem/iaeac/form/index.html>) as an attachment by e-mail to: chemanal@pg.gda.pl before May 1, 2008.

Submission of oral and poster presentation:

Authors of oral and poster contributions are invited to submit the title and abstract of their paper as well as their affiliation through sending the completed abstract form. The latter can be downloaded from the homepage of the Symposium www.pg.gda.pl/chem/iaeac/submission_of_abstract_ISEAC.pdf.

The abstract should be submitted before March 31, 2008, to the following e-mail address: chemanal@pg.gda.pl.

Important deadlines:

Submission of abstracts: March 30, 2008

Registration: May 1, 2008

Hotel reservation: March 30, 2008

Submission of manuscript: July 30, 2008

Further information is available under:

<http://www.pg.gda.pl/chem/iaeac>.

1st INTERNATIONAL WORKSHOP

Fluorinated Surfactants: New Developments



Synthesis – Analysis – Fate – Regulation



June 26-28, 2008, Idstein, Germany

About the workshop

The main objective of the workshop is to bring together specialists around the world in order to present and discuss new developments regarding synthesis, behaviour and fate of fluorinated surfactants. Due to the many environmental problems linked with the ongoing use of fluorinated surfactants, this workshop especially addresses new developments towards more environmentally friendly compounds. Besides research regarding synthesis, performance testing and degradation studies, there will be a significant contribution dealing with environmental processing and regulation.

Call for papers and proceedings

Abstracts for oral and poster presentations (one-page) should be submitted to the secretariat before March 15th, 2008 using the formatting guidelines given at <http://pft-fh-fresenius.de>. Proceedings will be published in a scientific book.

Conference Secretariat

Heike Weil
Europa University of Applied Sciences Fresenius
Limburger Str. 2, D-65510 Idstein, Germany
Phone: 0049-6126-935268,
Fax: 0049-6126-935210
E-Mail: weil@fh-fresenius.de

Deadline for Abstract Submission: April 1st, 2008

Registration fee: 290€ (Students 80€)

Fee will cover attendance of the workshop, the book of abstracts and two coffee breaks.

4rd Summer School of Environmental Chemistry and Ecotoxicology 2008, 7. - 13. 7. 2008,

RECETOX Masaryk University, Brno, Czech
Republic; Field observatory Košetice



**Studies of relationship between the environmental levels
of chemicals and their biological effects with special
attention to persistent and toxic substances**

The basic goal of the 4th summer school is application of integrated monitoring/modelling approach and conception to the case of persistent toxic substances (PTS) and other emerging pollutants

The special attention of the 4th summer school will be focused on field studies and experimental methods in environmental chemistry, ecotoxicology, risk assessment, environmental monitoring, the studies of exchange processes between environmental compartments, sampling procedures, collection of data for modelling and field studies of ecological stressors.

The Summer School will be organized in two groups:

- A) Laboratory and field study on environmental chemistry and ecotoxicology of PTS
- B) Sampling, analysis and monitoring of POPs - this part will be organized in the co-operation with the Secretariat of the Stockholm Convention, UNEP.

Topics

- Fate of PTS, environmental processes
Prof. Dr. Holoubek, Prof. P. Garrigues, Dr. K. Semple
- Monitoring and determination of PTS
Dr. J. A. Klánová, Prof. Dr. Šimek, Dr. A. Kočan
- Modelling of PTS fate
Dr. M. Scheringer, Prof. Dr. Šimek, Dr. A. Kočan
- Ecotoxicology, effects in ecosystems
Prof. C. Janssen, Dr. L. Bláha, Prof. B. Maršálek
- Risk assessment data evaluation
Prof. L. Dušek, Dr. P. Čupr, Dr. J. Jarkovský

Contact

If you are interested in the 4th summer school, please visit the RECETOX web pages: <http://www.recetox.muni.cz/>

Registration fee 350 € (lectures and practical exercises, background materials, field trip, accommodation lunches). Participants cover their travel expenses.

Umweltbeobachtungskonferenz 8. – 10. Oktober 2008 im Zentrum Paul Klee, Bern, Schweiz

Bilanzen als Instrument für Umweltbeobachtung und Ressourcenmanagement

Die dritte Umweltbeobachtungskonferenz wird organisiert durch das Informations- und Koordinationsorgan Umweltbeobachtung der Schweiz IKUB, die Schweizer Akademie der Naturwissenschaften SCNAT und den Umweltbeobachtungsrat für Europa EOBC.

Die Umweltbeobachtungskonferenz 2008 soll den Austausch und das Wissen rund um das Thema Bilanzen fördern. Umweltbilanzen sind die naturwissenschaftliche Sicht auf die "Umwelt als Ganzes". Die Konferenz zeigt den Nutzen von Bilanzen anhand konkreter Fallbeispiele, macht die Vor- und Nachteile der verwendeten Methoden transparent und hilft damit, diese Methoden weiter zu entwickeln. Viele Entscheidungen in den Verwaltungsbehörden und Unternehmen und viele Gesetze erfordern heute die Sicht auf die "Umwelt als Ganzes". Dafür braucht es gute und solide Instrumente. Wenn nur Einzelaspekte der Umwelt betrachtet werden, können Entscheidungen fallen, die negative Auswirkungen in anderen Bereichen zur Folge haben. Zur Förderung des Themas Bilanzen wurden im Rahmen des EOBC drei Ausschüsse gebildet. Der vierte Ausschuss soll die sektoralen Grundlagen für Bilanzen und die übergreifende Berichterstattung fördern.

Raumbezogene Umwelt- und Stoffflussbilanzen (Ausschuss P1)

Welche Bedeutung haben raumbezogene Umweltbilanzen für die Umweltbeobachtung? Welche Umweltveränderungen werden durch den anthropogenen Stoffhaushalt und durch den natürlichen Stoffhaushalt verursacht? Wie lassen sich wichtige von unwichtigen Stoffflüssen unterscheiden? Raumbezogene Umweltbilanzen beziehen sich immer auf einen klar umgrenzten Raum, etwa einen Wald, ein Gewässer, ein Siedlungsgebiet oder einen Kanton bzw. ein Bundesland. Sie sind vielfach ein Schlüssel für das Verständnis von Umweltveränderungen. Viele Fragen lassen sich sogar erst auf diesem hohen, medienübergreifenden Aggregationsniveau sinnvoll beantworten. Die Stärken, Schwächen, Chancen und Risiken von raumbezogenen Bilanzen sollen auf der Konferenz 2008 mit ausgewählten Fallstudien und in vier Workshops diskutiert werden: G1 - Grundlagen und Konzeption (Gesetze, Normen und Regeln), G2 - Durchführung von Datenerhebungen, G3 - Datenhaltung und Datenmodell und G4 - Analyse und Berichterstattung.

Persönliche Gesundheits- und Umweltbilanzen (Ausschuss P2)

Wie können persönliche Gesundheits- und Umweltbilanzen voran gebracht werden? In die Öffentlichkeit getragene Umweltthemen führen immer wieder zu neuen persönlichen Besorgnissen über die eigene Gesundheit und das eigene Verhalten. Die Verbesserung der Gesundheit und die

Förderung umweltgerechten Verhaltens können praktisch nur über persönliche Betroffenheit und Besorgnisse verbessert werden. Allerdings kann es auch zur Fehleinschätzung der Bedeutung einzelner Themen und Verminderung der Lebensqualität führen. Mit der Konferenz 2008 sollen vorhandene Ansätze von persönlichen Gesundheits- und Umweltbilanzen geprüft und deren Verbesserung angeregt werden. Ansatzpunkte für individuelle Gesundheits- und Umweltbilanzen sind z.B. "persönliche Gesundheitsbilanzen", "persönliche Energie-rechner" oder "Fußabdrücke".

Produkt- und betriebsspezifische Umweltbilanzen (Ausschuss P3)

Wie können produkt- und betriebsspezifische Umweltbilanzen voran gebracht werden? Auf welchem Stand ist die Informationslage für produktbezogene Bilanzen - wie weit sind betriebsbezogene Bilanzen? Bei welchen Produkten sind die Informationsdefizite besonders groß? Welche Schnittstellen gibt es zwischen den verschiedenen europäischen Prozessen? Welche Erkenntnisse aus den raumbezogenen Bilanzen (Ausschuss P1), den persönlichen Bilanzen (Ausschuss P2) und der allgemeinen Umweltbeobachtung (Ausschuss P4) müssen in der gegenwärtigen Technologieentwicklung Beachtung finden? Wie können auf lange Sicht dieser Informationsfluss und auch die Qualitätssicherung insgesamt voran gebracht werden? Diese Fragen werden in 2008 anhand ausgewählter Umweltthemen und Tätigkeiten (z.B. Energieerzeugung) diskutiert.

Medien- und grenzübergreifende Umweltbeobachtung (Ausschuss P4)

Welche Verbesserungen für die medienübergreifende Umweltbeobachtung gibt es seit 2004 auf regionaler und europäischer Ebene? Welche Umweltdaten und welche Datenlücken sollten durch Bilanzen der Ausschüsse P1 bis P3 überprüft werden? Und wie können die langfristige Verfügbarkeit, die Vergleichbarkeit, die Mehrfachnutzung und die Berichterstattung insgesamt verbessert werden? Die Anforderungen an die Umweltbeobachtung haben sich in den letzten Jahrzehnten grundsätzlich geändert. In der Regel sind Entscheidungen zu treffen, für die ein breites Spektrum an Informationen aus vielen Bereichen heranzuziehen ist. Im Rahmen der Konferenz 2008 sollen die offenen Fragen bei der grenz- und medienübergreifenden Umweltbeobachtung anhand konkreter Fallbeispiele diskutiert werden.

Anmeldung

Die Teilnehmeranzahl ist beschränkt. Daher wird um frühzeitige Anmeldung gebeten. Detaillierte Veranstaltungshinweise, weitere Kontakte und Anmeldeformular für den elektronischen Versand unter www.umweltbeobachtung.eu.

Anmeldeschluss: 1. September 2008.

Anmeldeformular für den elektronischen Versand:

www.umweltbeobachtung.eu/conference/registration-de.doc

Ernennung des Vorsitzenden der Fachgruppe „Umweltchemie und Ökotoxikologie“, PD Dr. Gerhard Lammel, zum „Full Professor“ an der Masaryk-Universität, Brno, Tschechien

Gerhard Lammel, Priv.-Doz. Dr., Jg. 1960, MPI für Chemie, Mainz, und Masaryk-Universität, Brno, Tschechien, wurde zum Full Professor für das Fach Umweltchemie an dieser Universität ernannt. Die Ernennungsurkunde wurde ihm vom tschechischen Staatspräsidenten Václav Klaus in der Karls-Universität, Prag, überreicht.

Lammel studierte Chemie in Regensburg und Freiburg und promovierte 1988 an der Universität Mainz / MPI für Chemie auf dem Gebiet der heterogenen Chemie atmosphärischer Stickoxide bei Peter Warneck. Nach Postdoc-Zeiten am Forschungszentrum Karlsruhe und Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, USA, die der Aerosol- und Wolkenphysik und -chemie gewidmet waren, wechselte er 1993 ans MPI für Meteorologie, Hamburg, in die Abteilung Klimaprozesse (Leitung: Hartmut Graßl). 2000-2006 leitete er dort die Forschungsgruppe Aerosolchemie, die sich schwerpunktmäßig mit Untersuchungen zu Ausbreitung und Verbleib organischer Schadstoffe in den verschiedenen Umweltmedien befasste. Seit 1993 hatte er Lehraufträge der Universitäten Hamburg und Hohenheim, Stuttgart, sowie, seit kurzem, Mainz für Atmosphären- und Umweltchemie und -analytik sowie Globaler Wandel. In Hohenheim habilitierte er sich im Jahr 2000. Seit 2006 ist er auch am Research Centre for Environmental Chemistry and Ecotoxicology (Leitung: Ivan Holoubek) der Masaryk-Universität forschend und lehrend tätig.

Lammel wurde in verschiedenen Gremien und als Gutachter für Fachzeitschriften und Förderorganisationen berufen. Seit 2003 ist er Mitglied und seit 2007 Vorsitzender des Vorstandes der Fachgruppe Umweltchemie und Ökotoxikologie der GDCh.



Gerhard Lammel erhält aus den Händen des tschechischen Staatspräsidenten Václav Klaus die Ernennungsurkunde zum „Full Professor“.